«Машинное обучение и анализ данных»

Линейные методы:
Часть 2. – Линейная классификация

Александр Дьяконов

02 ноября 2020 года

План

Линейная регрессия
Решение проблемы вырожденности
Регуляризация, гребневая регрессия, LASSO, Elastic Net
Устойчивая регрессия
Градиентный метод обучения
Линейные скоринговые модели в задаче бинарной классификации
Логистическая регрессия

Линейные решающие модели в задаче бинарной классификации
Идея максимального зазора
Метод опорных векторов (SVM)
Линейный дискриминант Фишера

Линейные решающие модели в задаче бинарной классификации

Пусть $X = \mathbb{R}^n, Y = \{\pm 1\}$ **(обратите внимание на метки)**

обучающая выборка: $\{(x_i, y_i)\}_{i=1}^m$

хотим линейную модель:

(формально зависимость нелинейная)

$$a(x) = \mathrm{sgn}(w^\mathrm{T} x + b) = \begin{cases} +1, & w^\mathrm{T} x + b > 0 \\ -1, & w^\mathrm{T} x + b < 0 \end{cases}$$

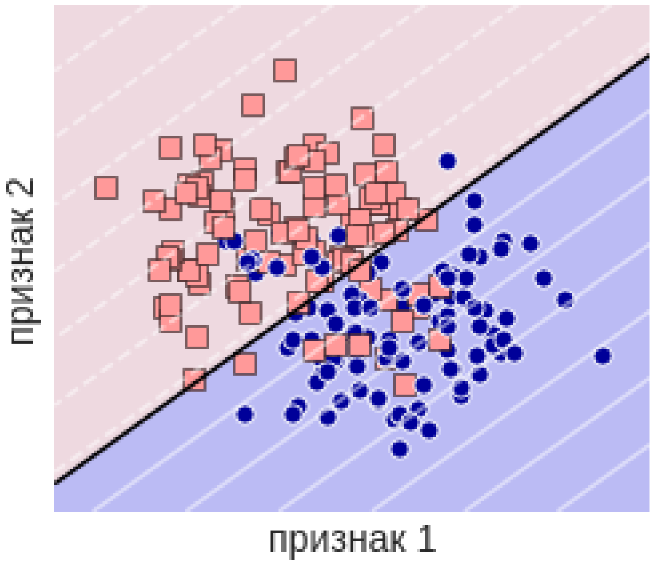
случай $w^\mathrm{T} x + b = 0$ **нам тут не особо важен**

Линейный классификатор

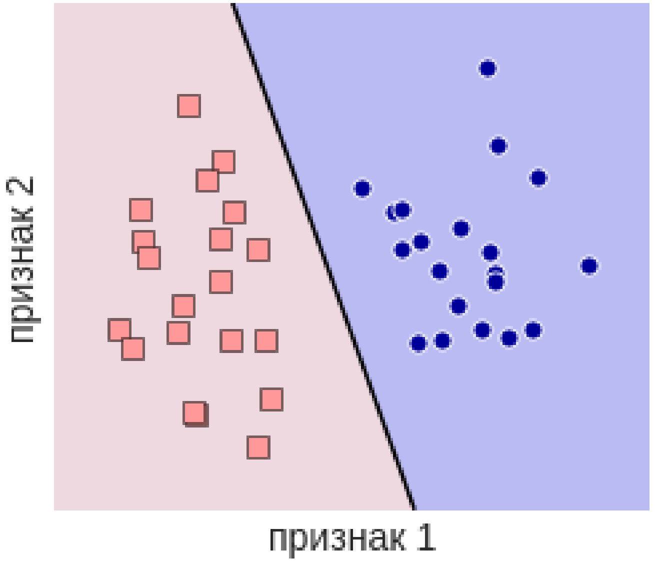
$$a(x) = \mathrm{sgn}(w^\mathrm{T} x)$$

после пополнения признакового пространства фиктивным признаком

Геометрический смысл линейного классификатора



Делим пространство гиперплоскостью на две части



Иногда это может здорово работать!

Линейный классификатор: обучение

Общая идея – 0-1-loss – число ощибок

$$L(X_{\text{train}},a)=\sum_{t=1}^{m}L(y_t,a(x_t))\to\min$$

$$L(y_t,a(x_t))=\theta(-y_t w^{\mathrm{T}}x_t)=\begin{cases}1, & \operatorname{sgn} w^{\mathrm{T}}x_t\neq y_t\\ 0, & \operatorname{sgn} w^{\mathrm{T}}x_t=y_t,\end{cases}$$

где $\theta(z)=I[z>0]$

естественно минимизировать число ошибок, но

- **функция не дифференцируема**
- **выдаёт мало информации** только число ошибок, а не их «фатальность»
- **оптимизация здесь – NP-полная задача**

зазор (margin)

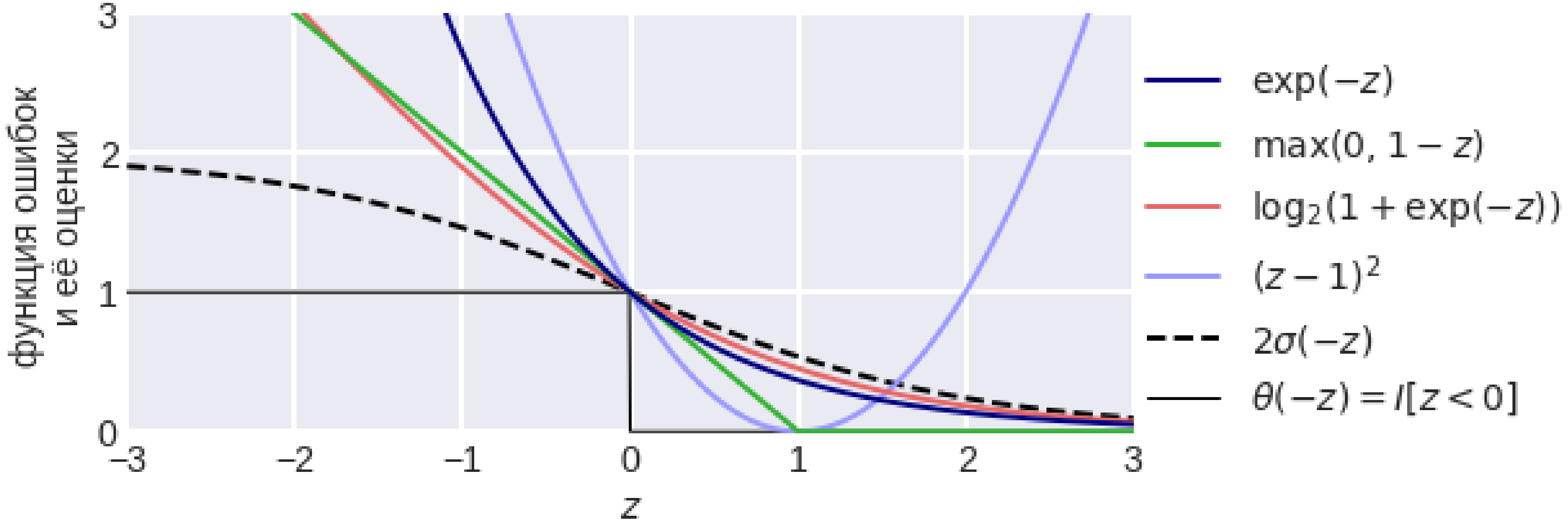
$z_t=y_t w^{\mathrm{T}}x_t$ **~ чем меньше, тем хуже ()**

Суррогатные функции (surrogate loss functions)

$$\sum_{t=1}^{m} L(y_t, a(x_t)) \le \sum_{t=1}^{m} L'(y_t, a(x_t)) \to \min$$

$$z_t = y_t w^{\mathrm{T}} x_t$$

$$\sum_{t=1}^{m} \theta(-z_t) \le \sum_{t=1}^{m} f(-z_t) \to \min$$



Оценка функции ошибок через гладкую функцию, которую проще оптимизировать

Оценка функции ошибок через гладкую функцию

Примеры замен:

$$f(-z) = \exp(-z)$$

$$f(-z) = \max(0, 1 - z)$$

$$f(-z) = \log_2(1 + \exp(-z))$$

Обучение – минимизация оценки на обучающей выборке (+ регуляризация)

Персептрон, SVM, логистическая регрессия минимизируют выпуклые аппроксимации 0-1-loss, подменяя NP-трудную задачу задачей выпуклой оптимизации

Пример персептронного алгоритма

$$f(-z) = \max(0, -z)$$

Персептрон:

$$\sum_{i=1}^{m} \max[0, -y_i(w^{\mathrm{T}} x_i)] \to \min$$

SGD

$$w \leftarrow w + \eta \begin{cases} 0, & \operatorname{sgn}(w^{\mathrm{T}} x_i) = y_i, \\ +x_i & w^{\mathrm{T}} x_i \le 0, y_i = +1, \\ -x_i, & w^{\mathrm{T}} x_i \ge 0, y_i = -1, \end{cases}$$

Пример персептронного алгоритма

Есть теорема Новикова

Если две выборки линейно разделимы,
то разделяющая поверхность находится персептронным алгоритмом
за конечное число шагов
есть и другие способы разделения…

персептронный алгоритм

$$w \leftarrow w + \eta I[-y_i w^{\mathrm{T}} x_i \geq 0] y_i x_i$$

логистическая регрессия (вспомним)

$$w \leftarrow w + \eta \sigma(-y_i w^{\mathrm{T}} x_i) y_i x_i$$

Пример персептронного алгоритма – решение системы линейных неравенств

$$\begin{cases} 2w_1 + w_2 > 0 \\ -w_1 > 0 \\ w_1 - w_2 < 0 \\ -2w_1 - 2w_2 < 0 \end{cases}$$

$$\begin{bmatrix} 2 & 1 \\ -1 & 0 \\ -1 & 1 \\ 2 & 2 \end{bmatrix} \begin{pmatrix} w_1 \\ w_2 \end{pmatrix} > 0$$

```
X = list(np.array([[2,1], [-1, 0],
                   [-1, 1], [2, 2]]))
w = np.array([0, 0])
print ('w=', w)
change = True
while (change):
    change = False
    for x in X:
        if np.dot(x, w) <= 0:
            print ('w=', w, 'x=', x, '-')
            w += x
            change = True
                print ('w=', w)
```

```
w=[ 0  0]
w=[ 0  0] x= [ 2 1] -
w=[ 2  1] x= [-1 0] -
w=[ 1  1] x= [-1 1] -
w=[ 0  2] x= [-1 0] -
w=[-1  2] x= [ 2 1] -
w=[ 1  3] x= [-1 0] -
w=[ 0  3] x= [-1 0] -
w=[-1  3]
```

Реализация в scikit-learn

`sklearn.linear_model.Perceptron`

penalty=None	Тип регуляризации
alpha=0.0001	Коэффициент регуляризации
C=1.0	Обратная величина к коэффициенту регуляризации
fit_intercept=True	Свободный член
max_iter=1000	Число итераций
tol=0.001	Критерий остановки
shuffle=True	Перемешивать ли данные
verbose=0	Вывод служебной информации
eta0=1.0	Темп сходимости
early_stopping=False	Можно отложит выборку и остановить настройку, когда нет уменьшения ошибки на ней
validation_fraction=0.1	Объём выборки для ES
n_iter_no_change=5	Сколько итераций ждать для ES

`n_jobs=None, random_state=0, class_weight=None, warm_start=False`

Реализация в scikit-learn

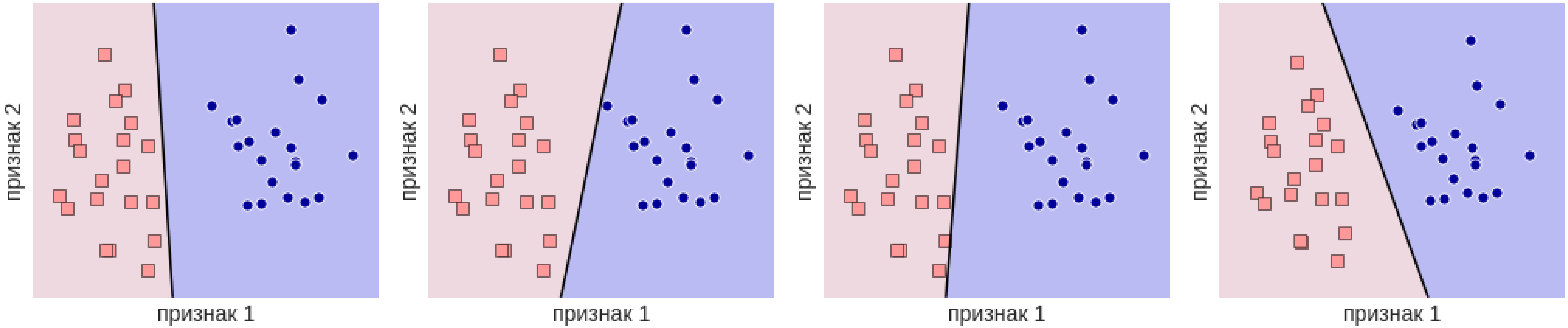
`sklearn.linear_model.SGDClassifier`
`sklearn.linear_model.SGDRegressor`

– общая реализация линейного алгоритма, обучающегося градиентным спуском
работает с разреженными данными!

`loss="hinge"`	**Функция ошибки, варианты:**
	`"hinge"` – **SVM**
	`"log"` – **логистическая регрессия**
	`"modified_huber"`
	`"squared_hinge"`
	`"perceptron"`– **персептрон**
	для регрессии:
	`"squared_loss"`
	`"huber"`
	`"epsilon_insensitive"`
	`"squared_epsilon_insensitive"`

Support Vector Machine (SVM)

Метод опорных векторов – самый популярный метод 1990х

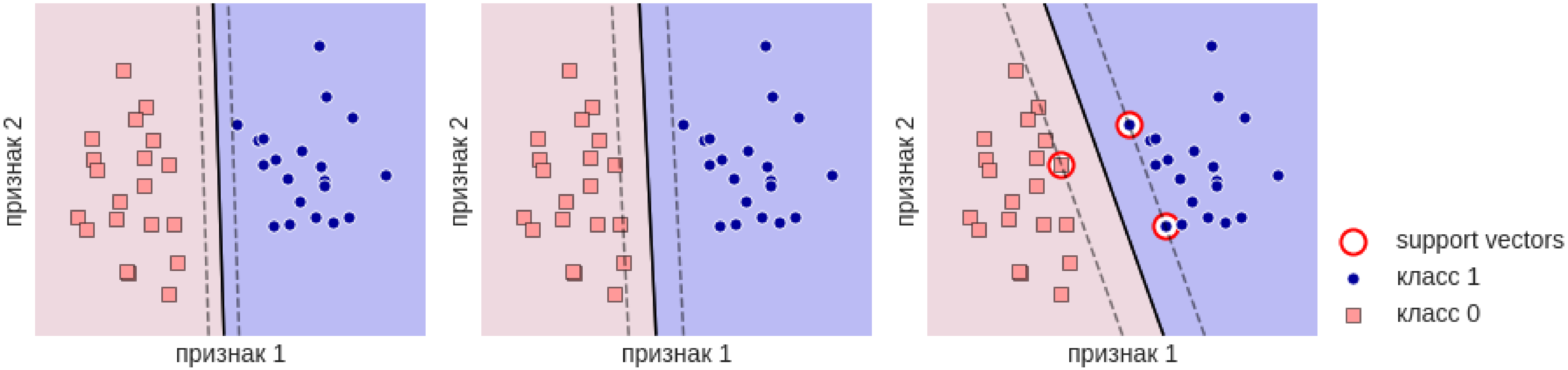


до сих пор пытались просто разделить точки…

а какой линейный классификатор лучше?

Здесь для начала предполагаем, что классы линейно разделимы

SVM: идея максимального зазора



**Оправдание: если немного ошибёмся с коэффициентами,
если объект задан неточно,
всё равно решение должно быть правильным**

Построение SVM эквивалентно нахождению кратчайшего отрезка, соединяющего выпуклые оболочки двух классов

SVM: постановка задачи

Пусть обучающая выборка:

$$\{(x_i, y_i)\}_{i=1}^m$$

$$y_i \in Y = \{\pm 1\}$$

Хотим разделить точки двух разных классов гиперплоскостью

$$a(x) = \mathrm{sgn}(w^{\mathrm{T}} x + b)$$

(здесь не вводим фиктивный константный признак)

Должно быть

$w^{\mathrm{T}} x_i + b \geq +1$ **если** $y_i = +1$

$w^{\mathrm{T}} x_i + b \leq -1$ **если** $y_i = -1$

(из-за нормировки это возможно)

Другая форма записи:

$$y_i (w^{\mathrm{T}} x_i + b) \geq 1$$

можно считать (из-за нормировки), что

$$\min_i | w^{\mathrm{T}} x_i + b | = 1$$

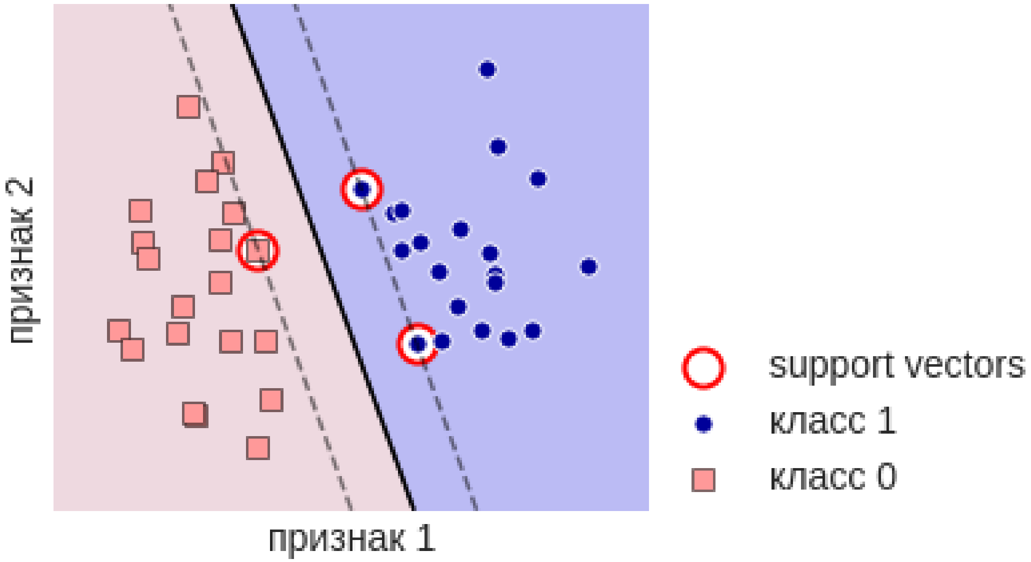
SVM: постановка задачи

Расстояние от точки до гиперплоскости:

$$\rho(x_i, w^{\mathrm{T}}x + b) = \frac{|w^{\mathrm{T}}x_i + b|}{\|w\|}$$

хотим, чтобы минимум из этих расстояний был максимален

зазор (margin) – $\min\limits_i \frac{|w^{\mathrm{T}}x_i + b|}{\|w\|} = \frac{1}{\|w\|} \to \max$



Зазор (margin)

В общем случае, когда $X=\mathbb{R}^n, Y=\{\pm 1\}$

обучающая выборка: $\{(x_i, y_i)\}_{i=1}^m$

Алгоритм со скоринговой функцией (score function)

$$a(x)=\operatorname{sgn}(b(x)), b(x)\in\mathbb{R}$$

Зазор – $y_i b(x_i)$

~ уверенность в ответе

SVM: постановка задачи

задача квадратичного программирования (QP = Quadratic Program)
с *m* ограничениями (constraints)

$$\frac{\|w\|^2}{2} \to \min$$
$$y_i(w^{\mathrm{T}}x_i + b) \geq 1,\ i \in \{1, 2, \ldots, m\}$$

Заметим, что здесь также, как при регуляризации линейной регрессии, хотим квадрат нормы весов сделать меньше

«квадрат» – для удобства оптимизации

Заметим, что решение существует и единственно
Есть много солверов…

SVM: приближённое решение «в лоб»

$$\frac{\|w\|^2}{2} \to \min$$

$$1 - y_i(w^{\mathrm{T}} x_i + b) \le 0,\ i \in \{1, 2, \ldots, m\}$$

не решаем задачу точно, но стремимся выполнить условия:

$$\frac{1}{m}\sum_{i=1}^{m} \max[0, 1 - y_i(w^{\mathrm{T}} x_i + b)] + \lambda \|w\|^2 \to \min$$

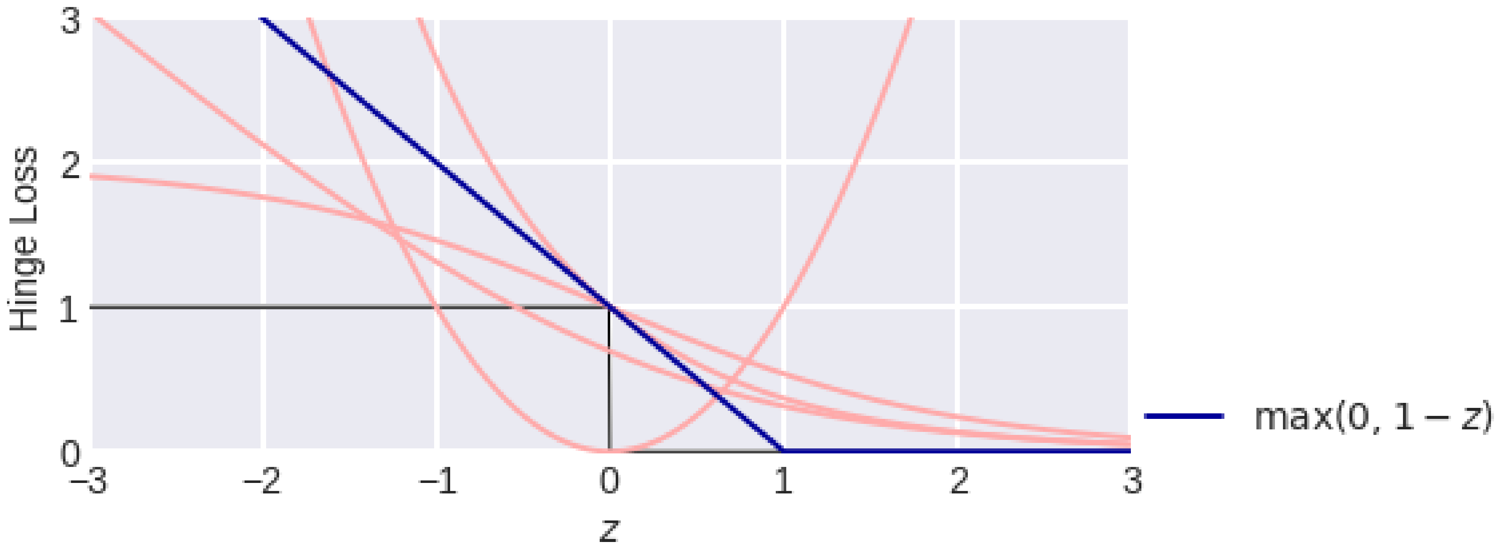
Удивительно:

ошибка $L(y, a) = \max[0, 1 - ya]$ **+ регуляризатор**

но тут нет дифференцируемости из-за max

дальше увидим, что это решение точно выводится из обобщения задачи

Hinge loss



А в логистической регрессии:
логистическая функция ошибки + регуляризатор

SVM: решение строгое

$$\frac{\|w\|^2}{2} \to \min$$

$$1 - y_i(w^{\mathrm{T}} x_i + b) \le 0,\ i \in \{1, 2, \ldots, m\}$$

Вспоминаем оптимизацию с ограничениями:

$$\min_{w,b} \max_{\alpha \ge 0} L(w, b, \alpha) = \frac{w^{\mathrm{T}} w}{2} + \sum_{i=1}^{m} \alpha_i (1 - y_i(w^{\mathrm{T}} x_i + b))$$

тут будет дифференцируемость, но есть ограничения

SVM: решение строгое

$$\min_{w,b}\max_{\alpha\geq 0} L(w,b,\alpha)=\frac{w^{\mathrm{T}}w}{2}+\sum_{i=1}^{m}\alpha_i(1-y_i(w^{\mathrm{T}}x_i+b))$$

возьмём производные, приравняем к нулю

$$\frac{\partial L}{\partial w}=0\Rightarrow w=\sum_{i=1}^{m}\alpha_i y_i x_i$$

$$\frac{\partial L}{\partial b}=0\Rightarrow \sum_{i=1}^{m}\alpha_i y_i=0$$

Таким образом, оптимальный вектор весов –
– взвешенная сумма признаковых описаний объектов из обучения

если подумать – аналогично происходит и при настройке персептрона и логистической регрессии…

Переход к двойственной задаче

Задача квадратичного программирования

$$\max_{\alpha\geq 0}\min_{w,b} L(w,b,\alpha)=\sum_{i=1}^{m}\alpha_i-\frac{1}{2}\sum_{i=1}^{m}\sum_{j=1}^{m}\alpha_i\alpha_j y_i y_j x_i^{\mathrm{T}} x_j$$

при условиях $\sum_{i=1}^{m}\alpha_i y_i = 0$

Информацию об описаниях объектов мы используем лишь в виде их попарных скалярных произведений!

когда решим задачу...

$$w=\sum_{i=1}^{m}\alpha_i y_i x_i$$

(связь между решением прямой и обратной задачи)

$$b=-\frac{1}{2}\left(\min_{i:\,y_i=+1} w^{\mathrm{T}}x_i+\max_{i:\,y_i=-1} w^{\mathrm{T}}x_i\right)$$

большинство α_i **обратиться в ноль (из-за условий Кунна-Таккера)**

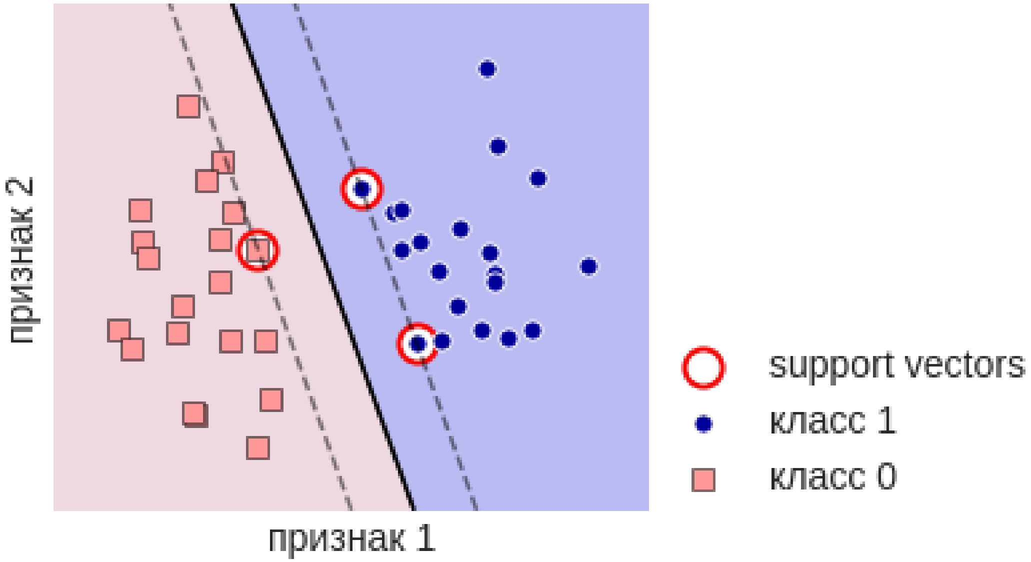
Условия Кунна-Таккера

для решения:

$$\alpha_i(1 - y_i(w^{\mathrm{T}} x_i + b)) = 0$$

если $\alpha_i > 0$**, то** x_i **– опорный вектор (support vector)**

– лежит на границе $y_i(w^{\mathrm{T}} x_i + b) = 1$



Замечание о двойственной задаче

$$-\frac{1}{2}\sum_{i=1}^{m}\sum_{j=1}^{m}\alpha_i\alpha_j y_i y_j x_i^{\mathrm{T}} x_j \sim \alpha^{\mathrm{T}} \underbrace{\| y_i y_j x_i^{\mathrm{T}} x_j \|_{m\times m}}_{H} \alpha$$

матрица H конгруэнтна ($H = P^{\mathrm{T}}GP$) матрице Грамма и является неотрицательно определённой

Существует решение задачи оптимизации, но, вообще говоря, неединственное
(в отличие от прямой задачи)

Метод опорных векторов: SVM

Построить $H = \| y_i y_j x_i^{\mathrm{T}} x_j \|_{m \times m}$

Решить

$$-\frac{1}{2}\alpha^{\mathrm{T}} H \alpha + \tilde{1}^{\mathrm{T}} \alpha \to \max$$

при условиях

$$\alpha \geq 0,\ y^{\mathrm{T}} \alpha = 0$$

здесь везде векторная запись

Решение

$$w = \sum_{i=1}^{m} \alpha_i y_i x_i$$

$$S = \{ i \in \{1, 2, \ldots, m\} \mid \alpha_i > 0 \}$$

$$b = \frac{1}{|S|} \sum_{i \in S} \left(y_i - w^{\mathrm{T}} x_i \right)$$

другой способ получения b

Зачем переходить к двойственной задаче

- **размерности**

м.б. удобно решать

выгодно, если признаковое пространство большое

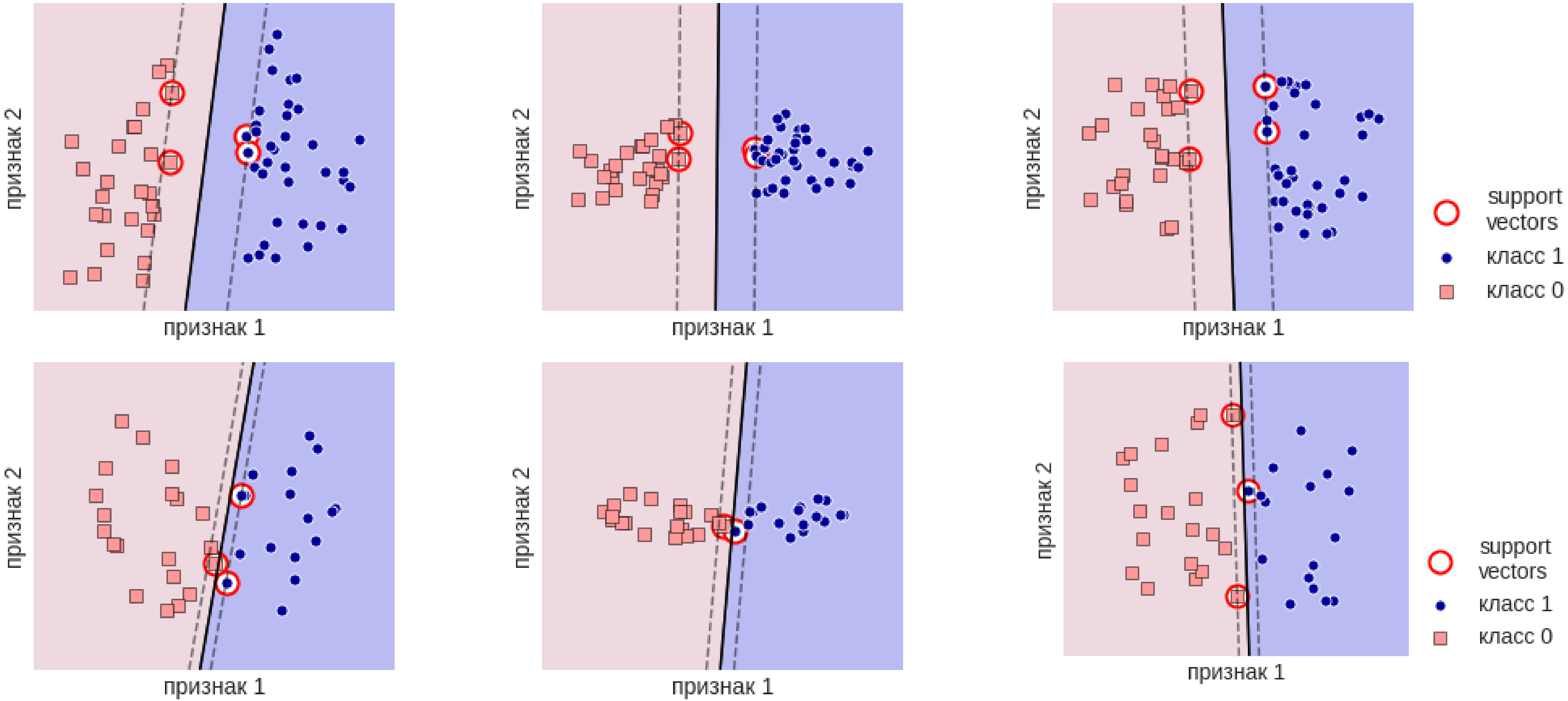
- **известная задача**

можно использовать солверы из готовых библиотек

- **возникли попарные произведения**

потом используем для kernel tricks

Чувствительность к масштабу и шумам



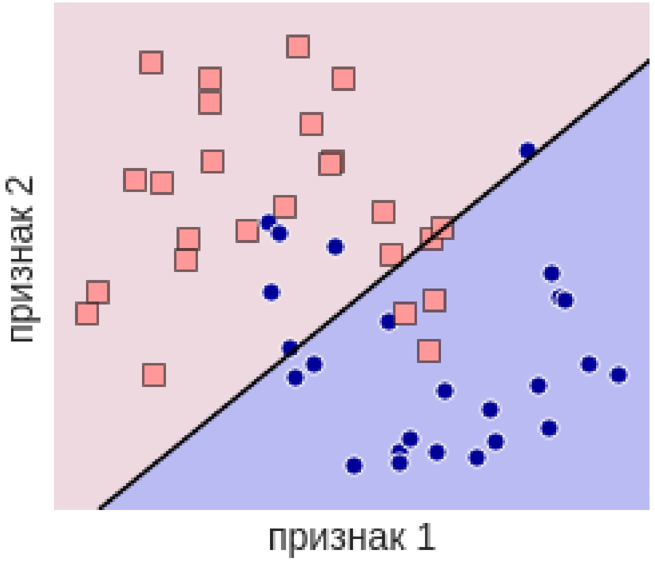
X[:, 1] / 10

X[:, 1] = rand

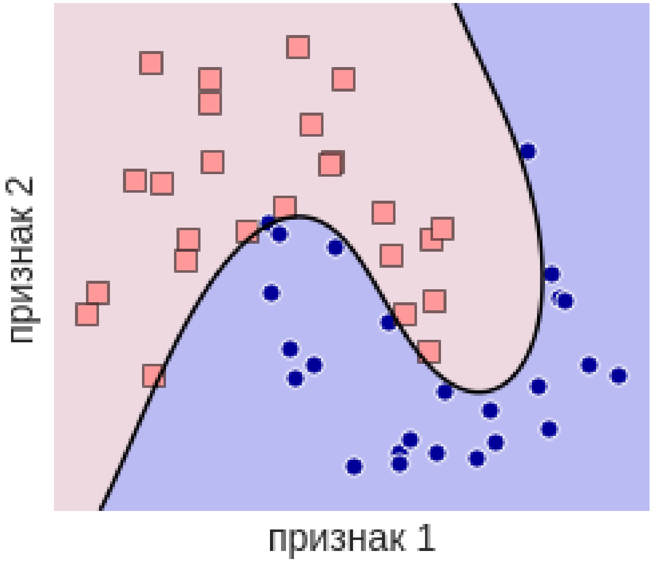
Если нет линейной разделимости

Два подхода (часто используются вместе)

1) разделять так, чтобы ошибок было мало



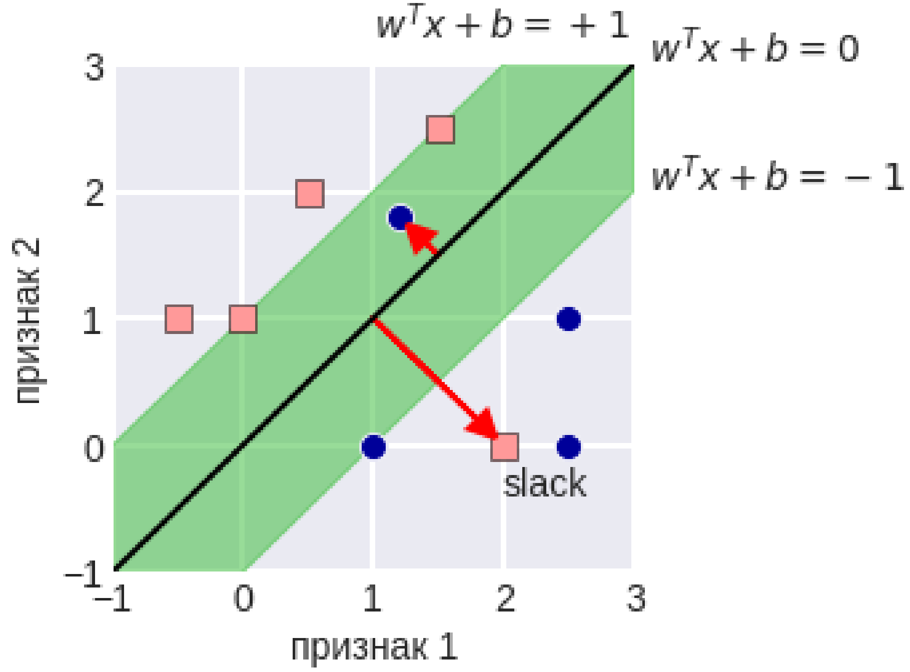
2) использование нелинейных разделяющих поверхностей



переход в другое признаковое пространство

потом подробно разберём!

Soft-Margin SVM: разделение допуская ошибки



позволить объектам «залезать» на половину другого класса

$$y_i(w^{\mathrm{T}}x_i + b) \geq 1 - \xi_i$$

$$\xi_i \geq 0$$

но не хотим, чтобы было много больших «залезаний»

«slack variables»

Soft-Margin SVM: разделение допуская ошибки

Прямая задача:

$$\frac{\|w\|^2}{2} + C\sum_{i=1}^{m}\xi_i \to \min$$

$$y_i(w^{\mathrm{T}}x_i + b) \geq 1 - \xi_i,\ \xi_i \geq 0,\ i \in \{1, 2, \ldots, m\}$$

тоже задача QP, но в два раза больше ограничений

C **– баланс между оптимизацией зазора и ошибки на обучении**

Если $C = 0$**, то получим решение** $w = \tilde{0}$**.**

Если $C \to +\infty$**, то получим решение как в «hard-margin objective»**

Можно было бы рассматривать задачу с таким ограничением

$$\sum_{i=1}^{m}\xi_i \leq C$$

Soft-Margin SVM: двойственная задача

Прямая задача:

$$\frac{\| w \|^2}{2} + C\sum_{i=1}^{m}\xi_i \to \min$$

$$y_i(w^{\mathrm{T}}x_i + b) \ge 1 - \xi_i,\ \xi_i \ge 0,\ i \in \{1, 2, \ldots, m\}$$

Soft-Margin SVM решается аналогично… ДЗ вывести!

Двойственная задача:

$$\sum_{i=1}^{m}\alpha_i - \frac{1}{2}\sum_{i=1}^{m}\sum_{j=1}^{m}\alpha_i\alpha_j y_i y_j x_i^{\mathrm{T}} x_j \to \max_{0 \le \alpha \le C}$$

появляется лишь ограничение $\alpha \le C$

одно нетривиальное ограничение $\sum_{i=1}^{m}\alpha_i y_i = 0$

Метод опорных векторов (SVM) в линейно неразделимом случае

Построить $H = \| y_i y_j x_i^{\mathrm{T}} x_j \|_{m\times m}$

Решить

$$-\frac{1}{2}\alpha^{\mathrm{T}} H\alpha + \tilde{1}^{\mathrm{T}}\alpha \to \max$$

при условиях

$$0 \le \alpha \le C,\ y^{\mathrm{T}}\alpha = 0$$

здесь везде векторная запись

Решение

$$w = \sum_{i=1}^{m} \alpha_i y_i x_i$$

$$S = \{i \in \{1,2,\ldots,m\} \mid 0 < \alpha_i \le C\}$$

$$b = \frac{1}{|S|}\sum_{i\in S}\left(y_i - w^{\mathrm{T}} x_i\right)$$

Soft-Margin SVM: численное решение

$$\frac{\|w\|^2}{2} + C\sum_{i=1}^{m}\xi_i \to \min$$

$$y_i(w^{\mathrm{T}}x_i + b) \geq 1 - \xi_i,\ \xi_i \geq 0,\ i \in \{1, 2, \ldots, m\}$$

преобразуем

$$\begin{cases} \xi_i \geq 1 - y_i(w^{\mathrm{T}}x_i + b) \\ \xi_i \geq 0 \end{cases} \Rightarrow \quad \xi_i \geq \max[1 - y_i(w^{\mathrm{T}}x_i + b),\ 0],$$

т.к. минимизируем сумму берём минимально возможное:

$$\xi_i = \max[1 - y_i(w^{\mathrm{T}}x_i + b),\ 0]$$

$$\frac{\|w\|^2}{2} + C\sum_{i=1}^{m}\xi_i \to \min$$

Soft-Margin SVM: численное решение

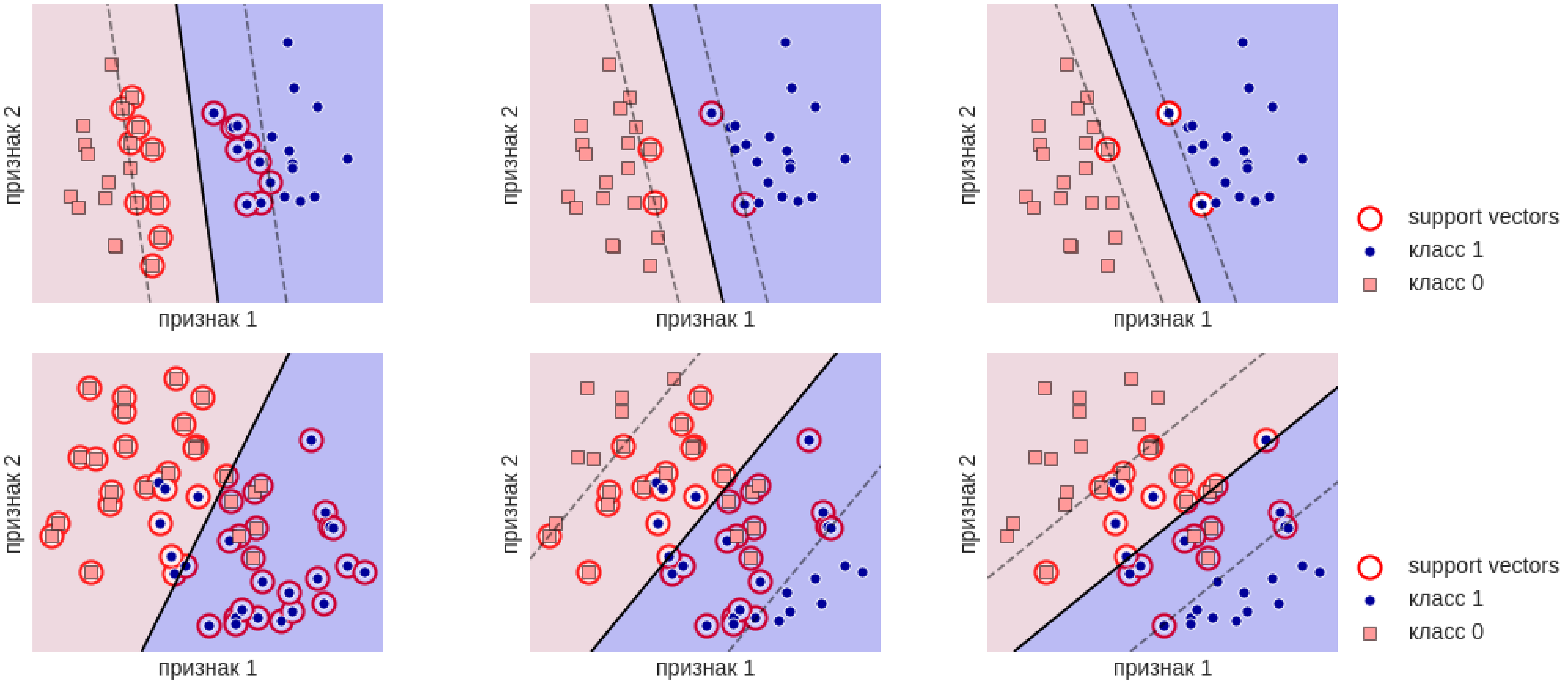
$$\underbrace{\frac{\|w\|^2}{2}}_{L_2-\text{регуляризация}} + C\underbrace{\sum_{i=1}^{m}\max[1-y_i(w^{\mathrm{T}}x_i+b),\,0]}_{\text{Hinge Loss}} \to \min$$

получили то же самое Hinge Loss + L_2-регуляризация

но тут это точное решение поставленной задачи!

Понятно, почему в реализации SVM не коэффициент регуляризации, а (1 / коэф. регул.)

Пример



$C = 0.01$ $\qquad$ $C = 0.1$ $\qquad$ $C = 1.0$

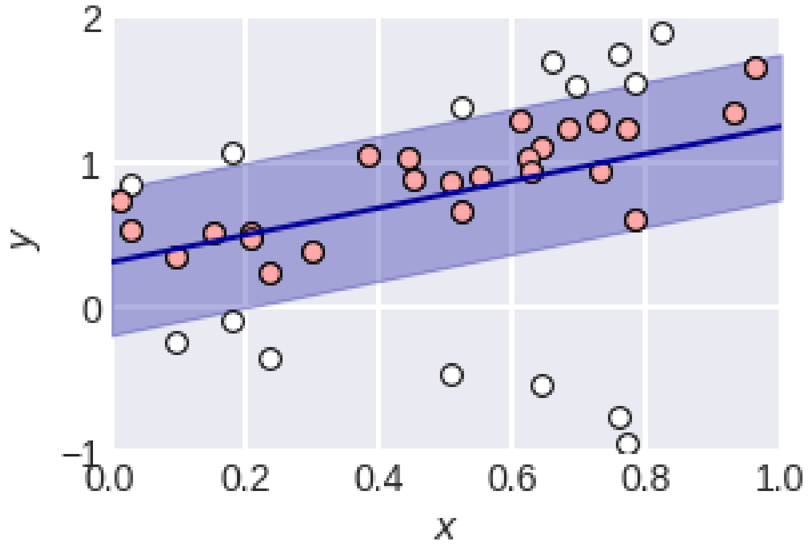
здесь опорными отмечены те объекты, которые пометила функция в sklearn

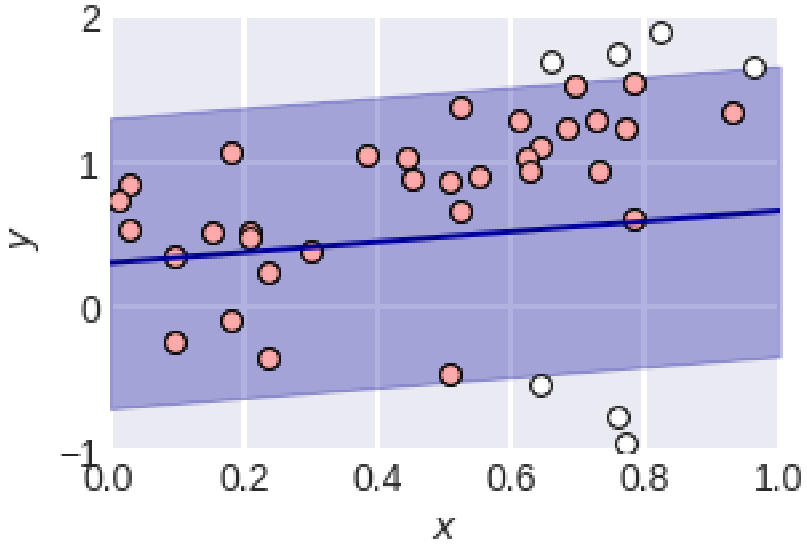
SVM Regression

хотим решить с ε-точностью

$$\frac{\|w\|^2}{2} \to \min$$

$$|w^{\mathrm{T}}x_i + b - y_i| \leq \varepsilon, \; i \in \{1, 2, \ldots, m\}$$





SVM Regression

$$\frac{\| w \|^2}{2} \to \min$$

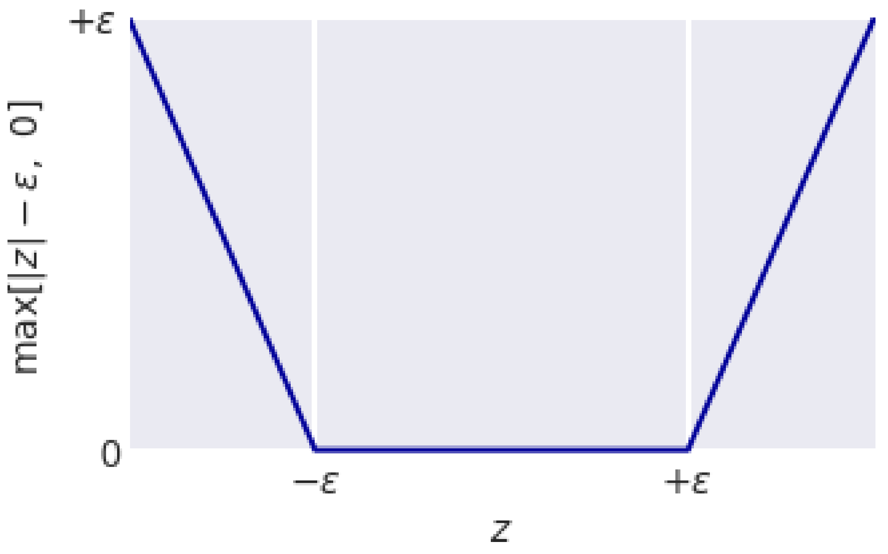
$$| w^{\mathrm{T}} x_i + b - y_i | \le \varepsilon,\ i \in \{1, 2, \ldots, m\}$$

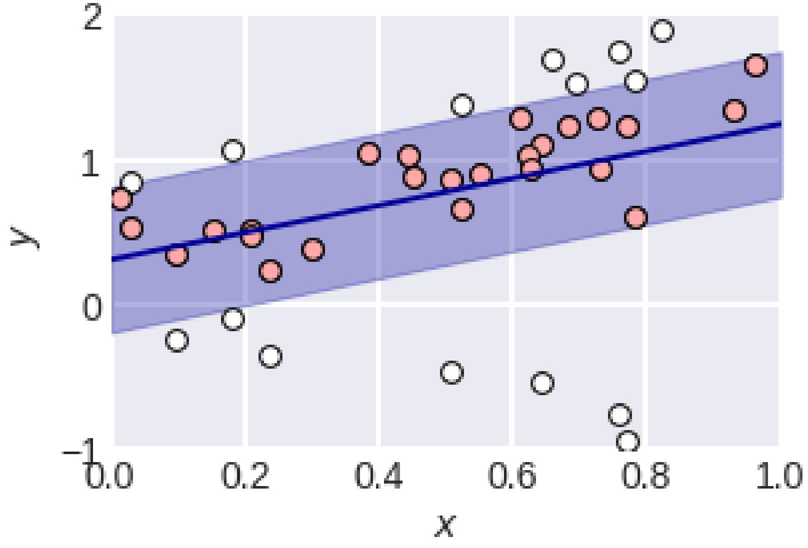
Записываем такую функцию ошибки:

$$\frac{\| w \|^2}{2} + C \sum_{i=1}^{m} \max[| w^{\mathrm{T}} x_i + b - y_i | - \varepsilon, 0] \to \min$$

Решение будет зависеть от объектов, для которых ошибка превышает порог…

После замены переменных задача сводится к QP





SVM Regression – переход к двойственной задаче

$$|w^{\mathrm{T}}x_i + b - y_i| \le \varepsilon$$

$$w^{\mathrm{T}}x_i + b - y_i \le +\varepsilon + \xi_i^+$$
$$w^{\mathrm{T}}x_i + b - y_i \ge -\varepsilon - \xi_i^-$$

$$\frac{\|w\|^2}{2} + C\sum_{i=1}^{m}(\xi_i^+ + \xi_i^-) \to \min$$
$$\xi_i^+ \ge 0,\ \xi_i^- \ge 0,\ i \in \{1, 2, \ldots, m\}$$

дальше аналогично переходим к Лагранжиану…

пропускаем это

SVM Regression – переход к двойственной задаче

$$\sum_{i=1}^{m}(\alpha_i^+-\alpha_i^-)(w^{\mathrm{T}}x_i+b-y_i)-\varepsilon\sum_{i=1}^{m}(\alpha_i^+-\alpha_i^-)-\frac{1}{2}\sum_{i,j}(\alpha_i^+-\alpha_i^-)(\alpha_j^+-\alpha_j^-)x_i^{\mathrm{T}}x_j\to\max$$

$$0<\alpha_i^+\leq C,\ 0<\alpha_j^+\leq C,\ \sum_{i=1}^{m}(\alpha_i^+-\alpha_i^-)=0$$

После решения QP

$$w=\sum_{i=1}^{m}(\alpha_i^+-\alpha_i^-)x_i$$

$$S=\{i|0<\alpha_i^+\leq C,0<\alpha_i^-\leq C,(\xi_i^+=0)\vee(\xi_i^-=0)\}$$

$$b=\frac{1}{|S|}\sum_{i\in S}\left(y_i-w^{\mathrm{T}}x_i-\varepsilon\right)$$

Реализация в scikit-learn

`sklearn.svm.LinearSVC`

`penalty="l2"`	**Тип регуляризации**
`loss="squared_hinge"`	**Ошибка регуляризации, более традиционная** `"hinge"`
`dual=True`	**Какую задачу решать** `dual=False` **когда** `n_samples > n_features`
`C=1.0`	**Обратная величина к коэффициенту регуляризации**
`fit_intercept=True`	**Свободный член**
`intercept_scaling=1`	**Значение фиктивного признака**

```
tol=0.0001, multi_class="ovr", class_weight=None, verbose=0,
random_state=None, max_iter=1000
```

SVM

• **естественное определение «оптимальной разделяющей гиперплоскости»**

+ геометрическая интерпретация

+ некоторая защита от проклятия размерности

• **есть теоретическое обоснование**

большой зазор $\Rightarrow$ меньше переобучение

• **при оптимизации нет проблем локальных минимумов**

• **решение определяется «опорными объектами»**

их сложнее всего классифицировать

– только их можно оставить в выборке

• **есть нелинейные модификации «kernel tricks»**

это, вообще говоря, не линейный метод!

будет дальше

SVM

• должно быть хорошее пространство
(однородные признаки в одной шкале)

• тогда работают линейные SVM
(нелинейные – с ядрами – успешно заменяются другими алгоритмами)

• не подходят для больших данных
(особенно нелинейные)

• при нелинейности интерпретация немного теряется…
иногда непонятно, в каком именно пространстве решается задача

• опорные объекты – нельзя считать «базовыми»
из-за этого было много споров,
работает ли метод «правильно»

Зачем нужен дискриминантный анализ?

Когда классы хорошо разделимы оцениваемые параметры, скажем, для логистической регрессии могу быть нестабильны.

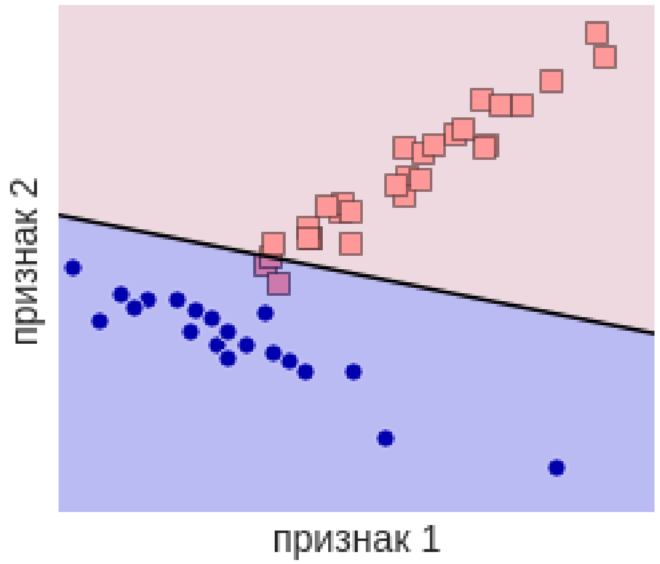
Линейный дискриминантный анализ меньше подвержен этой проблеме.

Если размерность малая, распределения нормальные – линейная дискриминантная модель опять лучше.

Также LDA можно приспособить для представления данных в маломерных пространствах.

LDA – для малых размерностей и нормально распределенных данных
Наивный Байес – для больших размерностей

Линейный дискриминант Фишера



рассмотрим случай двух классов:

$$X = \mathbb{R}^n, Y = \{\pm 1\}$$

$$X_\alpha = \{x_i \mid y_i = \alpha\}$$

$$m_\alpha = | X_\alpha |$$

$$m = m_{+1} + m_{-1}$$

Линейный дискриминант Фишера

Хотим все точки проецировать на прямую:

$$x \to w^{\mathrm{T}} x$$

Центры проекций:

$$\mu_\alpha = \frac{1}{m_\alpha} \sum_{x_i \in X_\alpha} x_i \to w^{\mathrm{T}} \mu_\alpha = \frac{1}{m_\alpha} \sum_{x_i \in X_\alpha} w^{\mathrm{T}} x_i$$

«Дисперсии» (не нормируем) проекций:

$$\sigma_\alpha^2 = \sum_{x_i \in X_\alpha} (w^{\mathrm{T}} x_i - w^{\mathrm{T}} m_\alpha)^2$$

хотим, чтобы

$$\frac{(w^{\mathrm{T}} \mu_{+1} - w^{\mathrm{T}} \mu_{-1})^2}{\sigma_{+1}^2 + \sigma_{-1}^2} \to \max$$

Линейный дискриминант Фишера

$$(w^{\mathrm{T}}\mu_{+1} - w^{\mathrm{T}}\mu_{-1})^2 = (w^{\mathrm{T}}(\mu_{+1} - \mu_{-1}))^2 =$$
$$= w^{\mathrm{T}}(\mu_{+1} - \mu_{-1})(\mu_{+1} - \mu_{-1})^{\mathrm{T}} w = w^{\mathrm{T}} S w$$

$$\sigma_\alpha^2 = \sum_{x_i \in X_\alpha} (w^{\mathrm{T}} x_i - w^{\mathrm{T}}\mu_\alpha)^2 = w^{\mathrm{T}} \sum_{x_i \in X_\alpha} (x_i - \mu_\alpha)(x_i - \mu_\alpha)^{\mathrm{T}} w =$$
$$= w^{\mathrm{T}} S_\alpha w$$

$$\frac{w^{\mathrm{T}} S\, w}{w^{\mathrm{T}}(S_{+1} + S_{-1}) w} \to \max$$

междуклассовый разброс (between-class scatter)

внутриклассовый разбор (within-class scatter matrices)

Линейный дискриминант Фишера

$$\frac{w^{\mathrm{T}} S\, w}{w^{\mathrm{T}}(S_{+1}+S_{-1})w} \to \max$$

если продифференцировать…

$$w^{\mathrm{T}} S\, w \cdot (S_{+1}+S_{-1})w = w^{\mathrm{T}}(S_{+1}+S_{-1})w \cdot S\, w$$

$$\underbrace{w^{\mathrm{T}} S\, w}_{\text{число}} \cdot (S_{+1}+S_{-1})w = \underbrace{w^{\mathrm{T}}(S_{+1}+S_{-1})w}_{\text{число}} \cdot \underbrace{S\, w}_{(\mu_{+1}-\mu_{-1})\cdot\text{число}}$$

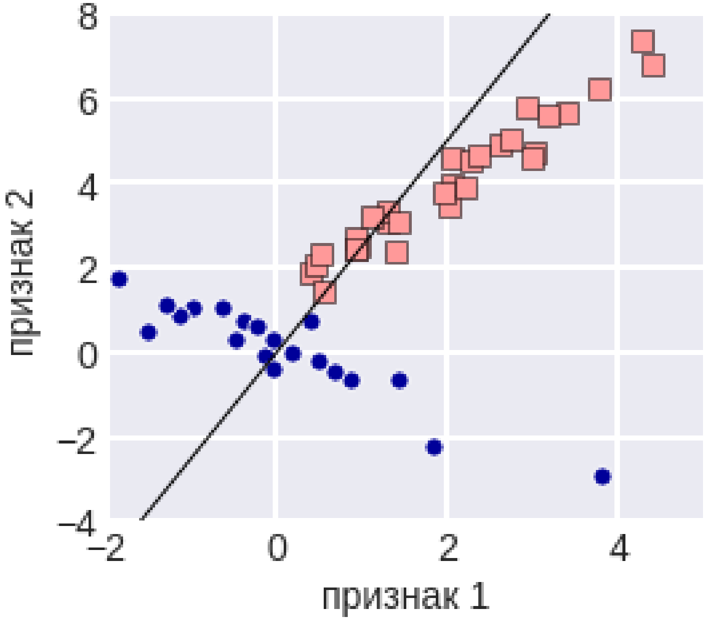
нас интересует направление вектора, а не его величина, тогда

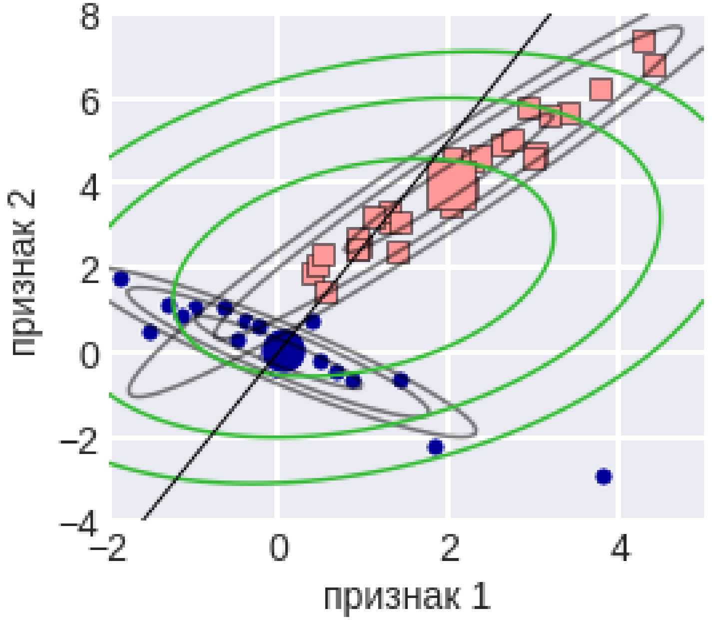
$$\mathrm{const}\cdot(S_{+1}+S_{-1})w = \mathrm{const}\cdot(\mu_{+1}-\mu_{-1})$$

решение $w \propto (S_{+1}+S_{-1})^{-1}(\mu_2-\mu_1)$

можно обратить внимание, что если вектор умножить на константу, то числитель и знаменатель сокращаются, можно задаться условием $w^{\mathrm{T}}(S_{+1}+S_{-1})w = 1$

Линейный дискриминант Фишера





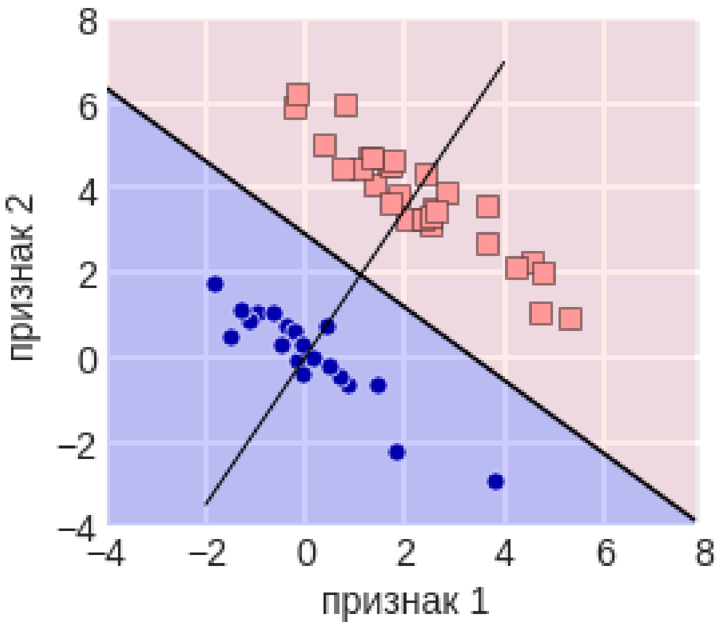
интересный факт:

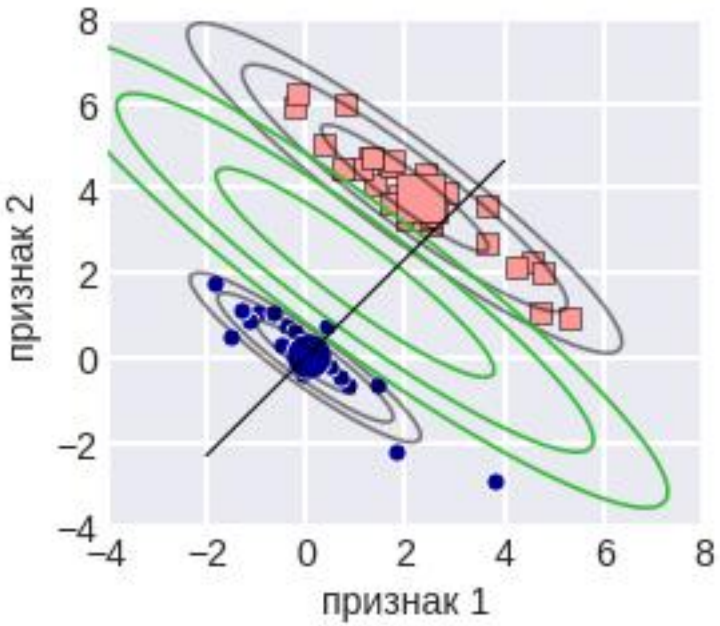
можно получить из МНК, выбрав целевые значения

$$\alpha \to \frac{m_{+1} + m_{-1}}{m_{\alpha}}$$

обосновать!

Линейный дискриминант Фишера






```
from sklearn.discriminant_analysis import LinearDiscriminantAnalysis
lda = LinearDiscriminantAnalysis(solver="svd", store_covariance=True)
lda.fit(X, y)
```

Итоги

Линейный классификатор ~ разделение точек гиперплоскостью
Есть простые методы настройки

Нигде в линейном классификаторе не минимизировали число ошибок
NP-полная задача
Но заменяли эту функцию ошибок другой… суррогатной

SVM зависит от масштаба признаков!

SVM чувствителен к шуму (шумовым признакам и объектам)

SVM называют лучшим методом линейной классификации… спорно

Линейная регрессия – пайплайн

как и во всём машинном обучении

- Выбираем модель (model)
- Выбираем функцию ошибки (loss – дальше будет больше)
- Выбираем способ обучения (прямой / градиентный)
- Эффективно реализуем (векторизация и т.п.)
- улучшаем качество с помощью генерации признаков / селекции / сокращения размерности
- боремся с переобучением с помощью регуляризации

Ссылки

Alexey Nefedov «Support Vector Machines: A Simple Tutorial»
https://svmtutorial.online/

Tristan Fletcher «Support Vector Machines Explained»
https://static1.squarespace.com/static/58851af9ebbd1a30e98fb283/t/58902fbae4fcb5398aeb7505/1485844411772/SVM+Explained.pdf