# Линейные методы:
# Часть 2. – Линейная классификация

Александр Дьяконов

# 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)**

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

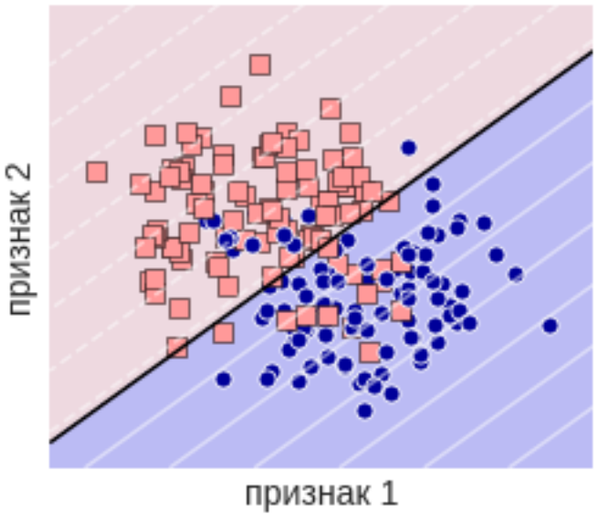
**случай** $w^{\text{T}} x + b = 0$ **нам тут не особо важен**

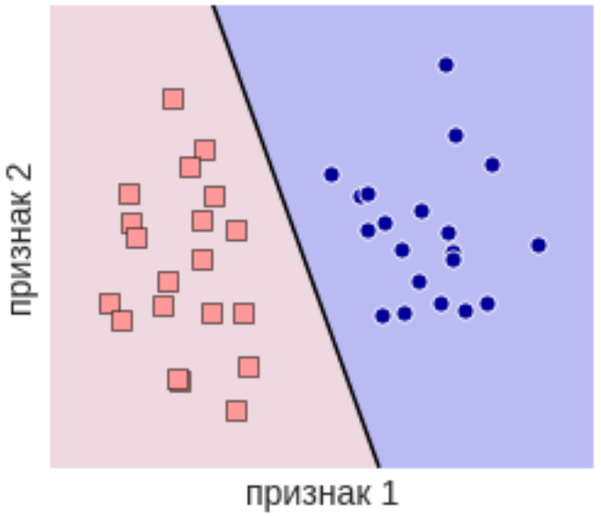
# Линейный классификатор

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

**если пополнить признаковое пространство фиктивным признаком**

**Геометрический смысл: делим пространство гиперплоскостью на две части**




**Иногда это может здорово работать!**

# Линейный классификатор: обучение

**Общая идея – 0-1-loss – число ошибок**

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

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

**естественно минимизировать число ошибок, но**

- **производная = 0 (не везде дифференцируема)**
- **выдаёт мало информации**
  **только число ошибок, а не их «фатальность»**
- **оптимизация здесь – NP-полная задача**

# Зазор (Margin)

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

**можно переписать:**

$$L(y_t, a(x_t)) = I[y_t w^{\mathrm{T}} x_t \leq 0] = \theta(-z_t)$$

**где** $\theta(z) = I[z \geq 0]$

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

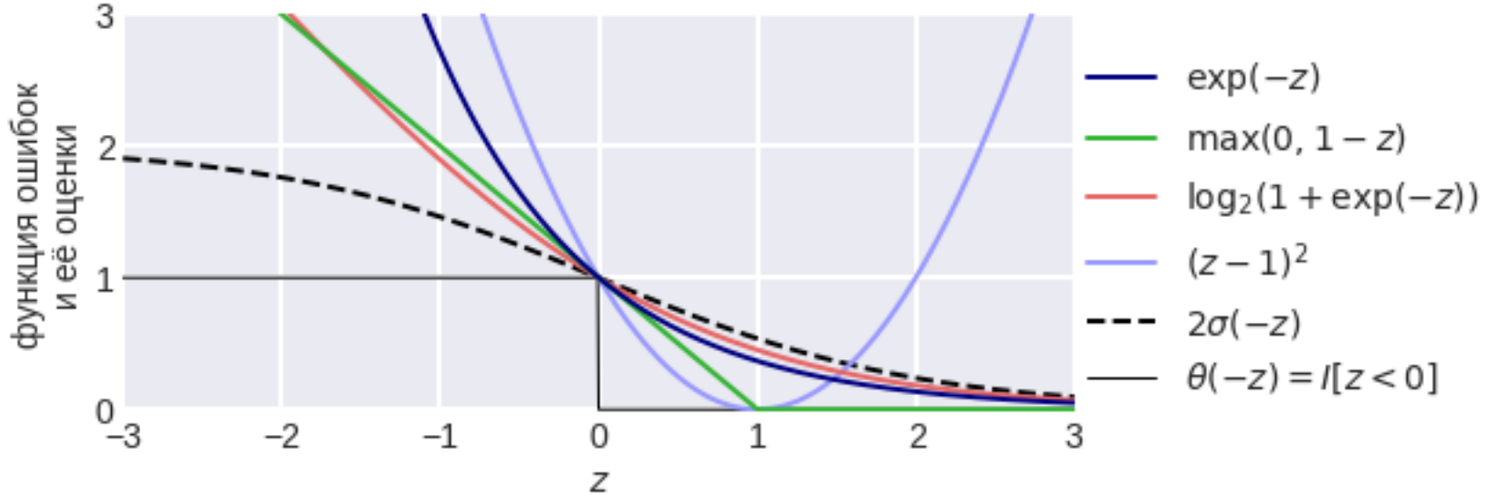
**пропорционален расстоянию до ГП с точностью до** $\|w\|$ **(дальше), знак ~ ошибка**

# Суррогатные функции (surrogate loss functions)

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

$$L(y_t, a(x_t)) = \theta(-z_t) \le f(-z_t) = L'(y_t, a(x_t))$$

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




**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 в персептроне:**

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

**Почему работает...**

$$w^{\mathrm{T}} x_i \le 0, y_i = +1 \Rightarrow w \leftarrow w + \eta x_i \Rightarrow w^{\mathrm{T}} x_i \leftarrow w^{\mathrm{T}} x_i + \eta \underbrace{x_i^{\mathrm{T}} x_i}_{\|x_i\|_2^2 > 0}$$

# Пример персептронного алгоритма

**Есть теорема Новикова**

**Если две конечные выборки линейно разделимы,
то разделяющая поверхность находится персептронным алгоритмом
за конечное число шагов**

**есть и другие способы разделения…**

**Сравним:**

**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

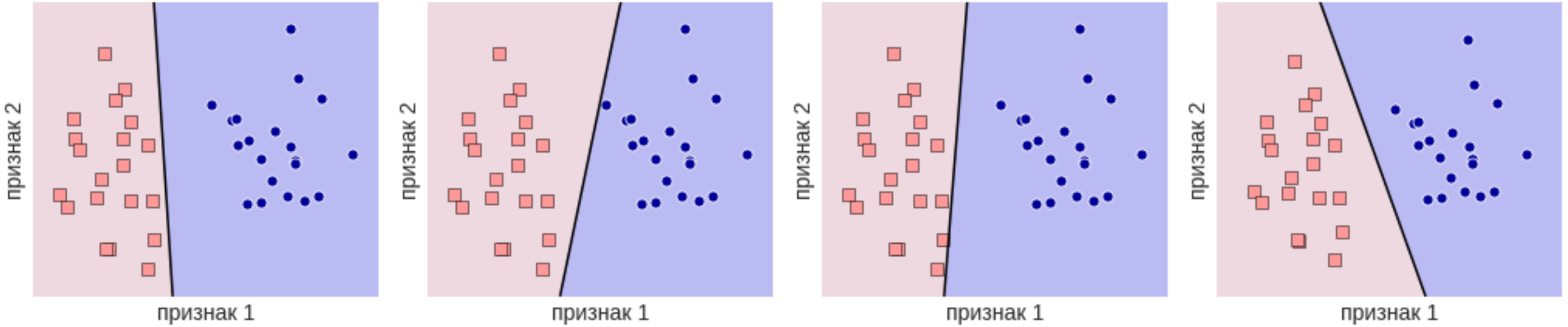
`sklearn.linear_model.SGDClassifier`
`sklearn.linear_model.SGDRegressor`

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

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

# Support Vector Machine (SVM)

**Метод опорных векторов – самый популярный метод 1990х**

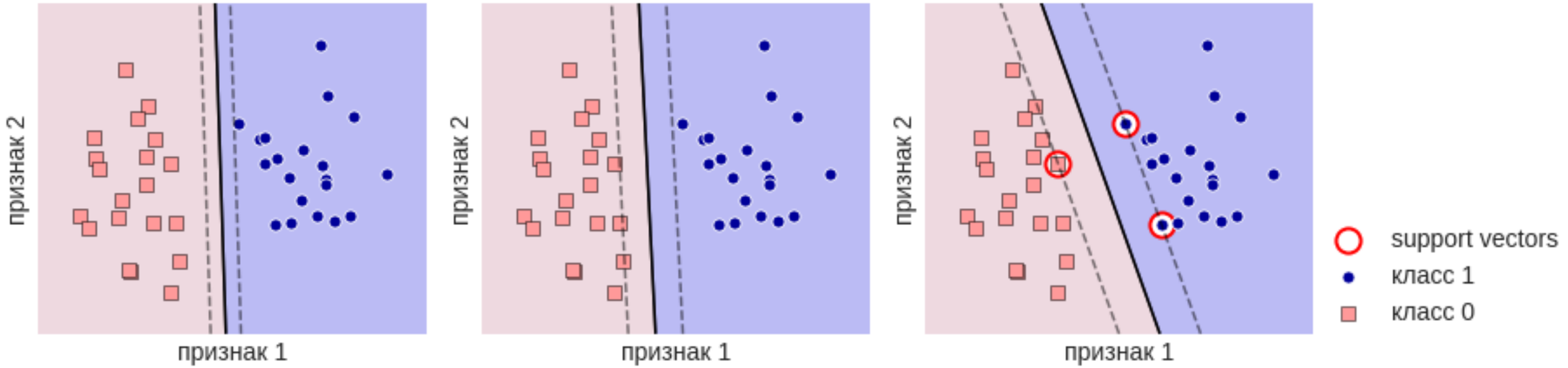



**до сих пор пытались просто разделить точки…**

**а какой линейный классификатор лучше?**

**здесь для начала предполагаем, что классы линейно разделимы**

# SVM: идея максимального зазора




**Идея:**

**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**

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

**(здесь не вводим фиктивный константный признак)**

**коэффициенты нужны с точностью до множителя $\alpha > 0$:**

$$\text{sgn}(w^{\text{T}} x + b) = \text{sgn}(\alpha w^{\text{T}} x + \alpha b)$$

**Должно быть**

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

**(из-за нормировки это возможно)**

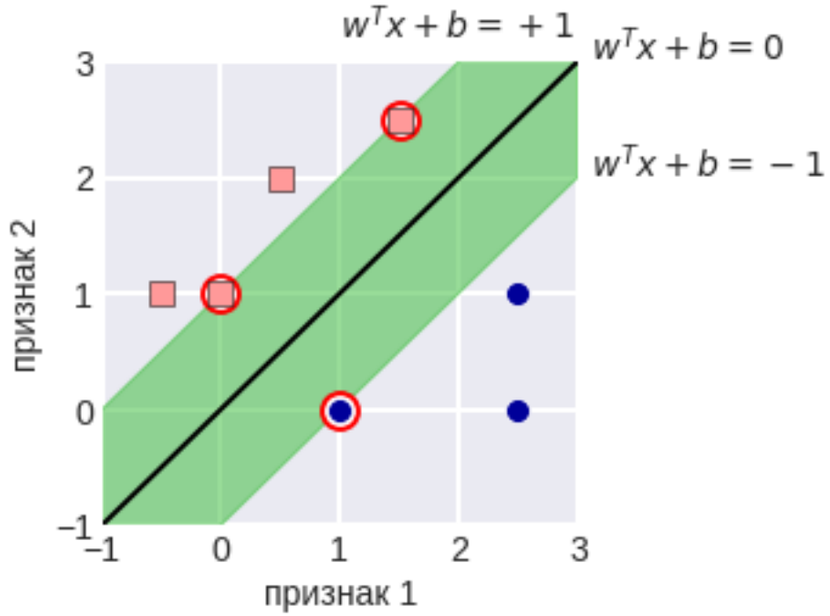
**Другая форма записи:**

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

**можно считать (из-за нормировки), что**

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

# SVM: постановка задачи



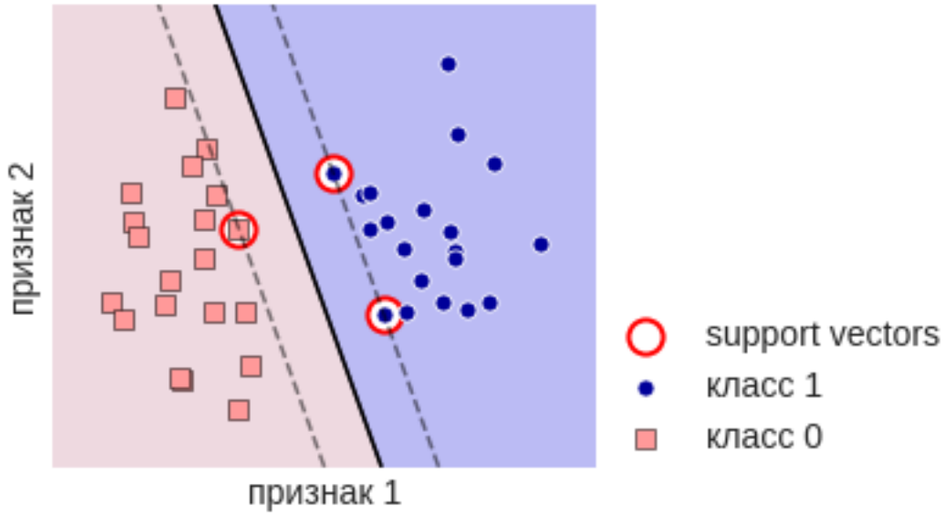

$$y_i(w^{\mathrm{T}} x_i + b) \geq 1$$

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

# 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**

**нормированный зазор (margin) –**

$$\min_i \frac{|\, w^{\mathrm{T}}x_i + b \,|}{\| w \|} = \frac{1}{\| w \|} \to \max$$

# Зазор (margin)

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

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

**В общем случае**
**алгоритм со скоринговой функцией (score function):**

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

$|b(x_i)|$ – **уверенность в ответе**

$y_i b(x_i)$ – **зазор** (насколько уверенность оправдала ожидание)

$\text{sgn}(\cdot)$ – **деформация**

# 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: 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:**

$$\min_{w,b} \max_{\alpha \ge 0} L(w, b, \alpha)$$

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

**тут будет дифференцируемость, но есть ограничения**

# SVM: решение строгое

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

**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**

**аналогично происходит и при настройке персептрона и логистической регрессии…**

# SVM: переход к двойственной задаче

## Задача квадратичного программирования

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

**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…**

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

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

(связь между решением прямой и обратной задачи)

# Условия Кунна-Таккера

**рассмотрим**

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

**для полученного решения:**

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

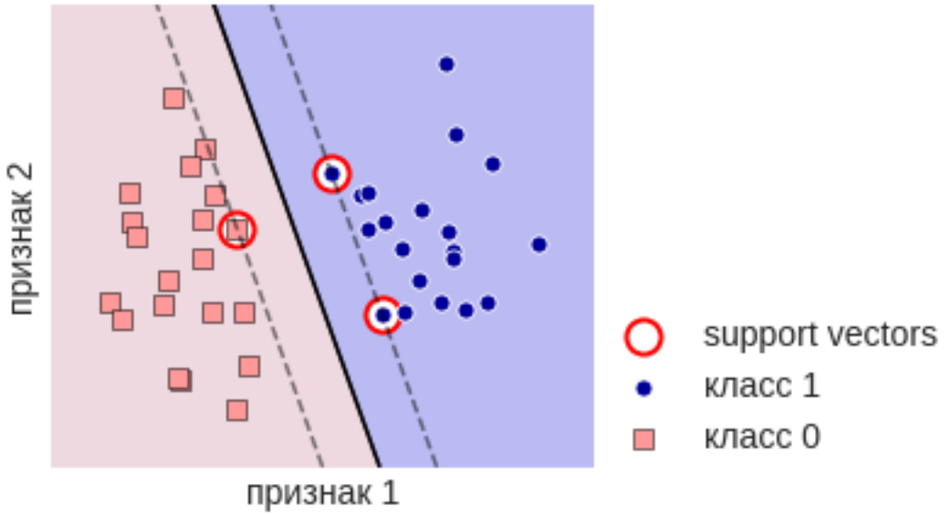
**если** $\alpha_i > 0,$

**то** $x_i$ **– опорный вектор (support vector)**

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

**большинство** $\alpha_i$ **обратиться в ноль**

**(из-за условий Кунна-Таккера)**



# Замечание о двойственной задаче

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

$$\alpha = (\alpha_1,\ldots,\alpha_m)^{\mathrm{T}}$$

**матрица $H$ конгруэнтна ($H = P^{\mathrm{T}}GP$) матрице Грама 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:**

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

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

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

**другой способ получения b**

**Итоговый алгоритм:** $a(x) = \mathrm{sgn}(w^{\mathrm{T}} x + b) = \mathrm{sgn}(\sum_{i \in S} \alpha_i y_i x_i^{\mathrm{T}} x + b)$

# Зачем переходить к двойственной задаче

- **размерности**

м.б. удобно решать

**выгодно, если признаковое пространство большое**

- **известная задача**

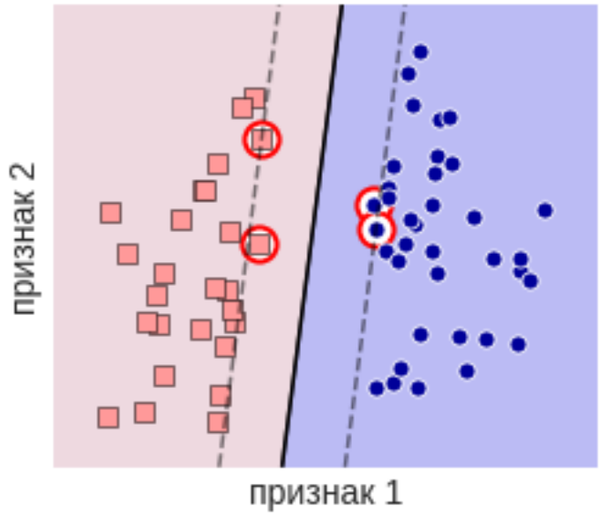
можно использовать солверы из готовых библиотек

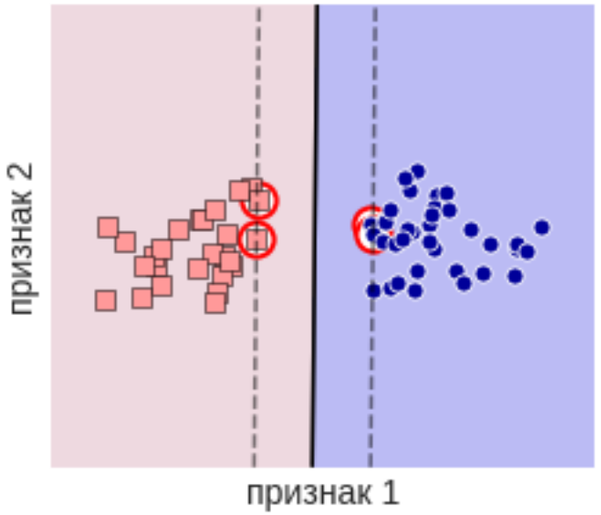
- **возникли попарные произведения**

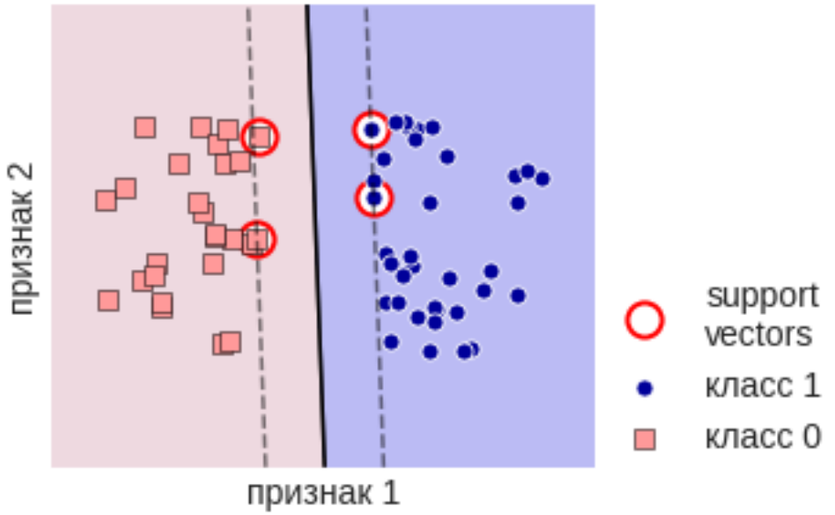
они везде – при обучении и работе алгоритма

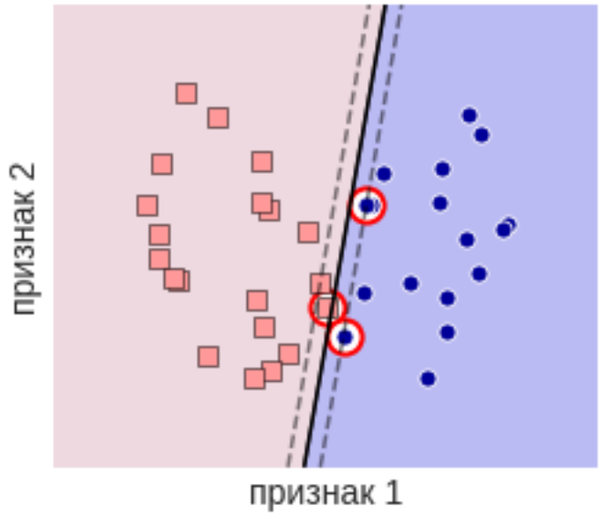
потом используем для kernel tricks

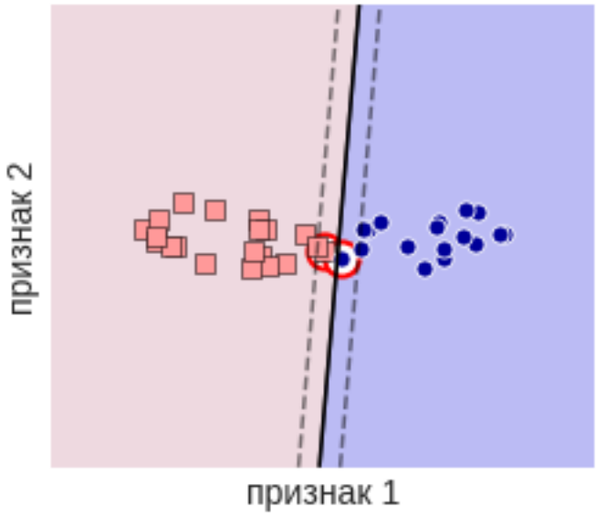
# Чувствительность к масштабу и шумам



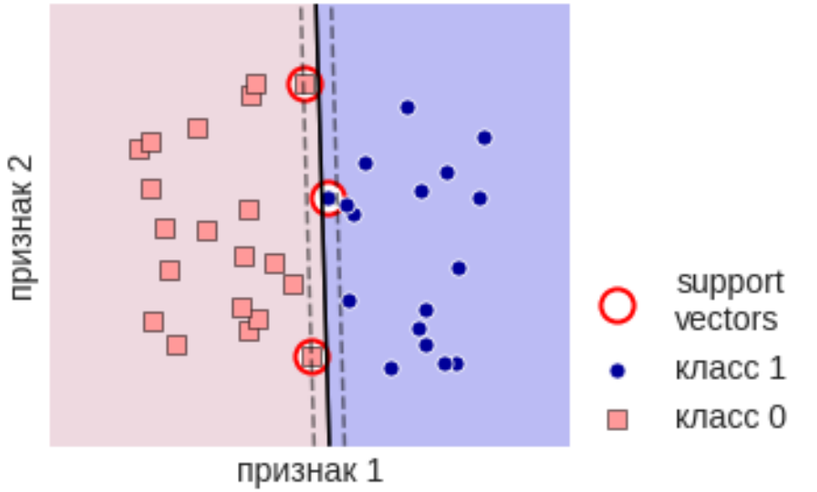




`X[:, 1] / 10`

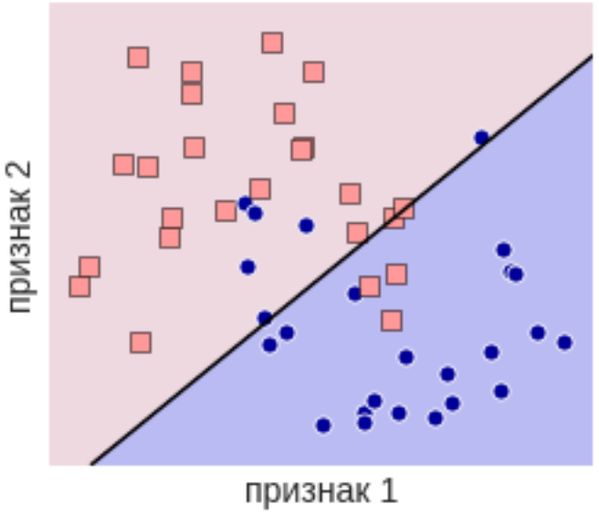



`X[:, 1] = rand`

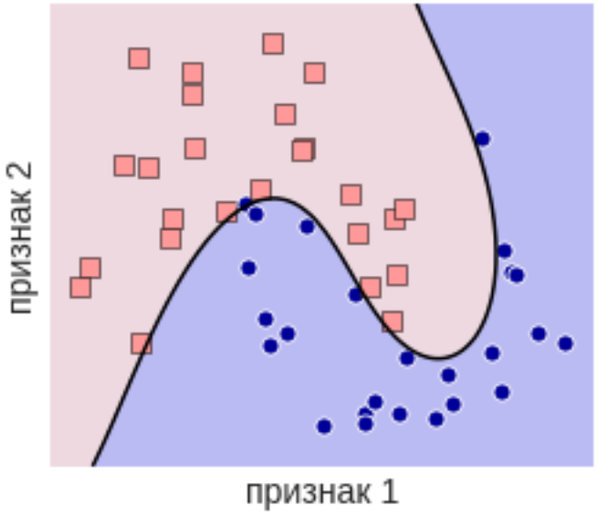
# Если нет линейной разделимости

## Два подхода (часто используются вместе)

**1) разделять так, чтобы ошибок было мало**



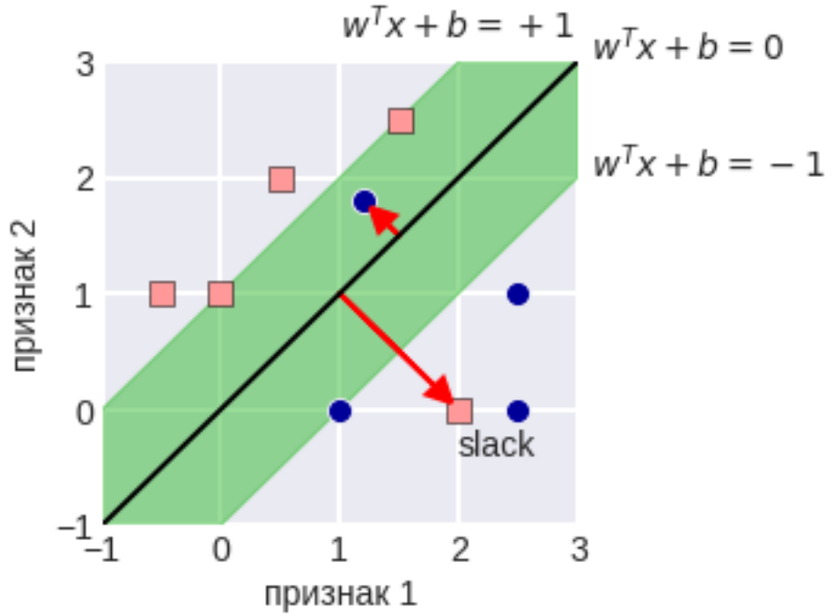

**2) использование нелинейных разделяющих поверхностей**




**переход в другое признаковое пространство**

**потом подробно разберём!**

# Soft-Margin SVM: разделение допуская ошибки




**позволить объектам «залезать» в полупространство 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**

**Можно было бы рассматривать задачу с таким ограничением**

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

**понятно, что можно было бы и**

$$+C\sum_{i=1}^{m} | \xi_i |^d$$

$C$ **– 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»**

# Soft-Margin SVM: двойственная задача

**Прямая задача:**

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

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

**Двойственная задача:**

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

**появляется лишь ограничение** $\alpha \leq C$

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

**ДЗ вывести!**

**Получается, что Soft-Margin SVM решается аналогично…**

# 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:**

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

**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

**Поставленная задача свелась к …**

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

**получили уже знакомое: Hinge Loss + $L_2$-регуляризация**

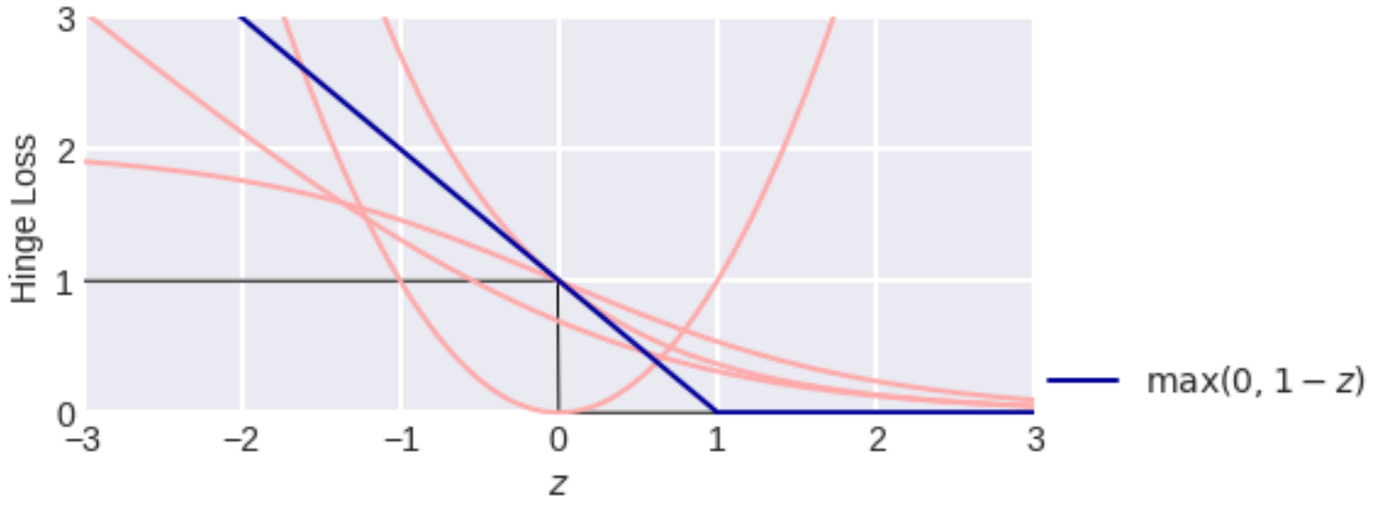
**но тут нет дифференцируемости (в каждой точке) из-за max**

**Также видно, что если** $1-y_i(w^{\mathrm{T}}x_i+b)\le 0$**,**

**т.е. зазор** $\ge$ **1 (достаточно большой), то объект не влияет на решение**

**решение зависит только от опорных объектов**

# Hinge loss

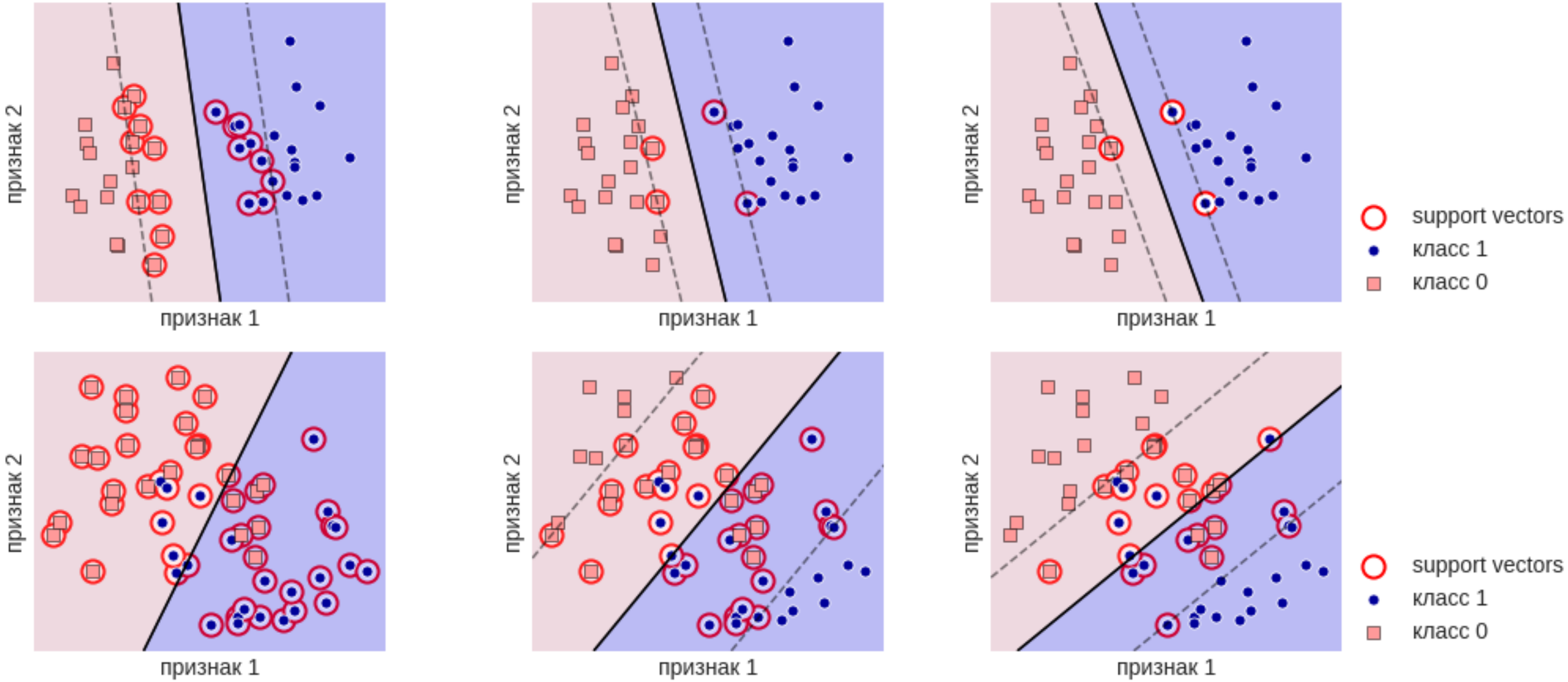



**А в логистической регрессии: логистическая функция ошибки + регуляризатор**

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

$$\sum_{i=1}^{m} \text{hinge}(y_i, w^T x_i + b) + \frac{1}{2C} \| w \|^2 \to \min$$

# Пример




$C = 0.01$ $C = 0.1$ $C = 1.0$

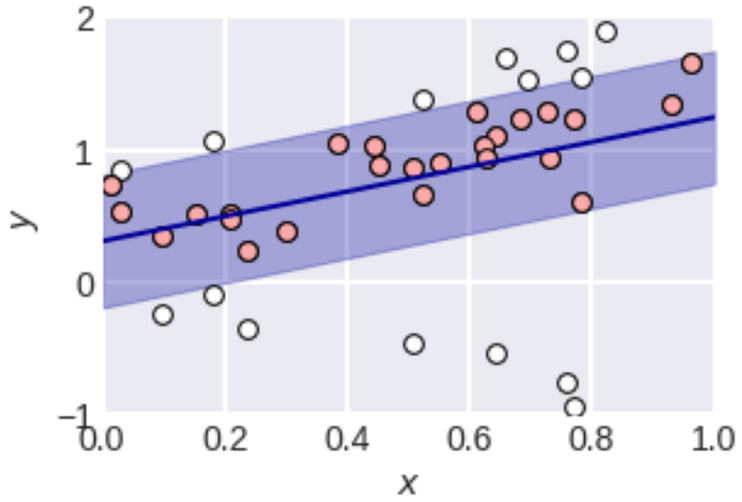
здесь опорными отмечены те объекты, которые пометила функция в sklearn

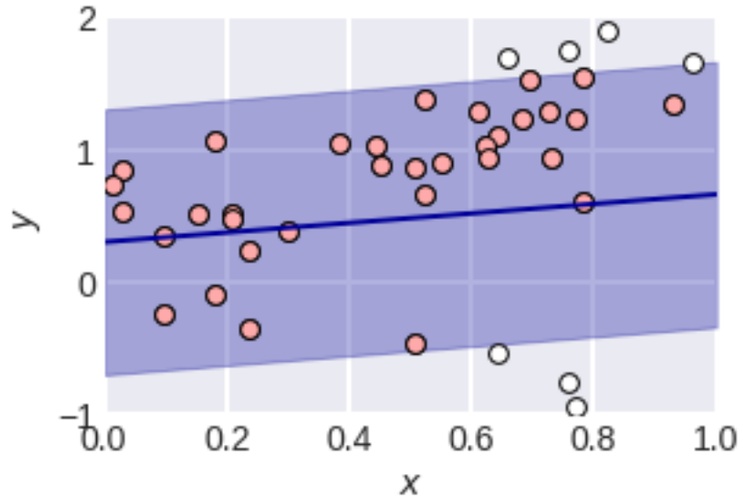
# SVM Regression

**хотим использовать регуляризацию и как можно лучше подстраиваться с $\varepsilon$-точностью:**

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

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




**выполнение неравенства – попадание точки в полосу**

**сейчас формализуем – что мы хотим «от попадания»**

# SVM Regression

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

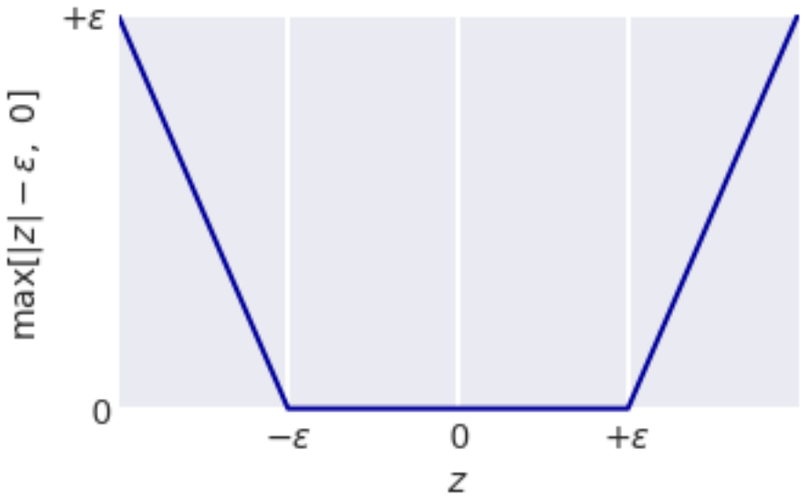
$$| w^{\mathrm{T}} x_i + b - y_i | \le \varepsilon,\ i \in \{1, 2, \ldots, m\}$$

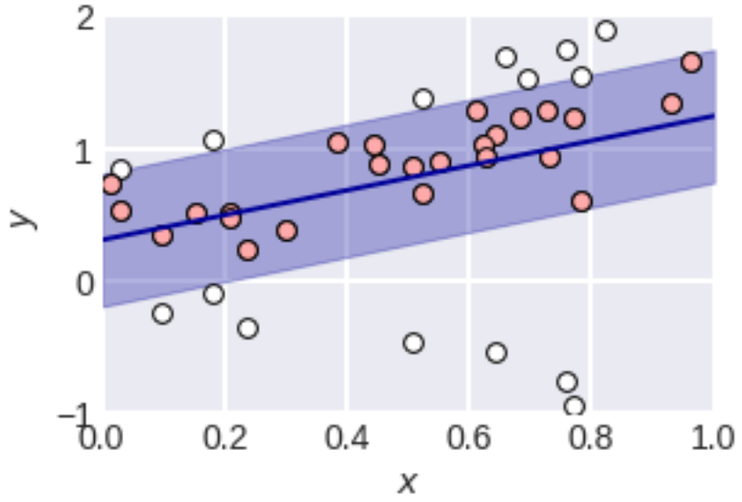
**Записываем такую функцию ошибки:**

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

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

**После замены переменных задача сводится к QP**



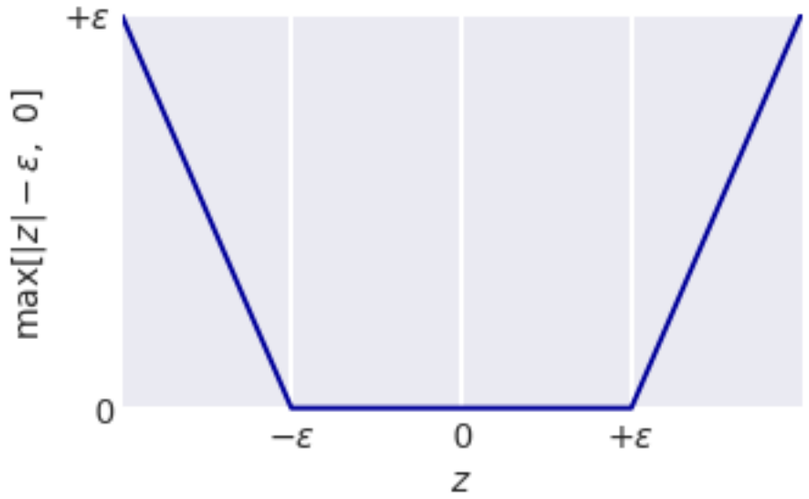



# SVM Regression

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

**$\varepsilon$-чувствительный Loss + регуляризатор**

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



# SVM Regression – переход к двойственной задаче

**вводим штрафующие слагаемые**

$$\xi_i^+ \geq 0, \xi_i^- \geq 0, i \in \{1,2,\ldots,m\}$$

**для этого неравенства:**

$$w^{\mathrm{T}} x_i + b - y_i \leq +\varepsilon + \xi_i^+$$
$$w^{\mathrm{T}} x_i + b - y_i \geq -\varepsilon - \xi_i^-$$

**тогда наш функционал**

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

**дальше аналогично переходим к Лагранжиану… пропускаем это**

# SVM Regression – переход к двойственной задаче

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

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

**После решения QP**

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

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

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

# Реализация в scikit-learn

`sklearn.svm.LinearSVC`

| | |
|---|---|
| `penalty="l2"` | **Тип регуляризации** |
| `loss="squared_hinge"` | **Ошибка регуляризации, более традиционная** `"hinge"` |
| `dual=True` | **Какую задачу решать**<br>`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 (не всё рассказали)**

**большой зазор ⇒ 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)

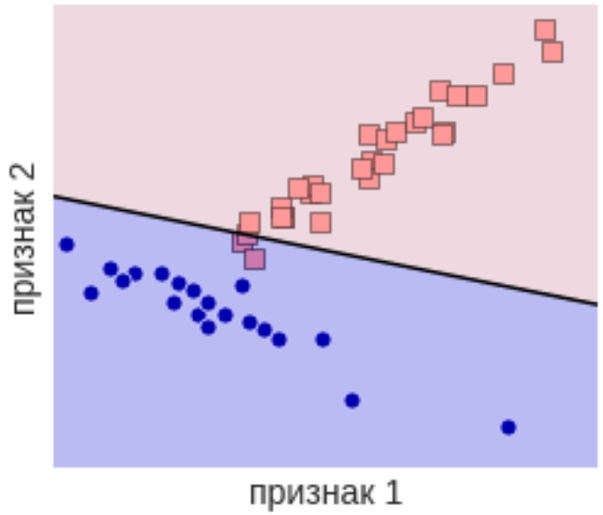
- **при нелинейности интерпретация немного теряется…**

иногда непонятно, в каком именно пространстве решается задача

- **опорные объекты – нельзя считать «базовыми»**

из-за этого было много споров,
работает ли метод «правильно»

# 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

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

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

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

**Получаем:**

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

**междуклассовый разброс (between-class scatter) /**
**внутриклассовый разброс (within-class scatter matrices)**

# Линейный дискриминант Фишера

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

можно, кстати задаться условием

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

т.к. если вектор умножить на константу, то числитель и знаменатель сокращаются

**если продифференцировать…**

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

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

число

**нас интересует только направление вектора, а не его величина, тогда**

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

# Линейный дискриминант Фишера

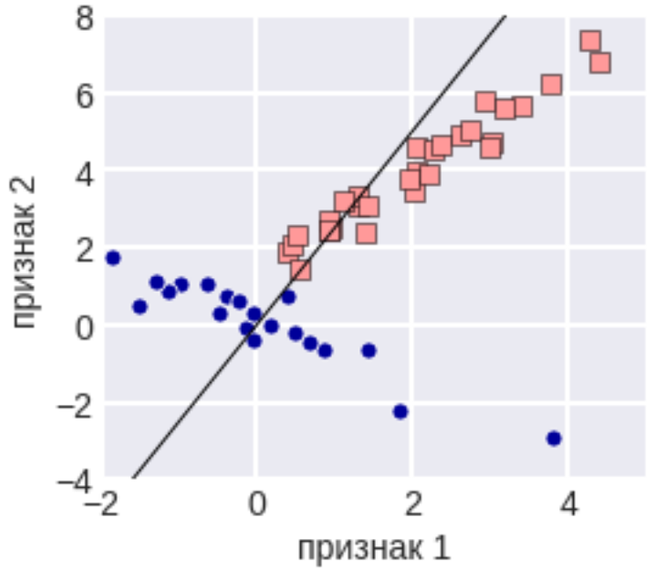
$$\frac{w^T S\, w}{w^T (S_{+1} + S_{-1}) w} \to \max$$

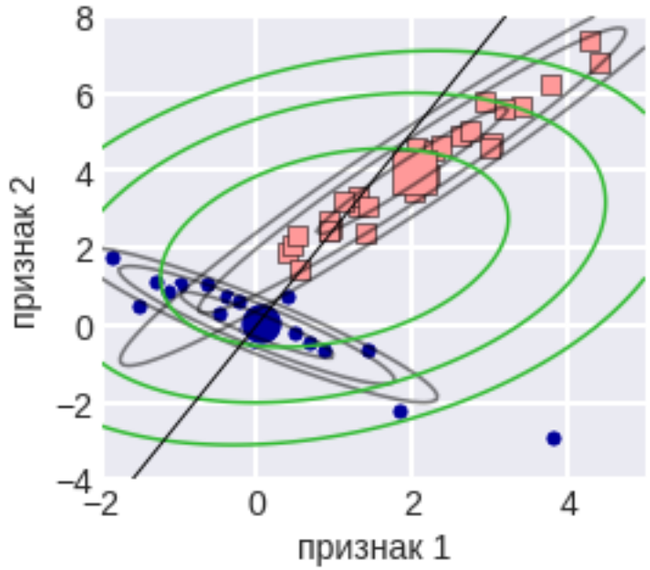
**решение** $w \propto (S_{+1} + S_{-1})^{-1}(\mu_2 - \mu_1)$

**интересный факт:**
**можно получить из МНК,**
**выбрав целевые значения**

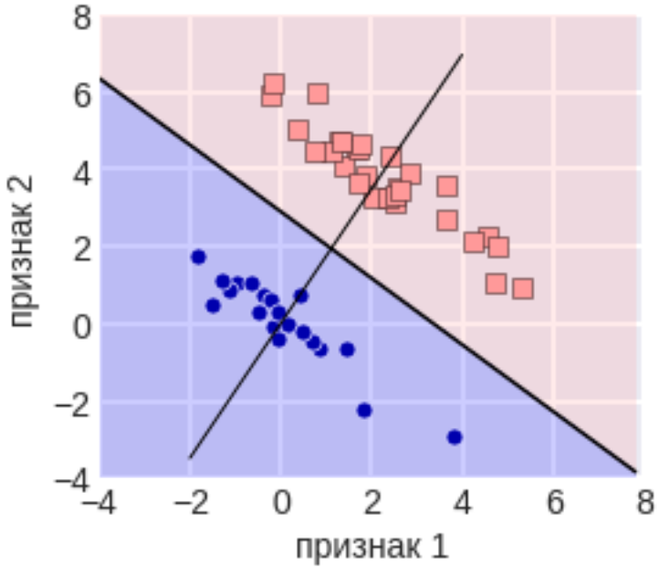
$$\alpha \to \frac{m_{+1} + m_{-1}}{m_\alpha} = \frac{m}{m_\alpha}$$

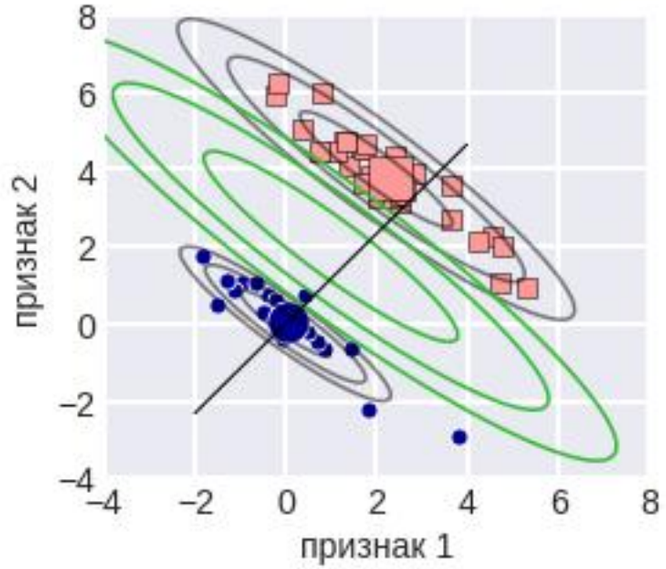
**Обосновать!**



# 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**

# 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

**«Scikit-Learn: тонкие вопросы о реализации методов машинного обучения»**

https://dyakonov.org/2021/03/04/ml-scikit-learn/