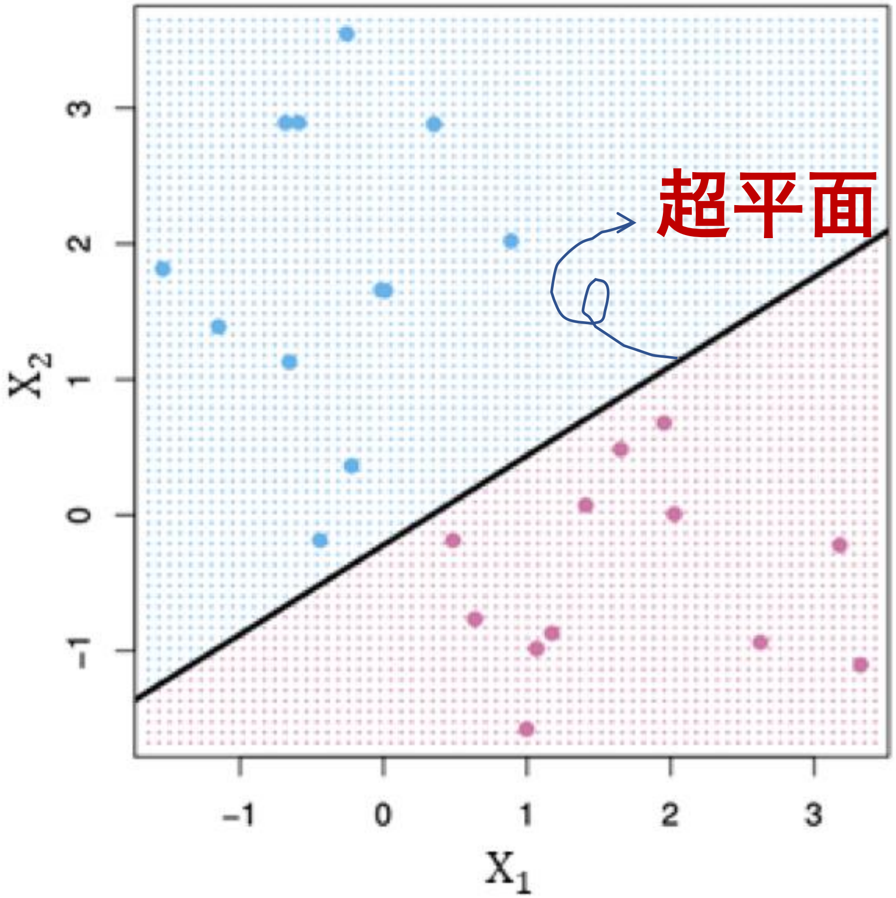
第九章 支持向量机

本章，我们先用一种直接的方式来处理二分类问题：

我们试图在特征空间中找到一个平面来分离类。例如：



如果做不到，我们就在两个方面发挥创意：

- 我们弱化了“分离”的含义；
- 我们丰富和扩大特征空间，以便分离成为可能。

02

什么是超平面?

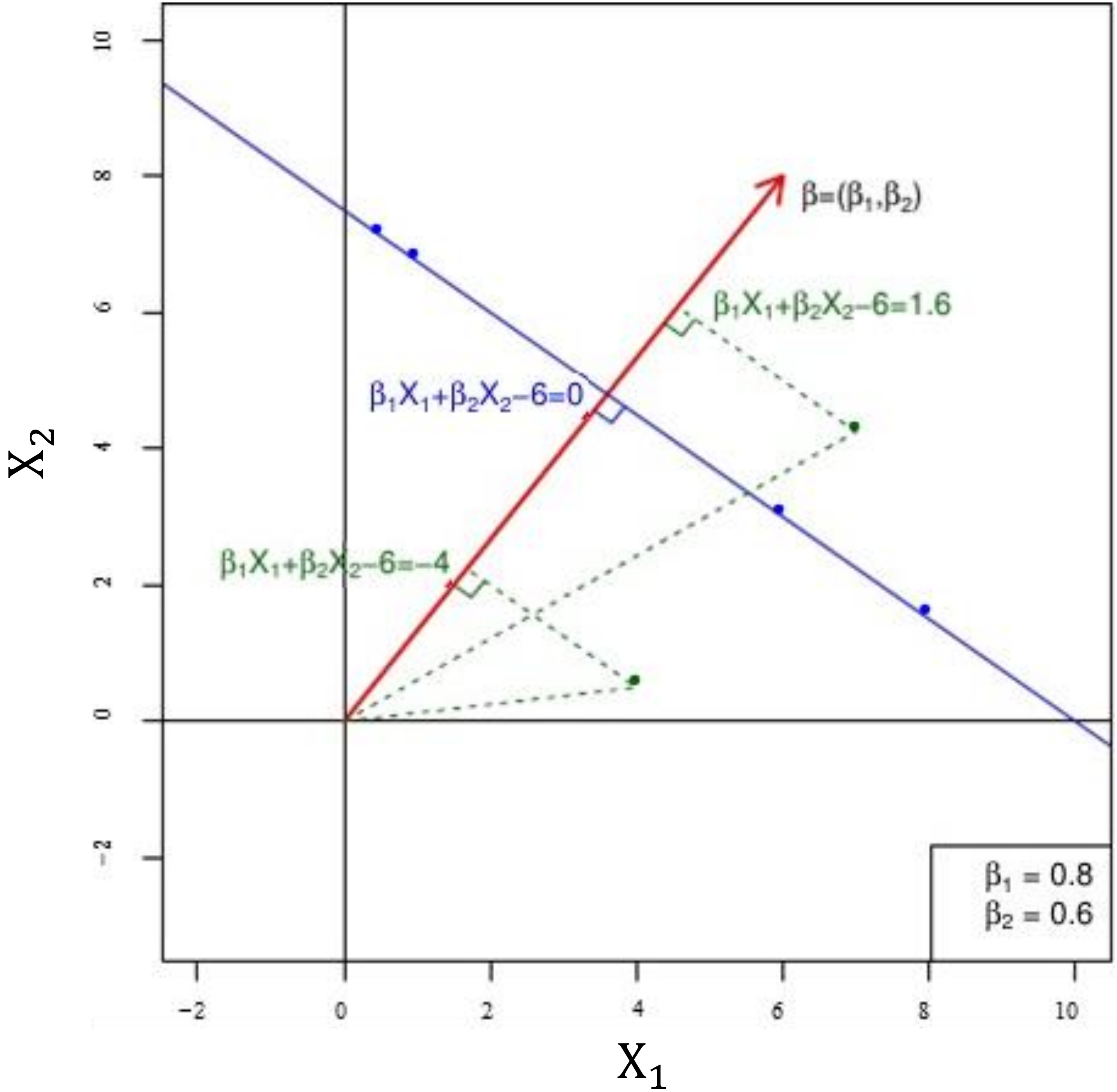
•p维的超平面是p−1维的平面仿射子空间。
•一般来说，超平面的方程有如下形式

$$\beta_0 + \beta_1 x_1 + \beta_2 x_2 + \ldots + \beta_p x_p = 0$$

•在p = 2维中，超平面是一条线。
•如果$\beta_0 = 0$，超平面经过原点，否则不经过。

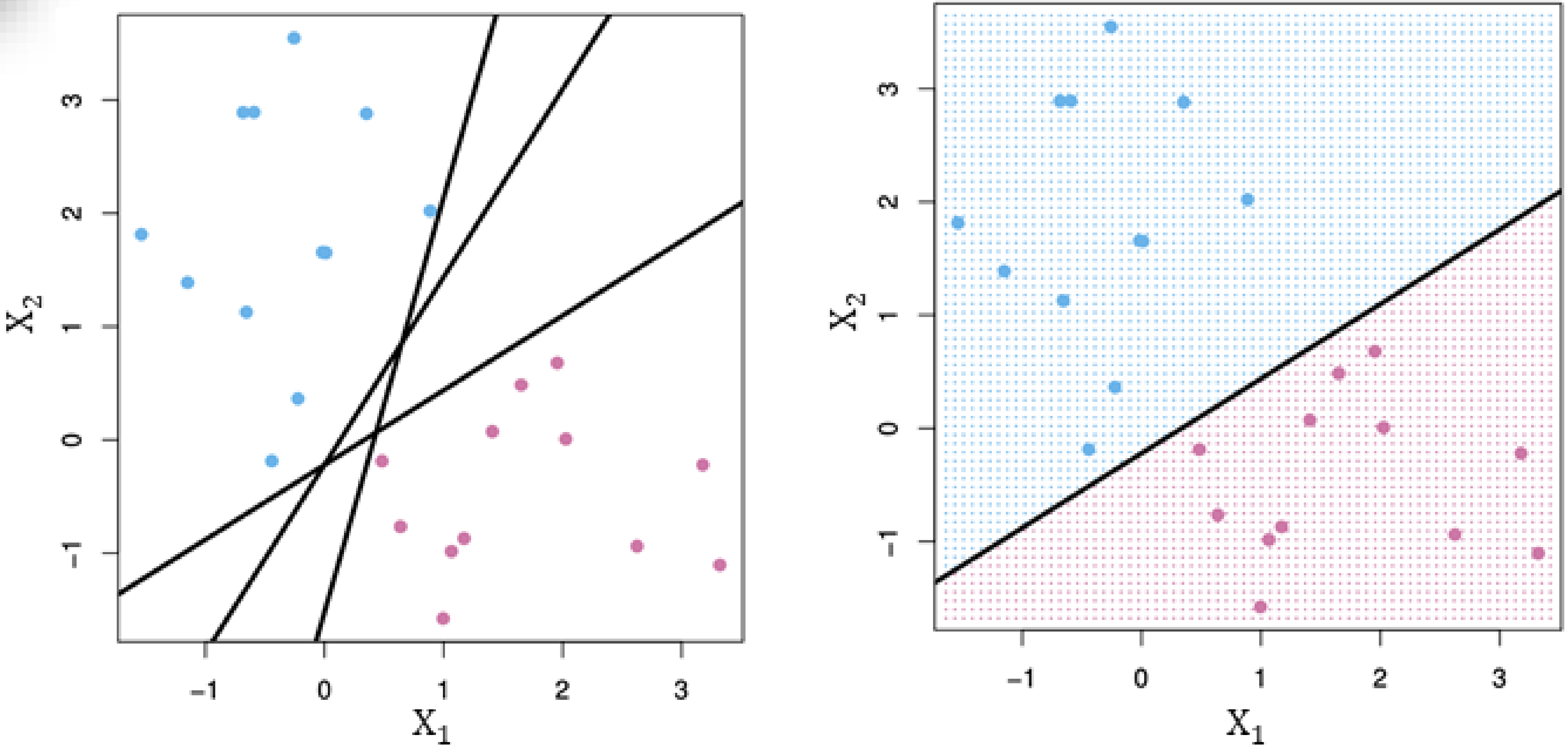
•向量$\boldsymbol{\beta} = (\beta_1, \beta_2, \cdots, \beta_p)$称为法向量——它指向与超平面表面正交的方向。

二维超平面



$\beta=(\beta_1,\beta_2)$
$\beta_1X_1+\beta_2X_2-6=1.6$
$\beta_1X_1+\beta_2X_2-6=0$
$\beta_1X_1+\beta_2X_2-6=-4$
$\beta_1 = 0.8$
$\beta_2 = 0.6$
X_1
X_2
-2
0
2
4
6
8
10

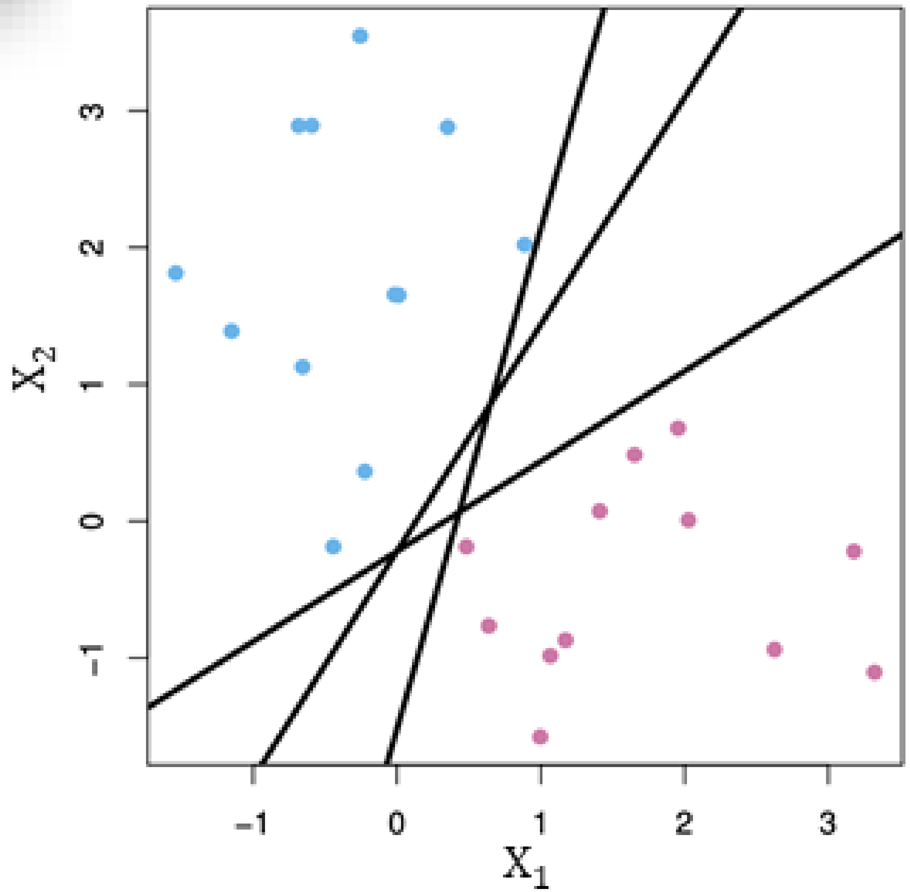
分离超平面

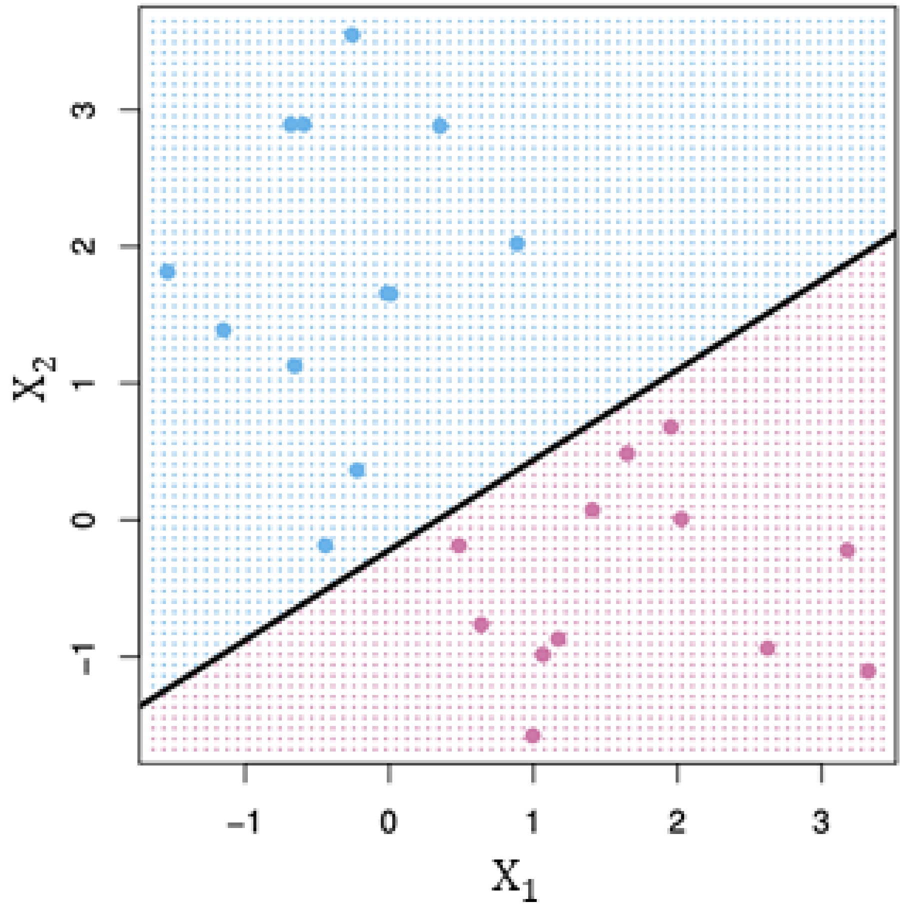


•如果$f(x) = \beta_0 + \beta_1 x_1 + \beta_2 x_2 + \ldots + \beta_p x_p$，则$f(x) > 0$表示超平面一侧的点，$f(x) < 0$表示超平面另一侧的点。

•如果我们将带颜色的点编码为$y_i = +1$表示蓝色，和$y_i = -1$代表淡紫色，那么如果$y_i\ f(x_i) > 0$对于所有$i=1, \ldots, n$，$\mathbf{f(x) = 0}$定义了一个**分割超平面**。

分割超平面



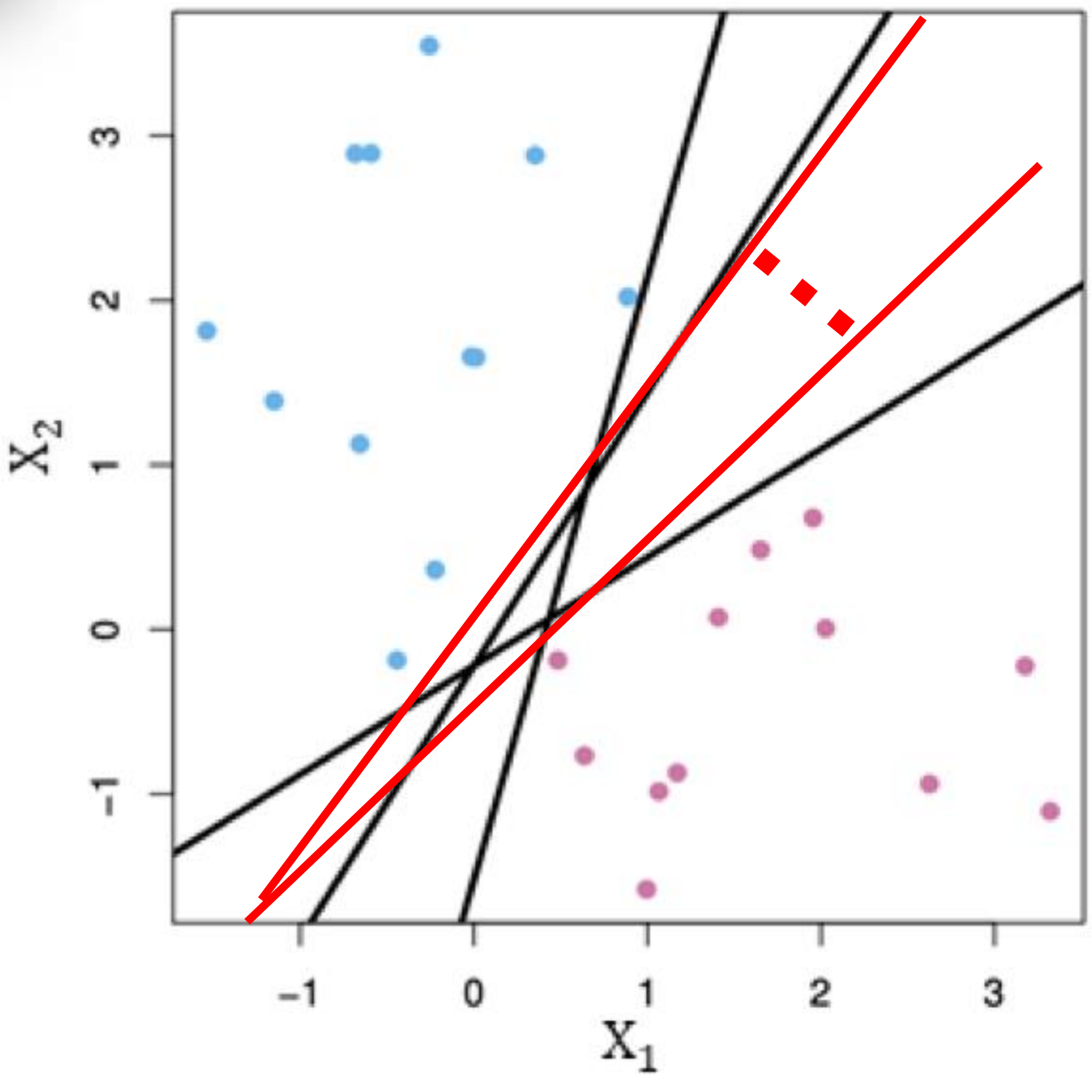


测试观测会被判定为哪个类完全取决于它落在分割超平面的哪一侧。即，根据$f(x^*) = \beta_0 + \beta_1 x_1{}^* + \beta_2 x_2{}^* + \ldots + \beta_p x_p{}^*$的符号分类。为正，分为1类，为负分为-1类。还可以根据$f(x^*)$大小进行分类，若离0很远，即离分割超平面很远，能非常确信对x^*的分类判断。

（一）最大间隔分类器

01 分割超平面

分割超平面若存在，则存在无穷多个。



用哪个好？

02 最大间隔分类器

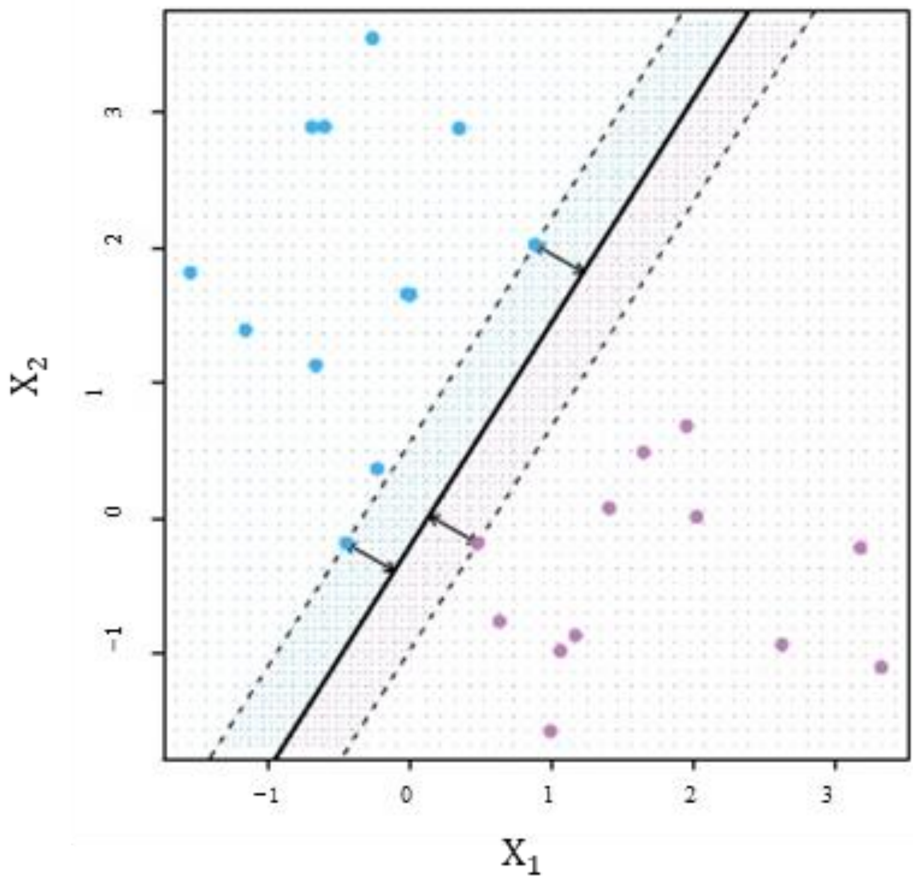
在所有分离超平面中，找出使两类之间的间隙或间隔最大的超平面。

首先，计算每个训练观测到一个分割超平面的距离，取最小值，称为**间隔**（margin）。这个间隔值最大的那个分割超平面即为最大间隔超平面。

然后，用此最大间隔超平面判断测试样本落在哪一侧，就可以分类。此为最大间隔分类器。

见下图。

在所有分离超平面中，找出使两类之间的间隙或间隔最大的超平面。

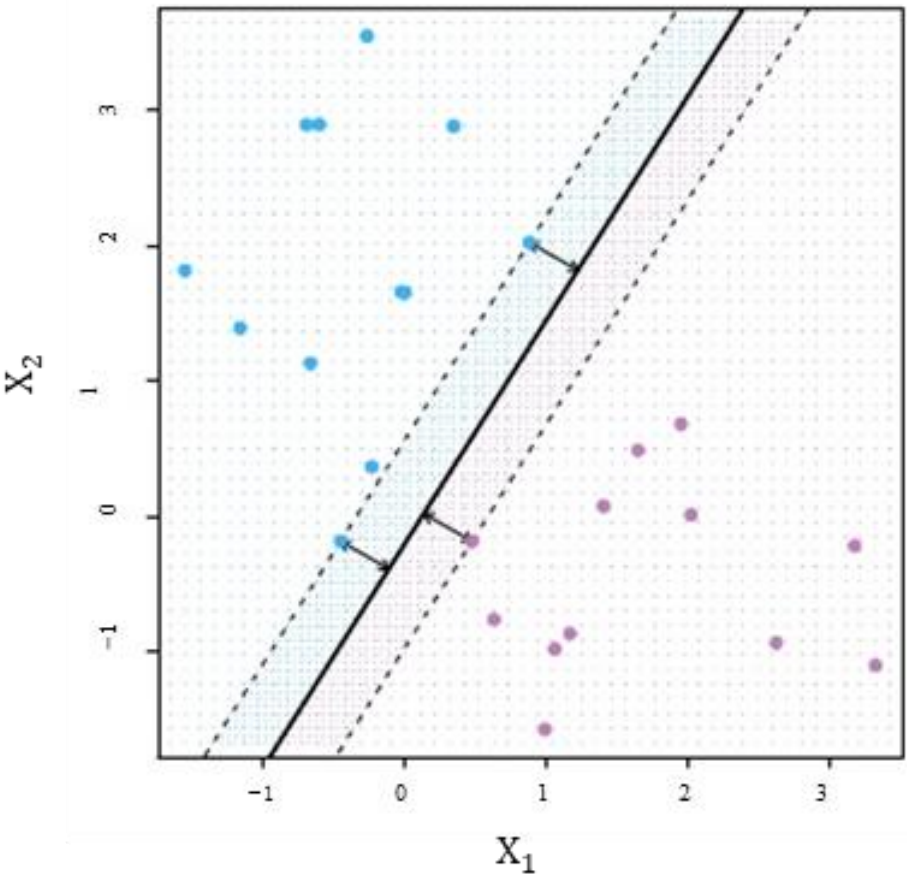


此例中，有3个训练观测到最大间隔超平面的距离最小，它们被称为“**支持向量**”（Support Vector，SV）。

这3个点的改变会明显影响最大间隔超平面走向，其它点不会。这3个点“**支持**”着分类器的形成与分类。

02 最大间隔分类器

在所有分离超平面中，找出使两类之间的间隙或间隔最大的超平面。如何构建？-> **约束优化问题！**



y_i的可能取值为-1和1。

$$\underset{\beta_0,\beta_1,\ldots,\beta_p}{\text{maximize}}\ M$$

$$\text{subject to } \sum_{j=1}^{p} \beta_j^2 = 1,$$

$$y_i(\beta_0 + \beta_1 x_{i1} + \ldots + \beta_p x_{ip}) \geq M$$

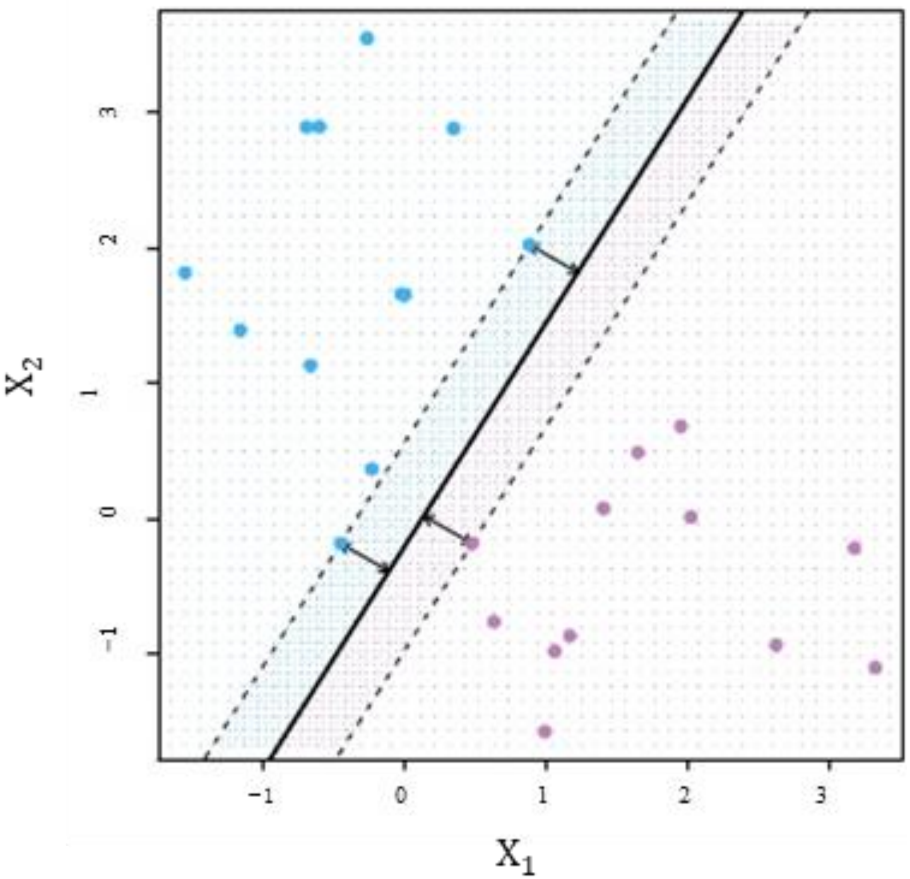
$$\text{for all } i = 1, \ldots, N.$$

约束条件保证了每个观测落在超平面正确的一测！

M就是间隔，找出最大化的M！

最大间隔分类器

在所有分离超平面中，找出使两类之间的间隙或间隔最大的超平面。如何构建？-> **约束优化问题！**



y_i的可能取值为-1和1。

$$\underset{\beta_0,\beta_1,\ldots,\beta_p}{\text{maximize}}\ M$$

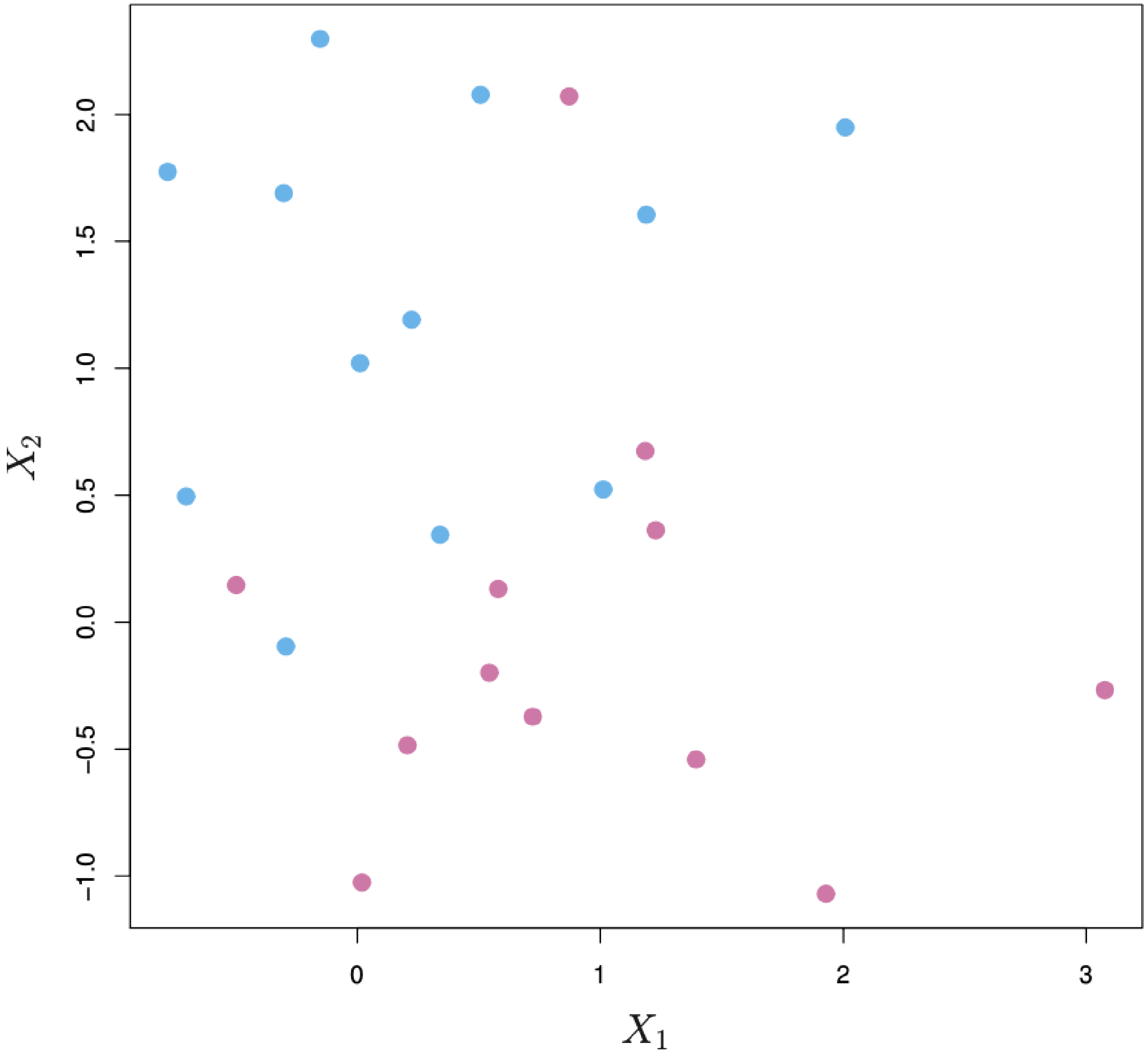
$$\text{subject to } \sum_{j=1}^{p}\beta_j^2 = 1,$$

$$y_i(\beta_0 + \beta_1 x_{i1} + \ldots + \beta_p x_{ip}) \geq M$$

$$\text{for all } i = 1, \ldots, N.$$

这可以重新表示为凸二次规划，然后有效地解出。
包e1071中的函数svm()有效地解决了这个问题。

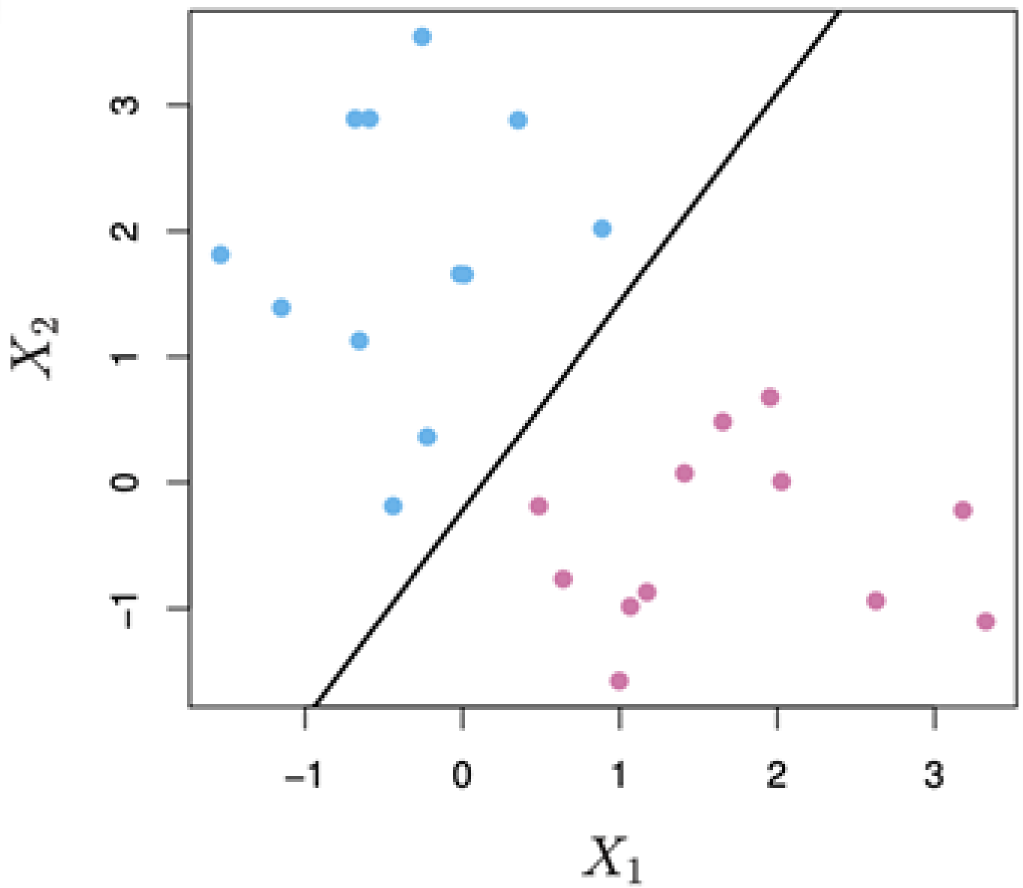
线性不可分的数据

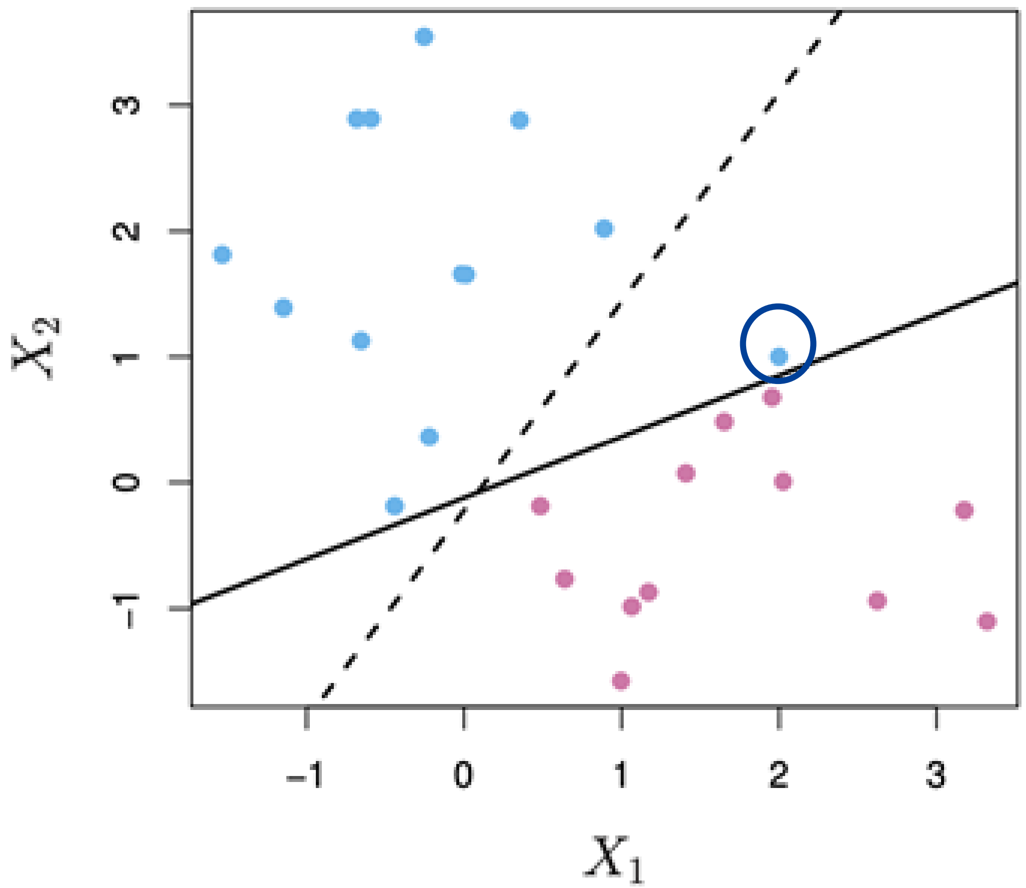


左边的数据不能被线性边界分离 -> 几乎能分类开即可，**软间隔**

这是经常发生的情况，除非N < p。

噪声数据



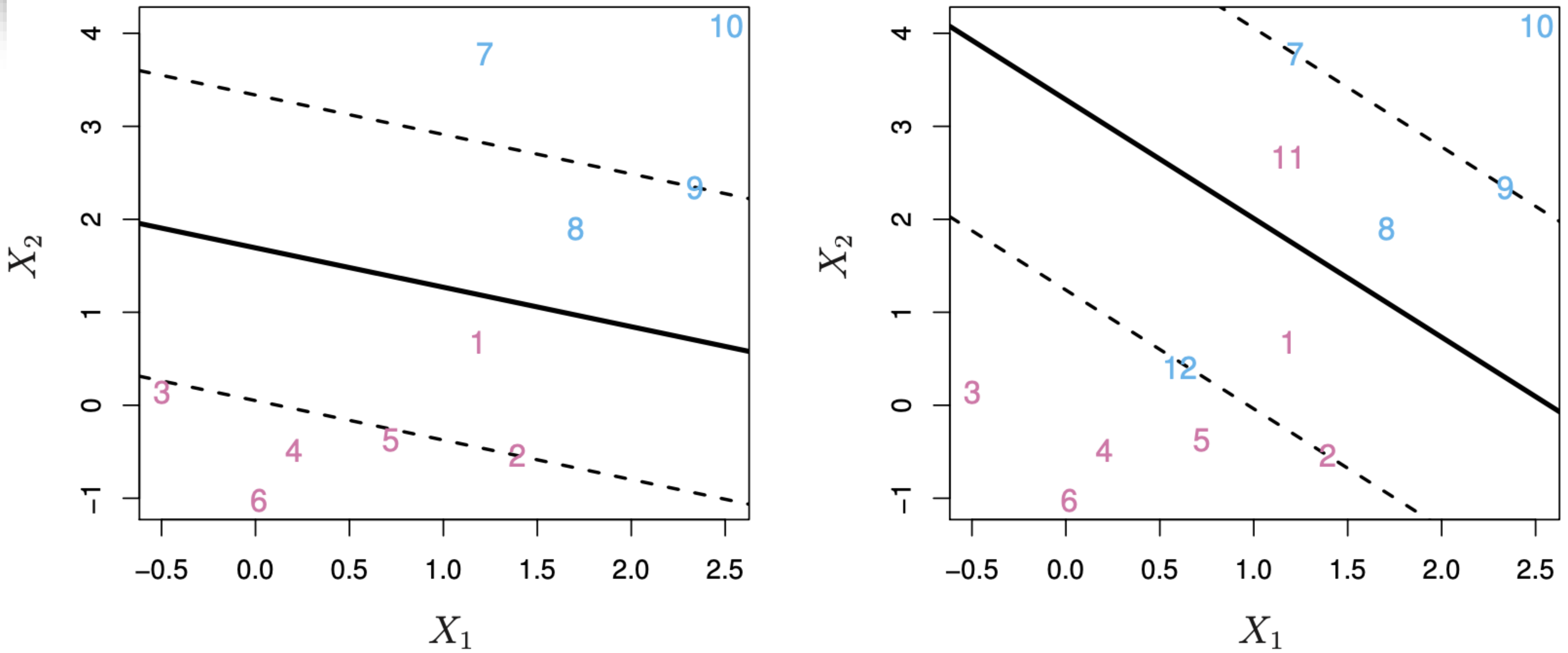


有时数据是可分离的，但噪声很大。这可能会导致最大间隔分类器的解决方案比较差。

只增加一个蓝点就让最大间隔超平面发生了巨大变化！而且间隔很小。对单个观测的变化极其敏感也说明可能过拟合了！

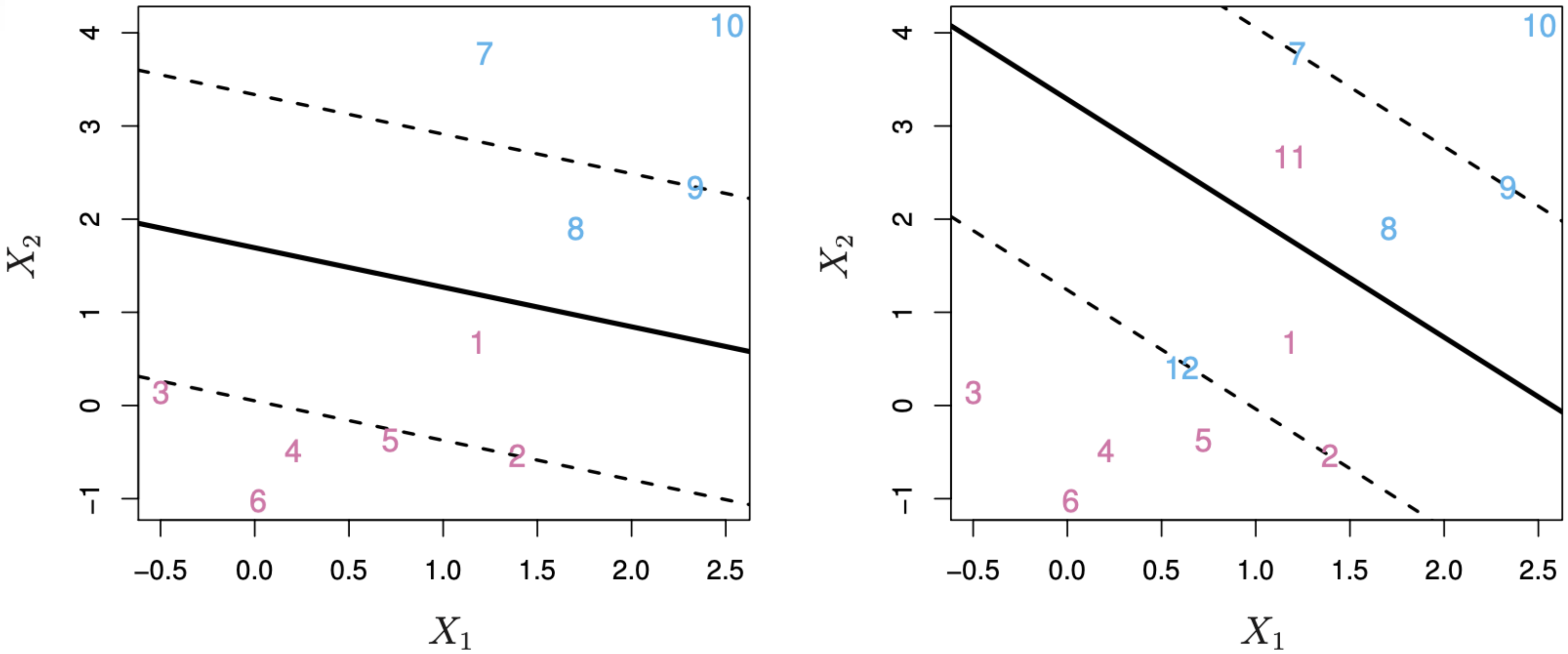
（二）支持向量分类器

支持向量分类器



支持向量分类器最大化了软间隔，即最大化允许了一些误分之后的间隔。 **-> 怎么软化？**

支持向量分类器

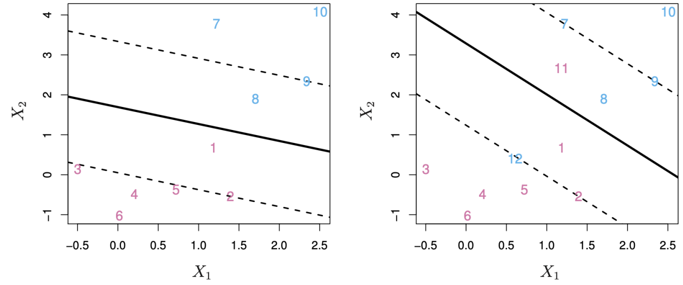


$$\underset{\beta_0,\beta_1,\ldots,\beta_p,\epsilon_1,\ldots,\epsilon_n}{\text{maximize}} \quad M \quad \text{subject to} \quad \sum_{j=1}^{p}\beta_j^2 = 1,$$

$$y_i(\beta_0 + \beta_1 x_{i1} + \beta_2 x_{i2} + \ldots + \beta_p x_{ip}) \geq M\underline{(1-\epsilon_i)},$$

$$\underline{\epsilon_i \geq 0, \quad \sum_{i=1}^{n}\epsilon_i \leq C},$$

01 支持向量分类器



$$\underset{\beta_0,\beta_1,\ldots,\beta_p,\epsilon_1,\ldots,\epsilon_n}{\text{maximize}} \quad M \quad \text{subject to} \sum_{j=1}^{p}\beta_j^2 = 1,$$

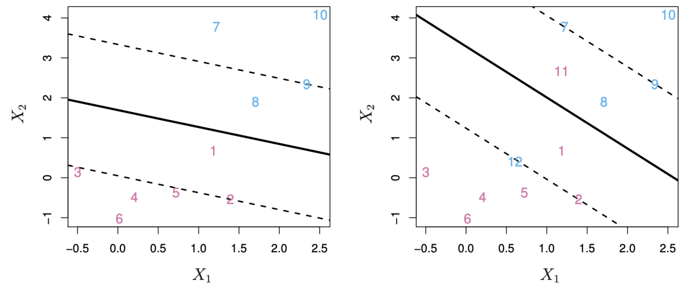
$$y_i(\beta_0 + \beta_1 x_{i1} + \beta_2 x_{i2} + \ldots + \beta_p x_{ip}) \geq M\underline{(1-\epsilon_i)},$$

$$\epsilon_i \geq 0, \quad \underline{\sum_{i=1}^{n}\epsilon_i \leq C},$$

松弛变量 ϵ_i 的含义：允许间隔冲突，其值为0意味着什么？
>0，>1呢？
调节参数C 的含义：能容忍的穿过间隔（以及超平面）的观测数目的严重程度，其值为0意味着什么？>0呢？

C通常通过交叉验证来选择。控制方差-偏差权衡。

01 支持向量分类器



$$\underset{\beta_0,\beta_1,\ldots,\beta_p,\epsilon_1,\ldots,\epsilon_n}{\text{maximize}} \quad M \quad \text{subject to} \quad \sum_{j=1}^{p} \beta_j^2 = 1,$$

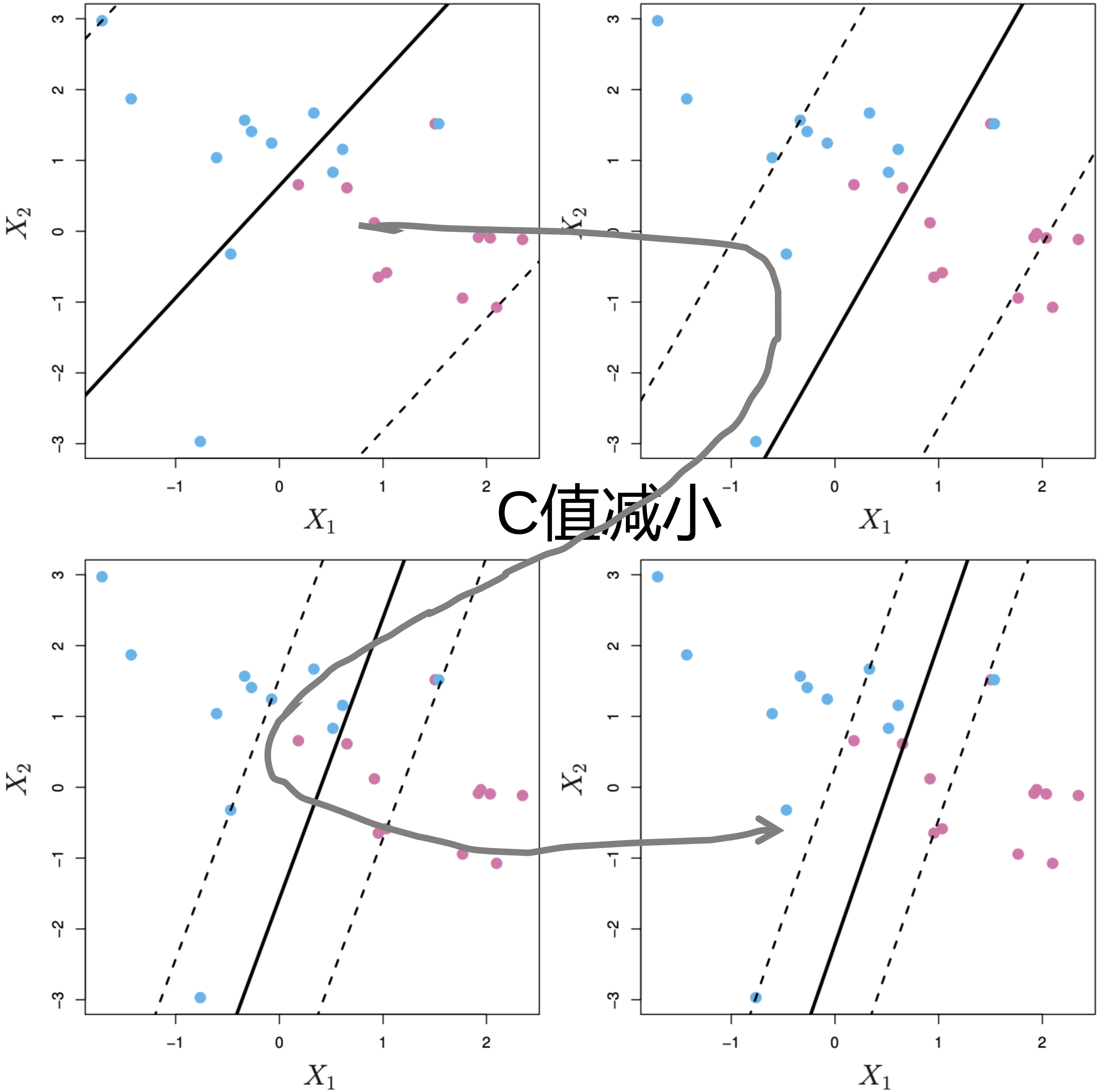
$$y_i(\beta_0 + \beta_1 x_{i1} + \beta_2 x_{i2} + \ldots + \beta_p x_{ip}) \geq M(1 - \epsilon_i),$$

$$\epsilon_i \geq 0, \quad \sum_{i=1}^{n} \epsilon_i \leq C,$$

此优化问题的一个性质：只有落在间隔或穿过间隔的观测会影响超平面，根据这些观测就能得到分类器。落在正确侧正确间隔外的观测没有任何影响！

->刚好落在间隔和落在间隔错误一侧的观测叫**支持向量**！

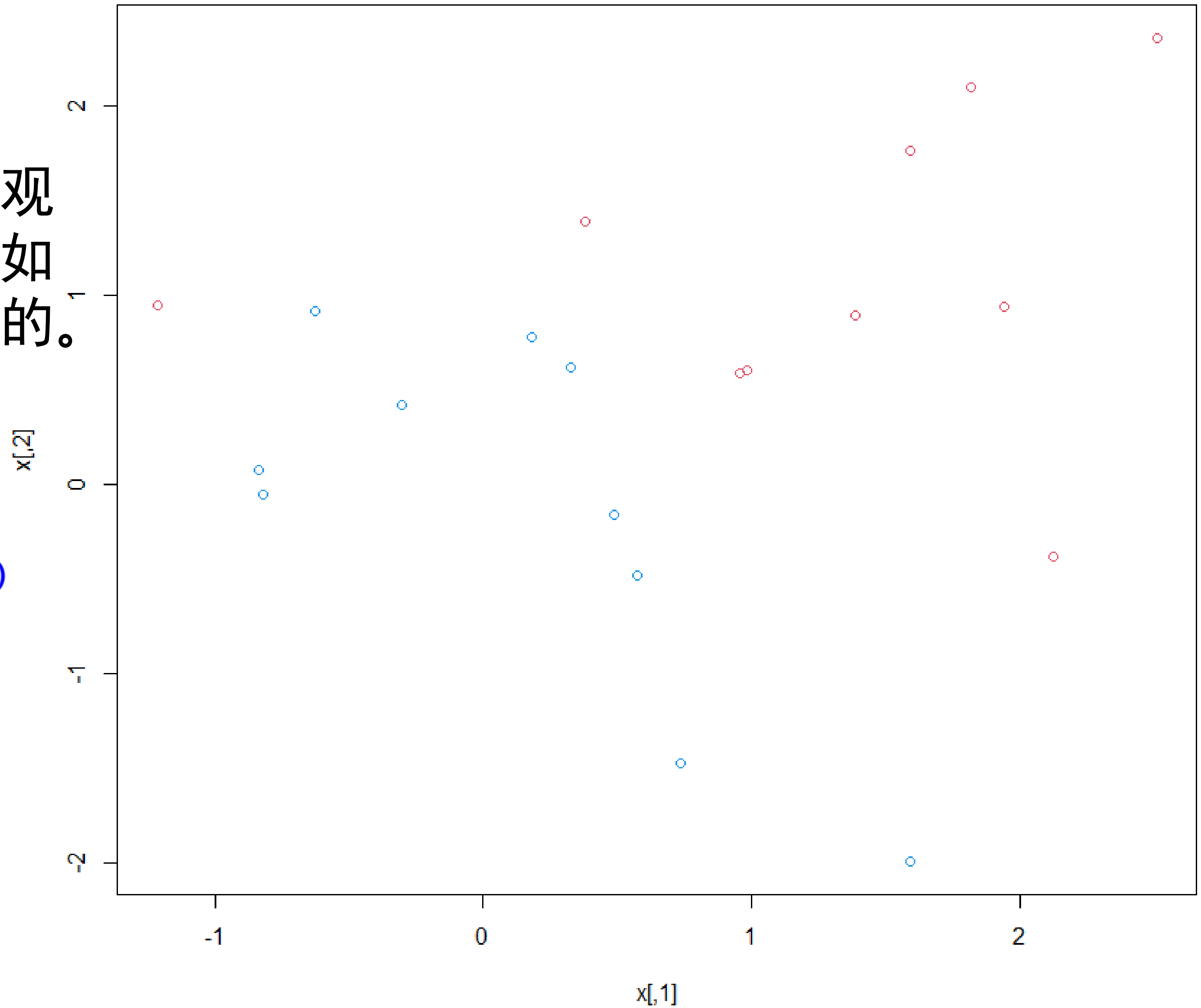
C是正则化参数



03 支持向量分类器例子代码

首先生成属于不同类别的两个观测并检测类别是否可分，结果如如所示：数据并不是线性可分的。

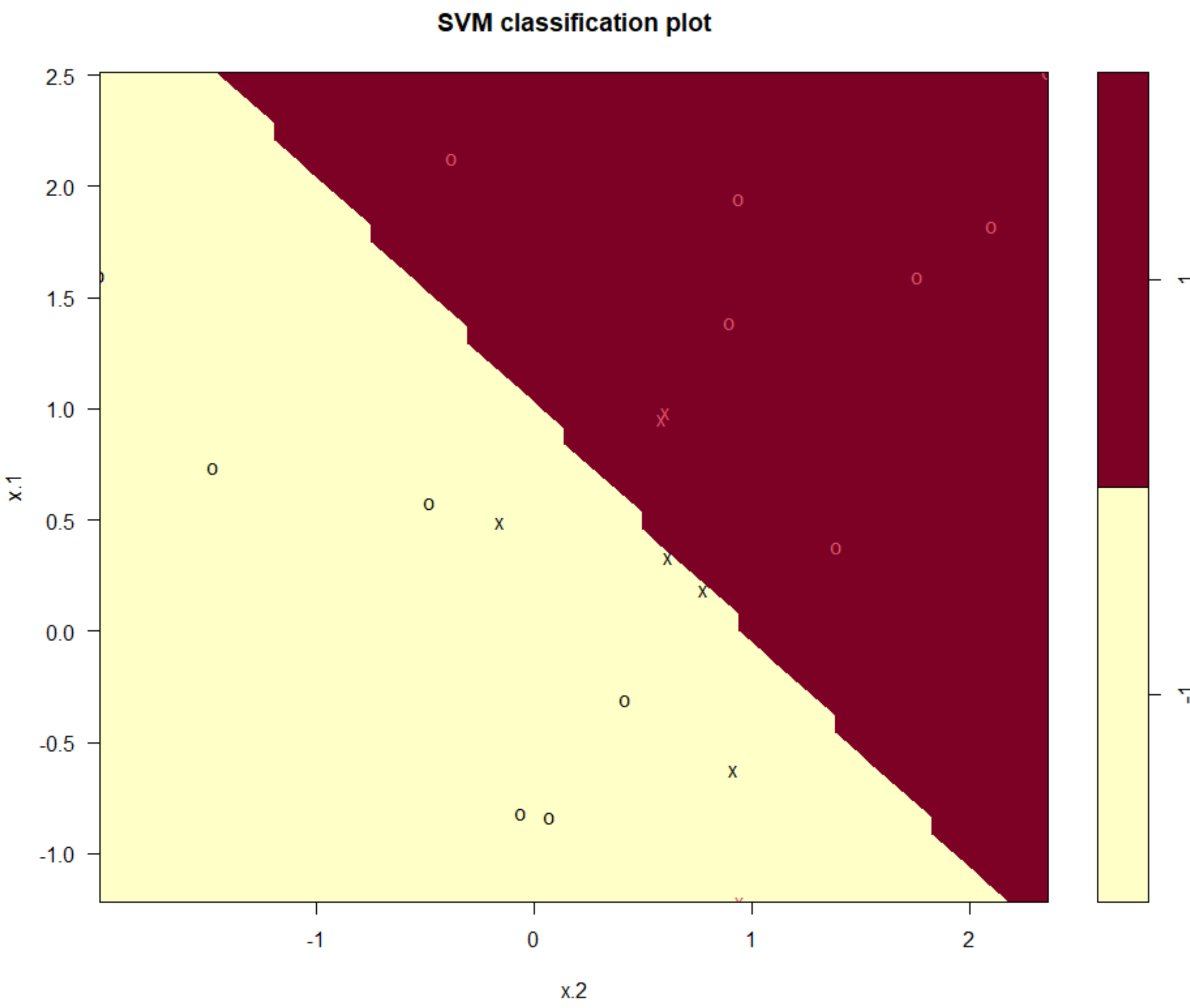
```
> set.seed(1)
> x=matrix(rnorm(20*2),ncol=2)
> y=c(rep(-1,10),rep(1,10))
> x[y==1,]=x[y==1,]+1
> plot(x,col=(3-y))
```



03 支持向量分类器例子代码

首先将响应向量转换成因子变量，并用svm()函数进行分类，然后画出得到的支持向量分类器，最后查看支持向量。

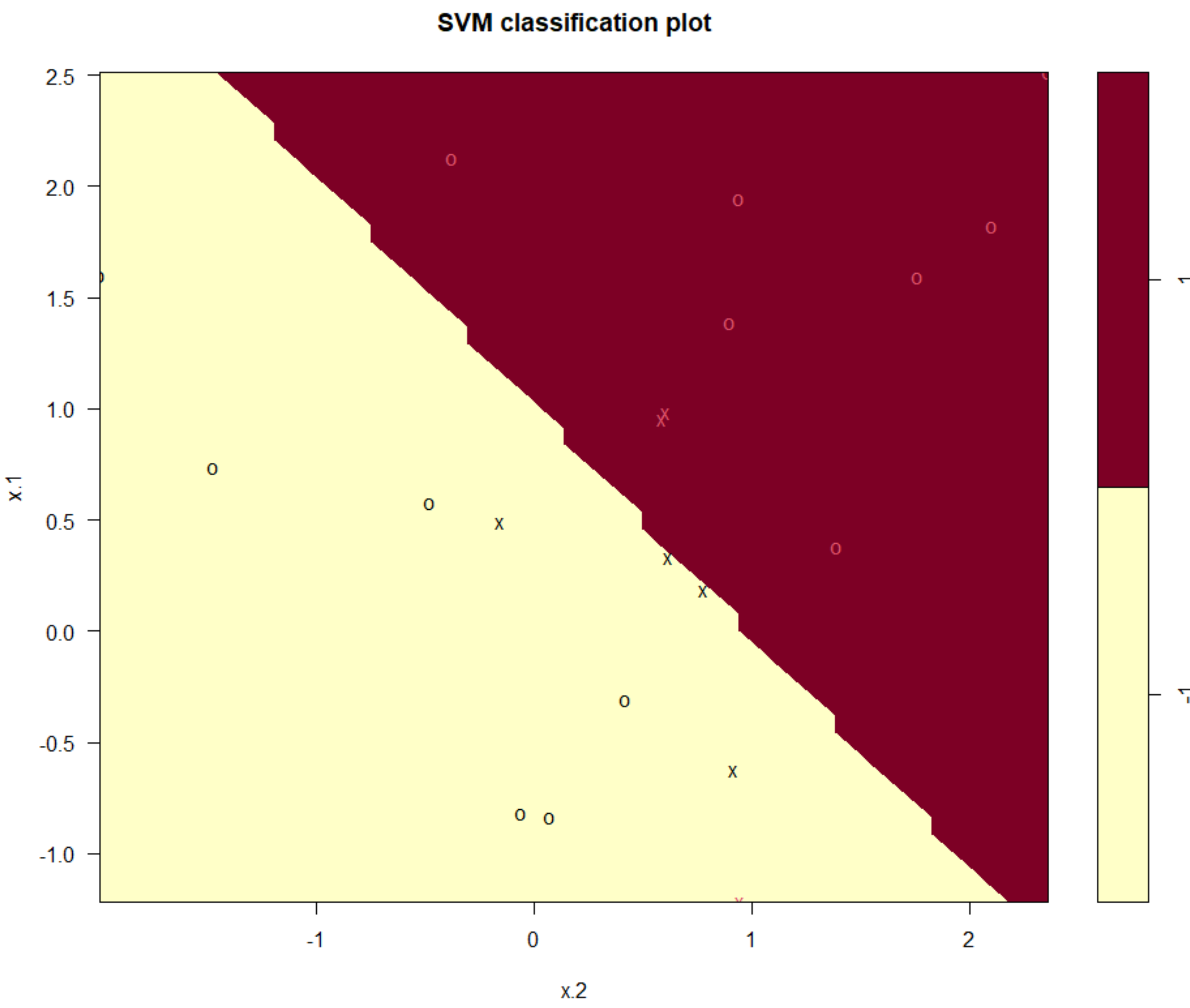
```
> dat=data.frame(x=x,y=as.factor(y))
> library(e1071)
> svmfit=svm(y~.,data=dat,kernel
="linear",cost=10,scale=FALSE)
> plot(svmfit,dat)
> svmfit$index
[1]  1  2  5  7 14 16 17
```



03 支持向量分类器例子代码

使用summary ()命令可以获得支持向量分类器拟合的一些基本信息:

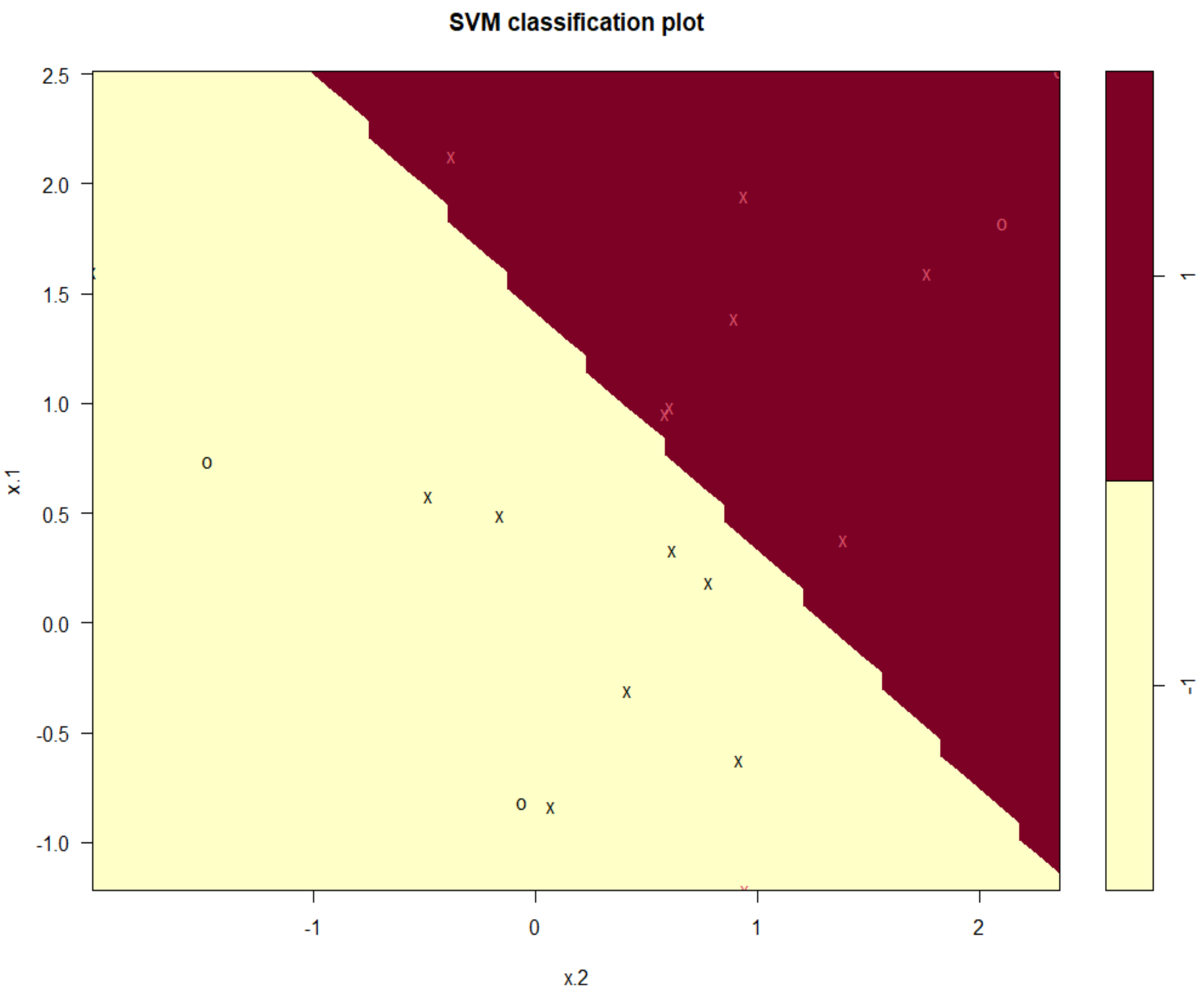
```
> summary(svmfit)

Call:
svm(formula = y ~ ., data = dat,
    kernel = "linear", cost = 10,
    scale = FALSE)


Parameters:
   SVM-Type:  C-classification
 SVM-Kernel:  linear
       cost:  10

Number of Support Vectors:  7

 ( 4 3 )


Number of Classes:  2

Levels:
 -1 1
```



03 支持向量分类器例子代码

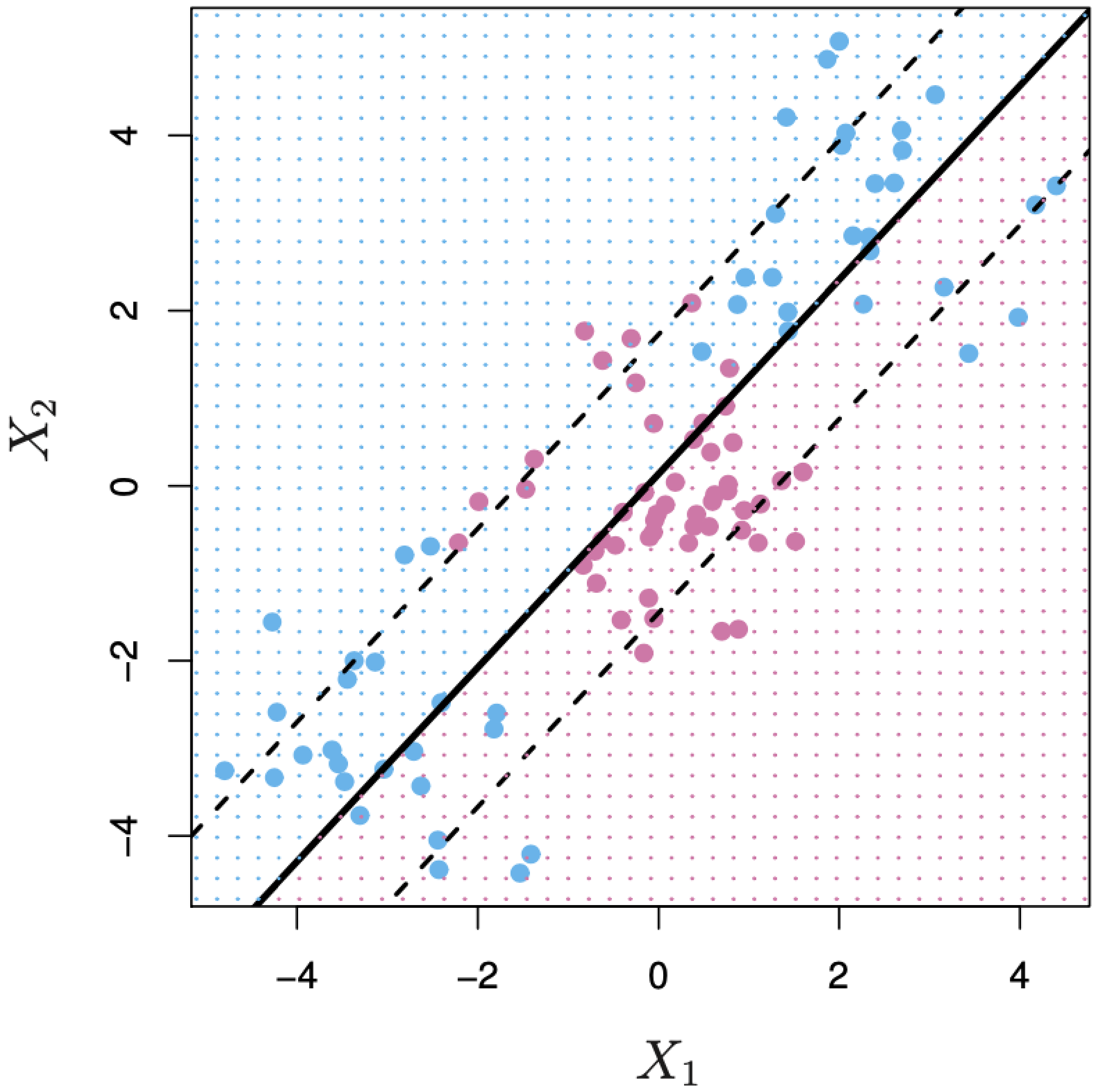
将cost值修改为0.1，
得到更多支持向量

```
> svmfit=svm(y~.,data=dat,kernel
="linear",cost=0.1,scale=FALSE)
> plot(svmfit,dat)
> svmfit$index
 [1]  1  2  3  4  5  7  9 10
 [9] 12 13 14 15 16 17 18 20
```



04

线性边界会失效



有时线性边界根本不起作用，不管C值是多少。

左边的例子就是这样一种情况。

怎么办?

特征扩展

- 通过把样本变换包含进来来扩大特征空间，例如 $X_1^2, X_1^3, X_1X_2, X_1X_2^2, \ldots\ldots$因此从一个p维空间到一个 M > p 维空间。

- 在扩大的空间中拟合一个支持向量分类器。

- 这导致了在原始空间中的非线性决策边界。

特征扩展示例

- 通过把样本变换包含进来来扩大特征空间，例如 $X_1^2, X_1^3, X_1X_2, X_1X_2^2, \ldots\ldots$因此从一个p维空间到一个 $M > p$ 维空间。
- 在扩大的空间中拟合一个支持向量分类器。
- 这导致了在原始空间中的非线性决策边界。

示例:

假设我们使用$(X_1, X_2, X_1^2, X_2^2, X_1X_2)$而不仅是$(X_1, X_2)$。那么决策边界就会是这样的

$$\beta_0 + \beta_1 x_1 + \beta_2 x_2 + \beta_3 x_1^2 + \beta_4 x_2^2 + \beta_5 x_1 x_2 = 0$$

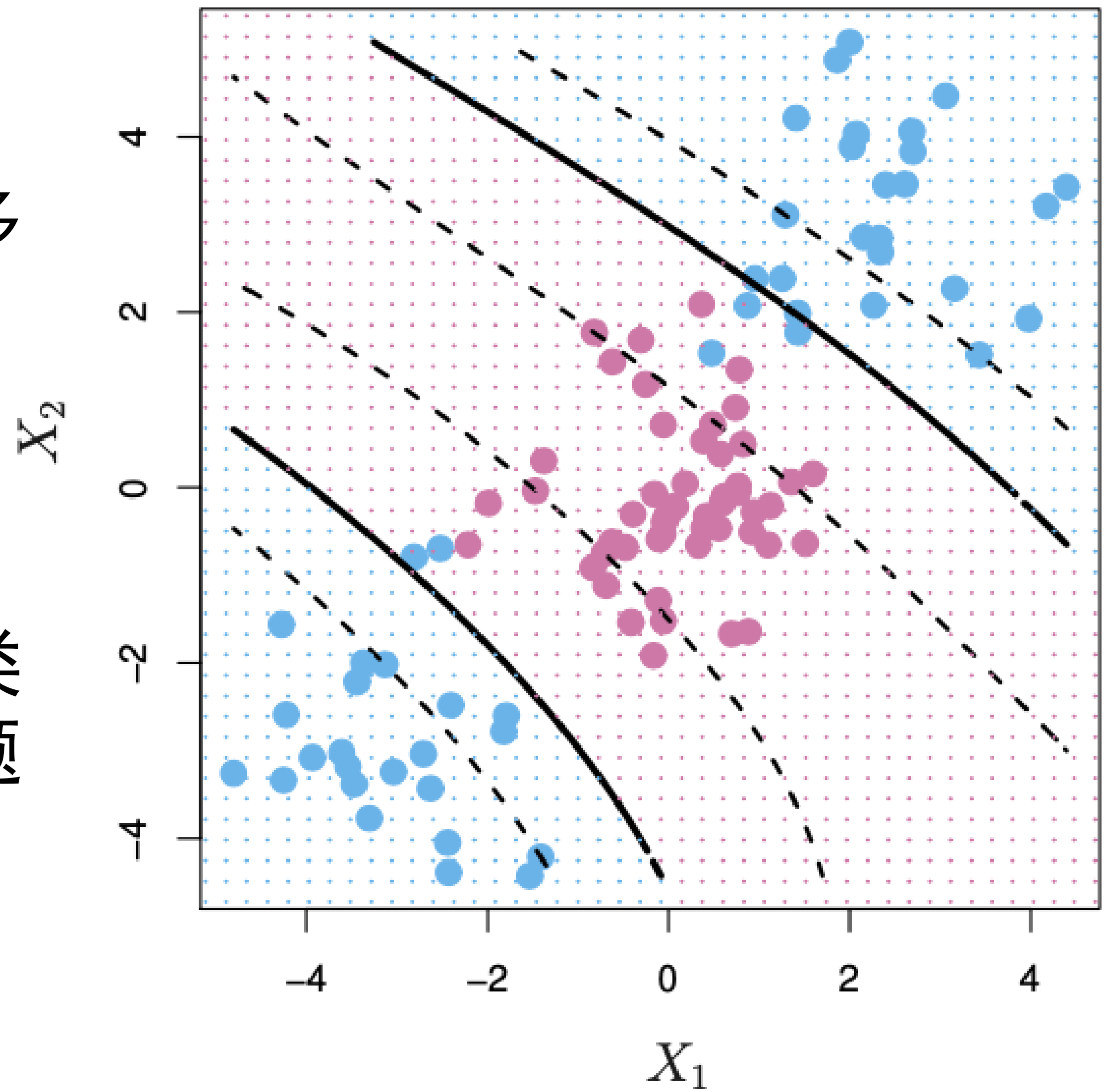
这导致了原始空间(二次圆锥截面)的非线性决策边界。

06 三次多项式

这里我们使用一组三次多项式的基展开

从2个变量到9个

扩大空间的支持向量分类器解决了低维空间的问题



$$\beta_0+\beta_1X_1+\beta_2X_2+\beta_3X_1^2+\beta_4X_2^2+\beta_5X_1X_2+\beta_6X_1^3+\beta_7X_2^3+\beta_8X_1X_2^2+\beta_9X_1^2X_2=0$$

- 多项式(特别是高维的)非常快地变得不可控。
- 有一个更优雅和可控的方法来引入非线性到支持向量分类器 – 通过核函数的使用。
- 在我们讨论这些之前，我们必须了解内积在支持向量分类器中的作用。

08

内积和支持向量

$$\langle x_i, x_{i'} \rangle = \sum_{j=1}^{p} x_{ij} x_{i'j}$$

向量内积

08

内积和支持向量

$$\langle x_i, x_{i'} \rangle = \sum_{j=1}^{p} x_{ij} x_{i'j}$$

向量内积

- 线性支持向量分类器可以表示为

$$f(x) = \beta_0 + \sum_{i=1}^{n} \alpha_i \langle x, x_i \rangle$$

n个参数

内积和支持向量

$$\langle x_i, x_{i'} \rangle = \sum_{j=1}^{p} x_{ij} x_{i'j}$$ 向量内积

•线性支持向量分类器可以表示为

$$f(x) = \beta_0 + \sum_{i=1}^{n} \alpha_i \langle x, x_i \rangle$$ n个参数

•估计参数 α_1，…，α_n 和 β_0，我们只需要 $\binom{n}{2}$ 个内积 $< x_i, x_{i'} >$，在所有成对的训练观察之间。

内积和支持向量

$$\langle x_i, x_{i'} \rangle = \sum_{j=1}^{p} x_{ij} x_{i'j}$$

向量内积

•线性支持向量分类器可以表示为

$$f(x) = \beta_0 + \sum_{i=1}^{n} \alpha_i \langle x, x_i \rangle$$

n个参数

•估计参数 α_1，…，α_n 和 β_0，我们只需要 $\binom{n}{2}$ 个内积 $< x_i, x_{i'} >$，在所有成对的训练观察之间。

•其实，大部分训练观测的 $\hat{\alpha}_i$ 为零，只有支持向量对应的非零:

$$f(x) = \beta_0 + \sum_{i \in \mathcal{S}} \underline{\hat{\alpha}_i \langle x, x_i \rangle}$$

能否一般化？

S是使$\hat{\alpha}_i > 0$的索引 i 的支持集。

（三）核函数和支持向量机

01 核函数和支持向量机

•如果我们可以计算观测值之间的内积，就可以拟合支持向量（SV）分类器。可以相当抽象！

•一些特殊的函数K可以为我们做到这一点 - **核函数（kernel）**。如**多项式核函数**：

$$K(x_i, x_{i'}) = \left(1 + \sum_{j=1}^{p} x_{ij} x_{i'j}\right)^d$$

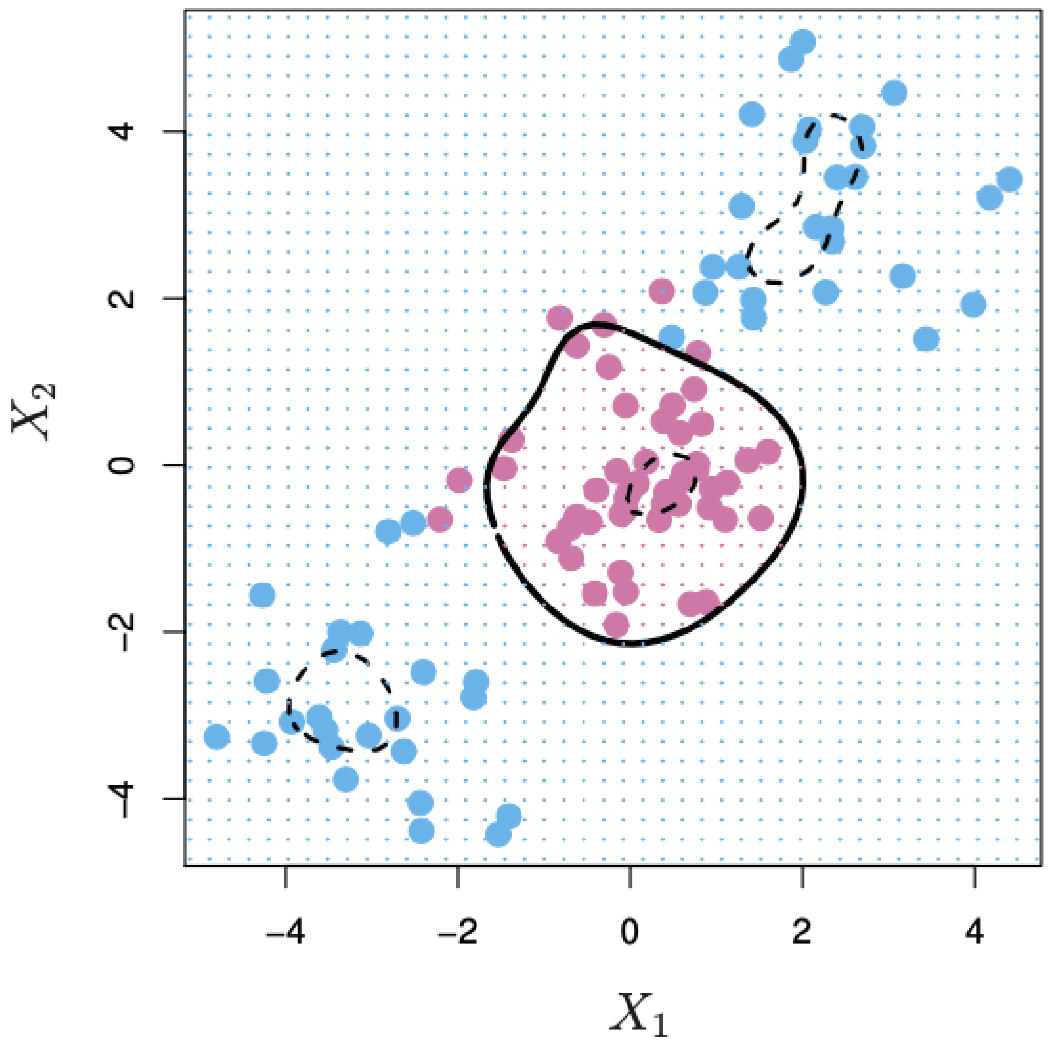
计算 d（正整数）维多项式所需的内积 - $\binom{p+d}{d}$ 个基函数!

对 p = 2 和 d = 2 试试看。

•解有这样的形式 $$f(x) = \beta_0 + \sum_{i \in \mathcal{S}} \hat{\alpha}_i K(x, x_i)$$

径向核函数

$$K(x_i, x_{i'}) = \exp(-\gamma \sum_{j=1}^{p}(x_{ij} - x_{i'j})^2)$$



$$f(x) = \beta_0 + \sum_{i \in \mathcal{S}} \hat{\alpha}_i K(x, x_i)$$

如果测试观测距离训练观测非常远，核函数值会很小，对预测的影响就很小。

隐式特征空间。很高的维度。

控制方差，通过极力压缩最多的维度。

02

核函数的优势

$$K(x_i, x_{i'}) = \left(1 + \sum_{j=1}^{p} x_{ij} x_{i'j}\right)^d$$

$$K(x_i, x_{i'}) = \exp(-\gamma \sum_{j=1}^{p} (x_{ij} - x_{i'j})^2)$$

$$f(x) = \beta_0 + \sum_{i \in \mathcal{S}} \hat{\alpha}_i K(x, x_i)$$

使用核函数，只需为$\binom{n}{2}$个不同样本配对计算核函数K

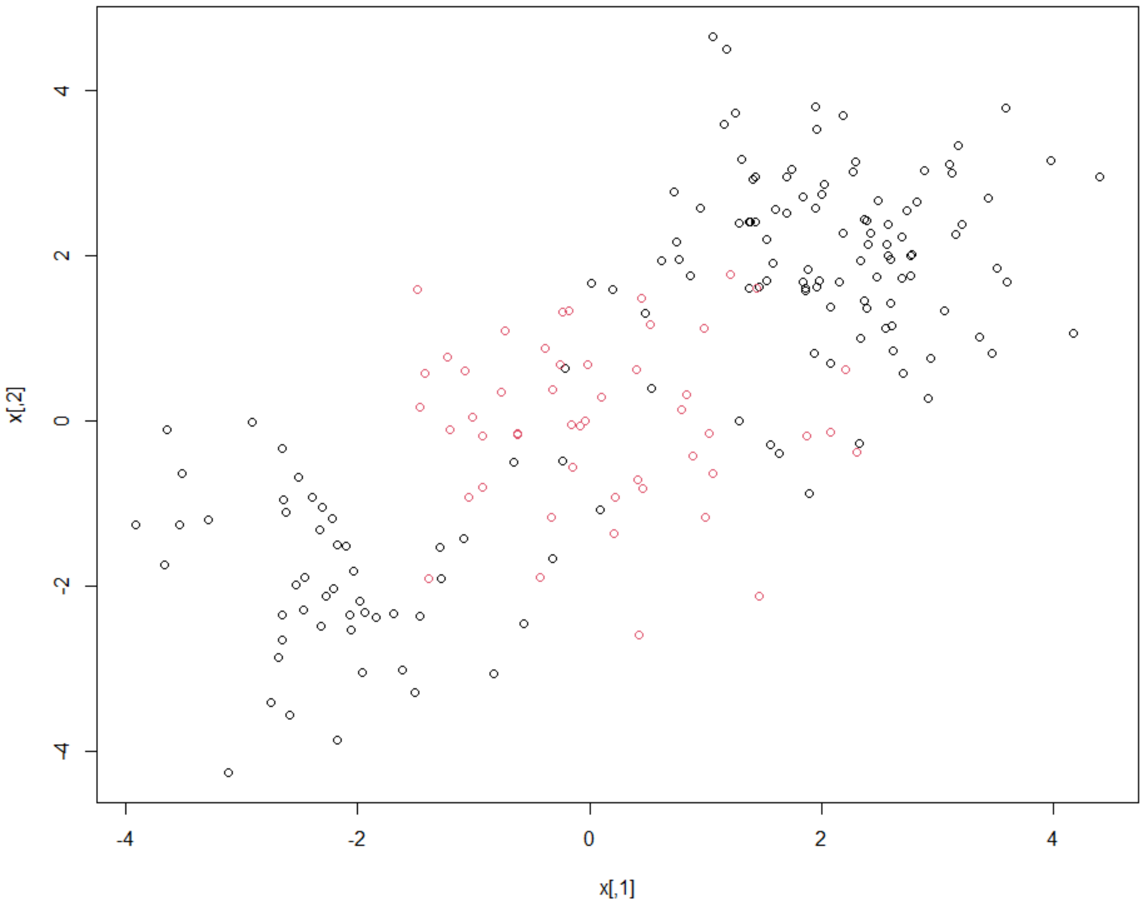
vs.

单纯的扩大特征空间的方法，没有明确的计算量！

02

使用核函数的例子

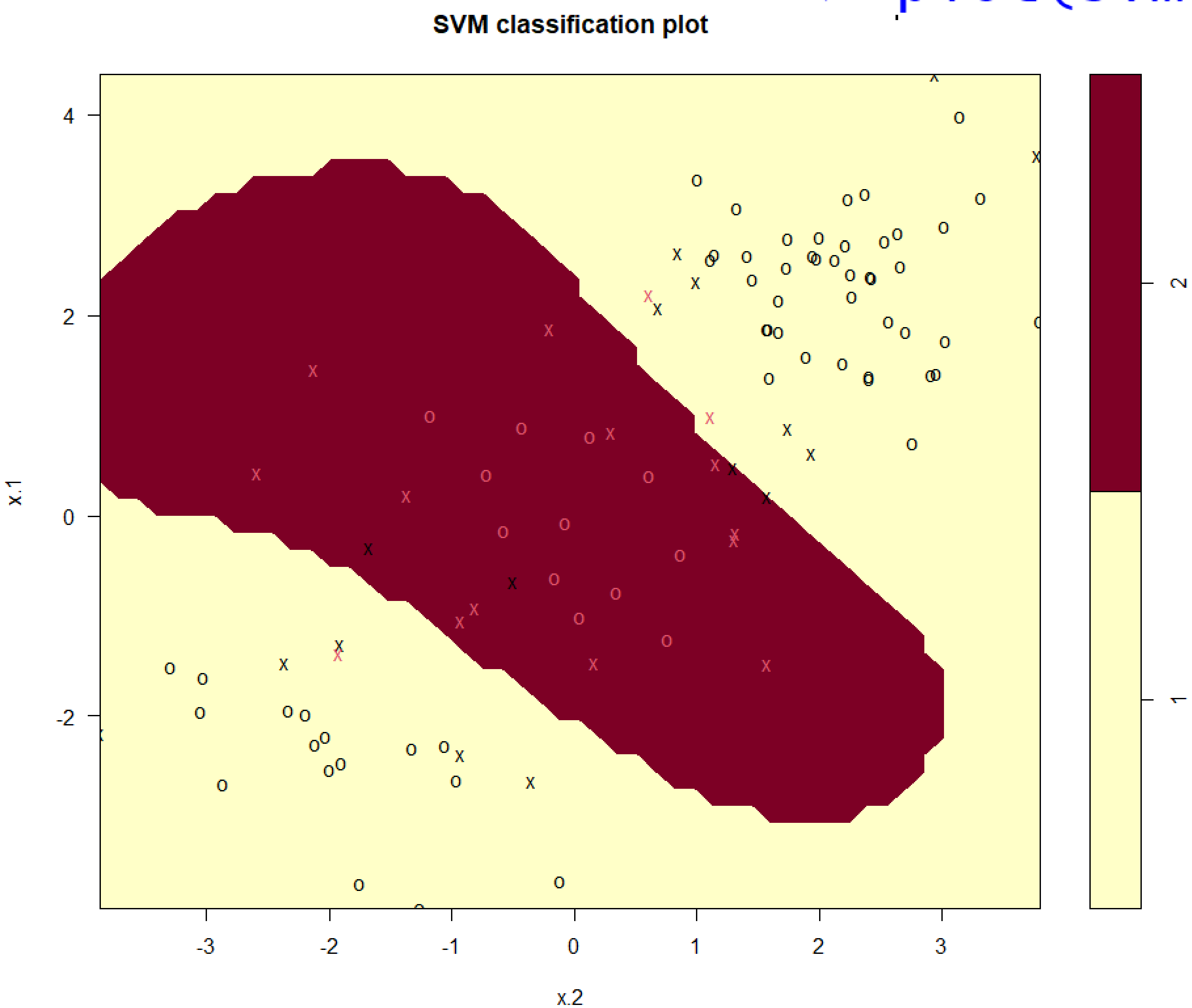
```
> set.seed(1)
> x=matrix(rnorm(200*2),ncol=2)
> x[1:100,]=x[1:100,]+2
> x[101:150,]=x[101:150,]-2
> y=c(rep(1,150),rep(2,50))
> dat=data.frame(x=x,y=as.factor(y))
> plot(x,col=y)
```



使用代码生成一些具有非线性类别边界的数据。
得到的结果如图所示：类别边界是非线性的。

02 使用核函数的例子

```
> train=sample(200,100)
> svmfit=svm(y~.,data=dat[train,],kernel="radial",gamma=1,cost=1)
> plot(svmfit,dat[train,])
```



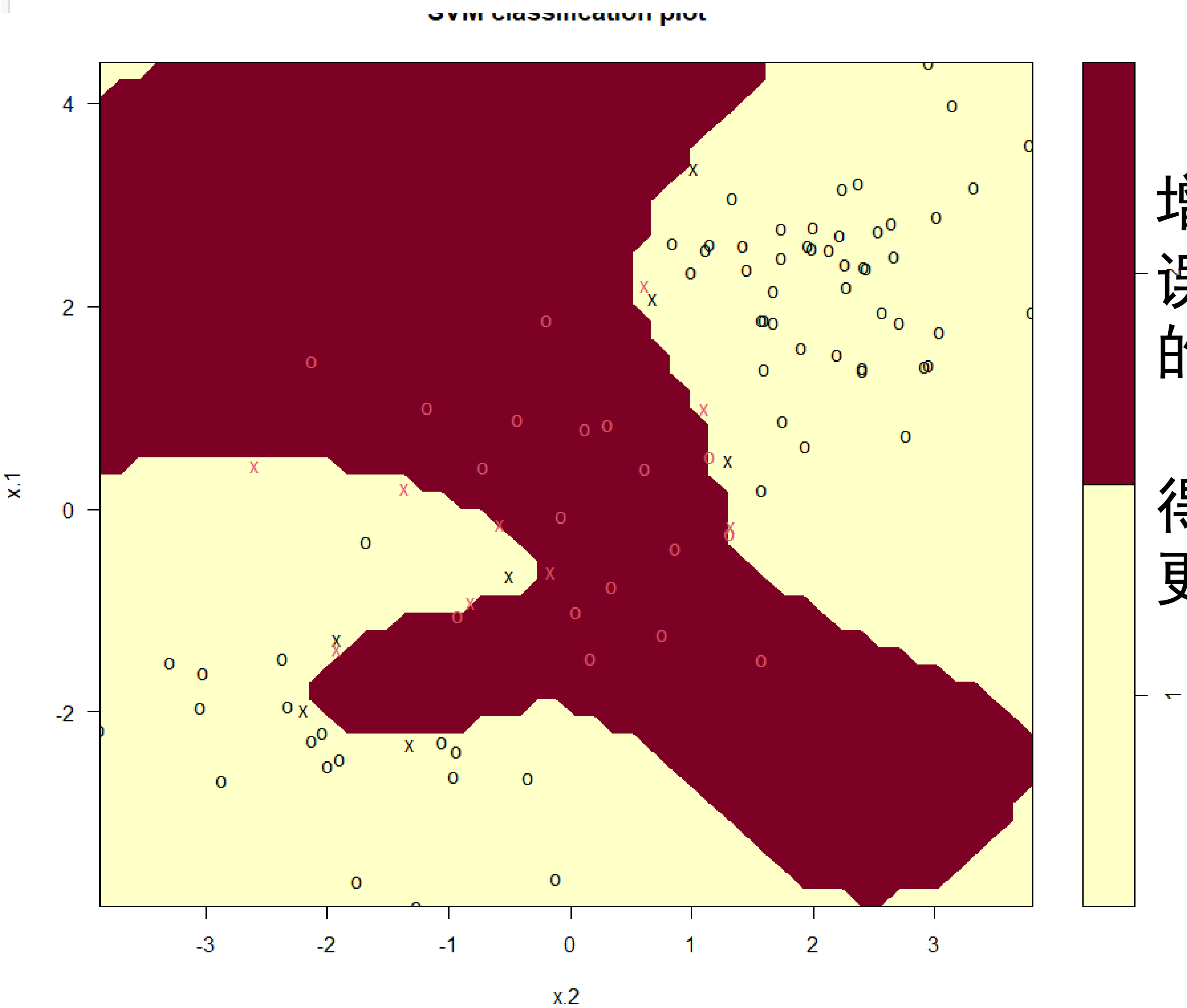
使用 svm ()函数拟合非线性核函数的 SVM，其中kernel设置为radial拟合径向基核函数，并设置gamma的值为1。

得到非线性的决策边界。

```
> summary(svmfit)

Call:
svm(formula = y ~ ., data = dat
[train,
    ], kernel = "radial",
    gamma = 1, cost = 1)


Parameters:
   SVM-Type:  C-classification
 SVM-Kernel:  radial
       cost:  1

Number of Support Vectors:  31

 ( 16 15 )


Number of Classes:  2

Levels:
 1 2
```

利用summary()函数查看svm拟合的信息。

```
> svmfit=svm(y~.,data=dat[train,],kernel="radial",gamma=1,cost=1e5)
```



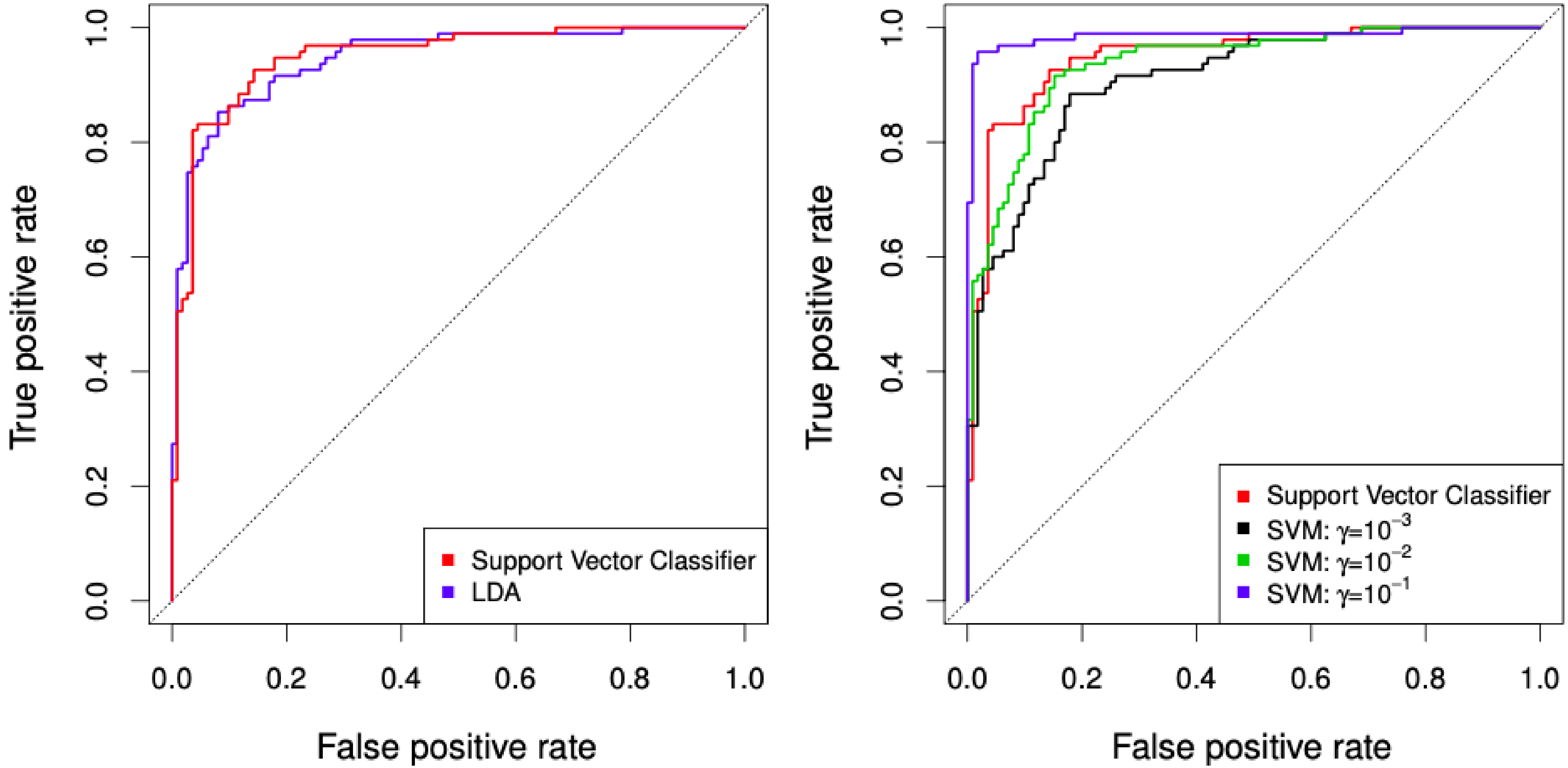
增大cost的值可以减小误差，但是会有过拟合的风险

得到非线性的决策边界更为不规则。

```
> set.seed(1)
> tune.out=tune(svm,y~.,data=dat[train,],kernel
="radial",ranges=list(cost=c(0.1,1,10,100,100),
gamma=c(0.5,1,2,3,4)))
> summary(tune.out)

Parameter tuning of ‘svm’:

- sampling method: 10-fold cross validation

- best parameters:
 cost gamma
    1   0.5

- best performance: 0.07

- Detailed performance results:
    cost gamma error
1     0.1   0.5  0.26
2     1.0   0.5  0.07
```

使用tune()函数选择径向核函数的最优gamma值以及cost值，结果如图所示为cost=1,gamma=0.5。

03 示例：心脏数据

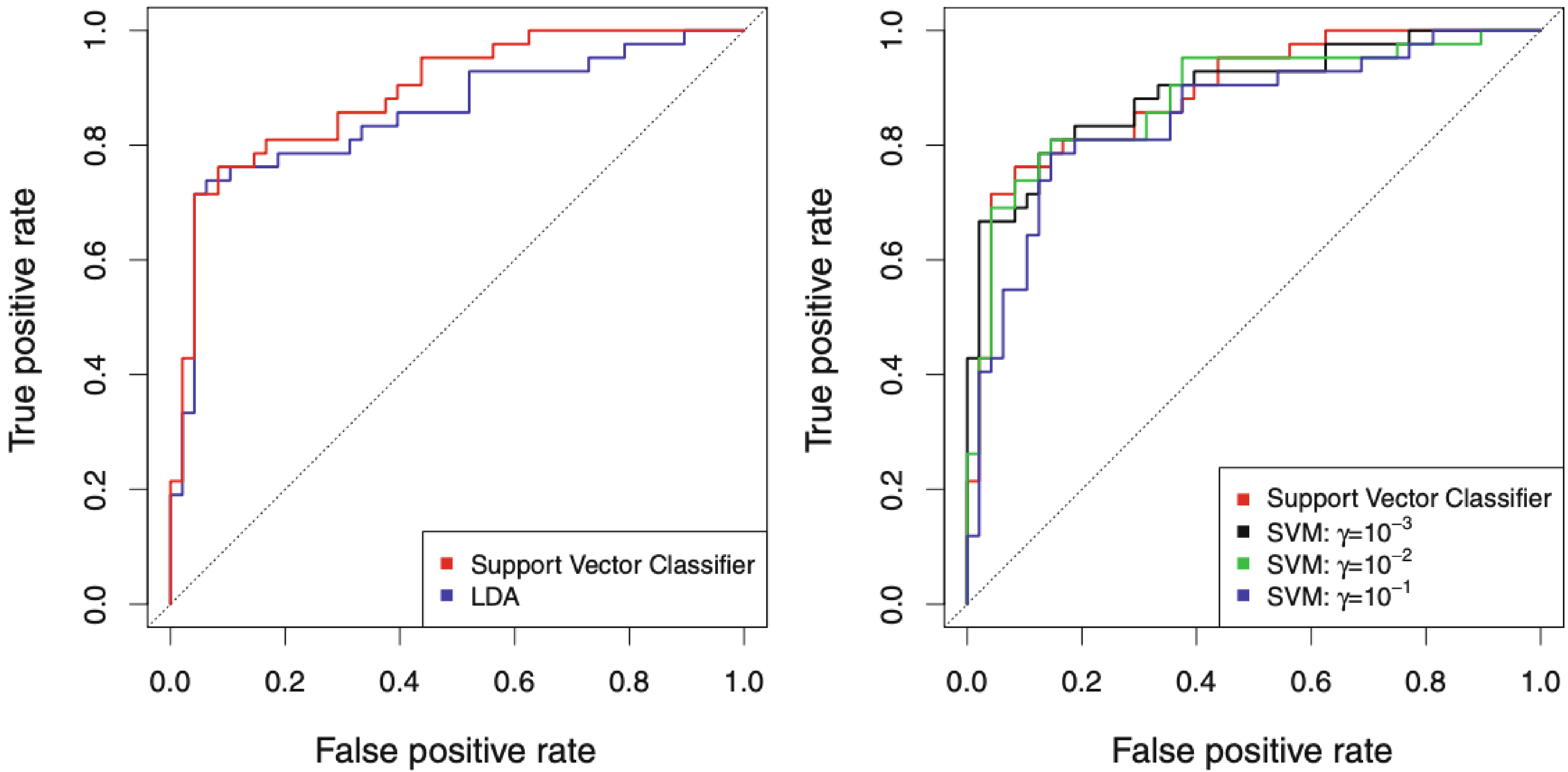


训练集ROC曲线。

左：与LDA比较；右：SVC与SVM比较。

SVM选的径向核函数，参数 γ 如图示。

04 示例继续：心脏数据测试集



测试集ROC曲线。

左：与LDA比较；右：SVC与SVM比较。

SVM选的径向核函数，参数 γ 如图示。

04 示例继续：ROC曲线画法

```
> library(ROCR)
> rocplot=function(pred, truth, ...){
+   predob = prediction(pred, truth)
+   perf = performance(predob, "tpr", "fpr")
+   plot(perf,...)}
```

做一个用预测值和真实值画图的函数

```
> svmfit.opt=svm(y~., data=dat[train,], kernel="radial",
            gamma=2, cost=1,decision.values=T)
> fitted=attributes(predict(svmfit.opt,dat[train,],decision.
  values=TRUE))$decision.values
```

SVM拟合、预测

```
> par(mfrow=c(1,2))
> rocplot(fitted,dat[train,"y"],main="Training Data")
```

调用前面定义的函数画图

```
> svmfit.flex=svm(y~., data=dat[train,], kernel="radial",
    gamma=50, cost=1, decision.values=T)
> fitted=attributes(predict(svmfit.flex,dat[train,],decision.
  values=T))$decision.values
> rocplot(fitted,dat[train,"y"],add=T,col="red")
```

增加gamma，再画图

```
> fitted=attributes(predict(svmfit.opt,dat[-train,],decision.
  values=T))$decision.values
> rocplot(fitted,dat[-train,"y"],main="Test Data")
> fitted=attributes(predict(svmfit.flex,dat[-train,],decision.
  values=T))$decision.values
> rocplot(fitted,dat[-train,"y"],add=T,col="red")
```

测试集画图

（四）多分类

05

SVMs：不只是二分类?

- 按定义SVM适用于 $K = 2$ 分类。那 $K > 2$分类呢?

SVMs：不只是二分类?

•按定义SVM适用于 $K = 2$ 分类。那 $K > 2$分类呢?

OVA One Vs. All, 1对所有。也可写作One Vs. Rest (OVR)
拟合 K 个不同的2分类SVM分类器$\hat{f}_k(x)$， $k = 1, \dots, K$; 然后各类对其余。 x^*分类到 $\hat{f}_k(x^*)$ 最大的那个类。

SVMs：不只是二分类?

•按定义SVM适用于 $K=2$ 分类。那 $K>2$分类呢?

OVA One Vs. All, 1对所有。也可写作One Vs. Rest (OVR)
拟合 K 个不同的2分类SVM分类器$\hat{\mathrm{f}}_k(x)$， $k=1,\ldots,K$; 然后各类对其余。 x^*分类到 $\hat{\mathrm{f}}_k(x^*)$ 最大的那个类。

OVO One Vs. One, 1对1。
拟合所有$\binom{K}{2}$成对分类器$\hat{\mathrm{f}}_{kl}(x)$。x^*分类到赢得最多两两对决的类。

SVMs：不只是二分类?

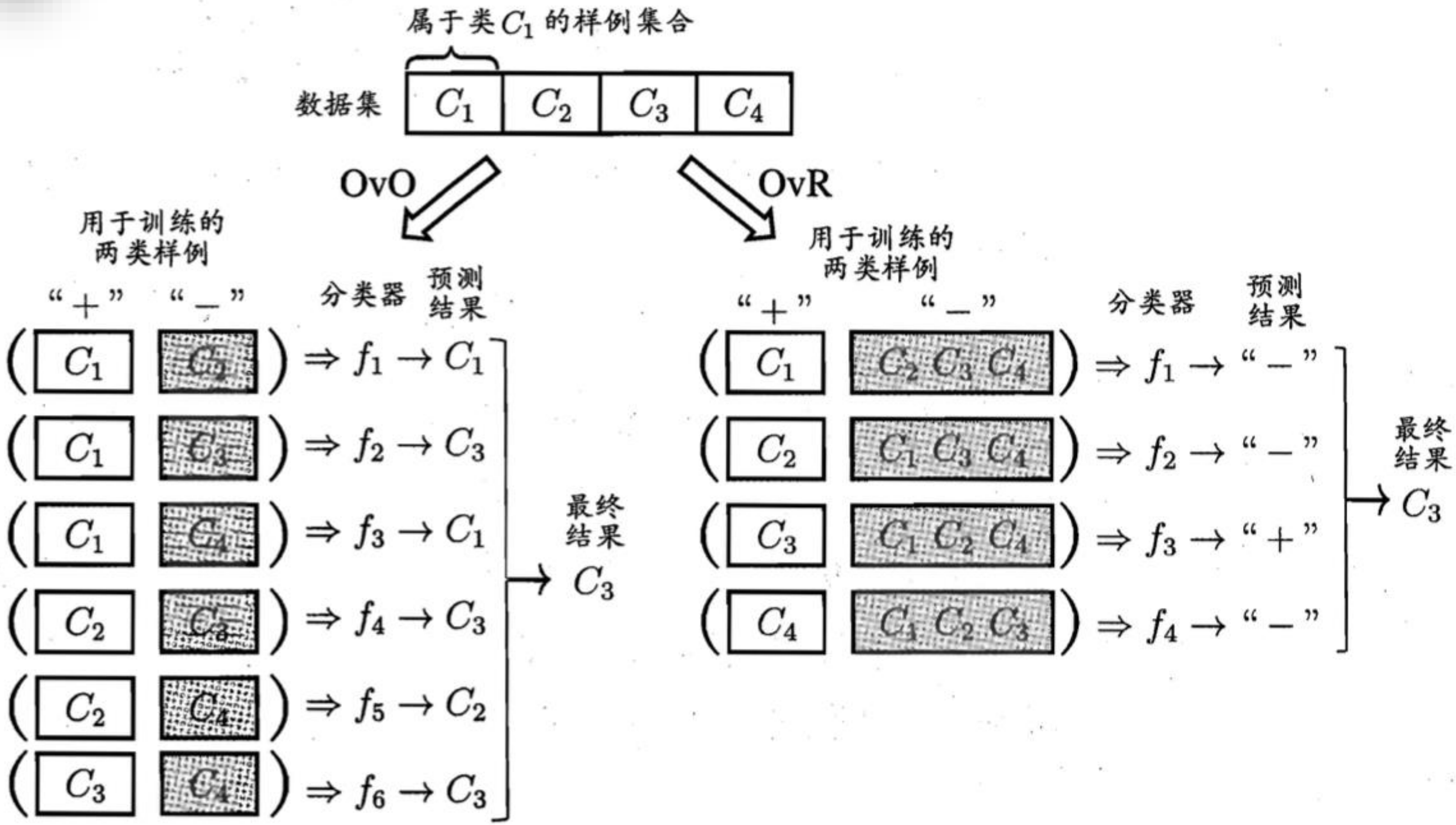
•按定义SVM适用于 $K=2$ 分类。那 $K>2$分类呢?

OVA One Vs. All, 1对所有。也可写作One Vs. Rest (OVR)
拟合 K 个不同的2分类SVM分类器$\hat{f}_k(x)$， $k=1,\ldots,K$; 然后各类对其余。 x^*分类到 $\hat{f}_k(x^*)$ 最大的那个类。

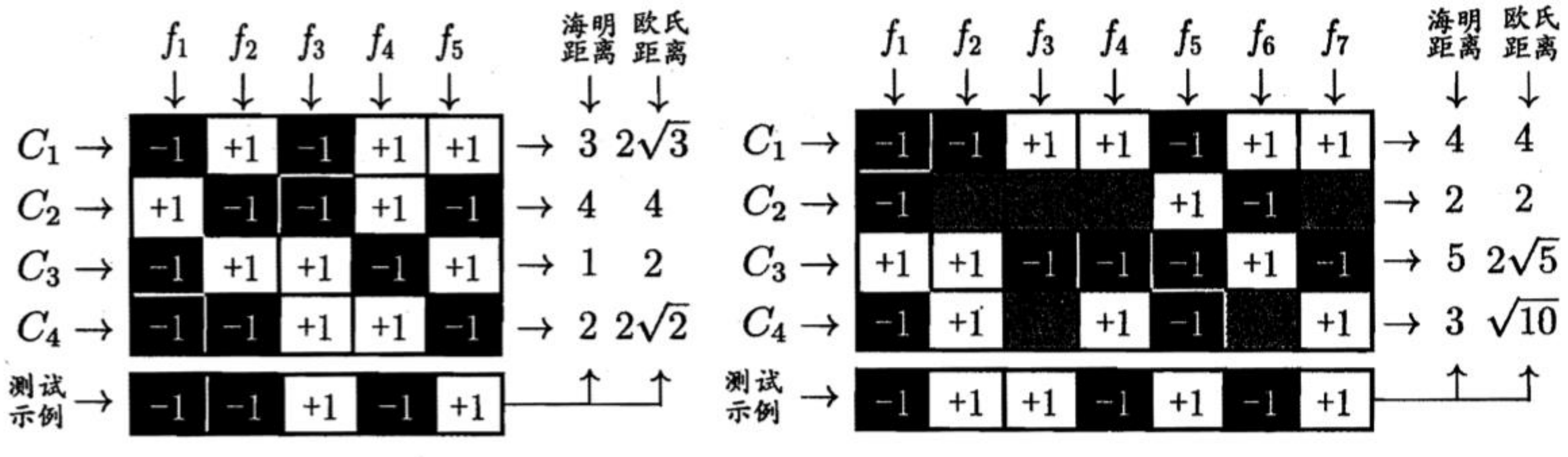
OVO One Vs. One, 1对1。
拟合所有$\binom{K}{2}$成对分类器$\hat{f}_{kl}(x)$。x^*分类到赢得最多两两对决的类。

选择哪一个? 如果K不是太大，就用OVO。

OVO与OVA（OVR）示意图



08 MVM



(a) 二元 ECOC 码　　(b) 三元 ECOC 码

使用ECOC编码（Error Correcting Output Codes, 纠错输出码, 1995年提出）

1）编码：对N个类别做M次划分，每次划分将一部分类划为正类，一部分划为反类，形成二分类训练集，训练出M个分类器。

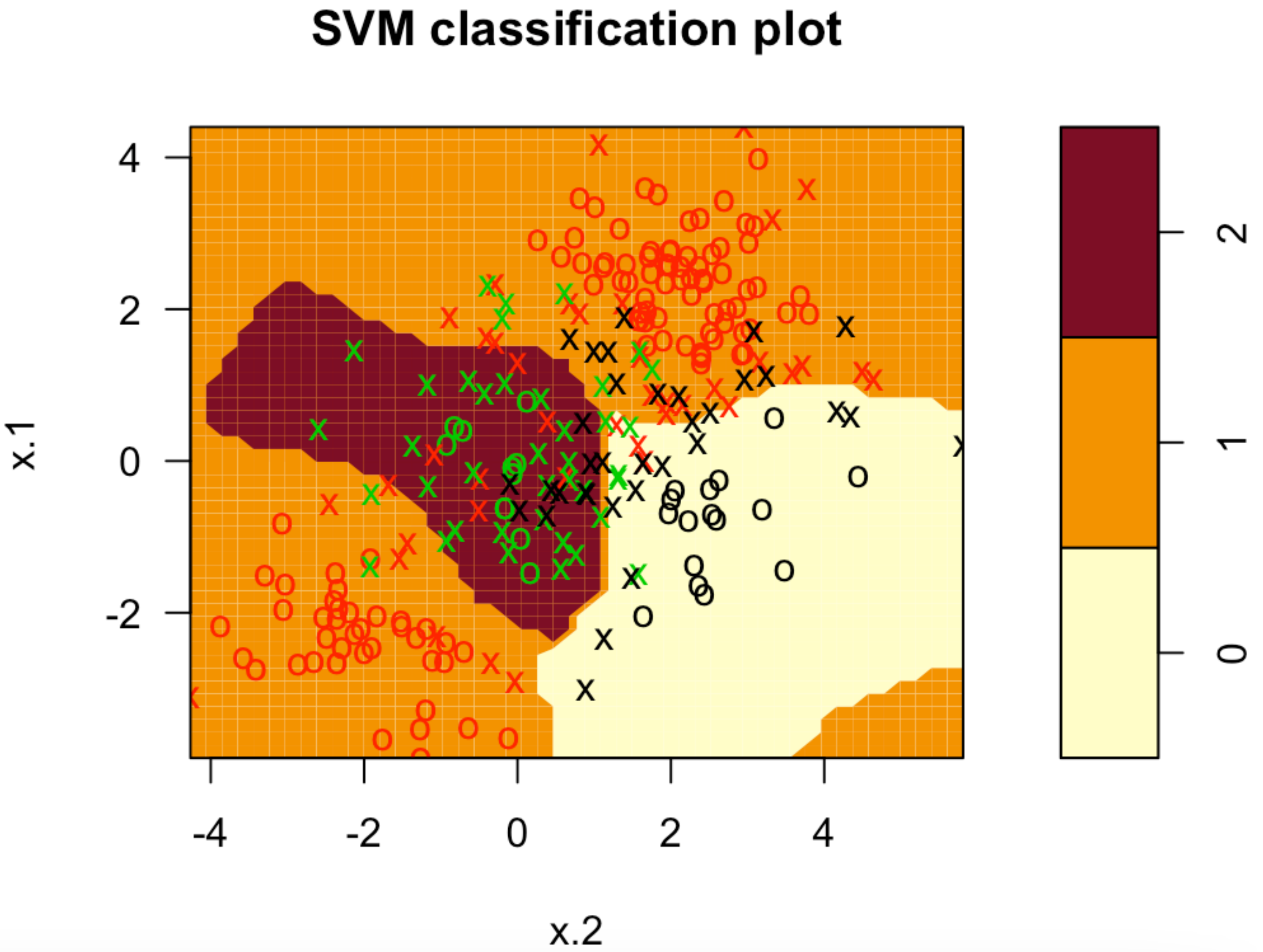
2）解码：对测试样本分类，返回距离最小的作为预测结果。

08

例子代码

```
> set.seed(1)
> x=rbind(x, matrix(rnorm(50*2), ncol=2))
> y=c(y, rep(0,50))
> x[y==0,2]=x[y==0,2]+2
> dat=data.frame(x=x, y=as.factor(y))
> par(mfrow=c(1,1))
> plot(x,col=(y+1))
```

```
> svmfit=svm(y~., data=dat, kernel="radial", cost=10, gamma=1)
> plot(svmfit, dat)
```



svm()使用OVO，3分类

（五）与逻辑斯谛回归的关系

支持向量 vs. 逻辑斯谛回归

•用$f(X)=\beta_0+\beta_1X_1+\cdots+\beta_pX_p$能将支持向量分类器优化再表达为

$$\underset{\beta_0,\beta_1,\ldots,\beta_p}{\text{minimize}}\left\{\sum_{i=1}^{n}\max\left[0,1-y_if(x_i)\right]+\lambda\sum_{j=1}^{p}\beta_j^2\right\}$$

λ大小变化的含义?

形式为：损失函数 + 惩罚项

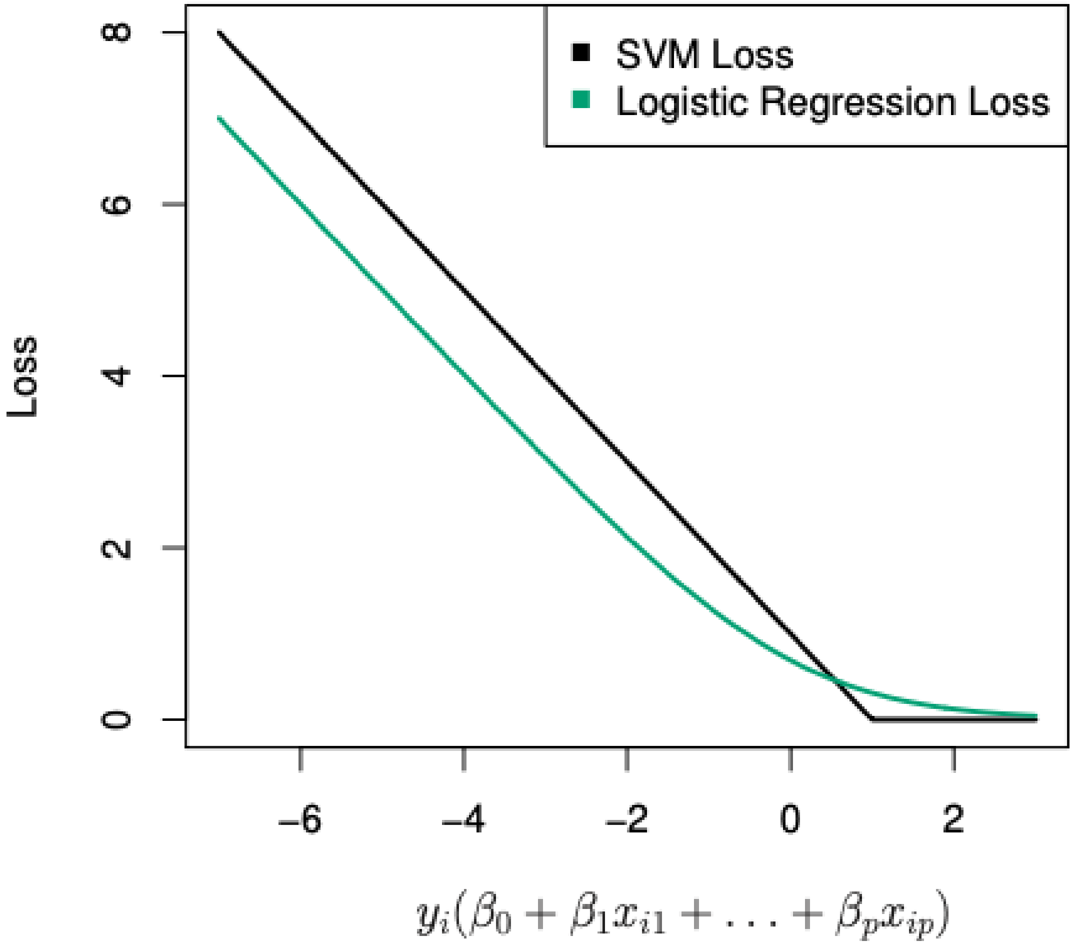
$$L(\mathbf{X},\mathbf{y},\beta)=\sum_{i=1}^{n}\max\left[0,1-y_i(\beta_0+\beta_1x_{i1}+\ldots+\beta_px_{ip})\right]$$

这个损失函数的形式为Hinge损失(铰链)。非常类似于logistic回归中的“损失”（负对数似然）。

支持向量 vs. 逻辑斯谛回归

- 用$f(X)=\beta_0+\beta_1X_1+\cdots+\beta_pX_p$能将支持向量分类器优化再表达为

$$\underset{\beta_0,\beta_1,\ldots,\beta_p}{\text{minimize}}\left\{\sum_{i=1}^{n}\max\left[0,1-y_if(x_i)\right]+\lambda\sum_{j=1}^{p}\beta_j^2\right\}$$



10

用哪个:支持向量机还是逻辑斯谛回归

- 当类别(几乎)可分离时，SVM比LR做得更好。LDA也是如此。

- 不可分离的时候，LR比较合适。

- 如果你想估计概率，选择LR。

- 对于非线性边界，核支持向量机很受欢迎。也可以使用核函数连同LR和LDA，但计算开销更大。

用哪个:支持向量机还是逻辑斯谛回归

el071 库能够实现许多统计学习方法。特别是，如果在参数设置中使用 kernel= “linear”，svm() 函数可以用来拟合支持向量分类器，其中的cost 参数用来设置观测穿过间隔的成本。

如果 cost 参数值较小，那么间隔就会很宽，许多支持向量会落在间隔上或者穿过间隔。如果 cost 参数值较大，那么间隔就会很窄，更少的支持向量会落在间隔上或者穿过间隙。