Support Vector Machine

Michal Jůza, Ladislav Kaiser

Obsah

1 Úvod a motivace

Pro klasifikaci do dvou tříd můžeme použít klasifikátoru založeném na perceptronu. Jednou z hlavních nevýhod takového klasifikátoru je nalezení rozdělující nadplochy tak, že výsledek je v podstatě závislý na průběhu učení (pořadí výběru prvků z trénovací množiny). V případě klasifikátoru SVM je rozdělující nadplocha volena podle optimalizujícího kritéria (maximální šířka pásu na viz obr. 5).

V případě neseparabilních dat, lze použít stejného triku jako u učení klasifikátoru na principu perceptronu. Přechodem do vyšší dimenze prostoru, kde jsou data již separabilní.

Velkou výhodou SVM narozdíl od *percerptronu* je možnost vyčíslit chybu na testovací množině, pomocí VC confidence, z Vapnikovy teorie statistického učení.

Základní rozdělení SVM:

Lineární

- separabilní data
- neseparabilní data

Nelineární SVM

2 Chyby klasifikátoru

Problém klasifikace do dvou tříd si můžeme představit jako nalezení funkce, která přiřadí naměřeným příznakům správnou třídu.

Množinu příznaků $\boldsymbol{x_i} \in R^n$, kde $i = 1, \ldots, l$ je počet prvků v trénovací množině, klasifikujeme do dvou tříd $-1, 1$. Pro každé $\boldsymbol{x_i}$ známe y_i, což je třída, do které patří. Předpokládáme, že jednotlivá měření příznaků jsou nezávislá.

Úkolem učení klasifikátoru je nalezení transformační funkce z prostoru X do prostoru Y. Ta je závislá na volbě klasifikátoru a metodě učení klasifikátoru. Tuto závislost formálně vyjádříme parametrem α.

$$\boldsymbol{x_i} \rightarrow f(\boldsymbol{x_i}, \alpha)$$

Bez znalosti chyby klasifikátorů je jeho použití obtížné, neboť nevíme jak moc se můžeme na výsledky spolehnout.

Očekávanou chybu klasifikátoru na skutečných datech po naučení lze vyjádřit:

$$R(\alpha) = \int \frac{1}{2}|y - f(\boldsymbol{x}, \alpha)| dP(\boldsymbol{x}, y) \quad (1)$$

Jesliže existuje sdružená hustota pravděpodobnosti pak

$$dP(\boldsymbol{x}, y) = p(\boldsymbol{x}, y)d\boldsymbol{x}dy$$

$R(\alpha)$ z (1) se nazývá očekávané riziko. Tato hodnota uvádí skutečnou chybu, ale pravděpodobnost $P(\boldsymbol{x}, y)$ nebo její odhad, lze získat velmi těžko.

$$R_{emp}(\alpha) = \frac{1}{2l}\sum_{i=1}^{l}|y_i - f(\boldsymbol{x_i}, \alpha)|. \tag{2}$$

$R_{emp}(\alpha)$ z (2) se nazývá empirická ztráta a udává chybu na trénovací množině, pro konečný počet pozorování. Hodnota $\frac{1}{2}|y_i - f(\boldsymbol{x_i}, \alpha)|$ se nazývá ztráta. Klasifikaci provádíme do tříd $-1, 1$, proto ztráta může nabývat pouze hodnot 0 nebo 1.

Samotná chyba na trénovací množině mnoho nevypovídá o chybě na testovacích (reálných) datech. Následující vztah dává *odhad* skutečné chyby (tedy hodnotu větší než ze vztahu (1), zato jej můžeme vyčíslit aniž bychom znali $P(\boldsymbol{x}, y)$

$$R(\alpha) \leq R_{emp}(\alpha) + \sqrt{(\frac{h(\log(2l/h) + 1) - \log(\eta/4)}{l})} \tag{3}$$

Kde h je celé nezáporné číslo nazývané VC (Vapnik-Chervonenkis) dimenze. Paranetr $\eta \in \langle 0, 1\rangle$ je volitelný a souvisí s důvěryhodností odhadu (3). Bylo totiž dokázáno, že (3) platí s pravděpodobností $1 - \eta$. Odmocnina ve vztahu (3) se nazývá VC confidence (Confidence - spolehlivost, důvěra) (Vapnik 1995).

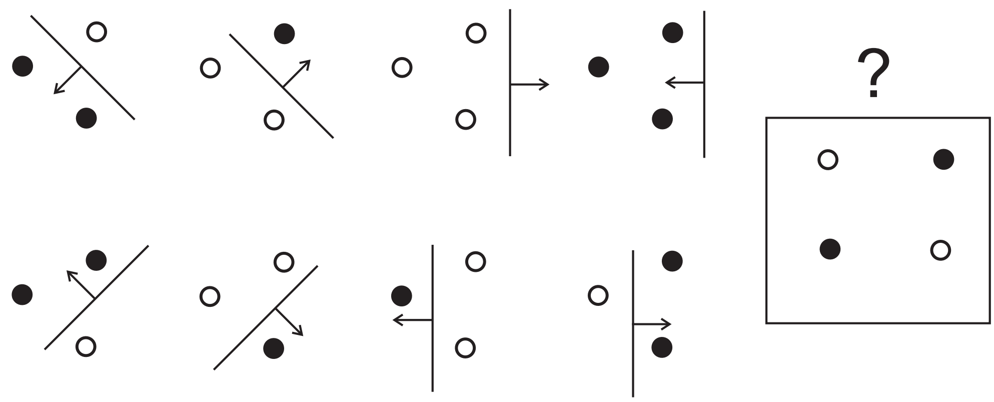
2.1 VC dimenze

VC dimenze je vlastnost množiny funkcí $\{f(\alpha)\}$ (pro představu ve 2D je to množina všech možných rozdělujících přímek). Pro klasifikaci do dvou tříd je VC dimenze definována jako maximální počet nedegenerovaných bodů (ve 2D tzn., že neleží na jedné přímce), jež lze rozbít funkcí $f(\alpha)$.

Mějme množinu l bodů, kterým přiřazujeme označení $-1, 1$ existuje 2^l možných přiřazení (označení).

Jestliže pro každé označení l bodů existuje funkce z $\{f(\alpha)\}$ a $f(\alpha)$ rozbíjí množinu bodů l, pak je VC dimenze l.

VC dimence h zaručuje, že existuje alespoň jedna množina h bodů, které lze rozbít. Na obr. 1 je dokázáno, že VC dim pro rozdělení přímkou (nadrovinou) v rovině je tři. Čtyři body v rovině již není možné pro všechna označení rozbít.



Obrázek 1: příklad rozbití množiny 3 bodů v rovině

2.2 VC dimenze a počet parametrů

Hodnota VC dimenze nezávisí na počtu parametrů α rozbíjející funkce. Následující příklad ukáže funkci s jediným parametrem α a s hodnotu VC dimenze nekonečno.

Mějme prahovu funkci :

$$\theta(x), x \in (R) : \theta(x) = 1 \ \forall x > 0; \theta(x) = -1 \ \forall x \leq 0$$

a jednoparametrickou rozdělující funkci

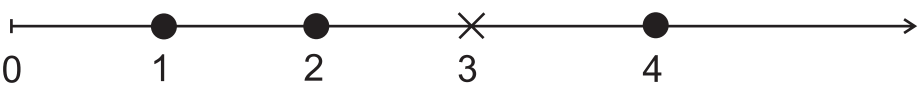
$$f(x, \alpha) = \theta(\sin(\alpha x)), x, \alpha \in \boldsymbol{R}.$$

Vybereme l bodů podle předpisů:

$$x_i = 10^{-i}, i = 1, \ldots, l.$$

Bodům přiřadíme třídy $y_1, y_2, \ldots, y_l; y_i \in -1, 1$.

Pro $\alpha = \pi(1 + \sum_{i=1}^{l} \frac{(1-y_i 10^i}{2})$ klasifikátor $f(x, \alpha)$ rozbíjí nekonečně mnoho bodů a má tedy VC dimenzi nekonečno. Jistě lze najít množinu čísel, která touto funkcí nelze rozbít, bez ohledu na nekonečnou VC dimenzi. Ta nám však zaručuje, že existuje alespoň jedna množina bodů jež lze rozbít.



Obrázek 2: příklad množiny čísel jež nelze rozbít funkcí $f(x, \alpha) = \theta(\sin(\alpha x)), x, \alpha \in \boldsymbol{R}$.

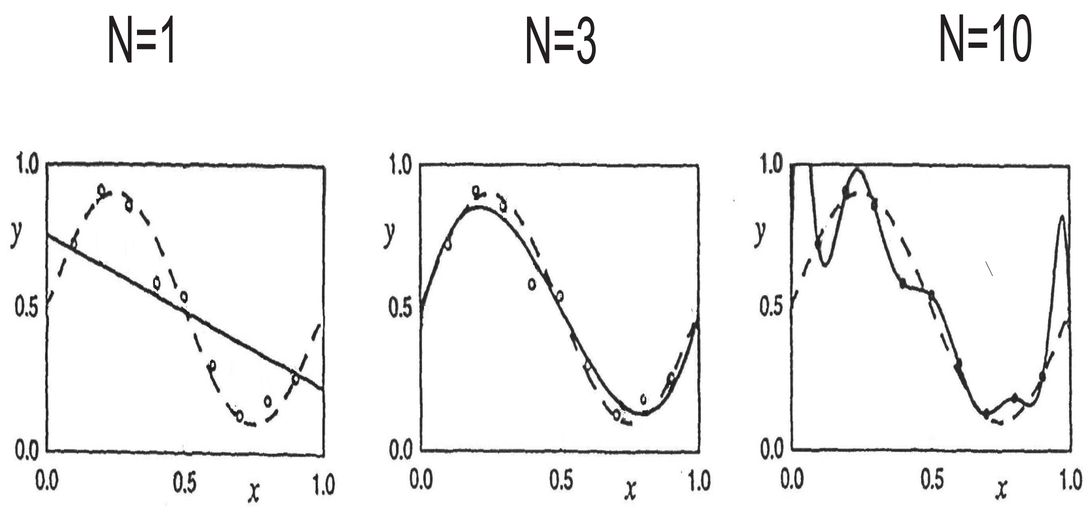
2.3 VC dimenze orientované nadroviny

Pro m bodů z $\boldsymbol{R}^n$ zvolme jeden bod za počátek souřadnic. Pak m bodů lze rozbít orientovanými nadrovinami právě když zbylých $m-1$ bodů je lineárně nezavislých.

VC dimenze orientovaných nadrovin v $\boldsymbol{R}^n$ je $n+1$.

2.4 Minimalizace strukturálního rizika

Pro ilustraci problému strukturálního rizika uvažujme problém regrese průběhu na obr 3 (několik bodů za šuměného sinu). Zřejmý problém je volba vhodného modelu (v našem případě stupně prokládající ho polynomu). Pro příliš nízký řád (např. stupeň 1) je výsledek regrese nepoužitelný. Pro řád příliš vysoký nám regrese bude kopírovat i šum, což také není ideální. VC confidence v rovnici (3) závisí na volbě klasifikační funkce. Měli bychom vybrat takovou podmnožinu z množiny funkcí, pro kterou bude odhad chyby minimální. Minimalizace strukturálního rizika je hledání takové podmnožiny funkcí, aby hodnota empirickiého risku a hodnota VC confidence byla minimální.

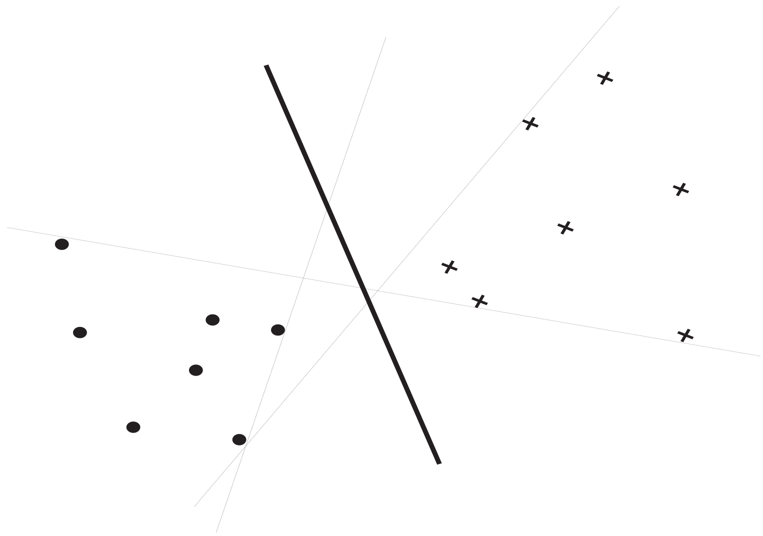


Obrázek 3: regrese průběhu zašuměného sinu pro různé stupně prokl. polynomu.

3 Separabilní data

Podívejme se na příklad na obr.4. Zde je mnoho vyhovujících lineárních klasifikátorů (slabší přímky), které umí rozdělit data (takové výsledky by dal pravděpodobně nějaký perceptron), ale jen jedna nadrovina maximalizuje mezeru (tedy vzdálenost mezi nejbližšími body z obou tříd k rozdělující nadrovině). Tento lineární klasifikátor bývá nazýván optimální rozdělující nadrovinou.

SVM tedy hledá lineární klasifikátor učením, které je založeno na minimalizaci strukturálního rizika (maximalizaci šířky rozdělujícího pásu).



Obrázek 4: Optimální rozdělující nadrovina

3.1 Optimální rozdělující nadrovina

Uvažujeme trénovací množinu ve tvaru $\{\boldsymbol{x_i}, y_i\}$, i=1,...,l , $y_i \in \{-1, 1\}$, $\boldsymbol{x_i} \in R^d$, kde y_i je třída a $\boldsymbol{x_i}$ je vektor souřadnic d-dimenzionálního prostoru. Předpokládejme, že máme nějakou nadrovinu, která nám odděluje pozitivní vzorky od negativních (oddělující nadrovinu). Body (vzorky) $\boldsymbol{x}$ ležící na oddělující nadrovině splňují rovnici $\boldsymbol{w} \cdot \boldsymbol{x} + b = 0$, kde $\boldsymbol{w}$ je normálový vektor oddělující nadroviny (též si lze představit jako vektor vah) a $|b| / |\boldsymbol{w}|$ je vzdálenost od nadroviny k počátku souřadné soustavy, viz. obr.5.

Nechť $d_+(d_-)$ jsou nejkratší vzdálenosti od oddělující nadroviny k pozitivním (negativním) bodům.

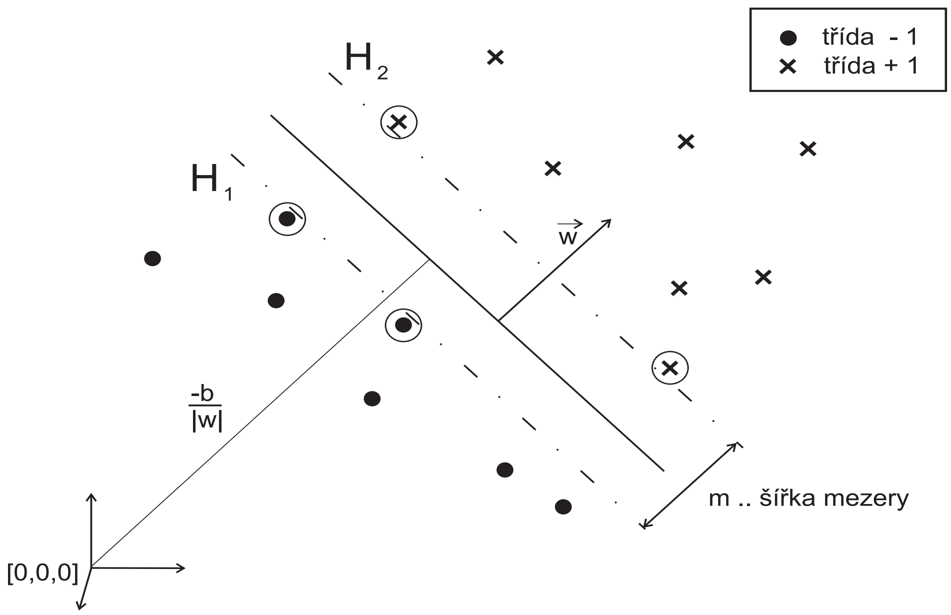
Definujme mezeru oddělující nadroviny: $\rho(\boldsymbol{w}, b) = d_{+} + d_{-}$. Úlohu můžeme formulovat následovně: předpokládejme, že všechna trénovací data vyhovují následujícím podmínkám:

$$\boldsymbol{x_i} \cdot \boldsymbol{w} + b \geq +1 \quad pro \quad y_i = +1 \tag{4}$$

$$\boldsymbol{x_i} \cdot \boldsymbol{w} + b \leq -1 \quad pro \quad y_i = -1 \tag{5}$$

Tyto dvě podmínky lze též formulovat následovně:

$$y_i \cdot (\boldsymbol{x_i} \cdot \boldsymbol{w} + b) - 1 \geq 0 \quad \forall i \tag{6}$$



Obrázek 5: Lineární rozdělující nadrovina pro dvoudimenzionální prostor

Tedy vyrobíme dva pásy a změnou parametru $\boldsymbol{w}$ budeme měnit šířku mezery. Nyní vezmeme v úvahu body, pro které platí podmínka (4).
Tyto body jsou odděleny nadrovinou H_1:

$$\boldsymbol{x_i} \cdot \boldsymbol{w} + b = 1 \tag{7}$$

s normálou $\boldsymbol{w}$ a vzdáleností od počátku $|1 - b| \,/\, |\boldsymbol{w}|$. Podobně pro body splňující podmínku (5) platí pro H_2 :

$$\boldsymbol{x_i} \cdot \boldsymbol{w} + b = -1 \tag{8}$$

Kde je vzdálenost od počátku rovna $|-1-b| / |\boldsymbol{w}|$. Poznamenejme, že H_1 a H_2 jsou paralelní (mají stejné normály), a mezi nimi neleží žádná trénovací data. Body $\boldsymbol{x_i}$ splňující podmínky (6) resp. (7) leží na nadrovinách H_1 resp. H_2 se nazývají **support vectors** a jsou v obr.5 označeny kroužkem. Tedy hledáme body $\boldsymbol{x_i}$, které vyhovují podmínce

$$\min_{\boldsymbol{x_i}} |\boldsymbol{x} \cdot \boldsymbol{w} + b| = 1 \tag{9}$$

Vzdálenost $d(\boldsymbol{w}, b; \boldsymbol{x})$ od $\boldsymbol{x}$ k nadrovině $\boldsymbol{w}, b$ je

$$d(\boldsymbol{w}, b; \boldsymbol{x}) = \frac{|\boldsymbol{w} \cdot \boldsymbol{x} + b|}{|\boldsymbol{w}|} \tag{10}$$

Tedy optimální oddělující nadrovina maximalizující mezeru nám dává velikost mezery

$$\begin{aligned}
&\rho(\boldsymbol{w}, b) = d_+ + d_- = \min_{\{\boldsymbol{x_i}: y_i=1\}} d(\boldsymbol{w}, b; \boldsymbol{x_i}) + \min_{\{\boldsymbol{x_i}: y_i=-1\}} d(\boldsymbol{w}, b; \boldsymbol{x_i}) \\
&= \min_{\{\boldsymbol{x_i}: y_i=1\}} \tfrac{|\boldsymbol{w} \cdot \boldsymbol{x} + b|}{|\boldsymbol{w}|} + \min_{\{\boldsymbol{x_i}: y_i=-1\}} \tfrac{|\boldsymbol{w} \cdot \boldsymbol{x} + b|}{|\boldsymbol{w}|} \\
&= \tfrac{1}{|\boldsymbol{w}|} \left(\min_{\{\boldsymbol{x_i}: y_i=1\}} |\boldsymbol{w} \cdot \boldsymbol{x_i} + b| + \min_{\{\boldsymbol{x_i}: y_i=-1\}} |\boldsymbol{w} \cdot \boldsymbol{x_i} + b| \right) \\
&= \tfrac{2}{|\boldsymbol{w}|}
\end{aligned} \tag{11}$$

Chceme-li maximalizovat mezeru musíme maximalizovat výraz $\frac{2}{|w|}$ nebo-li minimalizovat $|\boldsymbol{w}|$. Jak je z výše uvedených vztahů vidět, je potřeba pro nalezení optimální rozdělující nadroviny nalézt vázaný extrém, který je funkcí. Použijeme minimalizačního kriteria Lagrangeových koeficientů pro nalezení optimální oddělující nadroviny:

$$L(\boldsymbol{w}, b, \alpha) = \frac{1}{2} |\boldsymbol{w}|^2 - \sum_{i=1}^{l} \alpha_i y_i (\boldsymbol{x_i} \cdot \boldsymbol{w} + b) + \sum_{i=1}^{l} \alpha_i \tag{12}$$

Kde α_i jsou Lagrangeovy koeficienty (multiplikátory), pro které platí $\alpha_i > 0 \Leftrightarrow \boldsymbol{x_i}$ je support vector.

Teď si ještě naznačme řešení Lagrangeovy rovnice, předem je nutno podotknout, že se jedná o problém kvadratického programování. Hledáme minimum funkce $L(\boldsymbol{w}, b, \alpha)$ s ohledem ke koeficientům α_i. Tento problém bývá nazýván Wolfe dual (primárním problémem je označována rovnice (12) a sekundárním rovnice (13) viz. níže).

$$\max_{\alpha} W(\alpha) = \max_{\alpha} \{ \min_{\boldsymbol{w}, b} L(\boldsymbol{w}, b, \alpha) \} \tag{13}$$

Minimum $\min\limits_{\boldsymbol{w},b} L(\boldsymbol{w}, b, \alpha)$ určíme pomocí

$$\frac{\partial L}{\partial b} = 0 \quad \Rightarrow \quad \sum_{i=1}^{l} \alpha_i y_i = 0 \tag{14}$$

$$\frac{\partial L}{\partial \boldsymbol{w}} = 0 \quad \Rightarrow \quad \boldsymbol{w} = \sum_{i=1}^{l} \alpha_i y_i \boldsymbol{x_i} \tag{15}$$

Ze vztahů (13),(14) a (15) plyne

$$\max_{\alpha} W(\alpha) = \max_{\alpha} -\frac{1}{2} \sum_{i=1}^{l} \sum_{j=1}^{l} \alpha_i \alpha_j y_i y_j (\boldsymbol{x_i} \cdot \boldsymbol{x_j}) + \sum_{i=1}^{l} \alpha_i \tag{16}$$

Řešením rovnice (16) je

$$\bar{\alpha} = \arg\min_{\alpha} \frac{1}{2} \sum_{i=1}^{l} \sum_{j=1}^{l} \alpha_i \alpha_j y_i y_j (\boldsymbol{x_i} \cdot \boldsymbol{x_j}) - \sum_{i=1}^{l} \alpha_i \tag{17}$$

za podmínek (14) a $\alpha_i \geq 0, \quad i = 1, ..., l$
Máme tedy Lagrangeovi koeficienty α_i, které nám pomohou určit

$$\overline{w} = \sum_{i=1}^{l} \bar{\alpha}_i \boldsymbol{x_i} y_i \tag{18}$$

$$\overline{b} = -\frac{1}{2} \overline{w} [x_{+1} + x_{-1}] \tag{19}$$

kde x_{+1}, x_{-1} jsou support vektory.

4 Neseparabilní data

Pro neseparabilní data výše popsaný algoritmus nenajde vhodné řešení. Proto je třeba ho upravit tak, aby fungoval i pro neseparabilní data. Uvolníme proto omezení (4),(5) zavedením odchylky

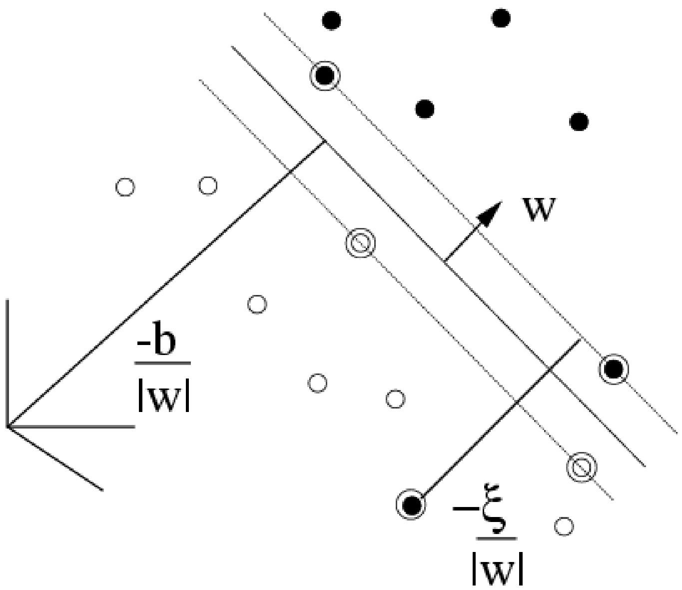
$$\xi_i, \; i = 1 \ldots l$$

Omezení definující oddělující nadrovinu jsou potom

$$\boldsymbol{x_i} \cdot \boldsymbol{w} + b \geq +1 - \xi_i \qquad \text{pro } y_i = +1 \tag{20}$$

$$\boldsymbol{x_i} \cdot \boldsymbol{w} + b \leq -1 + \xi_i \qquad \text{pro } y_i = -1 \tag{21}$$

$$\xi_i \geq 0 \, \forall i. \tag{22}$$



Obrázek 6: Lineární rozdělující nadroviny pro neseparabilní data

Tím rozšíříme prostor příznaků Výraz $\sum_i \xi_i$ je horní odhad chyby na trénovacích datech. Potom místo hledání minima $\frac{\|\boldsymbol{w}\|^2}{2}$ pro separabilní data budeme hledat minimum, kde parametr C volí uživatel a odpovídá pokutě za danou chybu.

$$\frac{\|\boldsymbol{w}\|^2}{2} + C\left(\sum_i \xi_i\right)^k \tag{23}$$

Vyřešení nerovnic (20) až (23) je konvexní minimalizační problém matematického programování. Pro k=1, k=2 přechází v problém kvadratického programování. Pro k=1 je výhodné, že ani ξ stejně jako Langrangeovy multiplikátory se neobjeví ve Wolfově duálním problému maximalizace

$$L_D = \sum_i \alpha_i - \frac{1}{2}\sum \alpha_i \alpha_j y_i y_j \boldsymbol{x_i} \cdot \boldsymbol{x_j} \tag{24}$$

$$0 \le \alpha_i \le C \tag{25}$$

$$\sum_i \alpha_i y_i = 0 \tag{26}$$

Řešením je:

$$\boldsymbol{w} = \sum_{i=1}^{N_s} \alpha_i y_i \boldsymbol{x_i}, \tag{27}$$

kde N_s je počet support vectors.

Další možná řešení lze najít pomocí:

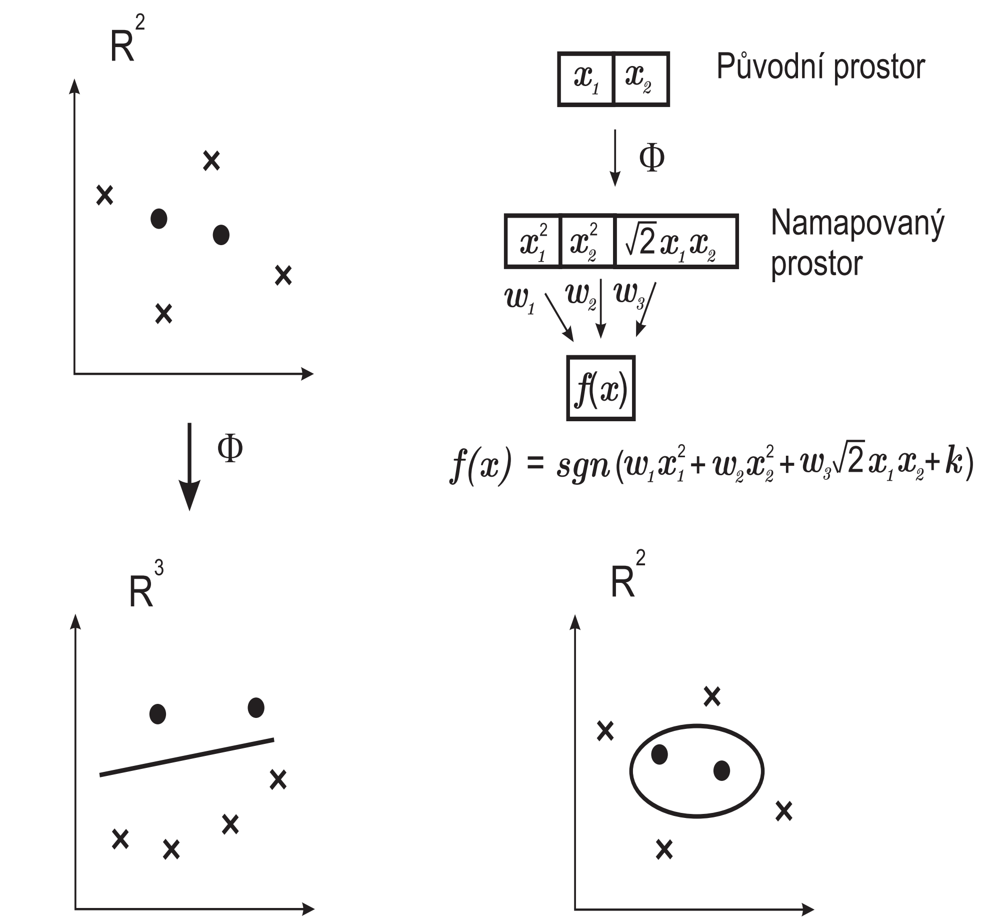
- constrained confugate gradient descent
- interior point methods
- projection methods
- Bunhc Kaufman decomposition

5 Nelineární SVM

Nelineární SVM musíme použít v případě, když rozhodovací funkce není lineární. Boser, Guyon a Vapnik ukázali, že cesta vede přes vlastnosti skalárního součinu $\boldsymbol{x_i} \cdot \boldsymbol{y_i}$. Trénovací data jednoduše přetransformujeme z prostoru R^d do $\mathcal{H}$ pomocí zobrazení

$$\Phi : R^d \rightarrow \mathcal{H} \tag{28}$$

Řešení tedy vede na hledání v prostoru vyšší dimenze, kde jsou data separabilní a kde tedy můžeme použít postup z předchozích odstavců. Problémem je nalezení vhodné transformace (28).



Obrázek 7: Transformace trénovacích dat (vlevo nahoře) nelineárně přes Φ do vícedimenziálního prostoru R^3 a konstrukce oddělující nadroviny (dole vlevo), SV klasifikátor (vpravo nahoře) odpovídající nelineární rozhodovací oblasti ve vstupním prostoru (vpravo dole).

Trénovací algoritmus závísí pouze na datech ze skalárního součinu v $\mathcal{H}$(tj. $\Phi(x_i) \cdot \Phi(x_j)$). Pokud tedy existuje Kernel funkce:

$$K(\boldsymbol{x_i}, \boldsymbol{x_j}) = \Phi(\boldsymbol{x_i}) \cdot \Phi(\boldsymbol{x_j}) \tag{29}$$

nemusíme funkci Φ počítat ani ji nemusíme znát. Ne vždy lze jednoduše určit, zda existuje pár $\{\mathcal{H},\Phi\}$. Odpověd lze určit pomocí Mercerovy podmínky:

Mějme

$$K(\boldsymbol{x_i}, \boldsymbol{y_i}) = \sum_i \Phi(\boldsymbol{x})_i \Phi(\boldsymbol{y})_i \tag{30}$$

a jakoukoliv funkci $g(x)$ takovou, že integrál (31) je konečný.

$$\int g(\boldsymbol{x})^2 d\boldsymbol{x} \tag{31}$$

potom pár $\{\mathcal{H},\Phi\}$ existuje pouze když platí

$$\int K(\boldsymbol{x},\boldsymbol{y})g(\boldsymbol{x})^2)g(\boldsymbol{y})d\boldsymbol{x}d\boldsymbol{y} \geq 0 \tag{32}$$

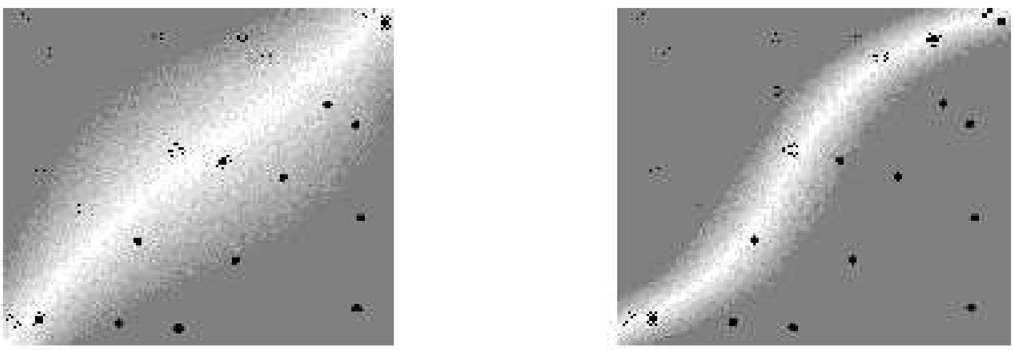
Příklad: (ukázka povoleného kernelu, pro který můžeme určit Φ)
Trénovací data jsou v dimenzi R^2 a jako kernel vybereme $K(\boldsymbol{x_i},\boldsymbol{x_j}) = (\boldsymbol{x_i},\boldsymbol{x_j})^2$. Potom není těžké najít prostor $\mathcal{H} = R^3$ a transformaci Φ z R^2 do $\mathcal{H}$ takovou, že
$(\boldsymbol{x},\boldsymbol{y}) = (\boldsymbol{x}\cdot\boldsymbol{y})$ a

$$\Phi(\boldsymbol{x}) = \begin{pmatrix} x_1^2 \\ \sqrt{2}x_1x_2 \\ x_2^2 \end{pmatrix}$$

Rozhodovací funkce klasifikátoru pro nelineární SVM se počítá dle

$$f(\boldsymbol{x}) = \sum_{i=1}^{N_s} \alpha_i y_i K(\boldsymbol{s_i},\boldsymbol{x_i}) + b, \tag{33}$$

kde $\boldsymbol{s_i}$ jsou support vectors.



Obrázek 8: Příklad nelineární SVM, kde kernel je kubický polynom 3. stupně

6 Generalizace SVM

- VC dimenze množiny funkcí rozdělujících nadrovin v prostoru dimenze n je

$$n + 1$$

- podmnožina rozdělujíích funkcí

$$f(x, \omega, b) = sign(\omega \cdot x) + b$$

definovaná na

$$\boldsymbol{X^r} = x_1, x_2, \ldots, x_r; |x_i - a| \leq R$$

Pozn.: tato podmínka říká, že všechny body z X leží uvnitř nějaké sféry (kružnice se středem a poloměrem R) splňující $|\omega| \leq A$ (všechny body jsou od rozdělujících nadploch nejblíže $\frac{1}{A}$, což omezuje počet možných nadrovin jak je patrne na obr. 9)
má VC dimenzi omezenou nerovností

$$h \leq min(R^2 A^2)$$

výše dva zmíněné případy lze shrnout a omezit VC dimenzi:

$$h \leq min(R^2 A^2, n) + 1 \tag{34}$$

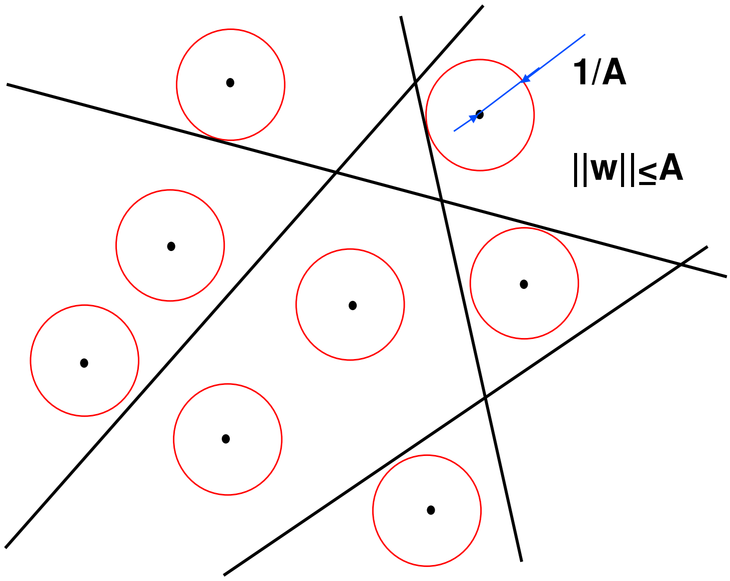
- pro separabilní data (Vapnik, 1995) přináší druhou možnost jak odhadnout skutečnou chybu klasifikátoru SVM

$$E[P(erorr)] \leq \frac{E[\text{number of SUPPORT VECTORS}]}{\text{Number of training vectors}} \tag{35}$$

kde $P(error)$ je hodnota skutečného rizika, klasifikátoru naučeného z $l-1$ vzorů. $E[Number\ of\ support\ vectors]$ je očekávání z počtu support vectors přes všechny možnosti trénovacích množin velikosti l.

7 Závěr

Metoda SVM má velmi jednouduchou geometrickou interpretaci. Učení SVM klasifikátoru vždy nalezne globální minimum.



Obrázek 9: Omezení množství možných nadrovin charakteristickou vzdáleností 1/A.

Reference

[1] CMP: *http://cmp.felk.cvut.cz/cmp/courses/recognition/resources/svmBurges.ps.gz*

[2] CMP: *http://cmp.felk.cvut.cz/cmp/courses/recognition/resources/svm_soton.ps.gz*

[3] CMP: *http://cmp.felk.cvut.cz/cmp/courses/recognition/resources/AIM_1599.ps*