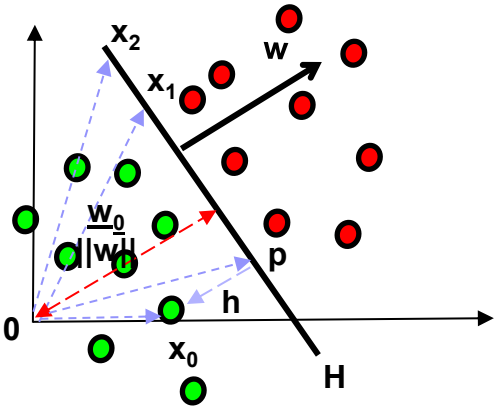
Лекция 9:
Метод опорных векторов

Линейный бинарный классификатор на основе разделяющей гиперплоскости

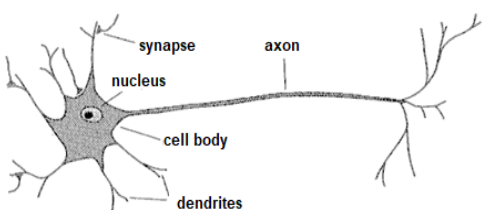
- Основные определения и свойства:
  - Отклик $Y = \{-1, +1\}$
  - Дискр. ф-ция $g(x) = g_+(x) - g_-(x)$
  - Отступ $M(x, y) = yg(x)$
  - Линейность $g(x) = \langle w, x \rangle + w_0$
  - Граница – гиперплоскость $H = \{x | \langle w, x \rangle + w_0 = 0\}$ определяется нормалью $w/||w||$ и смещением $w_0 /||w||$.

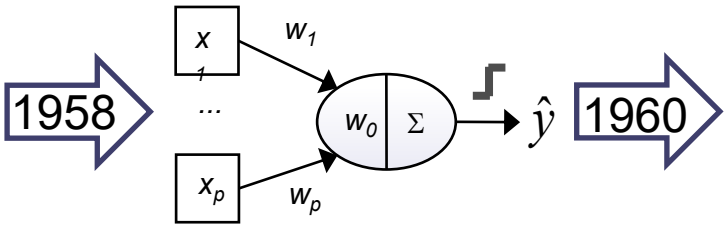


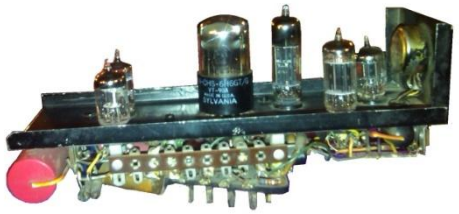
  - То, что w – ортогонально H, доказывается из определения линейного $g(x)$ и равенства $g(x) = 0$ на границе: пусть $x_1, x_2 \in H \Rightarrow \langle w, x_1 \rangle + w_0 = 0$, $\langle w, x_2 \rangle + w_0 = 0 \Rightarrow \langle w, x_2 - x_1 \rangle = 0 \Rightarrow w$ ортогонально любым $x_1, x_2 \in H$
  - Знаковое расстояние от точки x_0 до границы $d(x_0, H) = g(x_0)/\big|\big|w\big|\big|$ (подстановка в нормализованное уравнение гиперплоскости).

    Пусть $x_0 = p + h$, $p \in H$ – проекция x_0 на H, h –ортогональное дополнение, тогда $h = d\frac{w}{||w||}$, $x_0 = p + d\frac{w}{||w||}$ домножаем скалярно на w прибавляем w_0, получаем: $\langle w, x_0 \rangle + w_0 = \cancel{\langle w, p \rangle + w_0} + d\frac{\langle w,w \rangle}{||w||} \Rightarrow d = \frac{\langle w,x_0 \rangle + w_0}{||w||}$
  - Прогноз $a(x) = sign(g(x))$ – с какой стороны от H, расстояния от центра координат до H равно $w_0/||w||$

Персептрон Розенблатта







- Модель - разделяющая гиперплоскость:
  - Функция потерь $L_{perc}(M) = [M < 0]$,
  - Обучение - SGD, доказана сходимость за конечное число шагов
  - Для «ошибок» (примеров не с той стороны гиперплоскости):

$$\begin{pmatrix} w^{(t)} \\ w_0^{(t)} \end{pmatrix} + \eta \begin{pmatrix} y_i x_i \\ y_i \end{pmatrix} \rightarrow \begin{pmatrix} w^{(t+1)} \\ w_0^{(t+1)} \end{pmatrix}$$

- Недостатки (их устранение - достоинства SVM):
  - Несколько возможных решений при линейной разделимости классов (зависит от начального приближения)
  - Не сходится при линейной неразделимости классов, а при линейной разделимости долго сходится (много шагов)

Обучение линейного классификатора

- «Пороговая» (персептрон) функция потерь $L_{perc}(M) = [M < 0]$
  - кусочно-постоянная ⇒ имеет нулевые градиенты
- Можно ограничить ее сверху другой гладкой функцией потерь и искать решение задачи оптимизации с регуляризацией:

$$\min_w \frac{1}{l}\sum_i L_*(y_i(\langle x_i, w\rangle + w_0)) + \boldsymbol{\gamma L_p(w)}$$

  - Логистическая:

$$L_{log}(M) = \log_2(1 + e^{-M})$$

  - Квадратичная:

$$L_{sq}(M) = (1 - M)^2$$

  - Экспоненциальная:

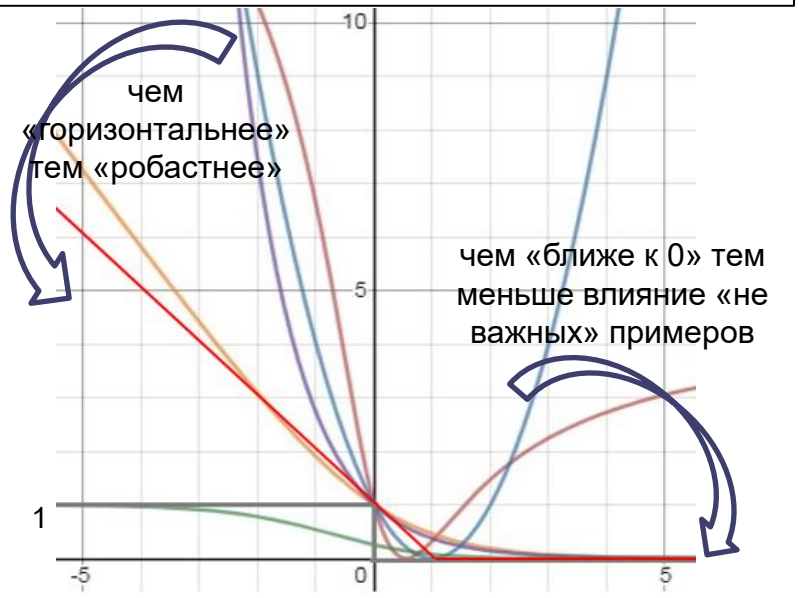
$$L_{exp}(M) = e^{-M}$$

  - Тангенсовая:

$$L_{tng}(M) = (2\arctan(M) - 1)^2$$

  - Hinge («шарнир»):

$$L_{hinge}(M) = (1 - M)_+$$



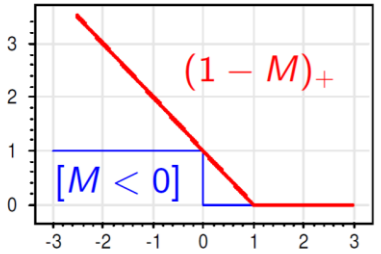
Аппроксимация Hinge функцией потерь с L_2 регуляризацией

- Ограничим сверху эмпирический риск персептрона L_2 - регуляризованным эмпирическим риском с с Hinge функцией потерь:

$$Q_{perc}(w, w_0) = \sum_{i=1}^{l} [M_i(w, w_0) < 0] \leq$$

$$\leq Q_{hinge}(w, w_0) = \sum_{i=1}^{l} \left(1 - M_i(w, w_0)\right)_+ + \gamma ||w||^2$$

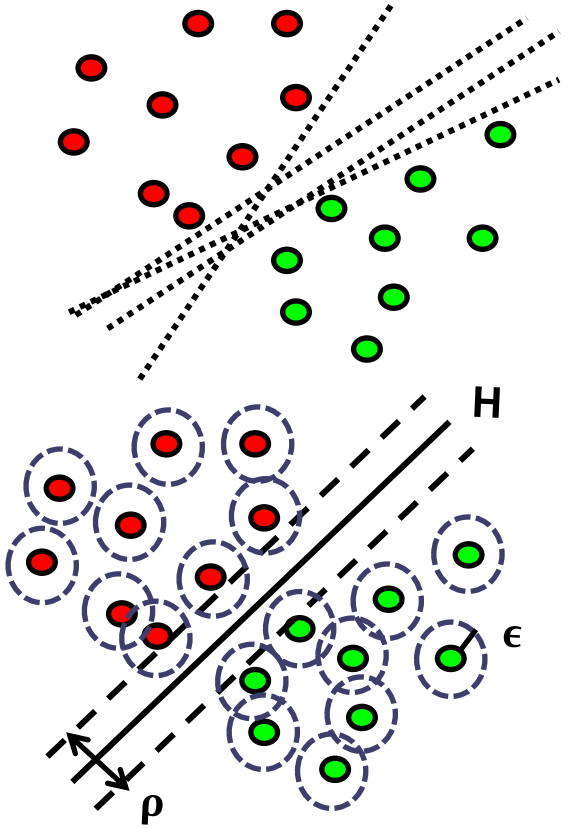
$$Q_{hinge} \to \min_{w, w_0} \quad \Rightarrow Q_{perc} \to \min_{w, w_0}$$



- Первое слагаемое:
  - линейно штрафует за приближение к границе классов с «правильной стороны» ближе чем 1
  - линейно штрафует за удаление от границы с «неправильной стороны»
- Второе слагаемое:
  - штрафует за сложность, не давая переобучаться
  - контролирует стабильность при мультколлинеарности

Оптимальная разделяющая гиперплоскость в случае линейно разделимых классов

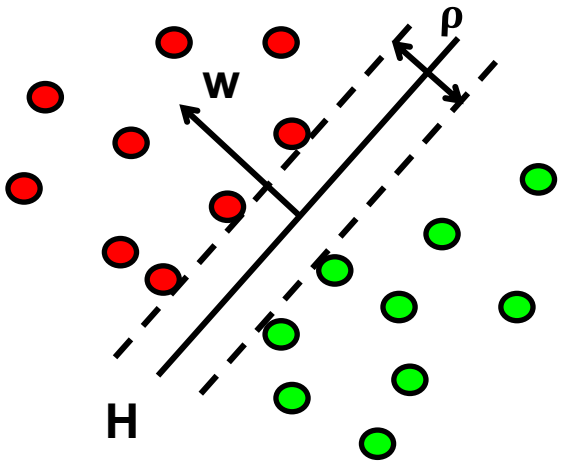
- В случае линейно разделимости классов:
  - можно провести бесконечно много разделяющих гиперплоскостей.
  - **Какая из них лучше?**
- Определим ширину разделяющей полосы ***ρ* - зазор** для множества точек как минимум расстояния по всем парам точек из разных классов
- Т.к. есть случайная составляющая (шум):
  - наблюдения могут лежать в некоторой окрестности неизвестного радиуса ϵ
  - значит чем больше отступ ρ, тем меньше вероятность, что окрестность точек рядом с границей пересечет ее
- Вывод – нужно **максимизировать зазор**



Максимизация отступа в случае линейно разделимых классов

- Каноническое уравнение гиперплоскости:
  - уравнение H определено с точностью до множителя, надо зафиксировать (с точностью до знака)
  - нормируем параметры так, чтобы расстояние $d(x,H) = g(x)/||w||$ от границы до ближайшего наблюдения каждого класса было равно 1
  - Это приводит к условиям: если $y_i = 1 \Rightarrow \langle w, x_i \rangle + w_0 \geq 1$, а для $y_i = -1 \Rightarrow \langle w, x_i \rangle + w_0 \leq -1$ и в общем виде $\forall \boldsymbol{i}: \boldsymbol{y_i}(\langle \boldsymbol{w}, \boldsymbol{x_i} \rangle + \boldsymbol{w_0}) \geq \boldsymbol{1}$
- Ширина разделяющей полосы (зазора между классами)
  - вспоминаем про знаковое расстояние:

$$d(x,H) = \frac{g(x)}{||w||} \Rightarrow \boldsymbol{\rho} = \frac{\boldsymbol{2}}{||\boldsymbol{w}||} \rightarrow \max_{w}$$



- Получаем задачу условной оптимизации:

$$\begin{cases} \min\limits_{w} \frac{1}{2}||w||^2 \\ \forall i: y_i(\langle w, x_i \rangle + w_0) \geq 1 \end{cases}$$

- Все выпуклое - **единственное решение!**

Условная оптимизация (необходимые факты)

- **Задача математического программирования** (ЗМП):

$$\min f\ (x)$$
$$\begin{cases} g_i(x) \le 0, i = \overline{1,k} = E \\ g_i(x) = 0, i = \overline{k+1,m} = I \end{cases}$$

  - $x \in P$ **- допустимое множество**:
$$X = \{x \in P | g_i(x) \le 0, i \in I; g_i(x) = 0, i \in E\}$$
  - *линейное программирование* – целевая функция и ограничения линейны
  - ***квадратичное программирование*** – квадратичная целевая функция и линейные ограничения
  - *выпуклое программирование – ограничения и целевая* функции выпуклые, P – выпуклое множество

Принцип Лагранжа (условная оптимизация)

- **Функция Лагранжа**: $L: \mathbb{R}^n \times \mathbb{R}^m \to \mathbb{R}, f, g_i: \mathbb{R}^m \to \mathbb{R}$,

  $\boldsymbol{L(x, \lambda) = f(x) + \langle \lambda, g(x) \rangle}$, где $\lambda = (\lambda_1, \ldots, \lambda_m)$ - множители Лагранжа

$$\nabla L(x, \lambda) = \nabla f(x) + \sum_{i=1}^{m} \lambda_i \nabla g_i(x)$$

  - Рассмотрим случай отсутствия ограничений-неравенств

- **Принцип Лагранжа** (необходимое условие оптимальности):
  - Пусть f дифференцируема в точке $x^* \in R^n$, $g_i, i = \overline{1, m}$ непрерывно дифференцируемы в некоторой окрестности x^* и в точке x^* выполнено дополнительное условие регулярности.
  - Если x^* является локальным решением задачи, то существует

$$\lambda^* \in \mathbb{R}^m: \nabla L(x^*, \lambda^*) = 0$$

- **Система Лагранжа:**

$$\begin{cases} \nabla L(x, \lambda) = 0 \\ g(x) = 0 \end{cases}$$

$\bar{x} \in X: L(\bar{x}, \bar{\lambda}) = 0$ для некоторого $\bar{\lambda}$ - стационарная точка

Условия Каруша-Куна-Таккера (условная оптимизация)

- Общий случай (смешанные ограничения) $0 \le k \le m$
- **Теорема.** Каруша−Куна−Таккера (ККТ) (необходимое условие оптимальности).
  - Пусть $f, g_i, i = \overline{1,k},$ дифференцируемы в точке $x^*, g_i, i = \overline{k+1,m}$ непрерывно дифференцируемы в некоторой окрестности x^* и в точке x^* выполнено условие регулярности.
  - Если x^* является локальным решением задачи, то существует λ^*:

$$\nabla_x L(x^*, \lambda^*) = 0,$$

$$\boldsymbol{\lambda_i^* g_i(x^*) = 0}$$ **условие дополняющей нежесткости**

$$g_i(x^*) = 0, \boldsymbol{\lambda_i^* \ge 0}, i = \overline{1,k},$$

$$g_i(x^*) \le 0, i = \overline{k+1,m}$$

Решение SVM в случае линейно разделимых классов

- Выпишем лагранжиан:

$$L(w, w_0; \alpha) = \frac{1}{2}||w||^2 - \sum_{i=1}^{l} \alpha_i (y_i(\langle w, x_i \rangle + w_0) - 1)$$

  - с множителями Лагранжа $\alpha_i \geq 0$ для каждого ограничения
  - с условиями дополняющей нежёсткости (KKT):

$$\forall i: \alpha_i (y_i(\langle w, x_i \rangle + w_0) - 1) = 0$$

- Из необходимых условий оптимальности следует:

$$\frac{\partial L(w,w_0;\alpha)}{\partial w_0} = 0 \Rightarrow \sum_{i=1}^{l} \alpha_i y_i = 0, \frac{\partial L(w,w_0;\alpha)}{\partial w} = 0 \Rightarrow \mathrm{w} = \sum_{i=1}^{l} \alpha_i y_i x_i$$

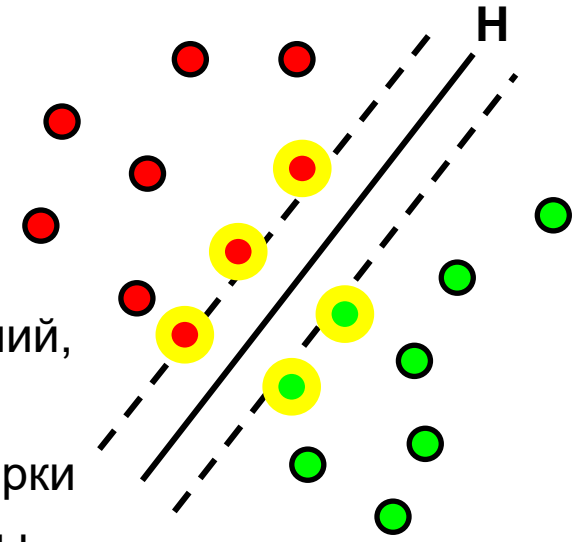
- Дискриминантная функция:

$$g(x) = \langle w, x \rangle + w_0 = \sum_{\boldsymbol{i=1}}^{\boldsymbol{l}} \boldsymbol{\alpha_i y_i \langle x_i, x \rangle} + \boldsymbol{w_0}$$

  - Сдвиг w_0 может корректироваться «вручную», обычно инициализируется как: $w_0 = \frac{1}{l}\sum_{j=1}^{l}\left(\boldsymbol{y_j} - \sum_{\boldsymbol{i=1}}^{\boldsymbol{l}} \boldsymbol{\alpha_i y_i \langle x_i, x \rangle}\right)$

Опорные вектора в случае линейно разделимых классов

- По свойствам множителей Лагранжа: $y_i(\langle w, x_i\rangle + w_0) > 1 \Rightarrow \alpha_i = 0$:
  - $\alpha_i \neq 0$ для **опорных векторов** (наблюдения лежат строго на границе, их расстояние до *H* равно 1)
  - Дискриминантная функция (и модель) зависит **только от опорных векторов**: $a(x) = \text{sign}(\sum_{i \in SV} \alpha_i y_i \langle x_i, x\rangle + w_0)$
  - Результат обучения не зависит от наличия в тренировочном наборе наблюдений, не лежащих на границе **(периферийных наблюдений)**, их можно исключить из выборки и получить ту же модель SVM (вот только мы заранее не знаем, какие именно наблюдения лежат на границе)
  - Этим свойством пользуются алгоритмы оптимизации для SVM



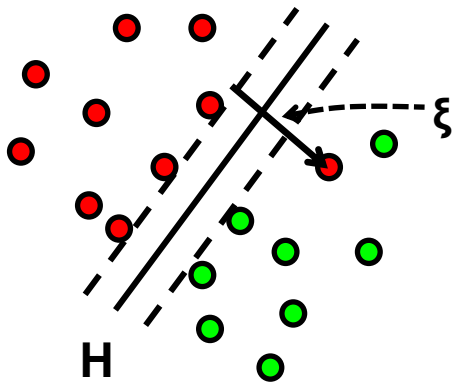
Линейно неразделимые классы

- Классы не обязаны быть линейно разделимы:
  - можно попробовать перебрать оптимальные гиперплоскости, минимизируя число ошибок, но оказалось, что это NP-трудная задача (не найдено не экспоненциальных по сложности методов)
- Основной подход – дополнительно линейно **штрафовать** модель за «нарушение» неравенств канонической гиперплоскости:

обобщающая способность

ошибка

$$\begin{cases} \min\limits_{w,\xi,w_0} \frac{1}{2}\left|\left|w\right|\right|^2 + \frac{C}{l}\sum_{i=1}^{l}\xi_i \\ \forall i: y_i(\langle w, x_i\rangle + w_0) \;\geq\; 1 - \xi_i, \xi_i \geq 0 \end{cases}$$



  - параметр *C* – задает в явном виде компромисс между точностью и сложностью модели
  - Аналогично безусловной минимизации Hinge функции потерь с L_2 регуляризацией:

$$Q_{hinge}(w, w_0) = \sum_{i=1}^{l}\left(1 - M_i(w, w_0)\right)_+ + \gamma\left|\left|w\right|\right|^2 \to \min_{w,w_0}$$

Метод множителей Лагранжа для линейно неразделимых классов

- Снова выпишем лагранжиан:

$$L(w, w_0, \xi; \alpha, \eta) = \frac{1}{2}||w||^2 - \sum_{i=1}^{l} \alpha_i [y_i(\langle w, x_i \rangle + w_0) - 1] - \sum_{\boldsymbol{i=1}}^{\boldsymbol{l}} \boldsymbol{\xi_i}(\boldsymbol{\alpha_i} + \boldsymbol{\eta_i} - \boldsymbol{C})$$

  - α_i - двойственные переменные к условиям $y_i(\langle w, x_i \rangle + w_0) \geq 1 - \boldsymbol{\xi_i}$
  - η_i - двойственные переменные к условиям $\boldsymbol{\xi_i} \geq \boldsymbol{0}$
  - условия дополняющей нежёсткости KKT:

$$\forall i: \alpha_i\big(y_i(\langle w, x_i \rangle + w_0) - (1 - \boldsymbol{\xi_i})\big) = 0, \qquad \boldsymbol{\eta_i \xi_i = 0} \qquad (*)$$

- Из необходимых условий седловой точки функции Лагранжа:

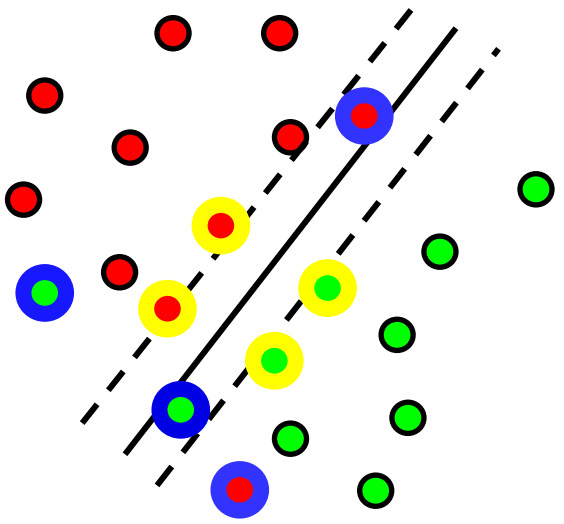
$$\frac{\partial L(w, w_0, \alpha, \eta)}{\partial w_0} = 0 \Rightarrow \sum_{i=1}^{l} \alpha_i y_i = 0, \frac{\partial L(w, w_0, \alpha, \eta)}{\partial w} = 0 \Rightarrow \mathrm{w} = \sum_{i=1}^{l} \alpha_i y_i x_i, \qquad (**)$$

$$\frac{\boldsymbol{\partial L(w, w_0, \alpha, \eta)}}{\boldsymbol{\partial \xi}} = \boldsymbol{0} \Rightarrow \boldsymbol{\eta_i + \alpha_i = C}$$

- Дискриминантная функция и сдвиг те же, но опорные вектора другие: $g(x) = \sum_{i=1}^{l} \alpha_i y_i \langle x_i, x \rangle + w_0$, $w_0 = \frac{1}{l} \sum_{j=1}^{l} \big(y_j - \sum_{i=1}^{l} \alpha_i y_i \langle x_i, x \rangle\big)$

Опорные вектора для линейно неразделимых классов

- Получаем два типа опорных векторов:
  - **Ошибки** – неравенство со штрафом строго НЕ выполняется:
    $$\boldsymbol{\alpha_i = C}, \eta_i = 0, \xi_i > 0, y_i(\langle w, x_i\rangle + w_0) < 1$$
  - **Граничные** – неравенство выполняется как равенство:
    $$\mathbf{0} < \boldsymbol{\alpha_i} < \boldsymbol{C}, 0 < \eta_i < C, \boldsymbol{\xi_i = 0}, y_i(\langle w, x_i\rangle + w_0) = 1$$
- Остальные (не важные) наблюдения:
  - **Периферийные** - неравенство со штрафом выполняется:
    $$\boldsymbol{\alpha_i = 0}, \eta_i = \mathrm{C}, \xi_i = 0, y_i(\langle w, x_i\rangle + w_0) > 1$$
  - снова от них ничего не зависит



Граничные опорные вектора

опорные вектора - ошибки

Двойственность (условная оптимизация)

Прямая задача

$f(x) \to min$

$g_i(x) \le 0, i = \overline{1,k}$

$g_i(x) = 0, i = \overline{k+1,m}$

$x \in P \subseteq \mathbb{R}^n$

$f^* = \inf\limits_{x \in X} f(x)$

Двойственная задача

$\varphi(\lambda) \to \max$

$\varphi(\lambda) = \inf\limits_{x \in P} L(x,\lambda) = \inf\limits_{x \in P} (f(x) + \langle \lambda, g(x) \rangle)$

$\lambda \in Y = \{\lambda \in Q | \varphi(\lambda) > -\infty\}$

$Q = \{\lambda \in \mathrm{R}^m | \lambda_i \ge 0, i = \overline{1,k}\}$

$\varphi^* = \sup\limits_{\lambda \in Y} \varphi(\lambda)$

- Прямая задача представима в виде:

$$\min_{x \in P} \psi(x), \text{ где } \psi(x) = \sup_{\lambda \in Q} L(x,\lambda)$$

  - Значения экстремумов полагаются бесконечными вне допустимого множества.
  - Прямая и двойственная задачи определяются симметрично относительно функции Лагранжа (седловая точка):

$$f^* = \inf_{x \in P} \sup_{\lambda \in Q} L(x,\lambda) \text{ и } \varphi^* = \sup_{\lambda \in Q} \inf_{x \in P} L(x,\lambda)$$

Теорема двойственности и седловые точки (условная оптимизация)

- **Теорема двойственности:**
  - Пусть существует вектор ККТ
    $$\lambda^* \in Q: f^* \leq f(x) + \langle \lambda^*, g(x) \rangle = L(x, \lambda^*)\ \forall x \in P$$
  - Если $f^* > -\infty$, то множество решений двойственной задачи не пусто и совпадает с множеством векторов ККТ прямой задачи. При этом:
    $$f^* = \varphi^*.$$
  - Пара $(x^*, \lambda^*) \in P \times Q$ **седловая точка** $L(x, \lambda)$ на $P \times Q$, если
    $$L(x^*, \lambda^*) = \min_{x \in P} L(x, \lambda^*) = \max_{\lambda \in Q} L(x^*, \lambda),$$

  т.е. иначе: $\forall x \in P, \lambda \in Q: L(x, \lambda^*) \geq L(x^*, \lambda^*) \geq L(x^*, \lambda)$
- **Теорема ККТ:**

  Пусть в Задаче математического программирования существует вектор ККТ. Точка $x^* \in P$ является решением тогда и только тогда, когда существует седловая точка $\lambda^* \in Q: (x^*, \lambda^*)$ функции Лагранжа $L(x, \lambda)$ на $P \times Q$

Двойственная задача SVM

- Можно решать прямую задачу (есть для этого методы оптимизации), но оказалось, что удобнее решать двойственную
- Подставим равенства, полученные из условий $(*)$ и $(**)$ в $L(w, w_0, \xi; \alpha, \eta)$ и увидим, что Лагранжиан после всех сокращений зависит только от двойственных переменных α_i и имеет простую квадратичную форму:

$$L(\cancel{w, w_0, \xi}; \alpha, \cancel{\eta}) = W(\alpha) = \sum_{i=1}^{l} \alpha_i - \frac{1}{2} \sum_{i=1}^{l} \sum_{j=1}^{l} \alpha_i \alpha_j y_i y_j \langle x_j, x_i \rangle$$

- пользуясь свойством седловой точки Лагранжа:

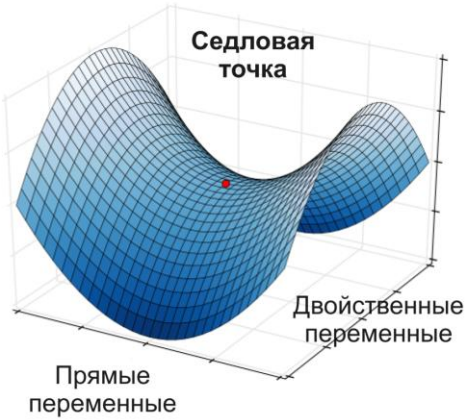
$$L(w^*, w_0^*, \xi^*; \alpha^*, \eta^*) = \min_{w, w_0, \xi} L(w, w_0, \xi; \alpha^*, \eta^*) = \max_{\alpha, \eta} L(w^*, w_0^*, \xi^*; \alpha, \eta)$$

- перейдем к решению двойственной задачи:

$$\begin{cases} \max\limits_{\alpha} W(\alpha) \\ 0 \le \alpha_i \le \mathrm{C}, \sum_{i=1}^{l} \alpha_i y_i = 0 \end{cases}$$

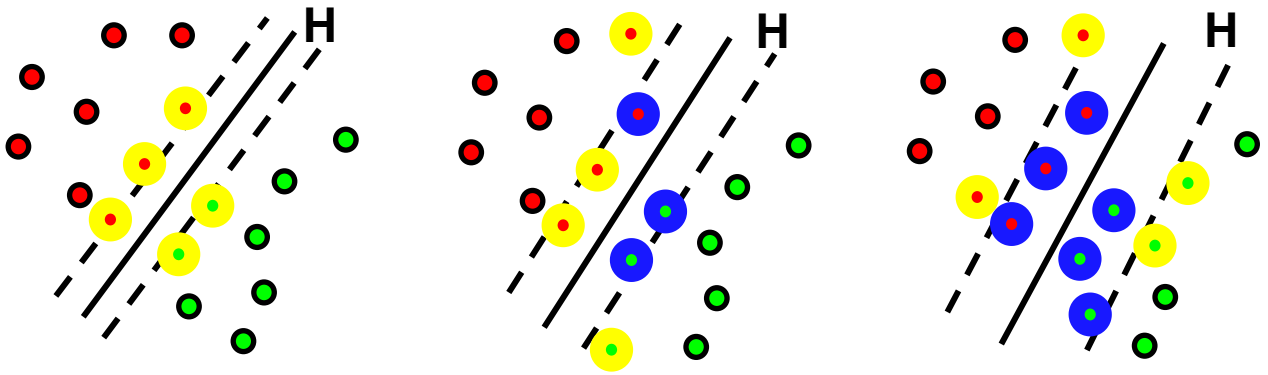
- решение прямой задачи выражается через него как:

$$a(x) = \operatorname{sign}(\textstyle\sum_{i \in SV} \alpha_i y_i \langle x_i, x \rangle + w_0)$$



Выбор параметра штрафа *C*

- Аналогично параметру регуляризации (но наоборот):
  - чем больше *C* тем меньше смещение и больше дисперсия модели
  - чем меньше *C* тем больше обобщающая способность и ошибка подгонки модели ($C_{left} > C_{middle} > C_{right}$)



- На практике:
  - используют стандартные эвристики: C={0.1, 1, 10}
  - подбирают с помощью кросс-валидации (по сетке значений)
- **Не интуитивный** параметр
  - Тяжело: угадать точно, выбрать сетку для перебора, понять смысл

Nu-SVM

- Основная идея – напрямую максимизировать зазор (ширину разделяющей полосы) между классами $\boldsymbol{\rho}$

$$\min_{\xi,\rho,w,w_0} \frac{1}{2}\|w\|^2 + \frac{1}{l}\sum_{i=1}^{l}\xi_i - \boldsymbol{\rho\nu}$$

$$\forall i: (y_i(\langle x_i, w\rangle + w_0) \leq \boldsymbol{\rho} - \boldsymbol{\xi_i}, \boldsymbol{\rho} \geq \mathbf{0}, \xi_i \geq 0$$

- Также через преобразование Лагранжиана сводится к задаче квадратичного программирования в двойственных переменных:

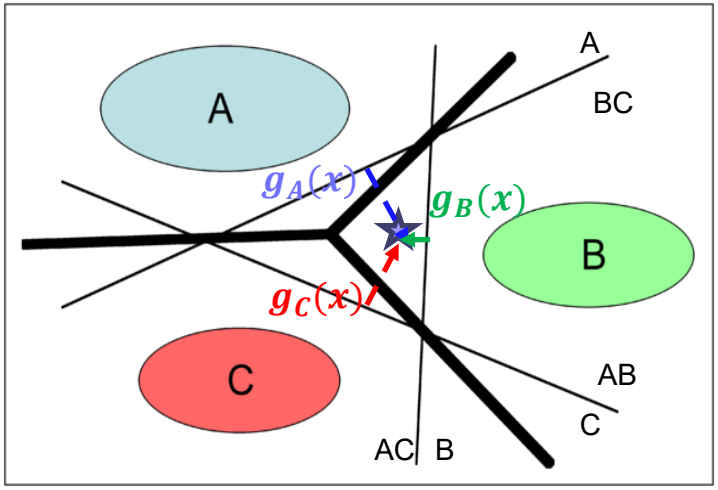
$$\begin{cases} \max_{\alpha} -\frac{1}{2}\sum_{i=1}^{l}\sum_{j=1}^{l}\alpha_i\alpha_j y_i y_j \langle x_j, x_i\rangle \\ \mathbf{0} \leq \boldsymbol{\alpha_i} \leq \frac{\mathbf{1}}{\boldsymbol{l}}, \sum_{i=1}^{l}\alpha_i y_i = 0, \sum_{\boldsymbol{i=1}}^{\boldsymbol{l}}\boldsymbol{\alpha_i} \geq \boldsymbol{\nu} \end{cases}$$

- Вместо метапараметра C используется ν с важными «ν-свойствами»:
  - ν-верхняя граница пропорции опорных векторов – ошибок
  - ν-нижняя граница пропорции опорных векторов - граничных
  - асимптотически с вероятностью 1 (при определенных условиях) эти границы достигаются

Многоклассовый SVM «каждый против всех»

- Каждый против всех:
  - Строим k моделей (k-число классов), выбираем класс с наиболее уверенным прогнозом – наибольшей дискриминирующей функцией:

$$\arg \max_{j=1,\dots,k} g_j(x)$$



- Особенности:
  - гарантировано есть хотя бы один не сбаласированный набор (т.к. 1 класс против всех остальных)
  - вычислительно сложно при больших наборах данных – k бинарных задач с l наблюдениями в каждой
  - независимое обучение – независимые $g_j(x)$, надо приводить на близкие шкалы, можно с помощью $\mathrm{softmax}(g_1(x), \dots, g_k(x))$ или более корректно с помощью корректировки Платта

Корректировка Платта

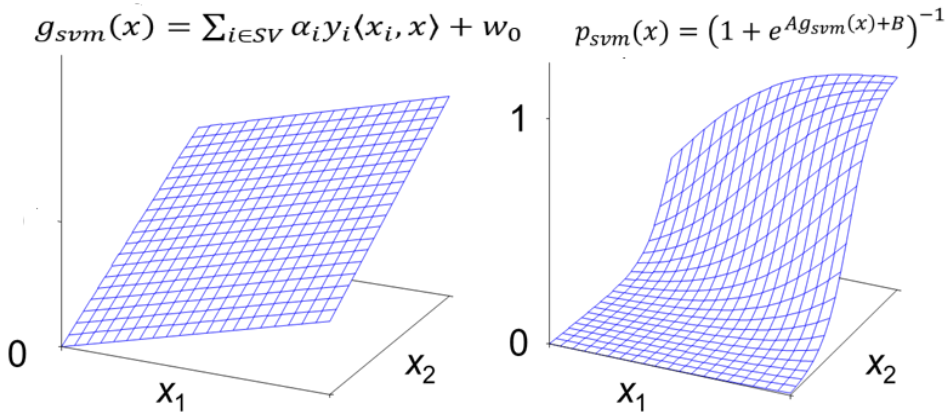
- Преобразуем отклик SVM из $(-\infty, +\infty)$ в **вероятностный** диапазон $[0,1]$с помощью подгонки сигмоиды:

$$p_{svm}(x) = \frac{1}{1+\exp(Ag_{svm}(x)+B)}$$

где $g_{svm}(x) = \sum_{i \in SV} \alpha_i y_i \langle x_i, x \rangle + w_0$, а A и B –параметры, которые ищем

- Чтобы не переобучиться:
  - параметры A и B подбираются как в логистической регрессии с одним предиктором (откликом SVM) на валидационной выборке (не использовалась для обучения SVM) или с помощью кросс-валидации
  - дополнительно часто используется «регуляризация» откликов:

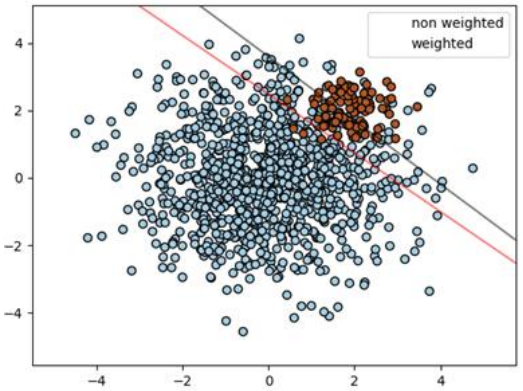
$$y_i^{Platt} = \begin{cases} \frac{l_+ + 1}{l_+ + 2}, y_i = 1 \\ \frac{1}{l + 2}, y_i = -1 \end{cases}$$



Дисбаланс классов

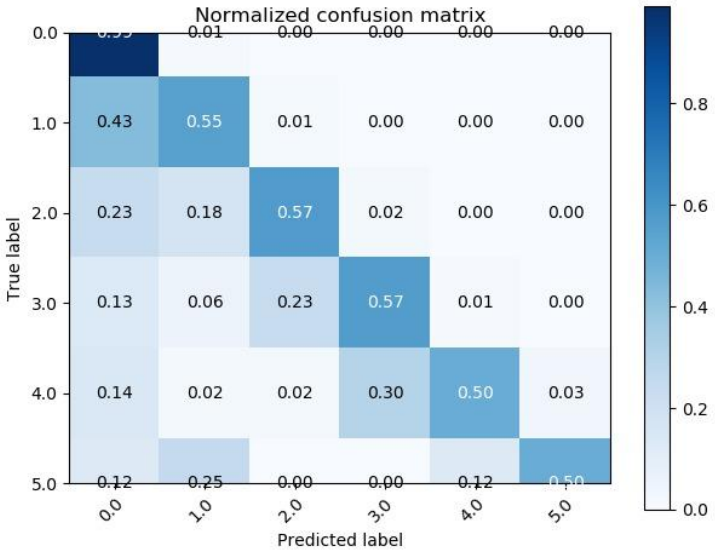
- Возможные подходы к решению проблемы:
  - В целом SVM менее чувствителен к дисбалансу, чем другие методы, т.к. модель зависит только от опорных векторов
  - SMOTE (oversampling)
  - Undersampling + корректировка сдвига w_0– строим SVM на сбалансированной выборке, а w_0 выбираем с учетом дисбаланса, например $w_0^* = \underset{w_0}{\operatorname{argmin}} F_\beta\,(g(x, w_0), y)$
  - Undersampling + корректировка Платта – строим SVM на сбалансированной выборке, а корректировку Платта на несбалансированной
  - Используем веса наблюдений
  - Используем веса классов:

$$\begin{cases} \min\limits_{w,\xi,w_0} \dfrac{1}{2}\left|\left|w\right|\right|^2 + \dfrac{C_{-1}}{l_{-1}} \sum\limits_{i:y_i=-1} \xi_i + \dfrac{C_1}{l_1} \sum\limits_{i:y_i=+1} \xi_i \\ \forall i: y_i(\langle w, x_i\rangle + w_0) \;\geq\; 1 - \xi_i, \xi_i \geq 0 \end{cases}$$

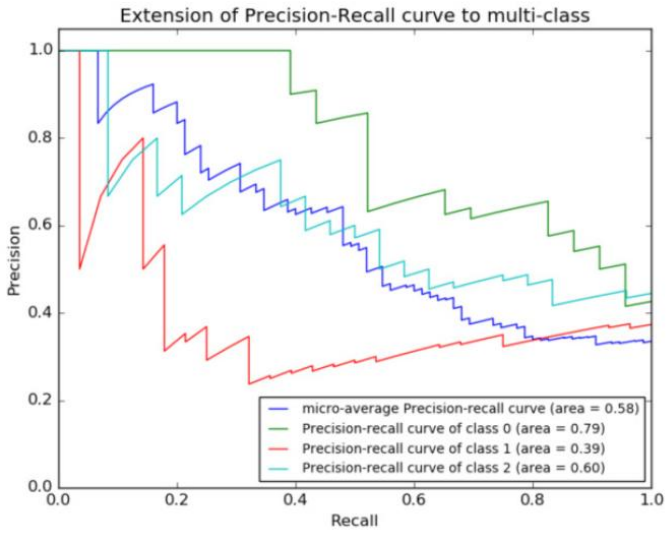


Многоклассовый случай (оценка качества)

Многоклассовая матрица ошибок



«Бинарные» оценки графики по каждому классу

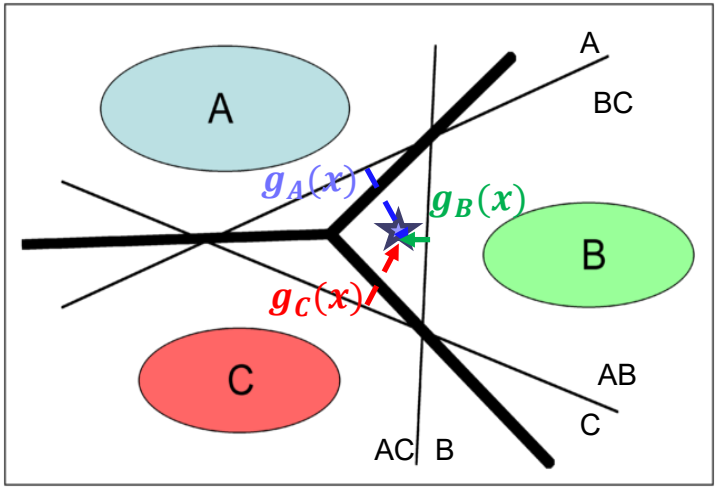


	бинарный случай	макроусреднение	микроусреднение
Точность	$\frac{TP}{\widehat{P}}$	$\frac{1}{C}\sum_{c=1}^{C}\frac{TP_c}{\widehat{P}_c}$	$\frac{\sum_{c=1}^{C} TP_c}{\sum_{c=1}^{C}\widehat{P}_c}$
Полнота	$\frac{TP}{P}$	$\frac{1}{C}\sum_{c=1}^{C}\frac{TP_c}{P_c}$	$\frac{\sum_{c=1}^{C} TP_c}{\sum_{c=1}^{C} P_c}$

Многоклассовый SVM «каждый против всех»

- Каждый против всех:
  - Строим k моделей (k-число классов), выбираем класс с наиболее уверенным прогнозом – наибольшей дискриминирующей функцией:

$$\arg \max_{j=1,\dots,k} g_j(x)$$



- Особенности:
  - гарантировано есть хотя бы один не сбаласированный набор (т.к. 1 класс против всех остальных)
  - вычислительно сложно при больших наборах данных – k бинарных задач с l наблюдениями в каждой
  - независимое обучение – независимые $g_j(x)$, надо приводить на близкие шкалы, можно с помощью $\mathrm{softmax}(g_1(x), \dots, g_k(x))$ или более корректно с помощью корректировки Платта

Корректировка Платта

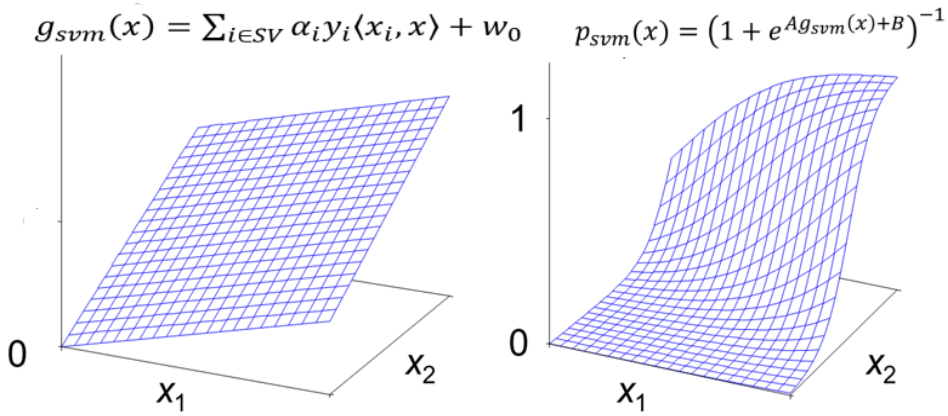
- Преобразуем отклик SVM из $(-\infty, +\infty)$ в **вероятностный** диапазон $[0,1]$с помощью подгонки сигмоиды:

$$p_{svm}(x) = \frac{1}{1+\exp(-Ag_{svm}(x)+B)}$$

где $g_{svm}(x) = \sum_{i \in SV} \alpha_i y_i \langle x_i, x \rangle + w_0$, а A и B –параметры, которые ищем

- Чтобы не переобучиться:
  - параметры A и B подбираются как в логистической регрессии с одним предиктором (откликом SVM) на валидационной выборке (не использовалась для обучения SVM) или с помощью кросс-валидации
  - дополнительно часто используется «регуляризация» откликов:

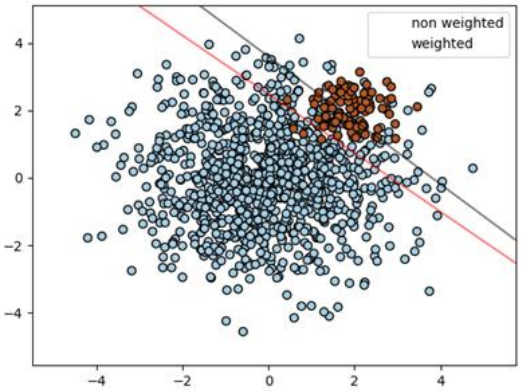
$$y_i^{Platt} = \begin{cases} \frac{l_+ + 1}{l_+ + 2}, y_i = 1 \\ \frac{1}{l + 2}, y_i = -1 \end{cases}$$



Дисбаланс классов

- Возможные подходы к решению проблемы:
  - В целом SVM менее чувствителен к дисбалансу, чем другие методы, т.к. модель зависит только от опорных векторов
  - SMOTE (oversampling)
  - Undersampling + корректировка сдвига w_0– строим SVM на сбалансированной выборке, а w_0 выбираем с учетом дисбаланса, например $w_0^* = \underset{w_0}{\operatorname{argmin}} F_\beta\,(g(x, w_0), y)$
  - Undersampling + корректировка Платта – строим SVM на сбалансированной выборке, а корректировку Платта на несбалансированной
  - Используем веса наблюдений
  - Используем веса классов:

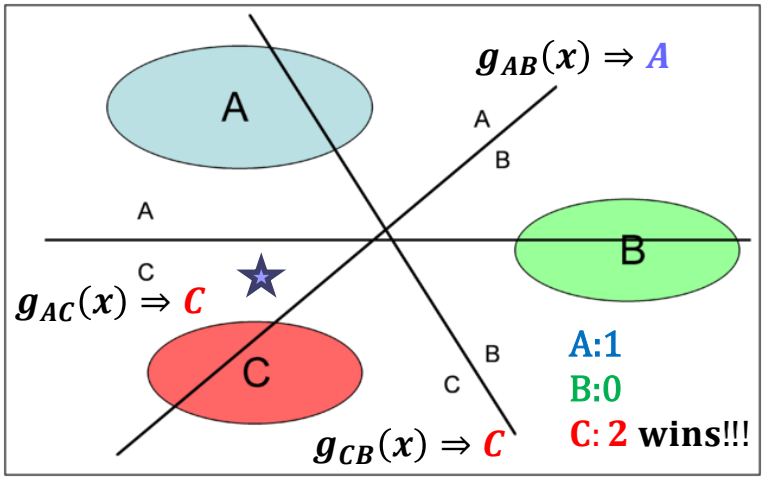
$$\begin{cases} \min\limits_{w,\xi,w_0} \dfrac{1}{2}\left|\left|w\right|\right|^2 + \dfrac{C_{-1}}{l_{-1}} \sum\limits_{i:y_i=-1} \xi_i + \dfrac{C_1}{l_1} \sum\limits_{i:y_i=+1} \xi_i \\ \forall i: y_i(\langle w, x_i\rangle + w_0) \;\geq\; 1 - \xi_i, \xi_i \geq 0 \end{cases}$$



Много-классовый SVM «каждый против каждого»

- Каждый против каждого
  - Строим k(k-1)/2 моделей (k-число классов), выбираем класс голосованием:

$$\arg\max_{j=1,\ldots,k} \sum_{i \neq j} [g_{ij}(x) > 0]$$



- Особенности:
  - меньше проблем с дисбалансом классов чем в каждом против всех
  - вычислительно сложно при больших k, получаем k(k-1)/2 бинарных задач, правда наблюдений в каждой меньше *l*
  - независимое обучение – независимые $g_{ij}(x)$ не так критично как в каждом против всех (не сравниваем отклики разных моделей друг с другом напрямую)
  - могут быть «ничьи», простое голосование – не лучший подход, надо учитывать «уверенность» в прогнозе, а значит тоже корректировать отклики

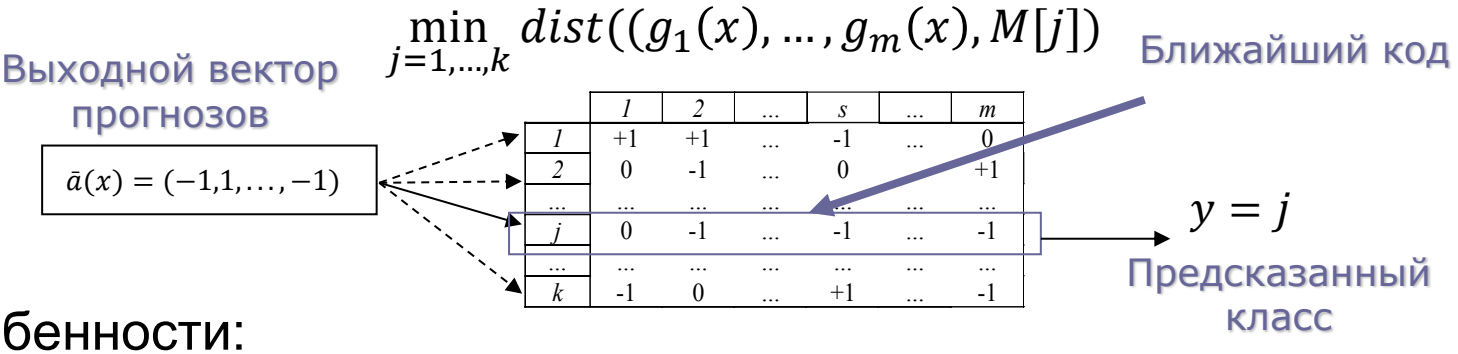
Вероятности классов на основе попарных сравнений

- Если по результатам применения подхода «каждый против каждого» необходимо вычислить вероятности принадлежности наблюдения x_0 каждому из k классов $p_1(x_0), \dots, p_k(x_0)$, то можно воспользоваться подходом попарных сравнений:
  - Применяем все $k(k-1)/2$ попарных моделей и получаем для каждой пары классов (i,j) значение функции $g_{ij}(x_0)$
  - Делаем корректировку Платта $p_{ij}(x_0)$ (x_0 можно не указывать, т.к. все считается только для него)
  - Принимаем предположение модели Брэдли-Терри для попарных сравнений: $p_{ij} = p_i/(p_i + p_j)$, где p_s неизвестны для $1 \le s \le k$
  - Находим их, минимизируя численным методом дивергенцию Кульбака-Лейблера :

$$\sum_{i,j} p_{ij} \log\left(\frac{p_{ij}(p_i + p_j)}{p_i}\right) + \sum_{i,j} \frac{p_i}{p_i + p_j} \log\left(\frac{p_i}{p_{ij}(p_i + p_j)}\right) \to \min_{p_1,\dots,p_k}$$

Многоклассовый ECOC SVM

- ECOC:
  - Строим кодовую матрицу M с m новыми «суперклассами», каждый объединяет комбинацию исходных классов и
  - Обучаем m моделей $g_1(x), \ldots, g_m(x)$
  - При классификации получаем вектор прогнозов и выбираем класс с наиболее близким кодовым словом:



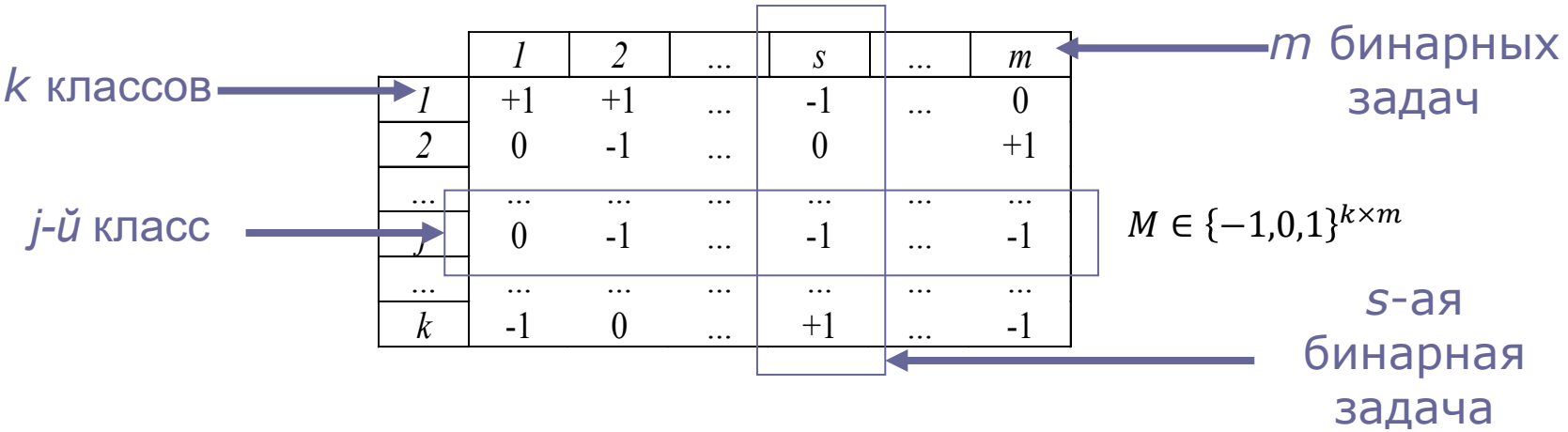
- Особенности:
  - вычислительную сложность можно контролировать числом столбцов
  - можно рассчитывать «уверенность» в прогнозе на основе расстояний до кодовых слов или по модели Брэдли-Терри
  - но качество зависит от M – если не угадали, то начинаем все заново

Много-классовые задачи: Error Correcting Output Coding (ECOC)

- Идея из теории информации и телекоммуникаций:
  - В телекоммуникациях: использовать избыточные коды для коррекции ошибок при передачи данных по «зашумленному» каналу
  - В машинном обучении: использовать избыточное число бинарных моделей (кодируется множество классов в супер-классы = группы) для повышения точности классификации, т.е. отклик избыточно кодируется
- Три этапа в ECOC:
  - Coding (кодирование): составление кодовой матрицы (coding matrix) и на ее основе обучающих выборок для бинарных задач
  - Learning (обучение): строятся бинарные модели
  - Decoding (декодирование): прогнозируется отклик (метка класса) на основе индивидуальных прогнозов бинарных классификаторов и кодовой матрицы.

Кодирование в ECOC

- Исходная задача с k классами конвертируется в m бинарных подзадач с помощью кодовой матрицы



	1	2	...	s	...	m
1	+1	+1	...	-1	...	0
2	0	-1	...	0		+1
...	...	...	...	...	...	...
j	0	-1	...	-1	...	-1
...	...	...	...	...	...	...
k	-1	0	...	+1	...	-1

- Каждый j-й класс имеет кодовое слово, соответствующее строке в матрице M
- Каждая s-я бинарная задача имеет 3 типа классов :
  - “positive”: $I_s^+ = \{y | y \in Y \wedge M(y,s) = +1\}$
  - “negative”: $I_s^- = \{y | y \in Y \wedge M(y,s) = -1\}$
  - “ignored”: $I_s^0 = \{y | y \in Y \wedge M(y,s) = 0\}$

Кодирование в ECOC

- “Разреженный” ECOC – общий случай:
  - “Плотный” ECOC – матрица без 0
  - “Каждый против всех”:

	1	*2*	...	...	*k-1*	*k*
1	+1	-1	-1	-1	-1	-1
2	-1	+1	-1	-1	-1	-1
...	-1	-1	+1	-1	-1	-1
...	-1	-1	-1	+1	-1	-1
k-1	-1	-1	-1	-1	+1	-1
k	-1	-1	-1	-1	-1	+1

“Каждый против каждого”:

	1	*2*	...	*k-1*	*k*	*k+1*	...	$\binom{k}{2}$
1	+1	+1	...	+1	0	0	...	0
2	-1	0	...	0	+1	+1	...	0
...	0	-1	...	0	-1	0	...	0
...	0	0	...	0	0	-1	...	0
...	0	0	...	0	0	0	...	+1
k	0	0	...	-1	0	0	...	-1

- Методы кодирования:
  - *Алгебраическая теория кодирования* (коды Хэмминга, например)
  - *Задаче-зависимое кодирование*: группы задает эксперт или ищутся на основе матрицы ошибок в “Каждый против всех” или “Каждый против каждого”
  - **Случайные коды**: случайные длинные «хорошо разделимые»

Обучение в ECOC

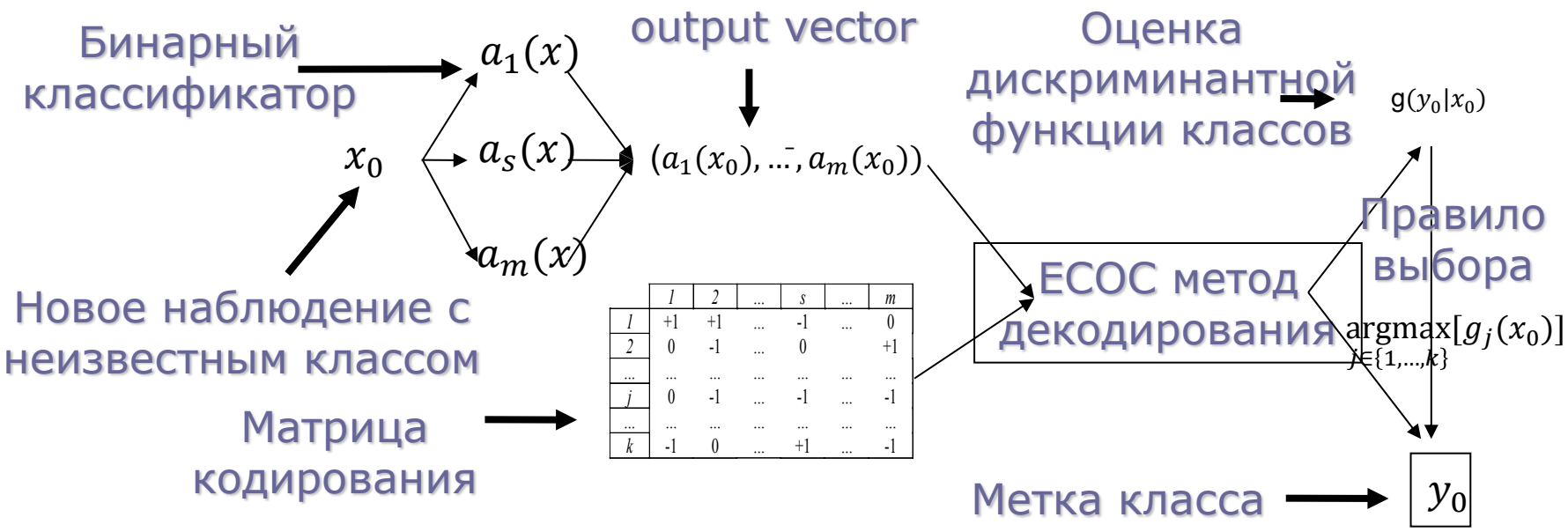
- m бинарных задач решаются независимо:
  - *s-й* бинарный классификатор отделяет *s-ые* “положительные” примеры от *s-х* “отрицательных, так что *s-й* тренировочный набор*:*

    $Z_s = \{(x_i, M(y_i, s)) | (x_i, y_i) \in Z \wedge (y_i \in I_s^- \vee y_i \in I_s^+)\} \in X \times \{-1, +1\}$
  - Строится бинарные классификаторы $a_s: X \to Y_{bin}$ и получаем m моделей бинарной классификации (m гипотез) $a_1(x), \ldots, a_m(x)$
- Типы бинарного отклика:
  - *Булевый* (hard-level): $Y_{hard} = \{-1, +1\}$
  - *Вещественный* (soft-level): $Y_{soft} = [-1,1]$
  - *Вероятностный*:

    $$Y_{prob} = \{-r_s(x) = P(a_s(x) \in I_s^+ | a_s(x) \in I_s^+ \cup I_s^-)$$

Декодирование в ECOC

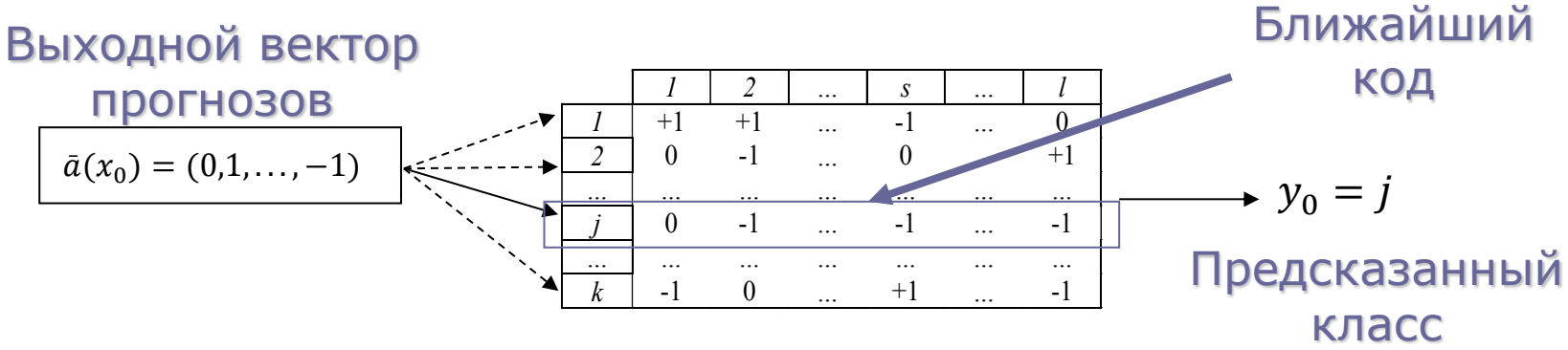
- Процесс прогнозирования:



- Применить все бинарные классификаторы, получить вектор откликов длины m
- Применить к нему выбранный метод декодирования и получить прогноз

Декодирование в ECOC

- На основе расстояний:
  - Поиск ближайшего к вектору откликов кодового слова



- Используются разные метрики:
  - Хэмминга (hard-level): $d_H(\bar{a}(x), M(y)) = \sum_{s=1}^{m}[1 - \mathrm{sgn}(M(y,s)a_s(x))]$
  - Минковского (probabilistic): $d_{L1}(\bar{r}(x), M(y)) = \sum_{s=1}^{m}|M(y,s) - r_s(x)|$
  - На основе функции потерь:

$$Loss(\bar{a}(x), M(y)) = \sum_{s=1}^{m} loss(M(y,s)a_s(x))$$

  - Вероятностные (например, на основе модели попарных сравнений Бредли-Терри) и др.

Пример

```
import pandas as pd
import numpy as np
import matplotlib.pyplot as plt
```

```
from sklearn.multiclass import OneVsRestClassifier
from sklearn.multiclass import OneVsOneClassifier
from sklearn.multiclass import OutputCodeClassifier
from sklearn.linear_model import LogisticRegression
from sklearn.datasets import load_iris
from sklearn.inspection import DecisionBoundaryDisplay
```

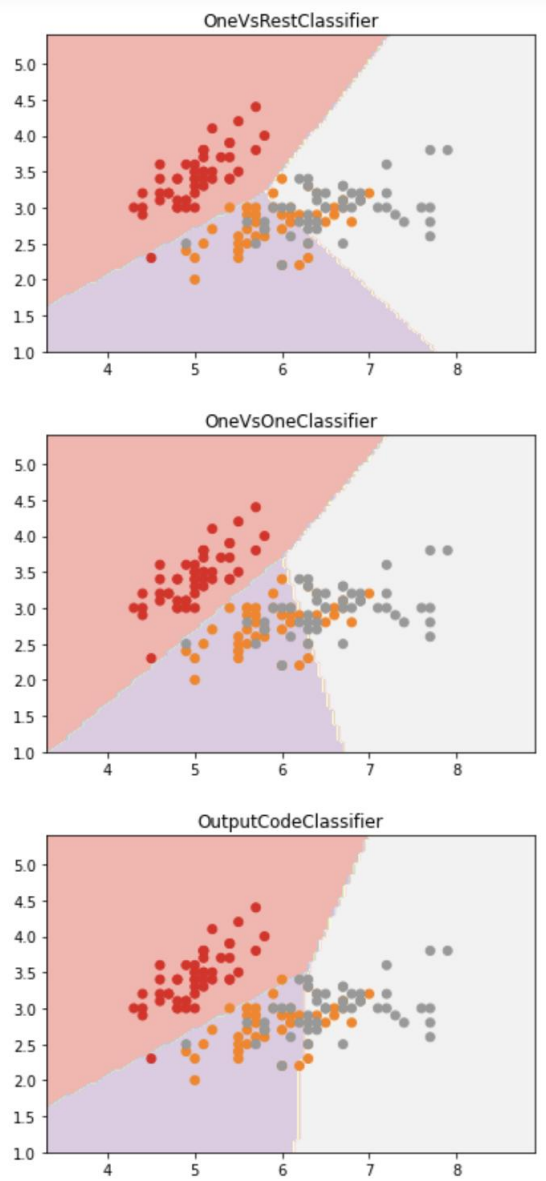
```
X, y = load_iris(return_X_y=True)
X = X[:, :2]
X.shape, y.shape
```

```
((150, 2), (150,))
```

```
ovr = OneVsRestClassifier(LogisticRegression()).fit(X, y)
ovo = OneVsOneClassifier(LogisticRegression()).fit(X, y)
ocs = OutputCodeClassifier(LogisticRegression(),code_size=5).fit(X, y)
print(ocs.code_book_)
```

```
[[ 1. -1. -1.  1. -1. -1.  1. -1. -1. -1.  1. -1.  1.  1.  1.]
 [ 1. -1. -1.  1. -1. -1.  1. -1. -1. -1.  1. -1. -1. -1.  1.]
 [-1.  1. -1.  1. -1. -1.  1.  1. -1. -1. -1.  1.  1. -1. -1.]]
```

```
for estimator in [ovr, ovo, ocs]:
    DecisionBoundaryDisplay.from_estimator(estimator, X, cmap="Pastel1")
    plt.scatter(*X.T, c=y, cmap="Set1")
    plt.title(type(estimator).__name__)
```



SVM с многоклассовой целевой функцией

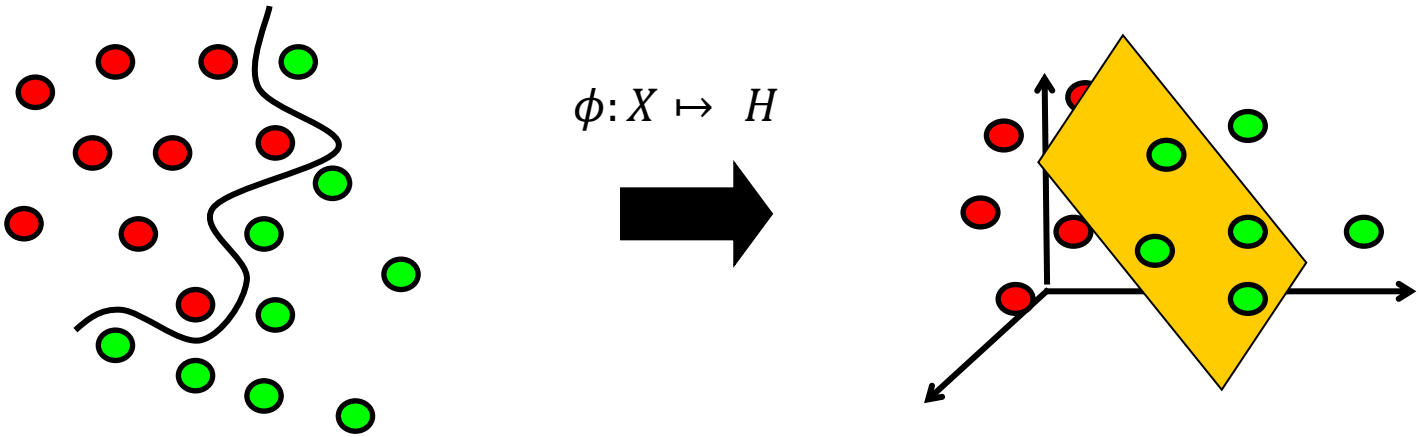
- Постановка задачи:
  - пусть k – число классов
  - вводим k гиперплоскостей и отдельно штрафуем за нарушение каждой границы и отдельно штрафуем каждую за ее сложность (максимизируем ширину каждой разделяющей полосы)
  - все штрафы суммируем в целевой функции:

$$\begin{cases} \min\limits_{w,w_0,\xi} \frac{1}{2}\sum\limits_{j=1}^{k}\left\|w^j\right\|^2 + \frac{C}{l}\sum\limits_{i=1}^{l}\sum\limits_{j\neq y_i}\xi_{ij} \\ \forall i,j: y_i\left(\langle w^{y_i}, x_i\rangle + w_0^{y_i}\right) \geq \langle w^{y_j}, x_i\rangle + w_0^{y_j} + 2 - \xi_{ij}, \xi_{ij} \geq 0 \end{cases}$$

- Особенности:
  - менее гибкие настройки по сравнению с остальными методам
  - вычислительно сложно – много двойственных переменных при большом наборе, проблема дисбаланса тоже есть
  - зато дискриминантные функции подгоняются вместе – прогнозы зависимы, не нужны корректировки

Случай существенно нелинейной границы между классами

- Следствие из Теоремы Ковера (о числе возможных линейных разбиений m точек в n-мерном пространстве):
  - В случае линейно неразделимых классов **нелинейное отображение** исходного пространства признаков в новое пространство признаков **большей** (или даже бесконечной) **размерности** увеличивает шансы линейного разделения в нем образов наблюдений из исходного пространства признаков
  - Новое пространство называется «спрямляющим»



Нелинейный метод опорных векторов

- Основная идея:
  - Нелинейное преобразование исходного пространства признаков в новое пространство большей или бесконечной размерности.
  - Разделяющая плоскость строится в преобразованном пространстве
  - В новом пространстве зависимость линейна, в исходном не линейна
- Постановка задачи оптимизации и модель C-SVM (и nu-SVM) не зависят от признаков, а только от их скалярного произведения:
  - Целевая функция C-SVM:

$$W(\alpha) = \sum_{i=1}^{l} \alpha_i - \frac{1}{2} \sum_{i,j=1}^{l} \alpha_i \alpha_j y_i y_j \langle x_i, x_j \rangle$$

Скалярное произведение

  - Решающая функция: $a(x) = sign\ \left(\sum_{i=1}^{n} \alpha_i y_i \langle x_i, x \rangle + w_0\right)$
- Kernel trick (подмена ядра):
  - Замена скалярного произведения на другое ядро неявно преобразует исходное пространство признаков в спрямляющее **без** необходимости явного **пересчета признаков**

Спрямляющее пространство для метода опорных векторов

- Спрямляющее пространство:
  - Преобразование исходного пространства признаков X в гильбертово пространство H с помощью отображения $\phi: X \to H$ реализуется **неявно**, за счет замены скалярного произведения в X на функцию **ядра** $K: X \times X \to \mathbb{R}$, которая является скалярным произведением в H: $\forall x_i, x_j: K(x_i, x_j) = \langle \phi(x_i), \phi(x_j) \rangle = \langle x_i, x_j \rangle_H$
- Функция $K: X \times X \to \mathbb{R}$ является ядром тогда и только тогда K:
  - симметрична: $\forall x_i, x_j: K(x_i, x_j) = K(x_j, x_i)$
  - неотрицательно определена: $\forall f: X \to \mathbb{R}$:

$$\int_X \int_X K(x_i, x_j) f(x_i) f(x_j) dx_i dx_j \geq 0$$

- Нелинейный ядерный C-SVM (для nu-SVM аналогично):

$$W(\alpha) = \sum_{i=1}^{l} \alpha_i - \frac{1}{2} \sum_{i,j=1}^{l} \alpha_i \alpha_j y_i y_j \boldsymbol{K(x_i, x_j)}, a(x) = sign\left(\sum_{i=1}^{l} \alpha_i y_i \boldsymbol{K(x_i, x_j)} + w_0 \right)$$

Ядра

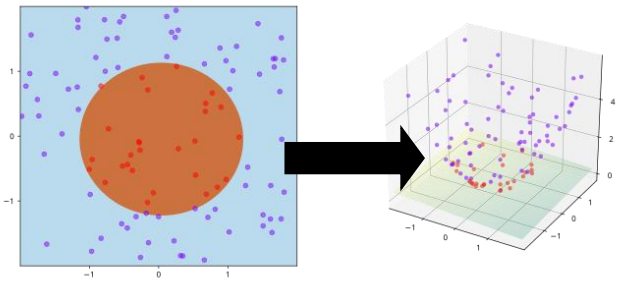
Примеры популярных ядер

- Линейное ядро:
  - $K(x_i, x_j) = \langle x_i, x_j \rangle$ - спрямляющее пространство совпадает с исходным
- Полиномиальное ядро степени d со сдвигом b:
  - $K(x_i, x_j) = \left(b + \langle x_i, x_j \rangle\right)^d$ - разделяющая поверхность d -го порядка
  - параметр *d* контролирует «сложность» модели, а значит K – тоже **регуляризатор**
  - H эквивалентно пространству, полученному «ручной» генерацией полиномиальных признаков
  - Частный случай $b=0$ (не получаем полный полином, только члены степени d), в результате H пространство мономов размерности C_d^{d+m-1}, простой пример при $b=0$, $d=2$, $m=2$:

$$\phi: \mathbb{R}^2 \to H = \mathbb{R}^3$$

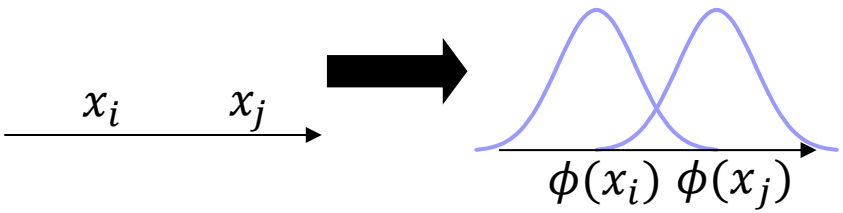
$$\phi: \left((x_i, x_j)\right) \to \left(x_i^2, x_j^2, x_i x_j\right)$$

$$K\left(x_i, x_j\right) = \langle x_i, x_j \rangle^2$$

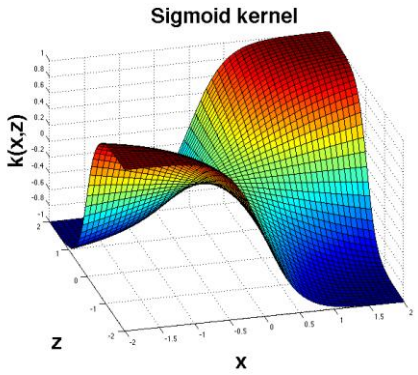


Примеры популярных «нейросетевых» ядер

- Гауссовская (RBF kernel):
  - $K(x_i, x_j) = \exp(-\gamma\left(x_i - x_j\right)^2)$ с параметром ширина ядра γ, который «штрафует» расстояние между объектами
  - Чем больше γ, тем сложнее граница – опять ядро-**регуляризатор**
  - Спрямляющее пространство бесконечномерное пространство функций (нельзя явно выразить все координаты)

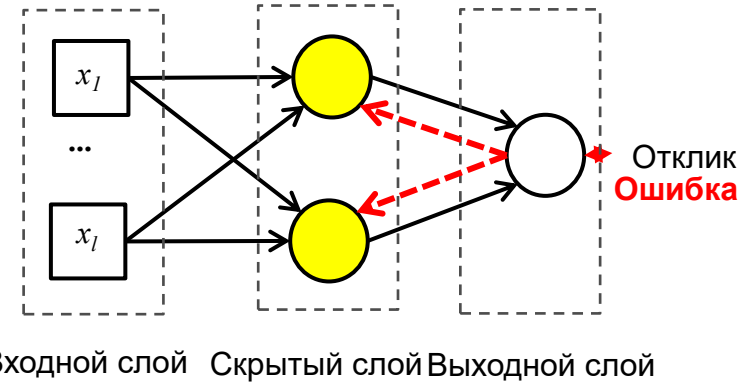


- Сигмоидальное ядро (hyperbolic tangent kernel):
  - $K(x_i, x_j) = \tanh(a\langle x_i, x_j\rangle + b)$ с параметрами a и b
  - формально является ядром не при всех значениях параметров, но тоже **регуляризирует** модель
  - Спрямляющее пространство – геодезическое (на эллипсоиде)



Сходство и отличия SVM и простых нейросетей

- Нейронный сети прямого распространения:
  - Сигнал передается от входного уровня к выходному по «слоям»
  - Внутри нейронов - расчет нелинейных выходных функций активации, от комбинации входных переменных, где каждый вход следующего слоя - композиции выходов предыдущего.
  - Нет задержек, времени, т.к. нет циклов (в отличии от рекуррентных сетей)
  - Модель – по сути параметрическая, уравнение зависимости отклика от предикторов определяется графом сети и функциями активации
  - Обучение – целевая функция (эмпирический риск) определяется типом и распределением отклика (как в GLM)
  - Применяются разные методы оптимизации, популярный – обратное распространение ошибки (SGD), но используют и методы 2 порядка

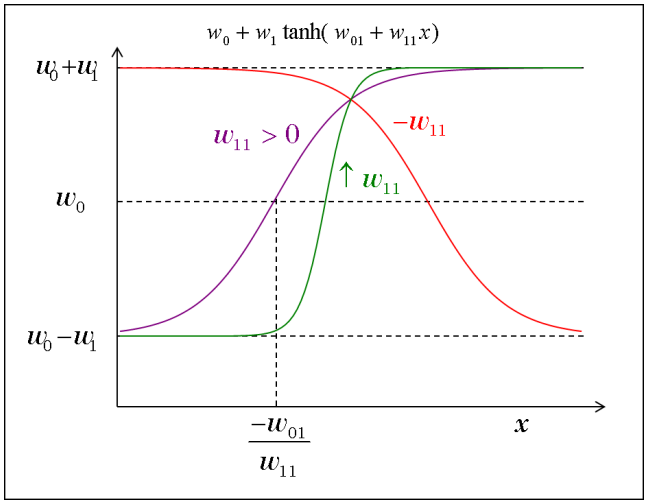


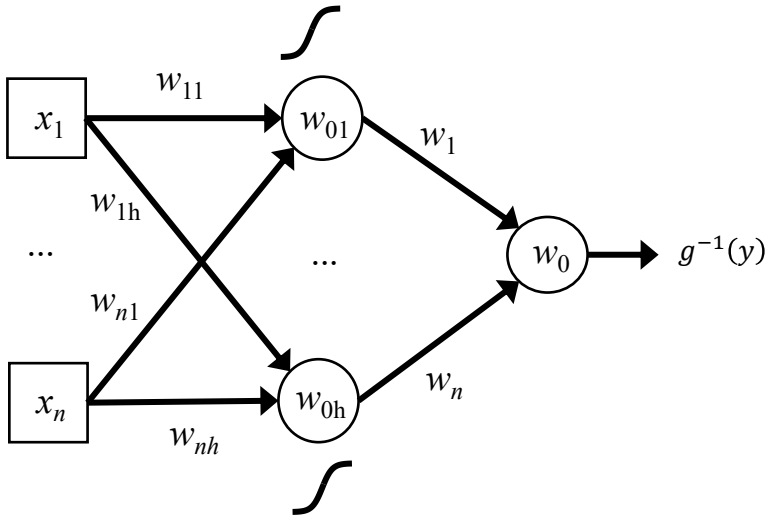
Сходство и отличия сигмоидального SVM и однослойного персептрона

- Однослойный персептрон (SLP):
  - Один скрытый слой с сигмоидальными функциями активации
  - Архитектура определяет параметрическую модель и решающую функцию как в SVM:

$$g^{-1}(y) = w_0 + \sum_{i=1}^{h} w_i \tanh\left(w_{0i} + \sum_j w_{ij} x_j\right)$$

- Но с SVM принципиальные отличия:
  - h - число SV, заранее не известно
  - w_{0i} параметр ядра, не подгоняется
  - w_{ij} - координаты опорных векторов
  - w_i - произведение метки и множителя Лагранжа опорных векторов

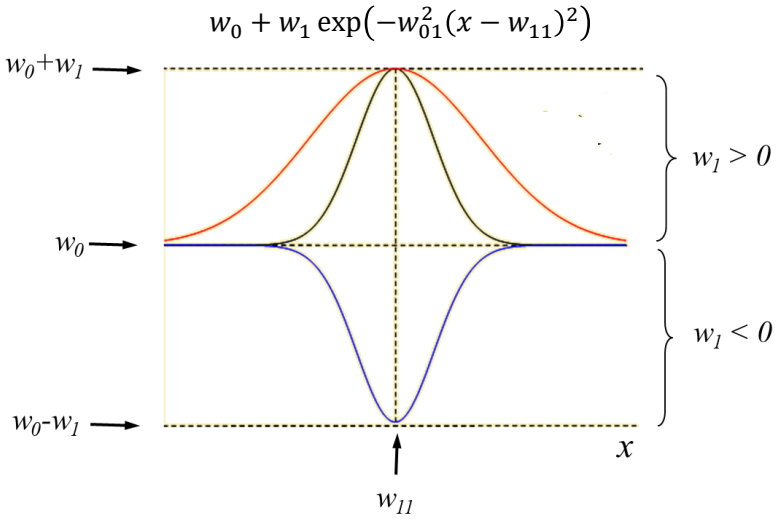




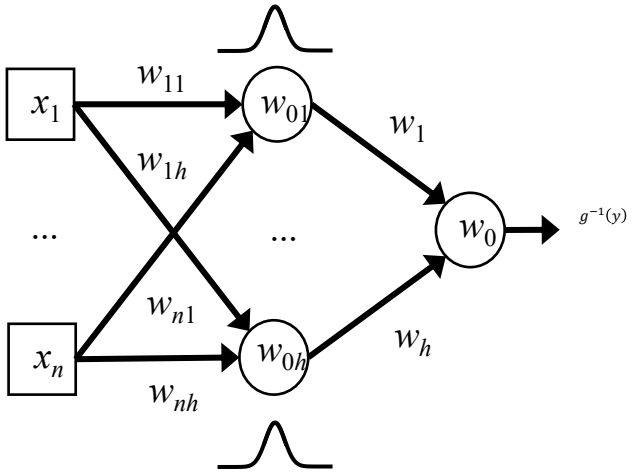
Сходство и отличия SVM с гауссовским ядром и RBF нейросети

- RBF нейросеть:
  - Один скрытый слой с функциями активации Гаусса
  - Архитектура определяет параметрическую модель и решающую функцию как в SVM:

$$g^{-1}(y) = w_0 + \sum_{i=1}^{h} w_i e^{-w_{0i}\left(\sum_j (w_{ij} - x_j)^2\right)}$$

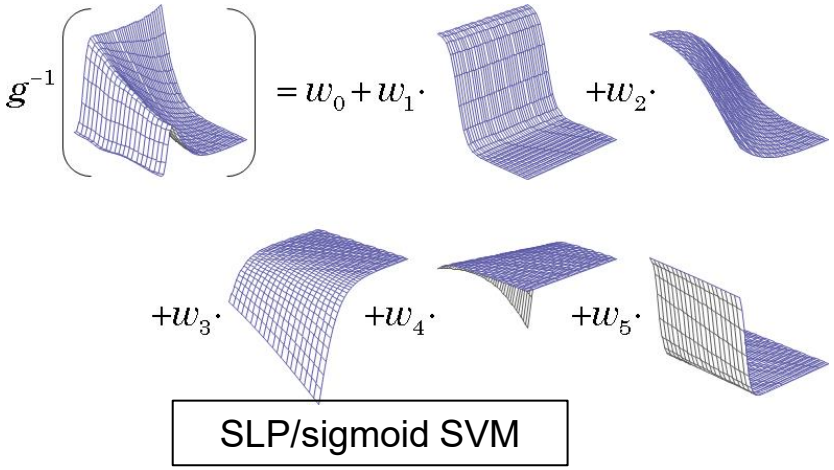


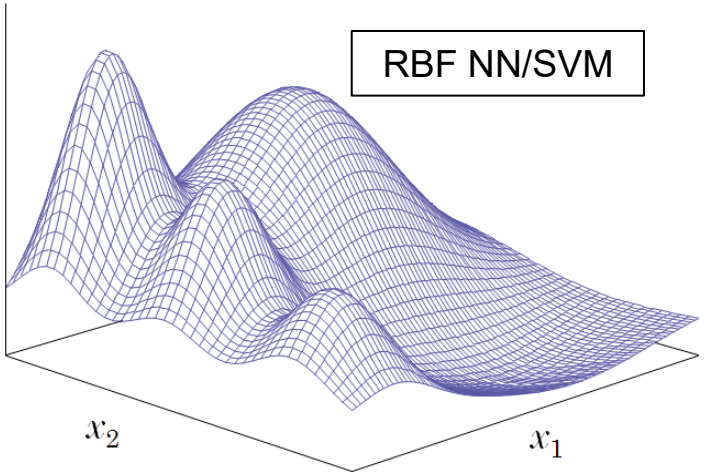
- Но с SVM принципиальные отличия:
  - h - число SV, заранее не известно
  - w_{0i} параметр ядра, не подгоняется
  - w_{ij} - координаты опорных векторов, а не прототипов нейронов
  - w_i - произведение метки и множителя Лагранжа опорных векторов



Сходство и отличия SVM и простых нейросетей

- Сходство:
  - структурно одинаковые решающие функции и соответственно похожие формы искомых зависимостей (но параметры ищутся по-разному и априори зафиксированы разные параметры, у нейросетей более гибкий набор параметров):



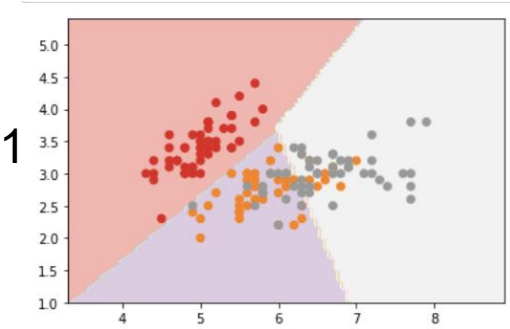


- Ключевые преимущества SVM:
  - **единственное решение** (при любом начальном приближении)
  - более эффективные и контролируемые методы оптимизации

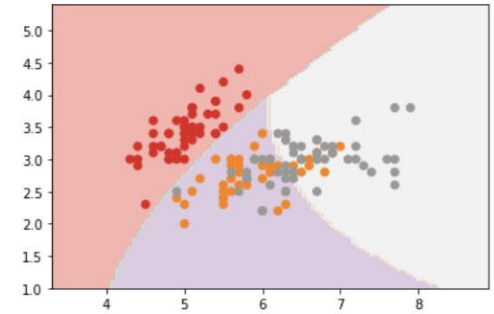
Влияние ядра

```
for degree in [1, 3, 5]:
    DecisionBoundaryDisplay.from_estimator(
        SVC(kernel="poly", degree=degree).fit(X, y), X, cmap="Pastel1")
    plt.scatter(*X.T, c=y, cmap="Set1")
```

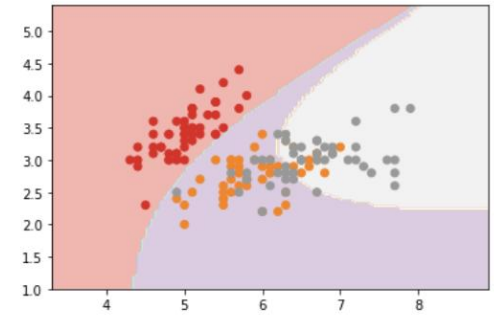
Degree=1



Degree=3

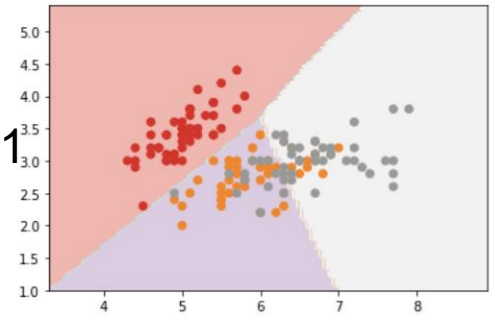


Degree=5

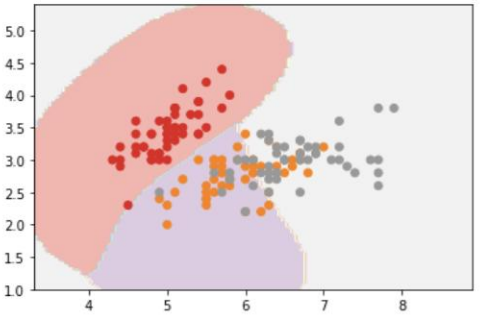


```
for gamma in [0.1, 1, 10]:
    DecisionBoundaryDisplay.from_estimator(
        SVC(kernel="rbf", gamma=gamma).fit(X, y), X, cmap="Pastel1")
    plt.scatter(*X.T, c=y, cmap="Set1")
```

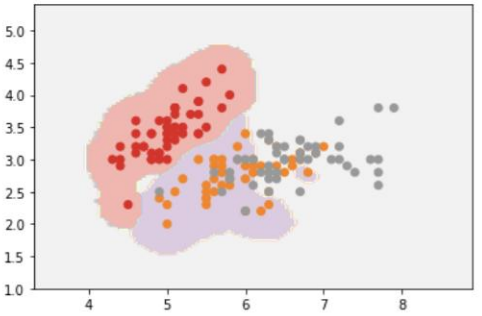
Gamma=0.1



Gamma=1



Gamma=10

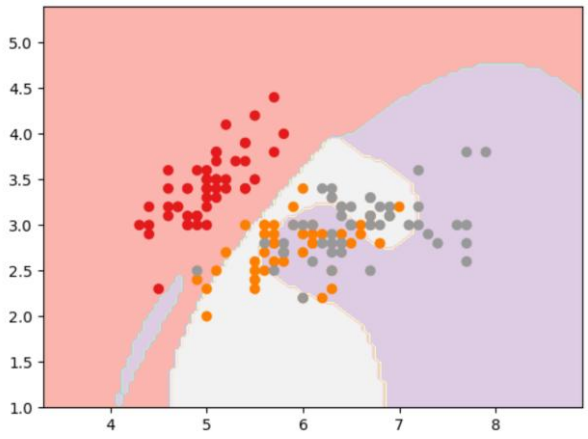


Влияние параметра штрафа на сложность

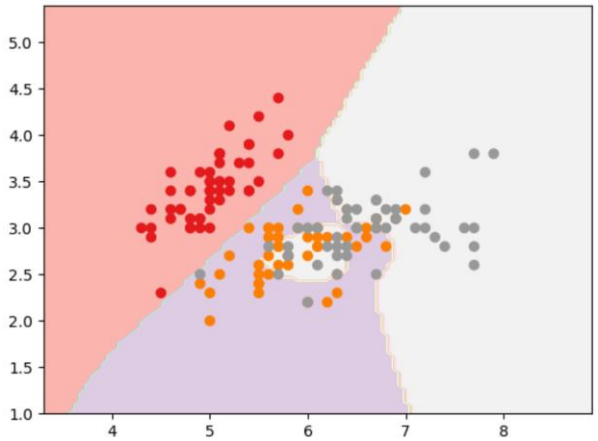
```python
from sklearn.svm import NuSVC
```

```python
X, y = load_iris(return_X_y=True)
X = X[:, :2]
```

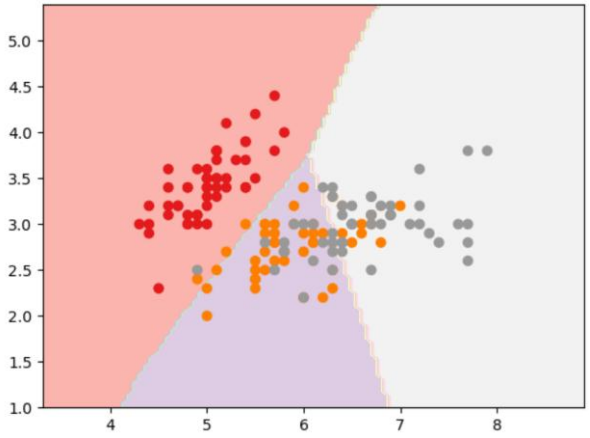
```python
for i, nu in enumerate([0.1, 0.5, 0.9]):
    DecisionBoundaryDisplay.from_estimator(
        NuSVC(nu=nu, kernel="rbf").fit(X, y), X, cmap="Pastel1")
    plt.scatter(*X.T, c=y, cmap="Set1")
```



Nu=0.1



Nu=0.5

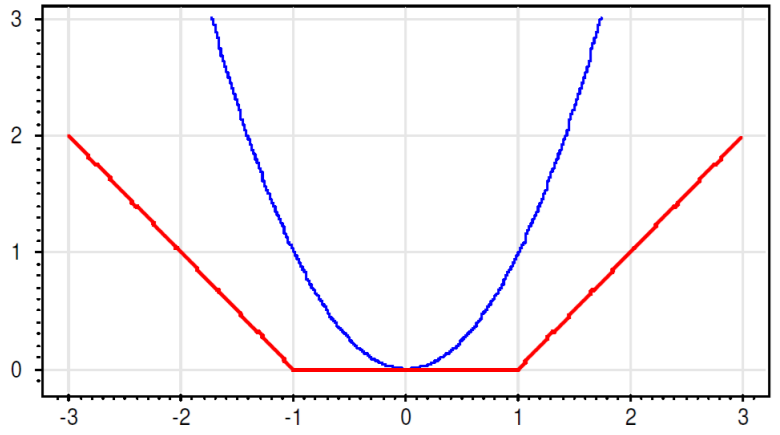


Nu=0.9

Нелинейная регрессия SVM

- ϵ -чувствительная функция потерь определяется как (линейное) расстояние до отклика за вычетом порога:

$$L_\epsilon(y, g(x)) = \begin{cases} 0, & |g(x) - y| < \epsilon \\ |g(x) - y| - \epsilon, & |g(x) - y| \geq \epsilon \end{cases}$$

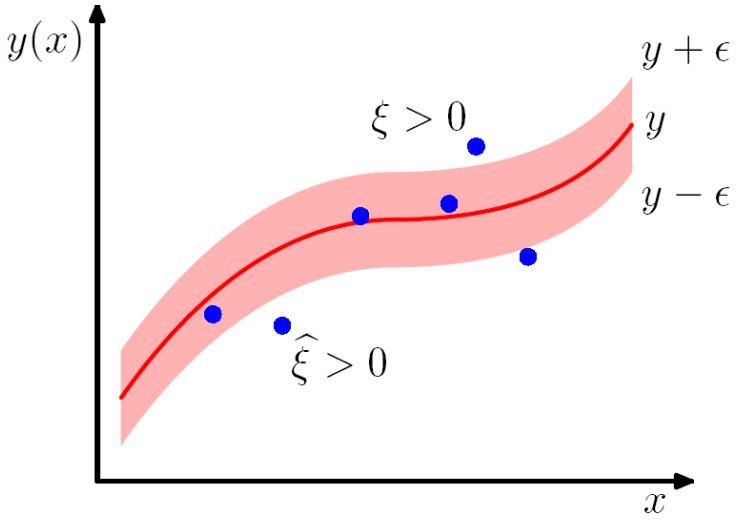


- Точки «внутри» полосы отступа от отклика – не штрафуются
- Уравнение регрессии задается как:

$$g(x) = \langle w, x \rangle_H + w_0$$

- Формулируется регуляризированный эмпирический риск:

$$\min_{w, w_0} C \sum_{i=1}^{l} L_\epsilon(g(x_i), y_i) + \frac{1}{2}\|w\|^2$$



Прямая задача оптимизации

- ϵ -формулировка (прямая задача):

штраф за сложность

$$\begin{cases} \min\limits_{\xi^{+/-},w,w_0} \frac{1}{2}\|w\|^2 + C\sum\limits_{i=1}^{l}(\xi_i^+ + \xi_i^-) \\ (\langle w, x_i\rangle_H + w_0) - y_i \le \epsilon + \xi_i^+, \xi_i^+ \ge 0 \\ y_i - (\langle w, x_i\rangle_H + w_0) \le \epsilon + \xi_i^-, \xi_i^- \ge 0 \end{cases}$$

штраф за ошибку

- ν -формулировка (прямая задача) –ϵ не метапараметр:

$$\begin{cases} \min\limits_{\epsilon,\xi^{+/-},w,w_0} \frac{1}{2}\|w\|^2 + C\left(\frac{1}{l}\sum\limits_{i=1}^{l}(\xi_i^+ + \xi_i^-) + \epsilon\nu\right) \\ (\langle w, x_i\rangle_H + w_0) - y_i \le \epsilon + \xi_i^+, \xi_i^+ \ge 0, \\ y_i - (\langle w, x_i\rangle_H + w_0) \le \epsilon + \xi_i^-, \xi_i^- \ge 0 \\ \epsilon \ge 0 \end{cases}$$

  - ν-свойства аналогичны классификации: верхняя граница пропорции опорных векторов – ошибок и нижняя граница пропорции опорных векторов – граничных, асимптотически достигаются

Двойственная задача ϵ - SVR

- Аналогично задачи классификации:
  - выписываем Лагранжиан, дифференцируем по прямым переменным, подставляем в Лагранжиан
  - с учетом условий ККТ переходим к двойственной, она не зависит от переменных прямой задачи и является задачей квадратичного программирования
- Двойственная задача:

$$\max_{\alpha^+,\alpha^-} -\frac{1}{2}\sum_{i,j=1}^{l}\left(\alpha_j^+ - \alpha_j^-\right)\left(\alpha_i^+ - \alpha_i^-\right)K(x_j,x_i) - \epsilon\sum_{i=1}^{l}\left(\alpha_i^+ + \alpha_i^-\right) + \sum_{i=1}^{l} y_i\left(\alpha_i^+ - \alpha_i^-\right)$$

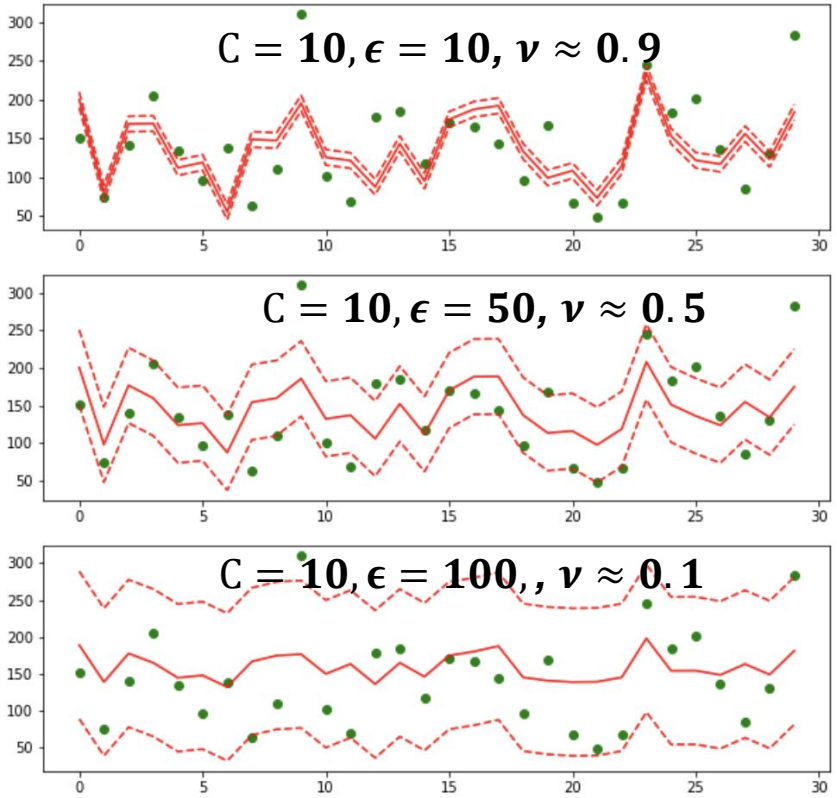
$$\sum_{i=1}^{l} y_i\left(\alpha_i^+ - \alpha_i^-\right) = 0, 0 \le \alpha_i^+ \le \frac{C}{l}, 0 \le \alpha_i^- \le \frac{C}{l}$$

- Результат:
  - Опорные вектора: $\alpha_i^+ = C/l$ или $\alpha_i^- = C/l$ для ошибок (за ϵ полосой)
  - $\alpha_i^+\alpha_i^- = 0$, $w_0 = \frac{1}{l}\left(\sum_{\alpha_i^+>0}\left(y_j - K(x,x_i) - \epsilon\right) + \sum_{\alpha_i^->0}\left(y_j - K(x,x_i) + \epsilon\right)\right)$
  - Функция регрессии $g(x) = \sum_{i\in SV}\left(\alpha_i^+ - \alpha_i^-\right)K(x,x_i) + w_0$

Двойственная задача ν - SVR

- Аналогичный вывод:

$$\begin{cases} \max\limits_{\alpha^+,\alpha^-} \sum\limits_{i=1}^{l} y_i\left(\alpha_i^+ - \alpha_i^-\right) - \\ -\frac{1}{2}\sum\limits_{i,j=1}^{l}\left(\alpha_j^+ - \alpha_j^-\right)\left(\alpha_i^+ - \alpha_i^-\right)K(x_j, x_i) \\ \sum\limits_{i=1}^{l} y_i\left(\alpha_i^+ - \alpha_i^-\right) = 0, \\ 0 \le \alpha_i^+ \le \frac{C}{l}, 0 \le \alpha_i^- \le \frac{C}{l} \\ \sum\limits_{i=1}^{l} y_i\left(\alpha_i^+ + \alpha_i^-\right) \le \nu C \end{cases}$$



- Функция регрессии $g(x) = \sum_{i \in SV}\left(\alpha_i^+ - \alpha_i^-\right)K(x, x_i) + w_0$
- Связь ν – SVR и ϵ – SVR: при одинаковых C, w, w_0 однозначно связаны $\boldsymbol{\nu} \Leftrightarrow \boldsymbol{\epsilon}$, все равно какой из них задавать

Методы синтеза ядер

- Популярные методы:
  - Линейная комбинация (с положительными весами) ядер – ядро
  - Произведение ядер - ядро
  - RBF от любого расстояния – ядро (кстати, ядро задает расстояние в спрямляющем пространстве: $\sqrt{K(x_i, x_i) + K(x_j, x_j) - 2K(x_i, x_j)}$
  - $\forall \phi: X \to \mathbb{R}$, $K(x_i, x_j) = \phi(x_i)\phi(x_j)$ – ядро
  - $\forall \phi: X \to X$, $K(x_i, x_j) = K_{base}(\phi(x_i), \phi(x_j))$ – ядро, если K_{base} - ядро
  - $\forall s: X \times X \to \mathbb{R}$ симметричная и интегрируемая, то $\mathrm{K}(x_i, x_j) = \int_X s(x_i, z)\, s(x_j, z) dz$ – ядро
  - Если K_{base} - ядро и $f: \mathbb{R} \to \mathbb{R}$ представима в виде сходящегося степенного ряда с неотрицательными коэффициентами, то $K(x_i, x_j) = f(\mathrm{K}_{base}(x_i, x_j))$– ядро
  - Если есть вероятностная модель, где $p(x|\theta)$– правдоподобие, а M – положительно определенная квадратная симметричная матрица, то $K(x_i, x_j) = \nabla_\theta \ln p(x_i|\theta)^T M^{-1} \nabla_\theta \ln p(x_j|\theta)$ - ядро

Ядра для сложных структур (пример – спектральное ядро)

- Для работы с текстовыми данными:
  - можно использовать векторную модель мешка слов и любое стандартное ядро над ней
  - но такая модель не учитывает порядок слов и расстояние между ними
- Можно построить ядро, учитывающее порядок и расстояния:
  - пусть Σ – фиксированный алфавит, а множество всевозможных строк длины n есть Σ^n, тогда множество всех строк $\Sigma^* = \bigcup_{n=0}^{\infty} \Sigma^n$
  - спрямляющее пространство H, такое, что каждая координата связана с некоторой допустимой строкой u в Σ,
  - тогда для любой строки s ее u-я координата может быть задана как

$$[\phi_n(s)]_u = \sum_{i:s(i)=u} \lambda^{l(i)}$$

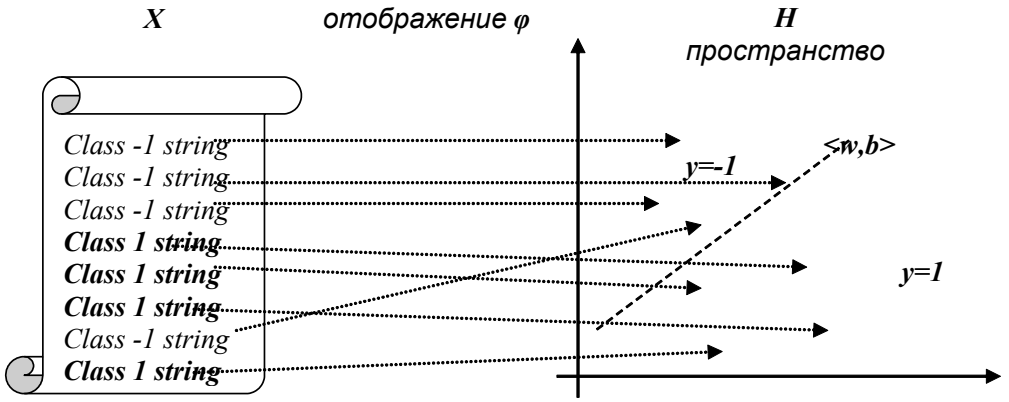
  - где i – множество индексов, формирующее подстроку из s,
  - $l(i)$ - расстояния между первым и последним индексом
  - $0 < \lambda < 1$ – весовой параметр, контролирует разреженность подстроки

Ядра для сложных структур (пример – спектральное ядро для строк)

- Пример: $[\phi_3(\text{"N}\mathbf{asd}\text{aq"})]_{\text{asd}} = \lambda^3$, а $[\phi_3(\text{"l}\mathbf{ass\ d}\text{as"})]_{\text{asd}} = 2\lambda^5$
- Строковое ядро для строк s и t длинны n:

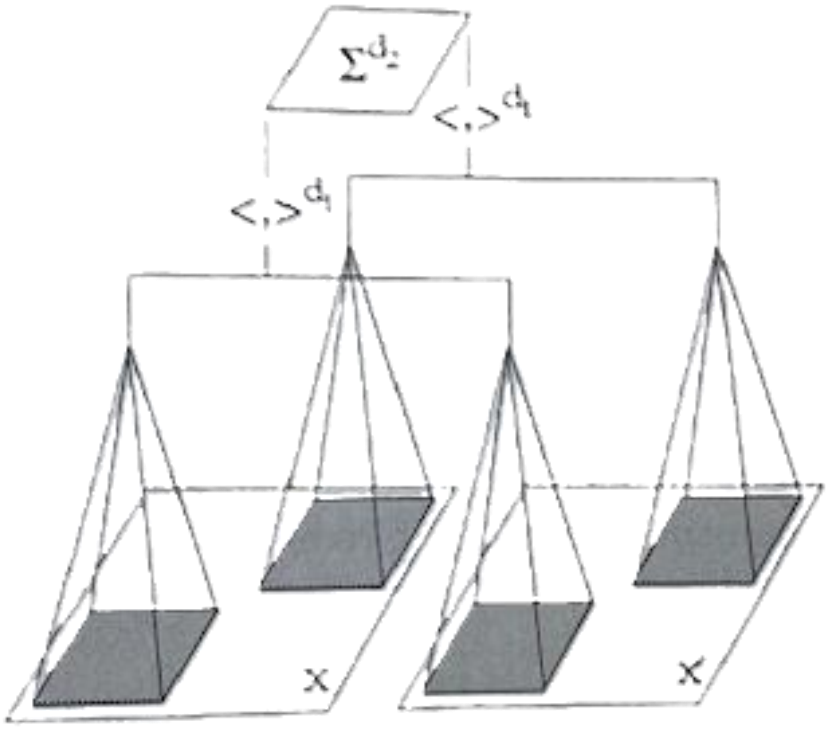
$$K_n(s,t) = \sum_{u \in \Sigma^n} [\phi_n(s)]_u [\phi_n(t)]_u = \sum_{u \in \Sigma^n} \sum_{i,j:s(i)=t(j)=u} \lambda^{l(j)+l(i)}$$

- Строковое ядро для строк s и t произвольной длинны:
  - с набором параметров «веса» длин $c_n \geq 0$: $K(s,t) = \sum_n c_n K_n(s,t)$
- Есть эффективный алгоритм динамического программирования для расчета таких ядер
- Примеры применения:
  - ДНК классификация
  - SMS,chat, anti-spam
  - language identification



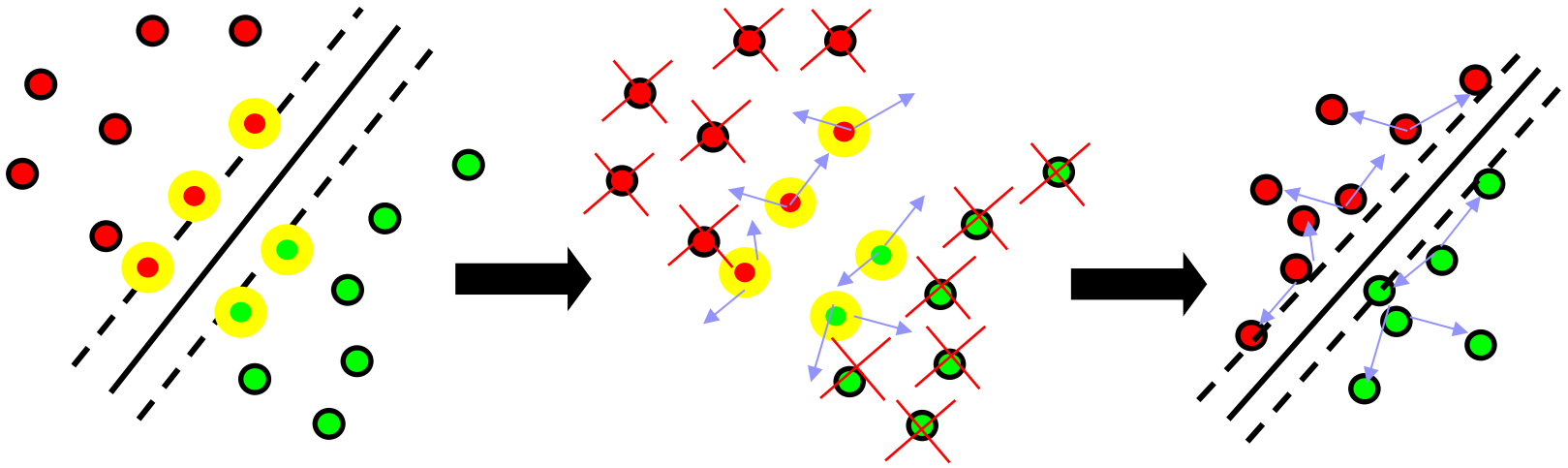
Локальные ядра для пространственных признаков (изображений, строк, ДНК ...)

- Аналог свертки в CNN:
  - Считаются ядра по локальным областям в пространстве признаков
  - Могут дополнительно учитываться веса признаков на основе удаленности от центра области локализации
  - Полученные значения агрегируются так, чтобы результат оставался ядром
  - Может быть несколько уровней «вложенности»



Augmentation в SVM – виртуальные опорные вектора

- Ключевая особенность SVM – нет необходимости «зашумлять» всю выборку:
  - решается задача без augmentation
  - «зашумляются» только опорные вектора
  - «искаженные» опорные вектора называются **виртуальными**
  - после этого строится классификатор только на них
  - можно повторить несколько раз



Общие особенности методов оптимизации для SVM

- Основные вычислительные затраты:
  - Расчет матрицы ядра (для экономии памяти кэшируют поэлементно или по строкам или по блокам матрицы ядра)
  - Численный метод оптимизации для задачи квадратичного программирования (когда остановится и какой использовать?)
- Если g – решающая функция C-SVM, то:
  - можно оценить эмпирический риск с регуляризацией:

$$Q_{reg}(g) \geq Q_{reg}(g_{opt}) \geq Q_{reg}(g) - \frac{1}{Cl} Gap(g)$$

  - сходимость обычно оценивают через $Gap(g)$
  - С-классификация $Gap(g) = \sum_j C \max\left(0,1 - y_j g(x_j)\right) + \alpha_j (y_j g(x_j) - 1)$
  - ϵ-регрессия:

$$Gap(g) = \sum_j C\left(\xi_j^+ + \xi_j^-\right) + \alpha_j^+ (\epsilon + g(x_j) - y_j) + \alpha_j^- (\epsilon - g(x_j) + y_j)$$

  - есть оценки $Gap(g)$ и для ν – SVM

Методы оптимизации для задачи квадратичного программирования

- Задача квадратичного программирования:

  Q – симметричная матрица

$$\begin{cases} \min\limits_{\alpha} \frac{1}{2}\alpha^T Q\alpha + c^T\alpha \\ A\alpha \le b \end{cases}$$

- SVM особенности:
  - Q – строится на основе матрицы ядер K и можно попытаться ее упростить
  - Существенная часть переменных или не опорные вектора ($\alpha = 0$) или опорные вектора ошибки ($\alpha = C$), если найдем, то можно не пересчитывать

Градиентный спуск для задачи квадратичного программирования в SVM

- Постановка задачи (g – решающая функция SVM):

$$Q_{reg} = \frac{1}{l}\sum_i L\left(y_i, g(x_i)\right) + \frac{\gamma}{2}||g||^2, \nabla Q_{reg} = \frac{1}{l}\sum_i L'\left(y_i, g(x_i)\right) + \gamma g$$

- Шаг градиента для дискриминантной функции (η-длина шага):

$$g \leftarrow g - \eta\ \nabla Q_{reg} = (1 - \eta\gamma)g - \frac{\eta}{l}\sum_i L'\left(y_i, g(x_i)\right)K(x_i, .)$$

- Шаг градиента для коэффициентов дискриминантной функции:

$$\alpha \leftarrow \alpha - \eta(\gamma\alpha + L'\left(y_i, g(x_i)\right))$$

  - для классификации $L'\left(y_i, g(x_i)\right) = \begin{cases} -y_i, y_i g(x_i) < 1 \\ 0, \text{иначе} \end{cases}$
  - для регрессии $L'\left(y_i, g(x_i)\right) = \begin{cases} 1, g(x_i) - y_i > \epsilon \\ -1, y_i - g(x_i) > \epsilon \\ 0, \text{иначе} \end{cases}$
  - для не опорных векторов α остается 0 …

Жадная разреженная аппроксимация матрицы ядра

- Основная идея – уменьшить размерность матрицы ядра:
  - можно через матричные разложения, но вычислительно затратно
  - поэтому исходную матрицу ядра $K^{l\times l}$ приближают линейной комбинацией подмножеств ее строк и столбцов (без потери общности можем считать их первыми $m \ll l$), тогда:

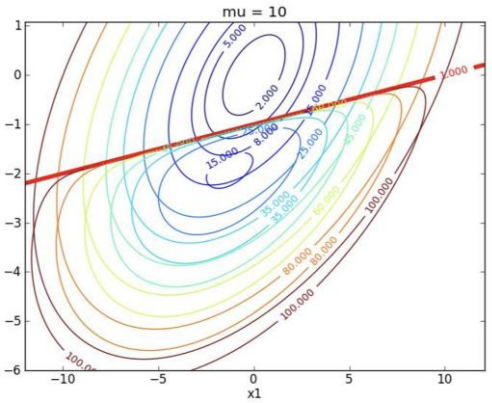
$$\left\|K-\widetilde{K}\right\|^2 \to \min_{\beta} \Rightarrow \beta_{opt} = K^{l\times m}(K^{m\times m})^{-1}, \forall i,j: \widetilde{K}(x_i,x_j) = \sum_{s=1}^{m} \beta_{is} K(x_i,x_s)$$

  - Решаем задачу меньшей размерности с $K^{m\times m}$, и выражаем решение исходной задачи через нее
- Как выбрать индексы для m?
  - есть простые процедуры $\left(K^{s+1\times s+1}\right)^{-1} \leftarrow (K^{s\times s})^{-1}$ и $\beta_{opt}^{l\times s+1} \leftarrow \beta_{opt}^{l\times s}$
  - жадный алгоритм: начинает с пустого множества индексов, берет небольшое случайное подмножество индексов, находит среди них лучший, добавляет его, берет следующее случайное подмножество и так далее пока не найдет m индексов

Методы внутренней точки для SVM

- Основные свойства (неформально):
  - Эффективны для небольших задач, полиномиальная сходимость
  - Для некоторых ядер можно эффективно сократить (аппроксимировать) матрицу ядра и распараллелить оптимизацию в том числе по данным
  - Выбор начального приближения «внутри» ограничений и последовательное приближение решения (например, с помощью ньютоновского метода) с штрафом за приближение к границе
  - Есть много вариантов для SVM, например, барьерные методы
- Упрощенный пример барьерного метода:
  - сводим задачу условной оптимизации $\min_x f(x)$, при $cx \leq 0$ к безусловной, добавляя ограничения в **барьерную функцию** с параметром μ:

$$\min_x f(x) + \boldsymbol{\mu \sum_j log(-c_j(x))}$$



  - последовательно пересчитываем x, делая шаг методом Ньютона, и меняем $\mu \to 0$ по определенной стратегии (например, $\mu^{(t+1)} \leftarrow \mu^{(t+1)}\sigma$, $\sigma \in (0,1)$), после каждого пересчета x

Методы активных множеств

- Покоординатный спуск в пространстве переменных:
  - Решаем стандартную задачу SVM квадратичного программирования:

$$\begin{cases} \min\limits_{\alpha} \frac{1}{2}\alpha^T Q\alpha + c^T\alpha \\ A\alpha = b, \{0 \le \alpha \le u\} \text{ или } \{\alpha + t = u, \alpha \ge 0, t \ge 0\} \end{cases}$$

  - «Замораживаем» часть переменных с индексами $S_f \subset [l]$, остальные индексы – рабочее (активное) множество $S_w = [l] \backslash S_f$
  - Получаем:

$$Q = \begin{bmatrix} Q_{ww} & Q_{fw} \\ Q_{wf} & Q_{ff} \end{bmatrix}, c = (c_w, c_f), A = [A_w\ A_f], u = (u_w, u_f)$$

  - Получаем и решаем такую же задачу, но меньшей размерности по α_w и с измененными граничными условиями: **«заморожено» - не оптимизируется**

$$\begin{cases} \min\limits_{\alpha_w} \frac{1}{2}\alpha_w^T Q_{ww}\alpha_w + [c_w + Q_{wf}\alpha_f]^T\alpha_w + \frac{1}{2}\alpha_f^T Q_{ff}\alpha_f + c_f^T\alpha_f \\ A_w\alpha_w = b - A_f\alpha_f, \{0 \le \alpha_w \le u_w\} \text{ или } \{\alpha_w + t_w = u_W, \alpha_w \ge 0, t_w \ge 0\} \end{cases}$$

Методы активных множеств

- Основная проблема:
  - как выбрать индексы для активного множества?
  - приведет ли выбранная стратегия обновления активного множества к сходимости к глобальному оптимуму?
- Стратегии выбора (и перебора) индексов:
  - минимизация штрафа за ошибки (нарушения граничных условий)
  - максимизация градиента прямой или двойственной целевой функции
  - на основе улучшения Лагранжиана напрямую
- Популярный подход - последовательная минимальная оптимизация (Sequential minimal optimization, **SMO**)
  - В активном множестве только **два индекса** – позволяет получить аналитическое решение малой задачи для обоих (без итераций)
  - Перебираются пары индексов (возможно с дополнительными эвристиками для не рассмотрения части наблюдений)
  - Находятся новые значения множителей Лагранжа для каждой пары и значение Лагранжиана, по нему выбирается лучшая пара

Выводы по SVM

- SVM для классификации строит разделяющую гиперплоскость:
  - с максимально широкой границей в спрямляющем пространстве признаков, неявно индуцированном kernel функцией, используемой в качестве скалярного произведения
- SVR строит:
  - линейную в спрямляющем пространстве и (возможно) нелинейную в исходном пространстве признаков регуляризованную регрессию, используя ϵ –толерантную робастную функцию потерь
- Параметры регуляризации задают компромисс между точностью подгонки и обобщающей способностью модели:
  - контролируя ее сложность
  - уменьшая влияние выбросов и мультиколлинеарности
  - C или ν для классификации
  - C и ν или C и ϵ для регрессии
  - ν свойства позволяют явно контролировать ожидаемую пропорцию ошибок
  - параметры функции ядра также влияют на сложность модели

Выводы по SVM

- Модели опорных векторов представляют собой:
  - линейную комбинацию kernel функций от части наблюдений из тренировочного набора (опорных векторов) и зависят только от них
- Достоинства:
  - Единственное решение при любом начальном приближении
  - Kernel trick – смена пространства признаков «на лету» без необходимости их явно рассчитывать
  - Понятная геометрическая интерпретация
  - Относительная устойчивость к проклятию размерности
  - Явный контроль сложности модели
- Основные недостатки:
  - Качество существенно зависит от метапараметров регуляризации
  - Построение ядра для конкретной задачи –трудоемкий, плохо формализуемый процесс, особенно для структурированных данных
  - Вычислительная сложность как на этапе построения матрицы ядра, так и на этапе оптимизации
  - Нет встроенного отбора и оценки важности признаков