# SVM-МЕТОД: МЯГКОЕ ОТДЕЛЕНИЕ*

В. Н. Малоземов — v.malozemov@spbu.ru

А. В. Плоткин — avplotkin@gmail.com

6 апреля 2022 г.

**1°**. Как известно [1, 2], задача строгого линейного отделения двух конечных множеств

$$P_1 = \{p_j\}_{j=1}^{s} \quad \text{и} \quad P_2 = \{p_j\}_{j=s+1}^{m}$$

с наибольшей шириной разделяющей полосы сводится к задаче квадратичного программирования

$$\begin{gathered} \tfrac{1}{2}\,\|w\|^2 \to \min, \\ \xi_j\big(\langle w, p_j\rangle + \beta\big) \geqslant 1, \quad j \in 1:m, \end{gathered} \tag{1}$$

где $\xi_j = 1$ при $j \in 1:s$ и $\xi_j = -1$ при $j \in s+1:m$.

Задача (1) не имеет решения, если множество ее планов пусто. В этом случае можно поставить вопрос о приближенном (мягком) отделении множеств $P_1$ и $P_2$. Обычно такая задача формализуется следующим образом [1]:

$$\begin{gathered} \tfrac{1}{2}\,\|w\|^2 + C\sum_{j=1}^{m}\eta_j \to \min, \\ \xi_j\big(\langle w, p_j\rangle + \beta\big) \geqslant 1 - \eta_j, \quad j \in 1:m, \\ \eta_j \geqslant 0, \quad j \in 1:m. \end{gathered} \tag{2}$$

Здесь $C > 0$ — штрафной множитель. Имеем новую задачу квадратичного программирования. В отличие от задачи (1) она всегда имеет решение, так как целевая функция ограничена снизу нулем и множество планов непусто (содержит вектор $(w, \beta, \eta_1, \ldots, \eta_m)$ с компонентами $w = \mathbb{O}$, $\beta = 0$, $\eta_j = 1$ при всех $j \in 1:m$).

*Семинар по оптимизации, машинному обучению и искусственному интеллекту «O&ML» `http://www.apmath.spbu.ru/oml/`

**2°**. Для дальнейшего анализа задачи (2) построим двойственную задачу. Предварительно составим таблицу данных задачи (2) (см. [3]).

Таблица 1. Таблица данных задачи (2)

| | $0\dots0$ | $0$ | $C\dots C$ | |
|---|---|---|---|---|
| | | $0$ | | |
| $v$ | $-E_n$ | $\vdots$ | $\mathbb{O}_{n\times m}$ | $-\frac{1}{2}v$ |
| | | $0$ | | |
| $\lambda$ | $0\dots0$ | $0$ | $0\dots0$ | $0$ |
| | | $0$ | | $0$ |
| $\mu$ | $\mathbb{O}_{n\times m}$ | $\vdots$ | $\mathbb{O}_{n\times m}$ | $\vdots$ |
| | | $0$ | | $0$ |
| $u_1$ | $\xi_1 p_1^{\mathsf{T}}$ | $\xi_1$ | | $1$ |
| $\vdots$ | $\vdots$ | $\vdots$ | $E_m$ | $\vdots$ |
| $u_m$ | $\xi_m p_m^{\mathsf{T}}$ | $\xi_m$ | | $1$ |
| $t_1$ | | $0$ | | $0$ |
| $\vdots$ | $\mathbb{O}_{m\times n}$ | $\vdots$ | $E_m$ | $\vdots$ |
| $t_m$ | | $0$ | | $0$ |

Запишем двойственную задачу

$$\begin{gathered}
-\tfrac{1}{2}\langle v, v\rangle + \sum_{i=1}^{m} u_i \to \max, \\
-v^T + \sum_{i=1}^{m} u_i \xi_i p_i^T = \mathbb{O}, \\
\sum_{i=1}^{m} u_i \xi_i = 0, \\
u_i + t_i = C, \quad i \in 1:m, \\
u_i \geqslant 0,\ t_i \geqslant 0, \quad i \in 1:m.
\end{gathered} \tag{3}$$

В частности,

$$v = \sum_{i=1}^{m} u_i \xi_i p_i. \tag{4}$$

Обозначим через $A$ матрицу со столбцами $\xi_1 p_1, \dots, \xi_m p_m$. Тогда формулу (4) можно переписать в виде

$$v = Au.$$

Пару соотношений $u_i + t_i = C$, $t_i \geqslant 0$ заменим одним неравенством $u_i \leqslant C$.

Переменные $v$ и $t_1, \dots, t_m$ в задаче (3) можно исключить. Поменяв знак у целевой функции, придем к следующей задаче:

$$\begin{gathered} \tfrac{1}{2}\langle A^T A u, u\rangle - \sum_{i=1}^m u_i \to \min, \\ \sum_{i=1}^m \xi_i u_i = 0, \\ 0 \leqslant u_i \leqslant C, \quad i \in 1:m. \end{gathered} \tag{5}$$

Именно эту задачу и нужно решать.

**3°**. Задача (5) имеет решение $u^*$, так как множество ее планов компактно. Решением двойственной задачи (3) является вектор $(v^*, u^*, t^*)$, где

$$\begin{gathered} v^* = \sum_{i=1}^m u_i^* \xi_i p_i, \\ t_i^* = C - u_i^*, \quad i \in 1:m. \end{gathered} \tag{6}$$

Обозначим решение прямой задачи (2) через $z^* = (w^*, \beta^*, \eta^*)$. По второй теореме двойственности имеем

$$\begin{gathered} w^* = v^*, \\ u_i^*\Big(\xi_i\big(\langle w^*, p_i\rangle + \beta^*\big) + \eta_i^* - 1\Big) = 0, \quad i \in 1:m, \\ t_i^* \eta_i^* = 0, \quad i \in 1:m. \end{gathered} \tag{7}$$

Положим

$$I_1^* = \{i \in 1:m \mid u_i^* > 0\}, \quad I_2^* = \{i \in 1:m \mid t_i^* > 0\}.$$

Из (6) и (7) следует, что

$$\begin{gathered} w^* = \sum_{i \in I_1^*} u_i^* \xi_i p_i, \\ \xi_i\big(\langle w^*, p_i\rangle + \beta^*\big) = 1 - \eta_i^*, \quad i \in I_1^*, \\ \eta_i^* = 0, \quad i \in I_2^*. \end{gathered} \tag{8}$$

Так как $t_i^* = C$ при $i \notin I_1^*$, то $\eta_i^* = 0$ при $i \notin I_1^*$.

Покажем, что множество $I_1^*$ непусто. В противном случае $u^* = \mathbb{O}$, $w^* = \mathbb{O}$, $t_i^* = C$ при всех $i \in 1 : m$, $\eta_i^* = 0$ при всех $i \in 1 : m$. Ограничение задачи (2) примет вид $\xi_j \beta^* \geqslant 1$, $j \in 1 : m$. Но это невозможно, поскольку среди $\xi_j$ есть как $+1$, так и $-1$.

Соотношения (8) позволяют, вообще говоря, найти решение $z^*$ задачи (2).

**4°**. Приведем иллюстративный пример на применение SVM-метода.

**ПРИМЕР.** На плоскости $\mathbb{R}^2$ заданы два множества точек

$$P_1 = \left\{ \begin{pmatrix} -\alpha \\ 0 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \right\}, \quad P_2 = \left\{ \begin{pmatrix} -1 \\ 0 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} \alpha \\ 0 \end{pmatrix} \right\},$$

где $\alpha > 0$ (см. рис. 1).

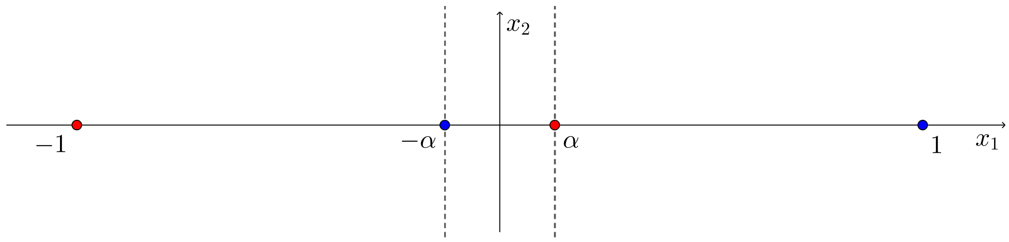


Рис. 1. Множества $P_1$ и $P_2$ на плоскости

Запишем задачу вида (2) приближенного отделения множеств $P_1$ и $P_2$:

$$\begin{gathered} \tfrac{1}{2}(w_1^2 + w_2^2) + C \sum_{j=1}^{4} \eta_j \to \min, \\ -\alpha w_1 + \beta \geqslant 1 - \eta_1, \\ w_1 + \beta \geqslant 1 - \eta_2, \\ w_1 - \beta \geqslant 1 - \eta_3, \\ -\alpha w_1 - \beta \geqslant 1 - \eta_4, \\ \eta_j \geqslant 0, \quad j \in 1 : 4. \end{gathered} \tag{9}$$

Мы приняли во внимание, что $\xi_1 = \xi_2 = 1$, $\xi_3 = \xi_4 = -1$.

Переменная $w_2$ не входит в ограничения задачи, поэтому оптимальное значение $w_2$ равно нулю, $w_2^* = 0$. Перепишем задачу (9), исключив из целевой функции переменную $w_2$:

$$\begin{aligned}
\tfrac{1}{2}w_1^2 + C\sum_{j=1}^{4}\eta_j \to \min,\\
-\alpha w_1 + \beta \geqslant 1 - \eta_1,\\
w_1 + \beta \geqslant 1 - \eta_2,\\
w_1 - \beta \geqslant 1 - \eta_3,\\
-\alpha w_1 - \beta \geqslant 1 - \eta_4,\\
\eta_j \geqslant 0, \quad j \in 1:4.
\end{aligned} \tag{10}$$

Сформируем вспомогательную задачу вида (5). В данном случае

$$A = (-\alpha, \quad 1, \quad 1, \quad -\alpha),$$

$$D := A^T A = \begin{pmatrix} \alpha^2 & -\alpha & -\alpha & \alpha^2 \\ -\alpha & 1 & 1 & -\alpha \\ -\alpha & 1 & 1 & -\alpha \\ \alpha^2 & -\alpha & -\alpha & \alpha^2 \end{pmatrix}, \quad \operatorname{rank} D = 1.$$

Запишем вспомогательную задачу:

$$\begin{aligned}
\tfrac{1}{2}\langle Du, u\rangle - \sum_{i=1}^{4} u_i \to \min,\\
\sum_{i=1}^{4}\xi_i u_i = 0,\\
0 \leqslant u_i \leqslant C, \quad i \in 1:4.
\end{aligned} \tag{11}$$

Именно эту задачу и будем решать.

При $\alpha = 0.1$, $C = 1$ получим

$$u_1^* = 1,\ u_2^* = 0.6,\ u_3^* = 0.6,\ u_4^* = 1.$$

При этом $t_1^* = 0$, $t_2^* = 0.4$, $t_3^* = 0.4$, $t_4^* = 0$. Имеем

$$I_1^* = \{1, 2, 3, 4\}, \qquad I_2^* = \{2, 3\}.$$

Условия дополнительности (8) примут вид:

$$\begin{aligned}
w_1^* = \sum_{i=1}^{4} u_i^* \xi_i p_i,\\
\xi_i(w_1^* p_i + \beta^*) = 1 - \eta_i^*, \quad i \in 1:4,\\
\eta_2^* = 0, \quad \eta_3^* = 0.
\end{aligned} \tag{12}$$

Так как $p_1 = -0.1$, $p_2 = 1$, $p_3 = -1$, $p_4 = 0.1$, то

$$w_1^* = p_1 + 0.6p_2 - 0.6p_3 - p_4 = 1.$$

Из второго и третьего условий системы (12) при $i = 2$ следует, что $p_2 + \beta^* = 1$. Значит, $\beta^* = 0$. Непосредственно проверяется, что

$$\eta_1^* = 1.1, \quad \eta_4^* = 1.1.$$

Подведем итог. Решение задачи (9) при $\alpha = 0.1$, $C = 1$ имеет вид

$$w_1^* = 1,\ w_2^* = 0,\ \beta^* = 0,\ \eta_1^* = 1.1,\ \eta_2^* = 0,\ \eta_3^* = 0,\ \eta_4^* = 1.1.$$

Плоскость, приближенно отделяющая множества $P_1$ и $P_2$, определяется уравнением $x_1 = 0$. Точки множества $P_1$ лежат в полуплоскости $x_1 \geqslant -0.1$. Точки множества $P_2$ лежат в полуплоскости $x_1 \leqslant 0.1$. В полосу $-0.1 \leqslant x_1 \leqslant 0.1$ попадают как точка из $P_1$, так и точка $P_2$.

**5°**. Возьмем в примере другое значение параметра $C$. Положим $C = \frac{1}{2}$. Оставим $\alpha = 0.1$. Получим следующее решение задачи (11):

$$u_1^* = u_2^* = u_3^* = u_4^* = \frac{1}{2}.$$

В этом случае $t_1^* = t_2^* = t_3^* = t_4^* = 0$,

$$I_1^* = \{1, 2, 3, 4\}, \qquad I_2^* = \varnothing.$$

Из условий дополнительности (12) следует, что

$$\begin{gathered} w_1^* = \sum_{i=1}^{4} u_i^* \xi_i p_i = \tfrac{1}{2}(p_1 + p_2 - p_3 - p_4) = 0.9, \\ \xi_i(0.9 p_i + \beta^*) = 1 - \eta_i^*, \quad i \in 1:4. \end{gathered} \tag{13}$$

Система (13) неопределенная, в ней четыре уравнения и пять неизвестных.

Предложим универсальный подход, позволяющий восстановить решение задачи (2) по решению $u^*$ задачи (5). Из соотношений (8) найдем оптимальное значение $w^*$. После этого подставим полученное значение $w^*$ в задачу (2). Придем к задаче линейного программирования

$$\begin{gathered} \sum_{j=1}^{m} \eta_j \to \min, \\ \xi_j\big(\langle w^*, p_j\rangle + \beta\big) \geqslant 1 - \eta_j, \quad j \in 1:m, \\ \eta_j \geqslant 0, \quad j \in 1:m. \end{gathered} \tag{14}$$

Здесь неизвестными являются $\beta$, $\eta_1, \ldots, \eta_m$. Полученные при решении задачи (14) значения неизвестных величин и будут оптимальными для задачи (2).

Перепишем задачу (14) в следующем виде:

$$\begin{gathered}\sum_{j=1}^{m} \eta_j \to \min, \\ \eta_j \geqslant \Big[1 - \xi_j\big(\langle w^*, p_j\rangle + \beta\big)\Big]_+, \quad j \in 1:m,\end{gathered} \tag{15}$$

где $[t]_+ = \max\{0, t\}$. Легко понять, что задача (15) эквивалентна одномерной задаче безусловной минимизации,

$$f(\beta) := \sum_{j=1}^{m} \Big[1 - \xi_j\big(\langle w^*, p_j\rangle + \beta\big)\Big]_+ \to \min_{\beta\in\mathbb{R}}. \tag{16}$$

Если $\beta^*$ — решение задачи (16), то

$$\eta_j^* = \Big[1 - \xi_j\big(\langle w^*, p_j\rangle + \beta^*\big)\Big]_+, \quad j \in 1:m.$$

Указанные величины $\beta^*$, $\eta_1^*, \ldots, \eta_m^*$ будут оптимальными для задачи (2).

Функция $f(\beta)$ является непрерывной выпуклой ломаной. Так как среди $\xi_j$ есть как $+1$, так и $-1$, то $f(\beta) \to +\infty$ при $\beta \to \pm\infty$. Это гарантирует существование решения у задачи (16). Его можно найти, вычислив значения ломаной $f(\beta)$ в ее узлах

$$\beta_i = \xi_i - \langle w^*, p_i\rangle, \quad i \in 1:m.$$

В нашем примере при $C = \frac{1}{2}$, $\alpha = 0.1$ задача (16) принимает конкретный вид

$$f(\beta) = [1.09 - \beta]_+ + [0.1 - \beta]_+ + [0.1 + \beta]_+ + [1.09 + \beta]_+ \to \min_{\beta\in\mathbb{R}}.$$

Воспользуемся равенством

$$[-t]_+ = [t]_+ - t.$$

Оно позволяет получить для ломаной $f(\beta)$ каноническое представление [4],

$$f(\beta) = -2\beta + 1.19 + [\beta + 1.09]_+ + [\beta + 0.1]_+ + [\beta - 0.1]_+ + [\beta - 1.09]_+.$$

На рис. 2 представлен график функции $f(\beta)$. Видим, что минимум функции $f(\beta)$ достигается при любом $\beta^* \in [-0.1, 0.1]$.

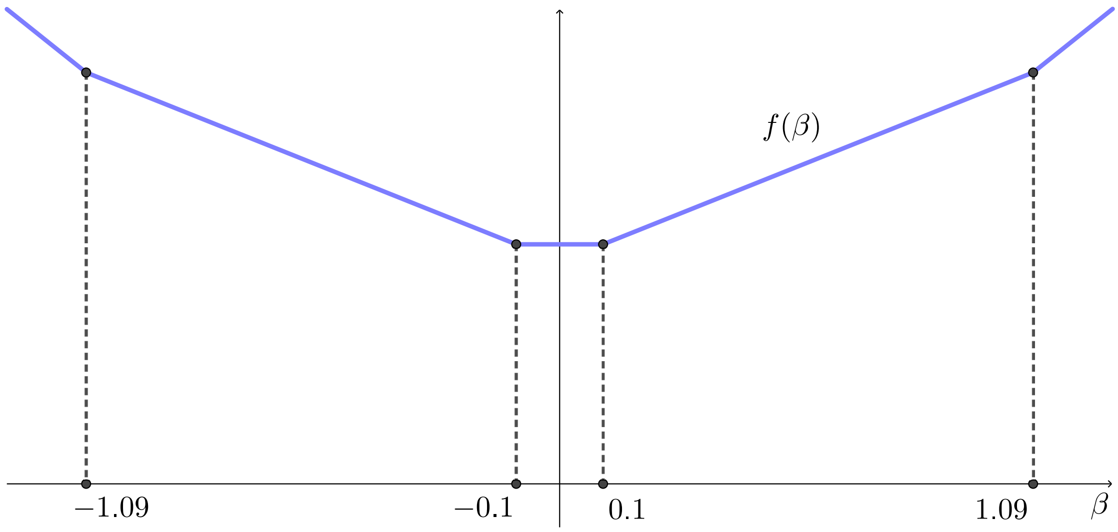


Рис. 2. График функции $f(\beta)$

**6°**. Были проведены вычисления, результаты которых поясняют роль параметра $C$. На рис. 3 множества $P_1$ и $P_2$ допускают линейное отделение. На рис. 4 и 5 линейное отделение невозможно. Указано приближенное (мягкое) отделение. Увеличение параметра $C$ улучшает качество отделения.

Во всех случаях прямые, изображенные на рисунках, определяются уравнением $\langle w^*, x\rangle + \beta^* = 0$.

## ЛИТЕРАТУРА

1. Воронцов К. В. *Лекции по методу опорных векторов.* (`http://www.ccas.ru/voron/download/SVM.pdf`)

2. Малоземов В. Н., Плоткин А. В. *SVM-метод строгого линейного отделения двух конечных множеств* // Семинар «O & ML». Избранные доклады. 30 марта 2022 г. (`http://apmath.spbu.ru/oml/reps22.shtml#0330`)

3. Малоземов В. Н., Плоткин А. В. *Двойственность в квадратичном программировании. Задача Сильвестра.* // Семинар «CNSA & NDO». Избранные доклады. 8 декабря 2021 г. (`http://apmath.spbu.ru/cnsa/reps21.shtml#1208`)

4. Малоземов В. Н., Тамасян Г. Ш. *Представления непрерывных кусочно-аффинных функций* // Семинар «CNSA & NDO». Избранные доклады. 10 сентября 2019 г. (`http://apmath.spbu.ru/cnsa/reps19.shtml#0910`)

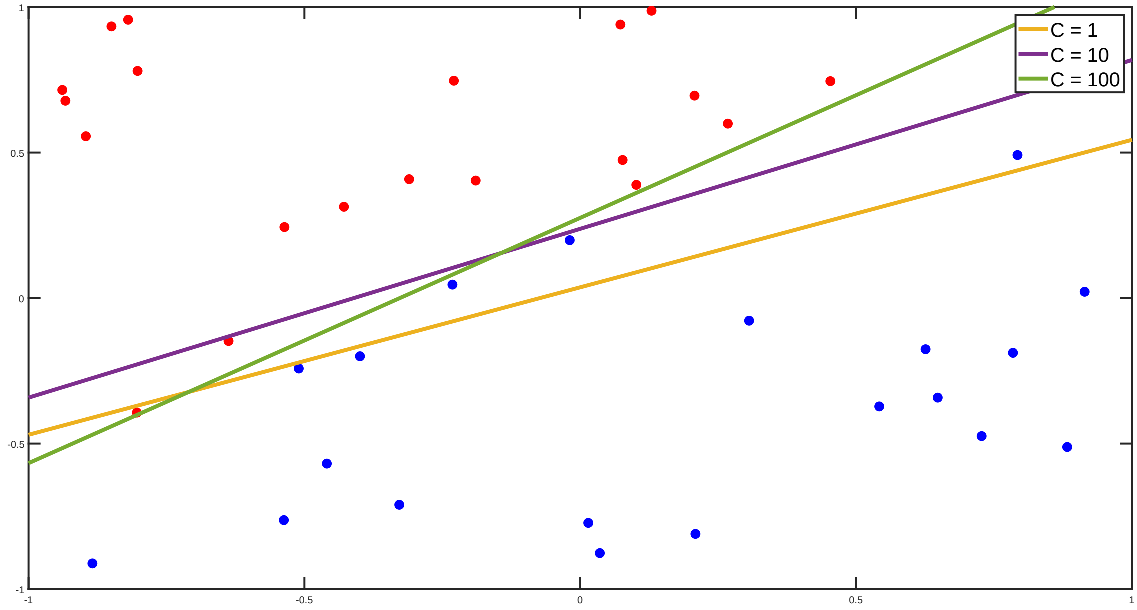


Рис. 3. $s = 20$, $m = 40$

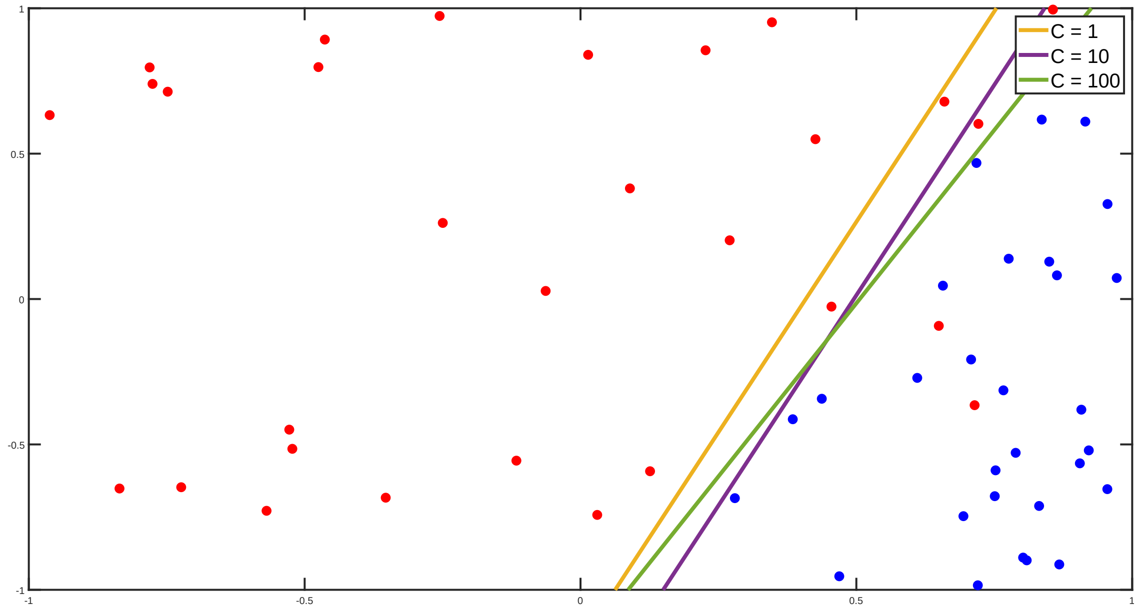


Рис. 4. $s = 30$, $m = 60$

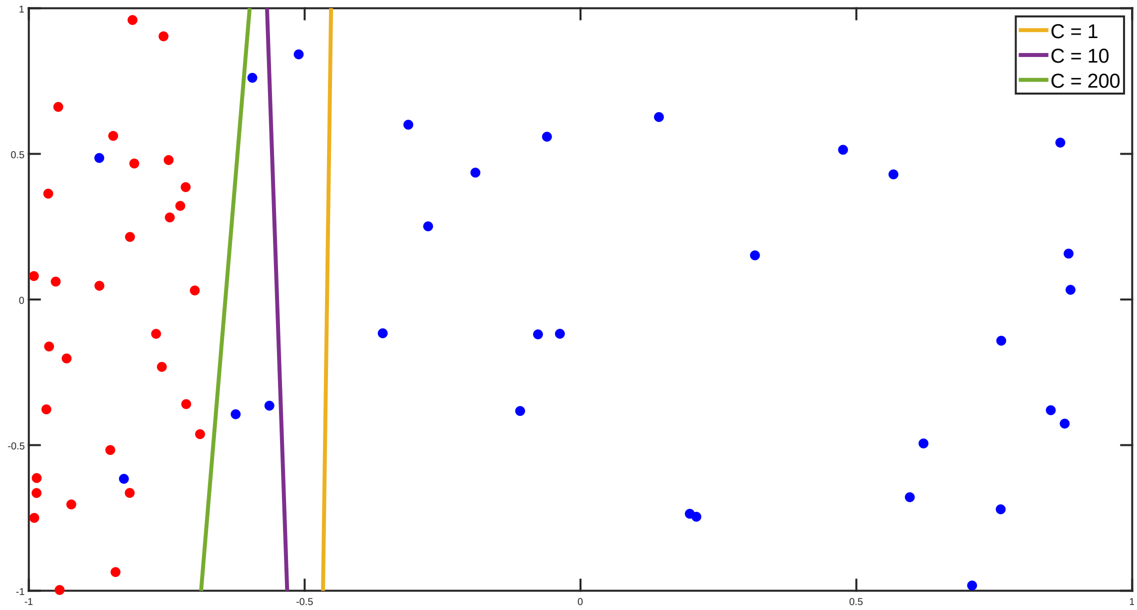


Рис. 5. $s = 30$, $m = 60$