- Paskaita 6 -

Atraminių vektorių mašina

Support Vector Machine

Tai labai populiarus ir efektyvus duomenų klasifikavimo algoritmas

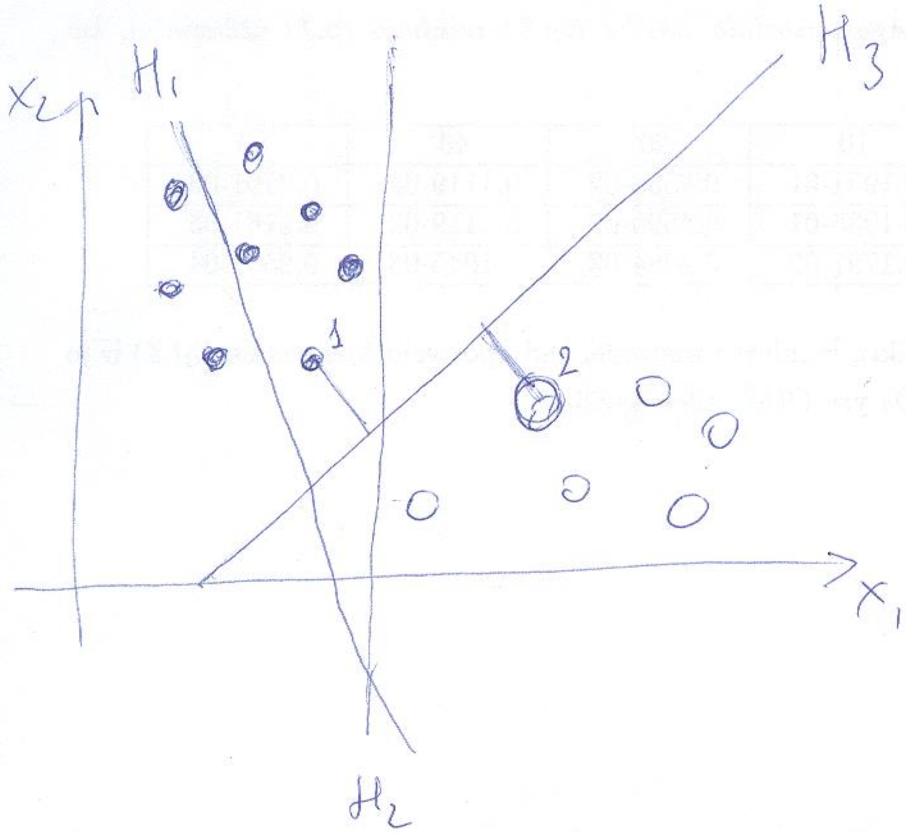
Sakykime turime p-mačių vektorių rinkinį

$$X_j = (x_1^j, \dots, x_p^j), \quad j = 1, \dots, J.$$

Šie taškai (vektoriai) priklauso vienai iš dviejų klasių.

Uždavinys. Surasti (jei egzistuoja) tokią hiperplokštumą (p-1)-matę, kurią atskiria skirtingų klasių taškus

Panagrinėkime $p=2$ atvejį, tada duomenis siekiame atskirti išvesdami tiesę



yra atraminiai vektoriai:

Maximum-margin hyperplane

H_1 - nėra skiriančioji tiesė

H_2 - yra skiriančioji tiesė, bet atstumas iki skirtingų ~~ar~~ klasių nėra didelis (skirtumas).

H_3 - yra skiriančioji tiesė ir skirtumas yra maksimalus (kaip sakant maksimalaus skirtumo tiesė)

Ši technologija, pvz., gali būti naudojama <u>vaizdų klasifikavimui</u> (classification of images).
Panašiai atliekame ir proteinų klasifikavimą

Algoritmas 1. (tiesinė atraminių vektorių mašina – tiesinė AVM)

- Turime duomenis (n-apmokymo duomenų)

$$(\mathbb{X}_1, y_1), (\mathbb{X}_2, y_2), \dots, (\mathbb{X}_n, y_n),$$

čia y_j yra lygus 1 arba −1. (apibrėžia vieną iš dviejų klasių, kuriai priklauso duomenys)

x_j yra p-matis duomenų vektorius,

$$\mathbb{X}_j = (x_1^j, x_2^j, \dots, x_p^j), \quad x^k \in \mathbb{R}$$

- Ieškome „maksimaliai skiriančią hiperplokštumą“ (maximum-margin hyperplane), atskiriančią skirtingas klases

- Hiperplokštumos lygtis

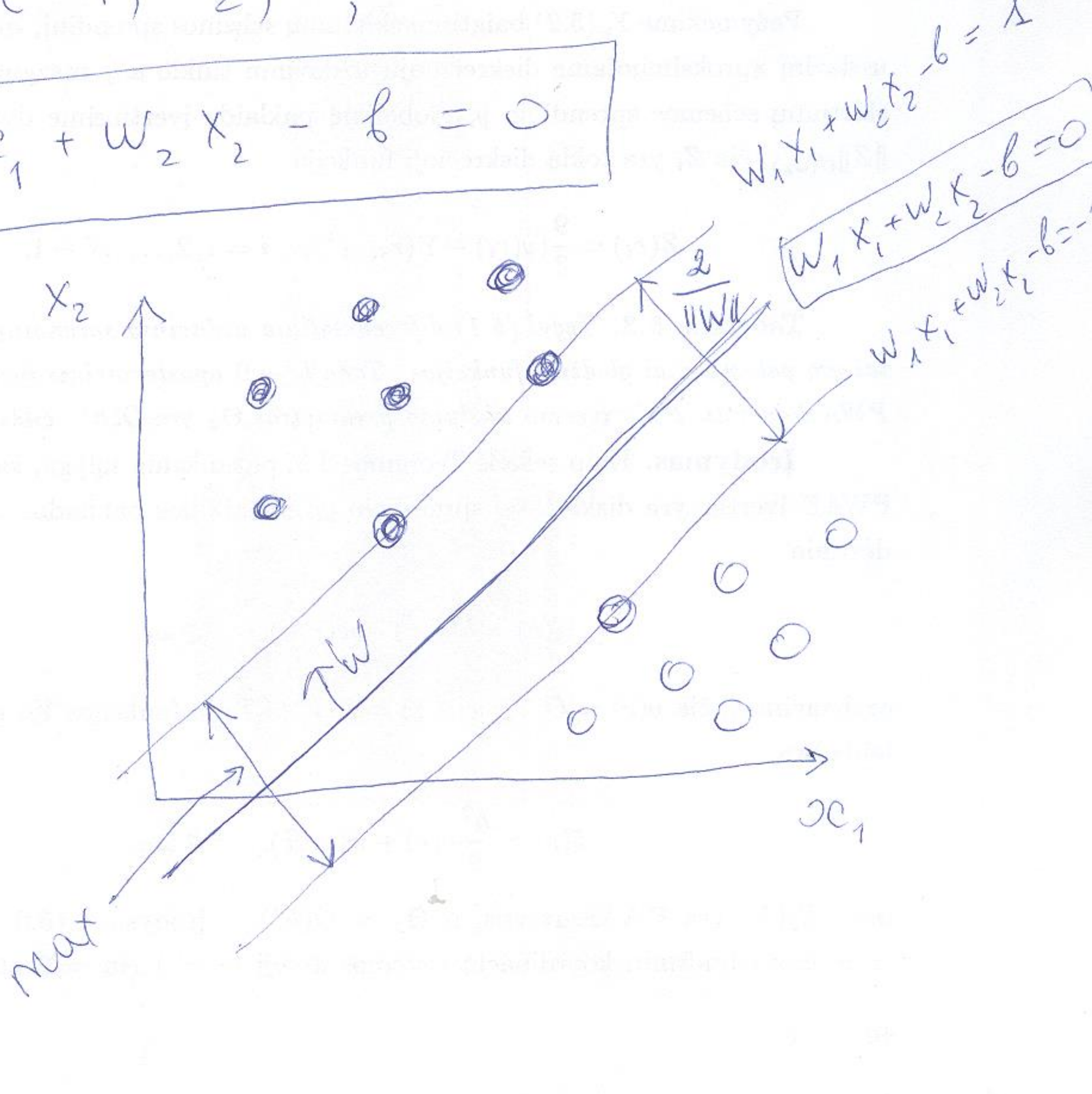
$$\boxed{W^T X - b = 0},$$

čia W yra normalusis vektorius

Kaip pvz. imkime dvimatį atvejį $p = 2$

$W = (w_1, w_2)$, $X = (x_1, x_2)$,

$$\boxed{w_1 x_1 + w_2 x_2 - b = 0}$$



Stiprus atskiriamumas (hard margin)

Jei apmokymo duomenys gali būti tiesiškai atskiriami, tai galime rasti dvi hiperplokštumas, kurios atskiria skirtingų klasių duomenis ir atstumas tarp dviejų hiperplokštumų yra maksimalus: gauname pasvirusio „margin" sritį, o didžiausio skirtumo hiperplokštuma yra apibrėžiama šios srities viduryje.

- Visi taškai ant ar virš hiperplokštumos

$$W^T X - b = 1$$

priklauso pirmai klasei

- visi taškai ant ar žemiau hiperplokštumos $W^T X - b = -1$ priklauso kitai klasei.

Iš analizinės geometrijos paskaitų žinome, kad atstumas tarp šių dviejų hiperplokštumų yra lygus $\frac{2}{\|W\|}$.

$$\left(\|W\|^2 = (W^T, W) \right).$$

Todėl <u>siekiame minimizuoti</u> $\|W\|$.

<u>Alg.</u> Gauname tokius uždavinius:

$$W^T X_i - b \geq 1, \text{ jeigu } y_i = 1,$$

$$W^T X_i - b \leq -1, \text{ jeigu } y_i = -1.$$

Juos apjungdame į vieną sąlygą:

$$\boxed{y_i (W^T X_i - b) \geq 1, \quad 1 \leq i \leq n.}$$

$$\boxed{\begin{array}{c} \min \|W\| \\ y_i (W^T X_i - b) \geq 1 \\ i = 1, \dots, n. \end{array}}$$

Rasti tokį W, kad išspręstume <u>suformuluotą uždav</u>

Klasifikatorius $X \to \operatorname{sign}(W^T X - b)$

Minkštas atskyrimas (soft-margin)

Tais atvejais, kai apmokymo duomenys nėra tiesiškai atskiriami – naudojame bendresnę tikslo funkcijos skaičiavimo ribojimų aibę

$$\max\left(0,\ 1-y_i\left(W^T X_i - b\right)\right)$$

Jeigu X_i yra teisingoje pusėje nuo hiper-plokštumos ribojimas lygus 0, jeigu neteisingoje – tai ši funkcija yra proporcinga atstumui nuo paviršiaus.

$$\boxed{\min_{W}\ \frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n}\max\left(0,\ 1-y_i\left(W^T X_i - b\right)\right) + \lambda \|W\|^2}$$

λ – yra Lagranžo daugiklio analogas ir parodo, kiek reikšminga yra apmokymo taškų netikslus pasiskirstymas hiperplokštumos atžvilgiu.

Priminsime, kad jei λ yra pakankamai mažas tai gauname striprai atskiriamo klasifikatoriaus (hard-margin), taigi turime bendrą sprendimą.

Dažniausiai naudojamas sprendimo būdas yra suvesti duotąjį minimizavimo uždavinį į kvadratinio programavimo uždavinį, kurio sprendimui egzistuoja daug efektyvių sprendimo algoritmų.

Užrašome uždavinį, kurį gauname iš klasifikatoriaus variacinio uždavinio

$$\max_{c_1,\dots,c_n} \sum_{i=1}^{n} c_i - \frac{1}{2}\sum_{i=1}^{n}\sum_{j=1}^{n} y_i c_i X_i^T X_j y_j c_j$$

su sąlygomis

$$\sum_{i=1}^{n} c_i y_i = 0 \quad \text{ir} \quad 0 \le c_i \le \frac{1}{2n\lambda} \quad \forall i=1,\dots,n$$