另类解读SVM：从损失函数说起

0. 参考资料

本笔记主要参考台大李宏毅老师2016年秋季机器学习课程中对SVM的讲解：

以及李航老师的《统计学习方法》、周志华老师的《机器学习》中的相关内容。

1. 损失函数

考虑简单的二分类问题，数据样本为$(x^1,\hat{y}^1),(x^2,\hat{y}^2),\ldots,(x^n,\hat{y}^n)$，数据样本的标签$\hat{y}^n=+1,-1$。我们可以构造一个预测函数$f(x)$和判别函数$g(x)$，使得当$f(x)>0$时，$g(x)=1$；$f(x)<0$时，$g(x)=-1$。那么我们可以很方便的定义如下的loss函数：

$$L(f)=\sum_n \delta\left(g\left(x^n\right)\neq \hat{y}^n\right)\text{即当\$}g\left(x^n\right)\neq\hat{y}^n\text{\$时，\$}L(f)\text{\$的值} \tag{1.1}$$

即当$g\left(x^n\right)\neq\hat{y}^n$时，$L(f)$的值为0，反之，$L(f)$值为1。式（1.1）的意义是$g$得到的错误结果的次数。这是我们理想情况下的loss函数。然而这个loss很难进行微分，因为它是不连续的，于是我们需要寻求其他近似的loss函数来代替它。

将式（1.1）改写为：

$$L(f)=\sum_n l\left(f\left(x^n\right),\hat{y}^n\right) \tag{1.2}$$

我们可以用$\hat{y}^n f\left(x^n\right)$来描述分类的正确性（即函数间隔）：当$y^n=+1$时，有$f(x)>0$，并且$f(x)$越大，分类的置信度越高；当$y^n=-1$时，有$f(x)<0$，并且$f(x)$越小，，分类的置信度越高。总结起来就是，$\hat{y}^n f\left(x^n\right)$越大，分类结果越好，同时对应的loss值越低。

我们来看几个常见的loss函数：

- **Square Loss**

根据我们之前的讨论，其表达式是：

$$l\left(f\left(x^n\right),\hat{y}^n\right)=\left(\hat{y}^n f\left(x^n\right)-1\right)^2 \tag{1.3}$$

我们可以这样来理解这个loss：当$y^n=+1$时，要求$f(x)$接近1，loss是比较小的；当$y^n=-1$时，$f(x)$接近-1，loss是比较小的。

- **Sigmoid + Square Loss**

其表达式为：

$$l\left(f\left(x^n\right),\hat{y}^n\right)=\left(\sigma\left(\hat{y}^n f(x)\right)-1\right)^2 \tag{1.4}$$

较小的loss值要求当$y^n=+1$时，$\sigma(f(x))$要接近于1；当$y^n=-1$，$\sigma(f(x))$要接近于0（利用$\sigma(-x)=1-\sigma(x)$得到）。

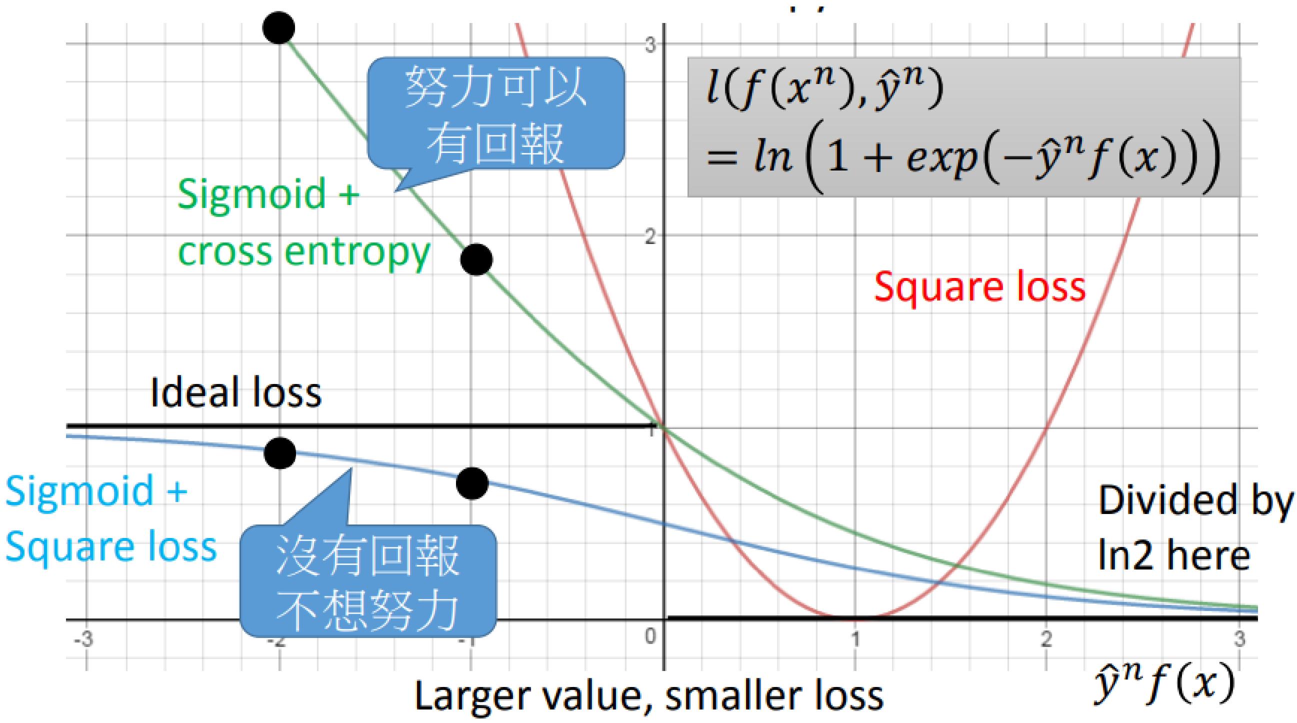
- **Sigmoid + Cross Entropy**

表达式为:

$$l\left(f\left(x^{n}\right), \hat{y}^{n}\right)=\ln(1+\exp(-\hat{y}^{n} f(x))) \tag{1.5}$$

这是我们在做logistic regression时使用的loss。

我们画出这三个loss函数的曲线图，如下:



对于Square Loss来说，当$\hat{y}^{n} f\left(x^{n}\right)$的值变大时，Loss值也会变大，这显然是不合理的，因此它不是我们要寻求的loss。

对于Sigmoid + Square Loss来说，函数曲线的斜率很小，相应的会造成优化时的梯度变化较小，模型会比较没有动力进行优化。

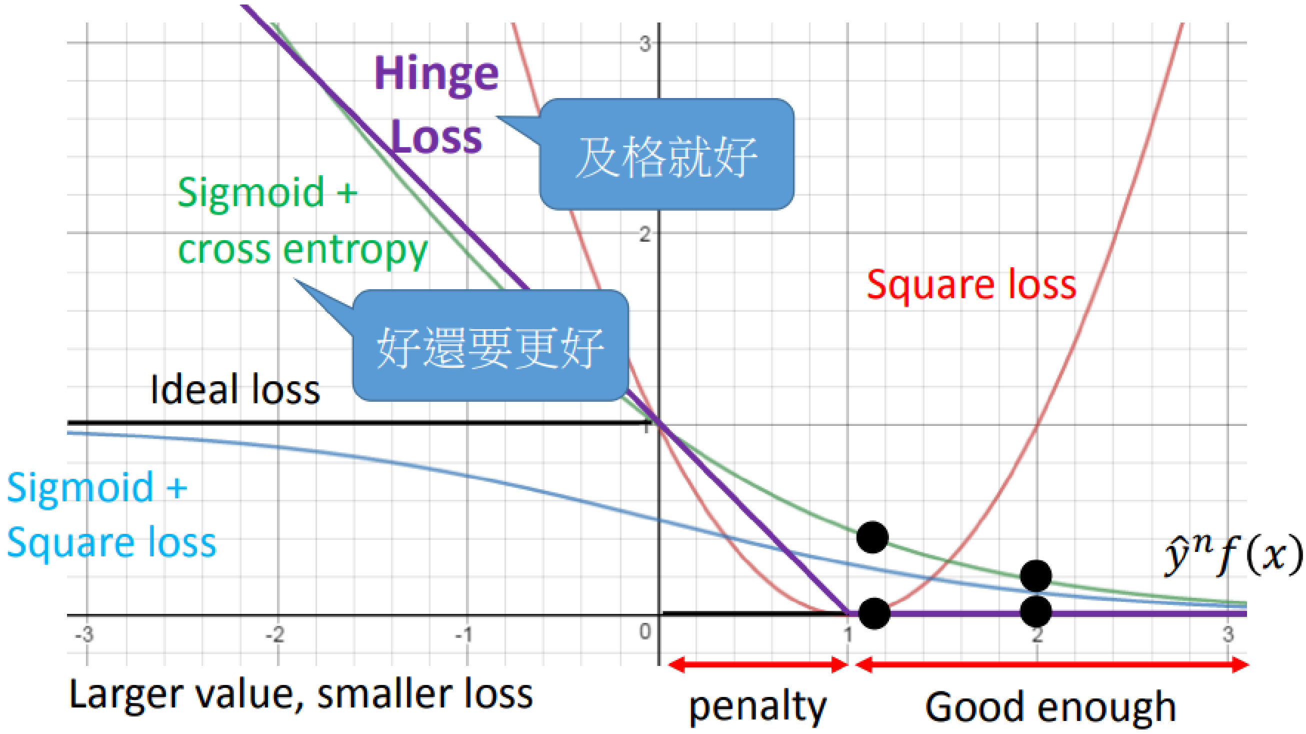
对于Sigmoid + Cross Entropy Loss来说，当$\hat{y}^{n} f\left(x^{n}\right)<0$，即分类错误时，对应的loss曲线斜率较大，这时梯度下降很快，模型会有动力朝着正确的结果优化，因此这是一个合理的loss函数的选择。注意在图中，我们将loss除以了ln2，这不影响优化的结果，但是可以让这个loss成为理想loss的一个tight up bound。也就是说，当我们选择sigmoid + cross entropy loss时，我们实际上是在优化理想loss的一个上界。

如果我们使用式（1.5）的logistic损失函数来代替理想损失函数，则几乎就得到了logistic回归模型。在这种情况下，SVM与logistic回归的优化目标相近，性能也相当。

下面我们来看另一个非常重要的、在SVM中被广泛使用的loss函数——**Hinge Loss**，它的表达式如下:

$$l\left(f\left(x^{n}\right), \hat{y}^{n}\right)=\max \left(0,1-\hat{y}^{n} f(x)\right) \tag{1.6}$$

下面给出这个loss函数的图像:



从图像上可以看出，Hinge Loss不仅要求模型分类正确，还要求分类正确的置信度大过一个margin，loss值才是0，此时优化结束。

hinge损失有一块“平坦”的零区域，这使得SVM的解具有稀疏性，而logistic损失是光滑的单调递减函数，不能导出类似支持向量的概念，因此logistic回归的解依赖于更多的训练样本，其预测开销更大。

2. 经验风险最小化

有了loss函数的定义以后，我们可以直接最小化以下的目标函数：

$$L(f)=\sum_n l\left(f\left(x^n\right), \hat{y}^n\right)+\lambda\|w\|_2 \tag{2.1}$$

上式中的第一项即为**经验风险（empirical risk）**，第二项为**正则项**，λ是正则化系数。我们可以把式（1.6）的hinge loss代入式（1.7），得到：

$$L(f)=\sum_n \max \left(0,1-\hat{y}^n f(x)\right)+\lambda\|w\|_2 \tag{2.2}$$

式（2.2）似乎和我们常见的SVM的形式有所区别，接下来我们对它进行改写，来说明式（2.2）实际上是和软间隔SVM等价的。

我们定义松弛变量：

$$\varepsilon^n=\max \left(0,1-\hat{y}^n f(x)\right) \tag{2.3}$$

那么式（2.2）就变为：

$$L(f)=\sum_n \varepsilon^n+\lambda\|w\|_2 \tag{2.4}$$

同时，在**最小化式（2.4）的loss的前提下**，式（2.3）是和下面两个约束条件等价的：

$$\begin{aligned} &\varepsilon^n \geq 0 \\ &\varepsilon^n \geq 1-\hat{y}^n f(x) \end{aligned} \tag{2.5}$$

这里需要注意的是，一般情况下，式（2.3）和式（2.5）代表的两个不等式是不等价的，比如说，为了满足式（2.5），我们只要需要取$\varepsilon^n=\infty$即可，但这并不满足式（2.3）。**只有当在最小化loss的前提下**，式（2.3）和式（2.5）才是等价的。

于是，将式（2.4）和式（2.5）总结一下，就可以得到下面的优化问题：

$$\begin{aligned} \min \quad & L(f)=\sum_n \varepsilon^n+\lambda\|w\|_2 \\ \text{s.t.} \quad & \varepsilon^n \geq 0 \\ & \hat{y}^n f(x) \geq 1-\varepsilon^n \end{aligned} \tag{2.6}$$

再把目标函数改写为等价的形式，有

$$\begin{aligned} \min \quad & L(f)=\frac{1}{2}\|w\|_2^2+C\sum_n \varepsilon^n \\ \text{s.t.} \quad & \varepsilon^n \geq 0 \\ & \hat{y}^n f(x) \geq 1-\varepsilon^n \end{aligned} \tag{2.7}$$

这就是经典的软间隔SVM的形式！因此，我们在求解软间隔SVM时，实际上就是以hinge loss为目标，在训练数据集上进行经验风险最小化。

事实上，我们可以把式（2.7）目标函数中的ε^n替换成其他loss函数，得到其他学习模型，这些模型的性质与所使用的替代loss函数直接相关，但它们具有一个共性：优化目标中的第一项用来描述划分超平面的“间隔”大小，另一项用来表述训练集上的误差，写成一般形式：

$$\min_f \quad \Omega(f)+C\sum_n l\left(f\left(x^n\right),\hat{y}^n\right) \tag{2.8}$$

其中$\Omega(f)$称为**结构风险（structural risk）**，用于描述模型f的某些性质；第二项$l\left(f\left(x^n\right),\hat{y}^n\right)$称为**经验风险（empirical risk）**用于描述模型与训练数据的契合程度；C用于对二者进行折中。

从经验风险最小化的角度来看，$\Omega(f)$表述了我们希望获得具有何种性质的模型（例如希望获得复杂度较小的模型），这为引入领域知识和用户意图提供了途径；另一方面，该信息有助于削减假设空间，从而降低了最小化训练误差的过拟合风险。从这个角度来说，式（2.8）所代表的就是式（2.4）的正则化问题，C可以视为正则化系数。