『我爱机器学习』深入理解SVM(二) – 核函数和软边距

2018年3月24日 (https://www.hrwhisper.me/machine-learning-support-vector-machine-2-kernel-function-and-soft-margin-svm/) hrwhisper (https://www.hrwhisper.me/author/hrsay/) 1 Comment (https://www.hrwhisper.me/machine-learning-support-vector-machine-2-kernel-function-and-soft-margin-svm/#comments) 651 views

本文尽可能通俗、详细的介绍支持向量机SVM内容。

包括

- 核函数
- 软边距SVM
- 其它
    - Hinge损失
    - 概率SVM
    - 核化逻辑回归

核函数

若我们将原始数据从R^d空间通过$\mathbf{z} = \mathbf{\Phi(x)}$映射到高维空间$R^{\tilde{d}}$以解决线性不可分的问题，则SVM原始问题为：

$$\begin{aligned}\min_{\mathbf{w,b}} \quad & \frac{1}{2}\mathbf{w^T w}\\ \text{st.} \quad & y_i(\mathbf{w^T z} + b) \ge 1, \qquad i = 1, 2, \cdots, n\end{aligned}$$

SVM的对偶问题为：

$$
\begin{aligned}
\max_{\boldsymbol{\alpha}} \quad & \sum_{i=1}^{n} \alpha_i - \frac{1}{2} \sum_{i=1}^{n} \sum_{j=1}^{n} \alpha_i \alpha_j y_i y_j \mathbf{z_i^T z_j} \\
\text{s. t.} \quad & \alpha_i \geq 0, i = 1, 2, \cdots, n \\
& \sum_{i=1}^{n} \alpha_i y_i = 0
\end{aligned}
$$

上一篇博文最后提到，对偶问题仍然依赖于数据维度$\tilde{d}$，因为有$\mathbf{z_i^T z_j}$内积运算。当新空间维度很大，甚至是无穷维的时候，这将成为一个计算的瓶颈。

核技巧和核函数

注意$\mathbf{z_i^T z_j} = \mathbf{\Phi(x_i)^T \Phi(x_j)}$的计算顺序如下：

1. 先进行空间变换
2. 进行内积

如果将两步合并，会不会快一点?

林轩田老师举了一个简单的例子（为了简单表示，将$x_1 x_2$和$x_2 x_1$都放了进来）

$$
\mathbf{\Phi}(\mathbf{x}) = (1, x_1, x_2, \ldots, x_d, x_1^2, x_1 x_2, \ldots, x_1 x_d, x_2 x_1, x_2^2, \ldots, x_2 x_d, \ldots, x_d^2)
$$

假设两个数据点$\mathbf{x, x'}$进行内积，结果如下（常数项、一次项、二次项）

$$
\begin{aligned}
\mathbf{\Phi}(\mathbf{x})^{\top} \mathbf{\Phi}(\mathbf{x}') &= 1 + \sum_{i=1}^{d} x_i x_i' + \sum_{i=1}^{d} \sum_{j=1}^{d} x_i x_j x_i' x_j' \\
&= 1 + \sum_{i=1}^{d} x_i x_i' + \sum_{i=1}^{d} x_i x_i' \sum_{j=1}^{d} x_j x_j' \\
&= 1 + \mathbf{x}^{\top} \mathbf{x}' + (\mathbf{x}^{\top} \mathbf{x}')(\mathbf{x}^{\top} \mathbf{x}')
\end{aligned}
$$

可以看出，先转换再进行内积的操作和我们直接在原空间进行$1 + \mathbf{x}^{\top} \mathbf{x}' + (\mathbf{x}^{\top} \mathbf{x}')(\mathbf{x}^{\top} \mathbf{x}')$的内积结果是一样的。

因此，在某些情况下，如果把变换和内积这两个步骤合起来，计算效率可以得到提高。

转换+内积合并为一步称为**核技巧**，换句话说，核技巧是要找一个**核函数K**，使得

$$K_{\boldsymbol{\Phi}}(\mathbf{x}, \mathbf{x}') \equiv \boldsymbol{\Phi}(\mathbf{x})^{\top} \boldsymbol{\Phi}(\mathbf{x}')$$

上面简单的例子中，核函数为

$$K_{\boldsymbol{\Phi}}(\mathbf{x}, \mathbf{x}') = 1 + \mathbf{x}^{\top} \mathbf{x}' + (\mathbf{x}^{\top} \mathbf{x}')^2$$

有了核函数后，可以**直接用核函数K在原本的d维空间计算**，而不用在高维空间中计算很复杂的内积。

注意到我们的SVM对偶问题中，无论是目标函数还是决策函数，都只有输入实例核实例的内积，因此可以用核函数写为：

$$\begin{aligned}
\max_{\boldsymbol{\alpha}} \quad & \sum_{i=1}^{n} \alpha_i - \frac{1}{2} \sum_{i=1}^{n} \sum_{j=1}^{n} \alpha_i \alpha_j y_i y_j K(\mathbf{x_i}, \mathbf{x_j}) \\
\text{s. t.} \quad & \alpha_i \geq 0, i = 1, 2, \cdots, m \\
& \sum_{i=1}^{n} \alpha_i y_i = 0
\end{aligned}$$

而决策函数可以写为：

$$\begin{aligned}
f(\mathbf{x}) &= \operatorname{sign}\left(\mathbf{w}^{\mathrm{T}} \Phi(\mathbf{x}) + \mathrm{b}\right) \\
&= \operatorname{sign}\left(\sum_{\mathrm{i}=1}^{\mathrm{n}} \alpha_{\mathrm{i}} \mathrm{y}_{\mathrm{i}} \Phi(\mathbf{x}_{\mathrm{i}}) \Phi(\mathbf{x}) + \mathrm{b}\right) \\
&= \operatorname{sign}\left(\sum_{\mathrm{i}=1}^{\mathrm{n}} \alpha_{\mathrm{i}} \mathrm{y}_{\mathrm{i}} \mathrm{K}(\mathbf{x}_{\mathrm{i}}, \mathbf{x}) + \mathrm{b}\right) \\
&= \operatorname{sign}\left(\sum_{\mathrm{SV}} \alpha_{\mathrm{i}} \mathrm{y}_{\mathrm{i}} \mathrm{K}(\mathbf{x}_{\mathrm{i}}, \mathbf{x}) + \mathrm{b}\right)
\end{aligned}$$

最后的SV表示支持向量。

于是就得到了**核支持向量机**。

核函数的选择

SVM引入了核函数之后，摆脱了对映射后高纬度$\tilde{d}$的内积计算。因此在实际问题中，我们通过指定核函数而非映射方式$\Phi(x)$。

核函数隐式的定义了一个特征空间，而我们希望在这个特征空间中，我们的样本线性可分。因此核函数的选择是十分重要的，如果**核函数选择不合适，意味着将样本映射到了一个不合适的特征空间，很可能性能不佳。**

下面介绍常见的多项式核和高斯核。

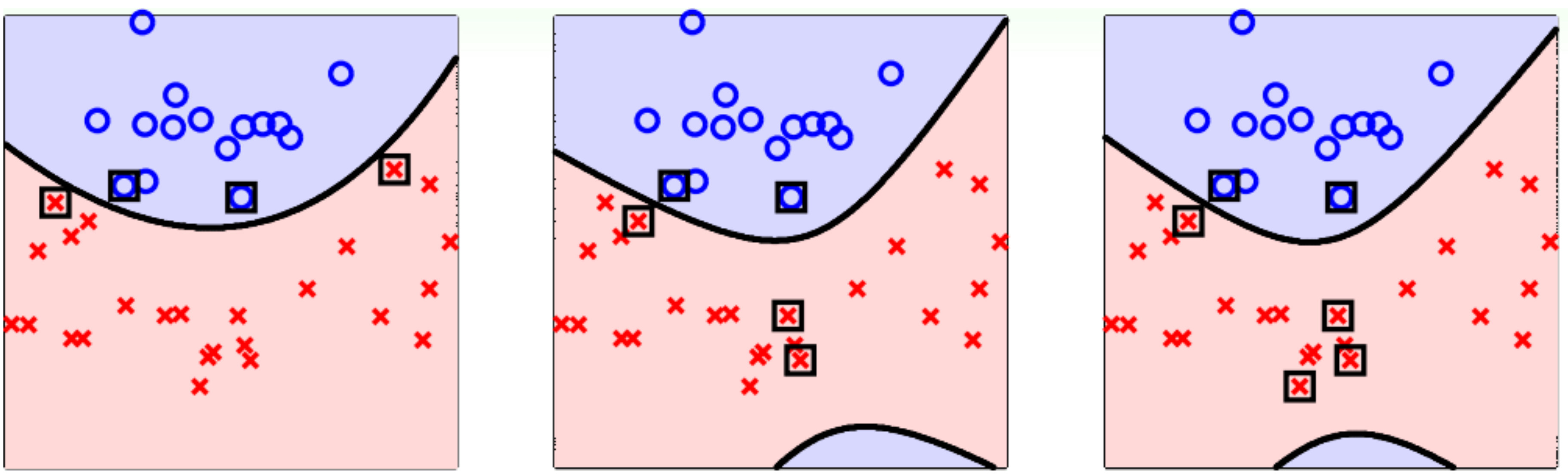
多项式核

多项式核写作:

$$K(\mathbf{x}, \mathbf{x}') = (\zeta + \gamma \mathbf{x}^{\mathrm{T}} \mathbf{x}')^{d} \tag{1-1}$$

当多项式核中的$= 0, = 1, d = 1 $时，退化为线性核。

下图为林轩田老师给出的多项式核中不同参数的效果，其中带方框的点是支持向量。



$(1 + 0.001\mathbf{x}^T\mathbf{x}')^2$ $1 + \mathbf{x}^T\mathbf{x}' + (\mathbf{x}^T\mathbf{x}')^2$ $(1 + 1000\mathbf{x}^T\mathbf{x}')^2$

我们很难在训练前说哪一个比较好，往往需要进行交叉验证等来判断。

但是这个例子说明了我们把核函数换掉，SVM的边界也随之改变（说明我们需要进行核函数选择）。在实践中，应记住“linear first”， 从线性核这种简单模型开始尝试。

高斯核

高斯核可以方便的计算**无限维度**的内积，如下：

$$
\begin{aligned}
K(\mathbf{x}, \mathbf{x}') &= \exp(-(\mathbf{x}-\mathbf{x}')^2) \\
&= \exp(-\mathbf{x}^2)\exp(-\mathbf{x}'^2)\exp(2\mathbf{x}\mathbf{x}') \\
&= \exp(-\mathbf{x}^2)\exp(-\mathbf{x}'^2)\left(\sum_{i=0}^{\infty}\frac{(2\mathbf{x}\mathbf{x}')^i}{i!}\right) \qquad \text{Taylor 展开 } \exp(x) = \sum_{n=0}^{\infty}\frac{x^n}{n!} \\
&= \sum_{i=0}^{\infty}\left(\exp(-\mathbf{x}^2)\exp(-\mathbf{x}'^2)\sqrt{\frac{2^i}{i!}}\sqrt{\frac{2^i}{i!}}(\mathbf{x})^i(\mathbf{x}')^i\right) \\
&= \Phi(\mathbf{x})^{\mathsf{T}}\Phi(\mathbf{x}')
\end{aligned}
$$

即多项式变换将**x**映射到一个无限维的空间中：

$$
\Phi(\mathbf{x}) = \exp(-\mathbf{x}^2)\cdot\left(1, \sqrt{\frac{2}{1!}}\mathbf{x}, \sqrt{\frac{2^2}{2!}}\mathbf{x}^2, \ldots\right)
$$

更一般的，**高斯核函数**写为：

$$
K(\mathbf{x}, \mathbf{x}') = \exp\left(-\frac{\|\mathbf{x}-\mathbf{x}'\|^2}{2\sigma^2}\right) \tag{1-2}
$$

带入核支持向量机得到：

$$
\begin{aligned}
g_{\mathrm{SVM}}(\mathbf{x}) &= \operatorname{sign}\left(\sum_{\mathrm{SV}}\alpha_i y_i K(\mathbf{x}_i, \mathbf{x}) + b\right) \\
&= \operatorname{sign}\left(\sum_{\mathrm{SV}}\alpha_i y_i \exp\left(\frac{\|\mathbf{x}-\mathbf{x}_i\|^2}{2\sigma^2}\right) + b\right)
\end{aligned}
$$

上述的式子中，此时SVM实际上是以支持向量为中心的高斯函数的线性组合，因此高斯核函数通常也称为**RBF核**（Radial Basis Function kernel, Radial 就是长得像高斯函数的(只和x_i到中心x的距离有关)，Basis function就是拿来做线性组合的)。

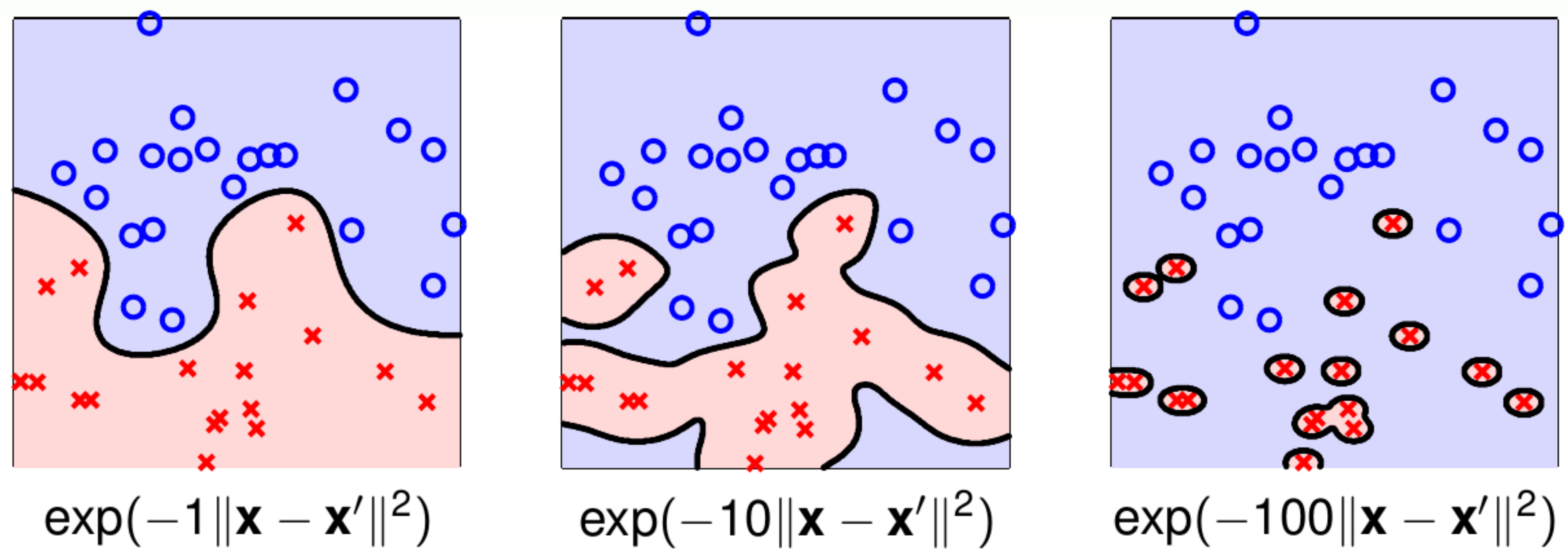
至此，可以小小总结一下我们SVM一路的”进化“：

- 使用$\mathbf{z} = \Phi(\mathbf{x})$ => 高效的核函数**K(x, x')**
- 保存最优的**w**， => 保存较少的支持向量和相应的α_i

而使用高斯核函数可以映射到无限多维空间！而我们的鲁棒性保证则是最大边界的性质。

当然，SVM也是会过拟合的。

林轩田老师又给出了下面的图：



注：林轩田老师的高斯核函数为$K(\mathbf{x}, \mathbf{x}') = \exp\left(-\gamma\|\mathbf{x}-\mathbf{x}'\|^2\right)$，和本文的其实是一样的

可以看出，γ越大，高斯函数越尖锐，模型越容易过拟合。可以想象，当$\gamma \to \infty$时，高斯函数$K(\mathbf{x}, \mathbf{x}') = [\![\mathbf{x} = \mathbf{x}']\!]$

核函数比较

- **线性核函数**$K(\mathbf{x}, \mathbf{x}') = \mathbf{x}^{\mathbf{T}}\mathbf{x}'$ 实际上没有进行特征空间变换。最安全也最快。最后得到的模型可解释性强：**w**会给出每个特征的权重，支持向量会给出每个数据点的重要性。缺点是：数据可能不是线性可分的。**对文本数据通常使用线性核函数**。
- **多项式核**$K(\mathbf{x}, \mathbf{x}') = (\zeta + \gamma\mathbf{x}^{\mathsf{T}}\mathbf{x}')^d$比线性核更通用，参数d直接描述了被映射空间的复杂度。但它参数较多，调参较难。**多项式核可能适用于d比较小的场景**，因为当d很大的时候计算不稳定。不稳定表现在：当$|\zeta + \gamma\mathbf{x}^{\mathsf{T}}\mathbf{x}'| < 1$时，核函数逼近0，当$|\zeta + \gamma\mathbf{x}^{\mathsf{T}}\mathbf{x}'| > 1$,核函数值会非常大。
- **高斯核**$K(\mathbf{x}, \mathbf{x}') = \exp\left(-\frac{|\mathbf{x}-\mathbf{x}'|^2}{2\sigma^2}\right)$,可以计算出更复杂的边界，相比多项式核只有一个

参数，容易调参。但是由于映射到了无限维空间，没有一个直观的**w**来解释模型。此外，它的计算也比较复杂，容易过拟合。

核函数的性质

核函数实际上是x和x’映射到新的特征空间的相似度衡量。（向量本身就表示相似性，如正交的时候我们就说一点都不像）。当然不是所有的相似性都能用一个合法的核函数表示。如果一个函数K是合法的核函数，K必须满足下面两个条件（**Mercer条件**）：

- K是对称的
- K必须是半正定的

此外，核函数还可以通过函数组合得到，

- K1，K2为核函数，对于任意正数γ_1, γ_2，其线性组合也是核函数： $\gamma_1 K_1 + \gamma_2 K_2$
- K1，K2为核函数，核函数的直积也是核函数：$K1 \otimes K_2(\mathbf{x}, \mathbf{z}) = K_1(\mathbf{x}, \mathbf{z}) K_2(\mathbf{x}, \mathbf{z})$
- K1为核函数，则对于任意函数g(**x**)， $g(\mathbf{x}) k_1(\mathbf{x}, \mathbf{z}) g(\mathbf{z})$也是核函数

软间隔SVM

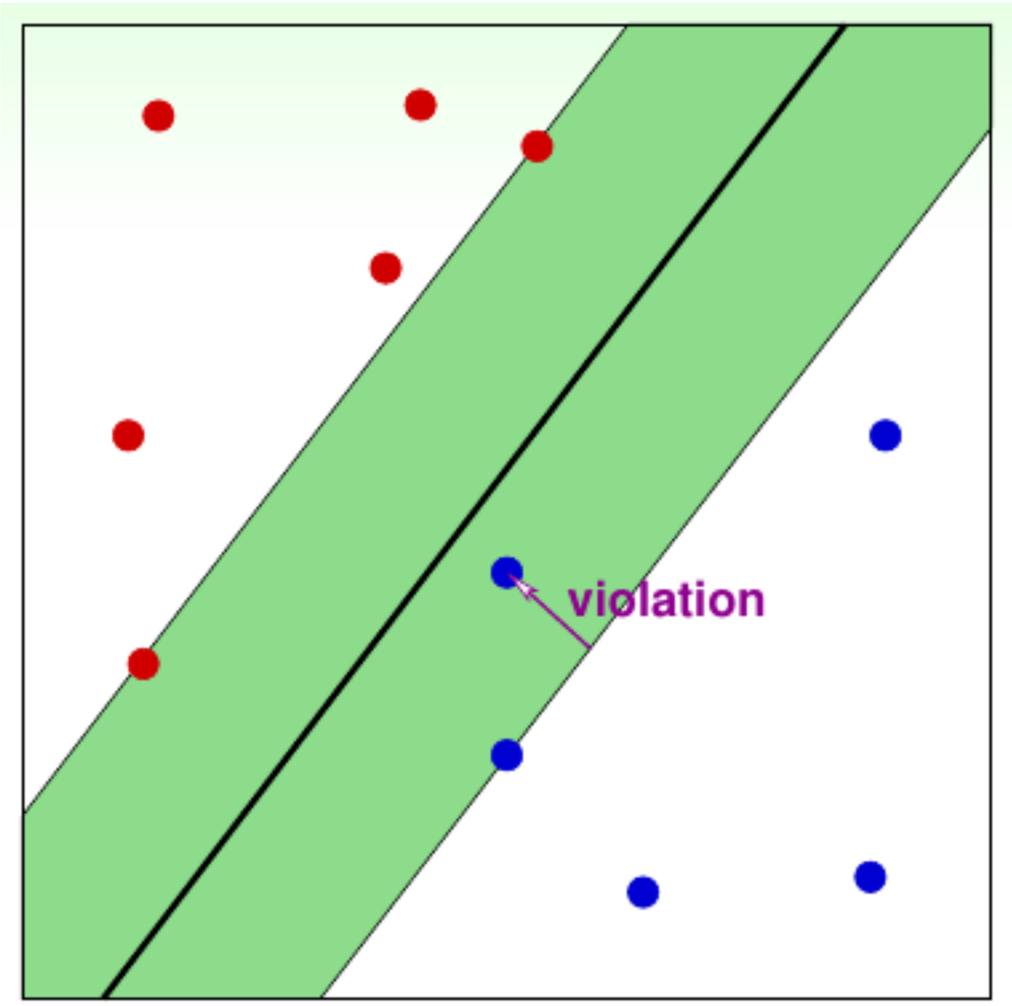
前面提到的SVM都是硬间隔的，所谓的硬间隔，就是要求所有的样本都分对，此外还要求每个样本离分离超平面有一定的距离。为了解决线性不可分的情况，使用了核函数进行特征空间的变换，然而，即使我们进行特征空间变换后把样本完全的分开，也有可能这个“线性可分”是因为噪声点而过拟合造成的。（很多情况下，训练数据中有一些噪声点，把这些噪声点去除后，剩下的大部分样本组成的特征空间是线性可分的。）

因此，我们可以对SVM适当的放松条件，不再要求所有的点都分对，而是对不能满足约束的样本进行一些“惩罚”，为此引入惩罚因子$\xi_i \geq 0$，并写出**软间隔SVM**的形式如下：

$$\begin{aligned}\min_{\mathbf{w},b,\xi} \quad & \frac{1}{2}\mathbf{w}^{\mathbf{T}}\mathbf{w} + C \cdot \sum_{i=1}^{n} \xi_i \\ \text{s. t.} \quad & y_i(\mathbf{w}^{\top}\mathbf{x}_i + b) \geq 1 - \xi_i \\ & \xi_i \geq 0, i = 1, 2, \ldots, n \end{aligned} \tag{2-1}$$

C为惩罚参数，**C越大说明越不能容忍犯错，尽可能的分对所有的点**，C越小说明对错误的容忍程度越大，间隔可以越宽。

下图就直观的描述了软间隔SVM，紫色的violation说明该点在间隔内，而紫色的长度就记录了对间隔的违反程度，即ξ_i（啰嗦一句，原先我们要求都在间隔外）。



软间隔SVM的对偶问题

和之前硬边界的SVM一样，我们求解对偶问题。

首先同样写出拉格朗日函数：

$$\mathcal{L}(\mathbf{w}, b, \boldsymbol{\xi}, \boldsymbol{\alpha}, \boldsymbol{\beta}) = \frac{1}{2}\mathbf{w}^{\top}\mathbf{w} + C \cdot \sum_{i=1}^{n} \xi_i + \sum_{i=1}^{n} \alpha_i(1-\xi_i-y_i(\mathbf{w}^{\mathbf{T}}\mathbf{x_i} + b)) - \sum_{i=1}^{n} \beta_i \xi_i$$

$\boldsymbol{\mathcal{L}}(\mathbf{w}, b, \boldsymbol{\xi}, \boldsymbol{\alpha}, \boldsymbol{\beta})$对$\mathbf{w}, b, \xi_i$的极小得

$$\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \mathbf{w}} = \mathbf{w} - \sum_{i=1}^{n} \alpha_i y_i \mathbf{x_i} = 0$$
$$\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial b} = -\sum_{i=1}^{n} \alpha_i y_i = 0$$
$$\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \xi_i} = C - \alpha_i - \beta_i = 0$$

整理得：

$$\begin{aligned} \mathbf{w} &= \sum_{i=1}^{n} \alpha_i y_i \mathbf{x_i} \\ \sum_{i=1}^{n} \alpha_i y_i &= 0 \\ C - \alpha_i - \beta_i &= 0 \end{aligned} \tag{2-2}$$

带入拉格朗日函数得：

$$\min_{\mathbf{w},b,\boldsymbol{\xi}} \mathcal{L}(\mathbf{w}, b, \boldsymbol{\xi}, \boldsymbol{\alpha}, \boldsymbol{\beta}) = -\frac{1}{2}\sum_{i=1}^{n}\sum_{j=1}^{n} \alpha_i \alpha_j y_i y_j \mathbf{x_i^T} \mathbf{x_j} + \sum_{i=1}^{n} \alpha_i$$

在对$\min_{\mathbf{w},b,\boldsymbol{\xi}} \mathcal{L}(\mathbf{w}, b, \boldsymbol{\xi}, \boldsymbol{\alpha}, \boldsymbol{\beta})$求极大，得到下式：

$$\begin{aligned} \max_{\boldsymbol{\alpha}} \quad & \sum_{i=1}^{n} \alpha_i - \frac{1}{2}\sum_{i=1}^{n}\sum_{j=1}^{n} \alpha_i \alpha_j y_i y_j \mathbf{x_i^T} \mathbf{x_j} \\ \text{s. t.} \quad & \sum_{i=1}^{n} \alpha_i y_i = 0 \\ & \alpha_i \geq 0 \\ & \beta_i \geq 0 \\ & C - \alpha_i - \beta_i = 0 \end{aligned} \tag{2-3}$$

前面提到过，$\mathbf{w}$无关了，所以不写$\mathbf{w} = \sum_{i=1}^{n} \alpha_i y_i \mathbf{x_i}$ 又因为可以利用等式约束去除β_i，$\beta_i \geq 0 \Rightarrow C - \alpha_i \geq 0$

于是2-3可以化简为:

$$
\begin{aligned}
\max_{\boldsymbol{\alpha}} \quad & \sum_{i=1}^{n} \alpha_i - \frac{1}{2} \sum_{i=1}^{n} \sum_{j=1}^{n} \alpha_i \alpha_j y_i y_j \mathbf{x_i}^{\mathbf{T}} \mathbf{x_j} \\
\text{s.t.} \quad & \sum_{i=1}^{n} \alpha_i y_i = 0 \\
& 0 \le \alpha_i \le C
\end{aligned} \tag{2-4}
$$

2-4即为我们的**软间隔SVM对偶问题**。其对应的KKT条件为：

- 主问题可行：$y_i(\mathbf{w}^{\mathsf{T}}\mathbf{x}_i + b) \ge 1 - \xi_i; \quad \xi_i \ge 0$
- 对偶问题可行：$\alpha_i \ge 0; \quad \beta_i \ge 0$
- 互补松弛：$\alpha_i(1 - \xi_i - y_i(\mathbf{w}^{\mathbf{T}}\mathbf{x_i} + b)) = 0; \quad \beta_i \xi_i = 0$
- 2-2的条件: $\mathbf{w} = \sum_{i=1}^{n} \alpha_i y_i \mathbf{x_i}; \quad \sum_{i=1}^{n} \alpha_i y_i = 0; \quad C - \alpha_i - \beta_i = 0$

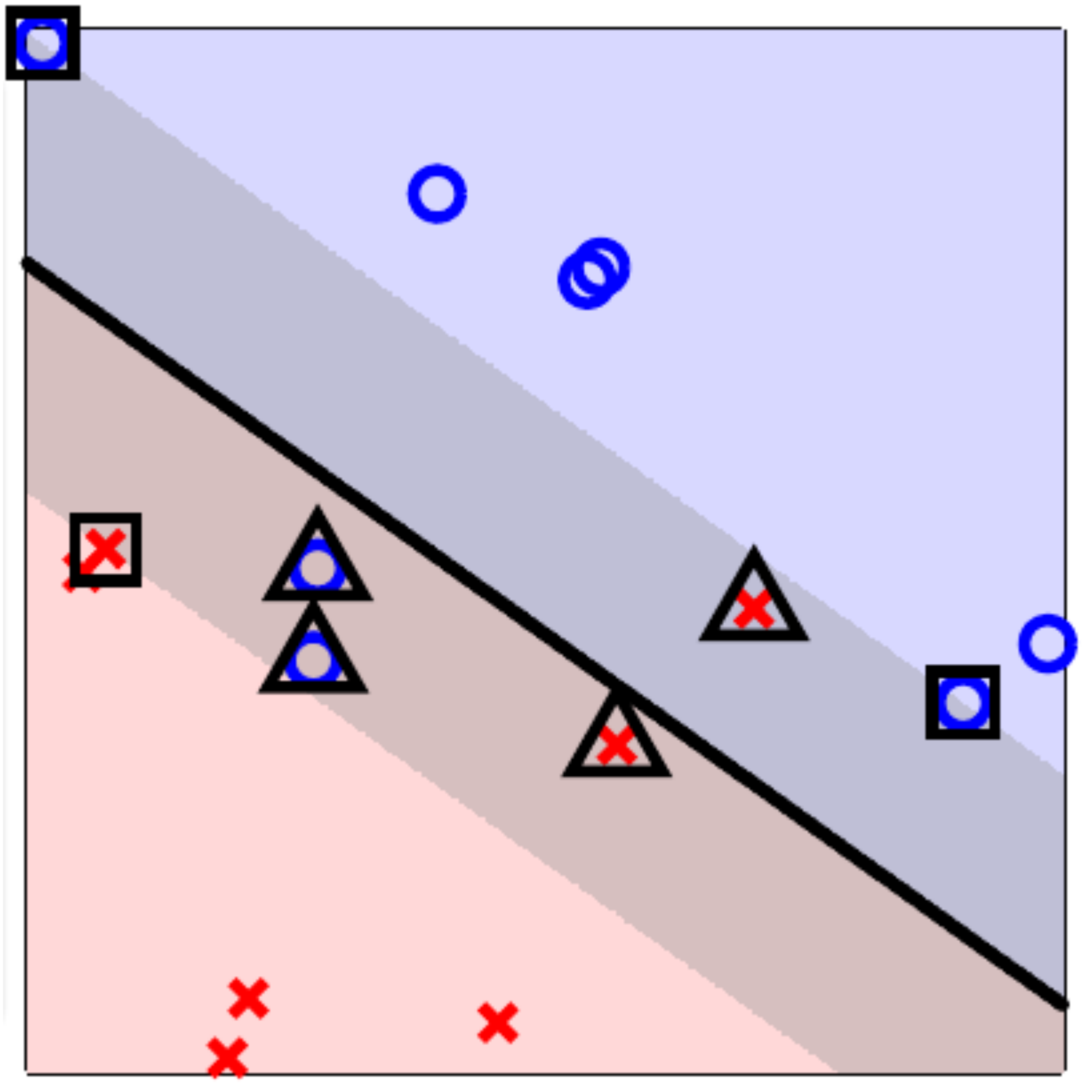
2-4和硬间隔的对偶SVM对比发现，其实就是多了限制$\alpha_i \le C$。

软间隔SVM的支持向量

分析软间隔SVM对偶问题的KKT条件，可以得出结论： - 当$\alpha_i = 0$此时不是支持向量 - 当$\alpha_i > 0 \Rightarrow 1 - \xi_i - y_i(\mathbf{w}^{\mathbf{T}}\mathbf{x_i} + b) = 0$，此时为支持向量，但可以细分为两种情况 - $\alpha_i < C \Rightarrow \beta_i \neq 0; \ \xi_i = 0$, 此时样本i正好在间隔上，称为**自由的支持向量free support vector**。 - $\alpha_i = C \Rightarrow \beta_i = 0; \ \xi_i > 0$，此时$\mathbf{x_i}$在间隔内，$\xi_i$反应了和间隔的距离。称为**受限支持向量bounded support vector**。此时又分为三种情况： - $\xi_i < 1$ ，分类正确，$\mathbf{x_i}$在间隔边界和超平面之间 - $\xi_i = 1$ ，$\mathbf{x_i}$在超平面上 - $\xi_i > 1$ ，分类错误，$\mathbf{x_i}$在超平面误分一侧

由此可以看出，软间隔SVM最终模型仅和支持向量有关，引入软间隔后仍保持稀疏性。

下面是林轩田老师给的图，自由支持向量用方框标出，受限支持向量以三角标出。



求解对偶问题

假设求解出了α, 那么根据KKT条件, $\mathbf{w}=\sum_{i=1}^{n}\alpha_i y_i \mathbf{x_i}$

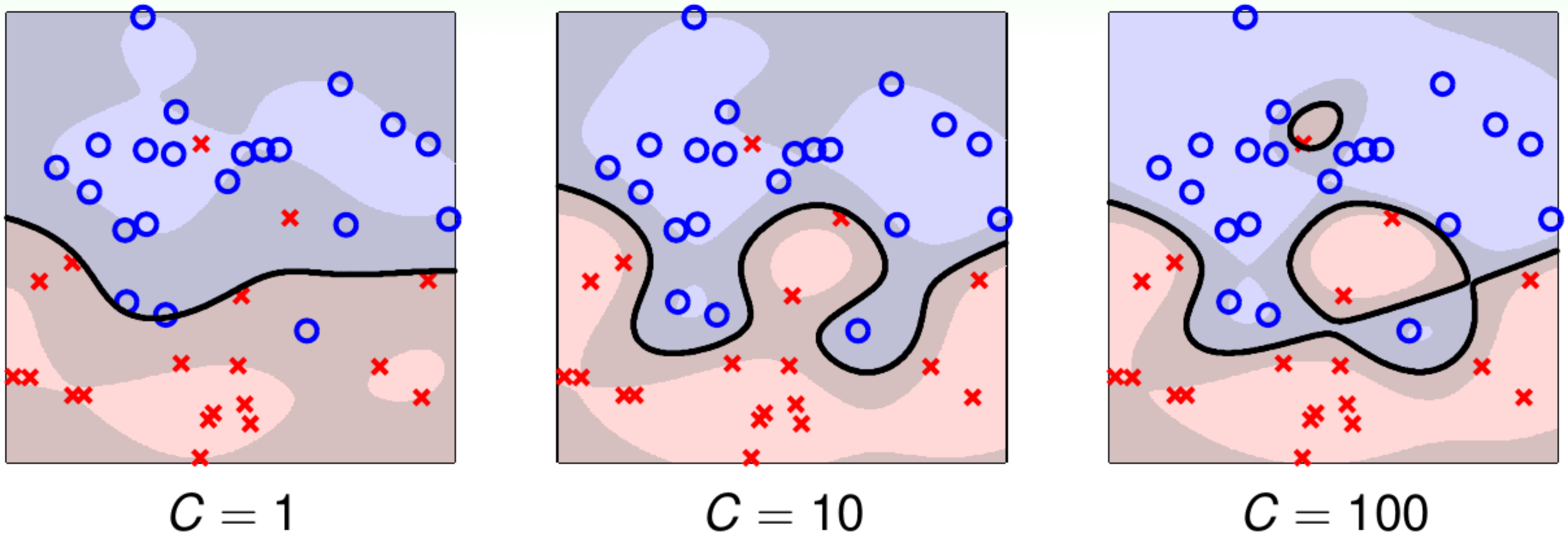
那b呢？模仿之前的硬间隔SVM对偶问题，选取一个$\alpha_i>0$ 可得$b=y_i-y_i\xi_i-\mathbf{w}^\top\mathbf{x}_i$，然而这样需要求解$\xi_i$,因此可以看看另外一个互补松弛条件。$\beta_i\xi_i=0\Rightarrow(C-\alpha_i)\xi_i=0$,即当$\alpha_i<C\Rightarrow\xi_i=0$，因此**选取任意的自由的支持向量**即可求解$b=y_i-\mathbf{w}^\top\mathbf{x}_i$

当然，极少数的情况下，没有自由的支持向量，那么b就只能通过一系列不等式得出，此时可能有不止一个b存在。

模型选择

值得注意的是，虽然是软间隔，但仍然可能过拟合。

下面是林轩田老师给出的使用高斯核函数的软间隔SVM的不同参数效果图：



小的C可能会欠拟合，大的C可能会过拟合。因此要小心的选择参数。

如何选择参数呢，常用的就是交叉验证的方法。

这里推导一个有趣的公式—使用留一交叉验证（即样本数m，m折的交叉验证）的留一误差的上界是:

$$\mathrm{E_{LOOCV}} = \frac{\#\mathrm{SV}}{\mathrm{m}} \tag{2-5}$$

简单证明如下：

- 设总的数据集为g ，此时验证集为样本点$(\mathbf{x_n}, y_n)$
- 若最优的$\alpha_n = 0$,则该点不是支持向量。
  - 若把该点去掉，求解出的$\{\alpha_1, \alpha_2, \cdots, \alpha_{n-1}\}$仍然是最优的
  - 也就是去除非支持向量的点求解出的g^-和不去掉求解出的g是一样的，又因为非支持向量肯定分类正确，于是有：$e_{\mathrm{non-SV}} = \mathrm{err}(g^-, \text{non-SV}) = \mathrm{err}(g, \text{non-SV}) = 0$
- 而如果是支持向量有：$e_{\mathrm{SV}} \leq 1$
- 求和取平均得到式2-5

因此，留一交叉验证的error的上界是支持向量个数的比例。如果一个算法的支持向量数比较少，那么它过拟合的风险可能就比较小。因此在调参的时候，可以排除一些支持向量数太多的模型，然后再去验证剩下的模型。

其它

回顾一下软间隔SVM原始问题2-1：

$$
\begin{aligned}
\min_{\mathbf{w},b,\xi} \quad & \frac{1}{2}\mathbf{w}^{\mathbf{T}}\mathbf{w} + C \cdot \sum_{i=1}^{n} \xi_i \\
\text{s. t.} \quad & y_i(\mathbf{w}^{\top}\mathbf{x}_i + b) \geq 1 - \xi_i \\
& \xi_i \geq 0, i = 1, 2, \ldots, n
\end{aligned}
$$

ξ_i 描述了对间隔的破坏程度，啰嗦的分析一下有两种情况：

- 该点破坏了间隔边界，$\xi_i = 1 - y_i(\mathbf{w}^{\mathbf{T}}\mathbf{x}_i + b) > 0$
- 该点没有破坏边界，$\xi_i = 0$

因此，我们可以把软间隔SVM 2-1写为一个没有限制的优化问题：

$$
\min_{\mathbf{w},b} \quad \frac{1}{2}\mathbf{w}^{\top}\mathbf{w} + C \cdot \sum_{i=1}^{n} \max\left(1 - y_i(\mathbf{w}^{\mathbf{T}}\mathbf{x}_i + b), 0\right) \tag{3-1}
$$

如果你学过正则化 (https://www.hrwhisper.me/machine-learning-regularization/)，会发现上面的式子和正则化是十分相似的，正则化更一般的形式是：

$$
\min_{f} \quad \Omega(f) + C\sum_{i=1}^{n} l\left(f(\mathbf{x_i}), y_i\right) \tag{3-2}
$$

式3-2中$\Omega(f)$称为**结构风险**，用于描述模型f的某些性质，第二项$l\left(f(\mathbf{x_i}), y_i\right)$则称**为经验风险**，用于描述模型和训练数据的契合程度。

我们的式3-1的第一项是**w**的长度，描述了模型本身的复杂度，第二项则是样本中的误差和。换句话说，**大间隔其实就是正则化的一种体现**，代表选择的超平面要少。而软间隔则是一种特殊的损失函数，称为**hinge损失**。参数C出现在3-1和3-2中，若C越大，则代表越小的正则化。

将软间隔SVM看作一种正则化，我们可以将其理论延伸到其它模型，与其它模型建立联系。

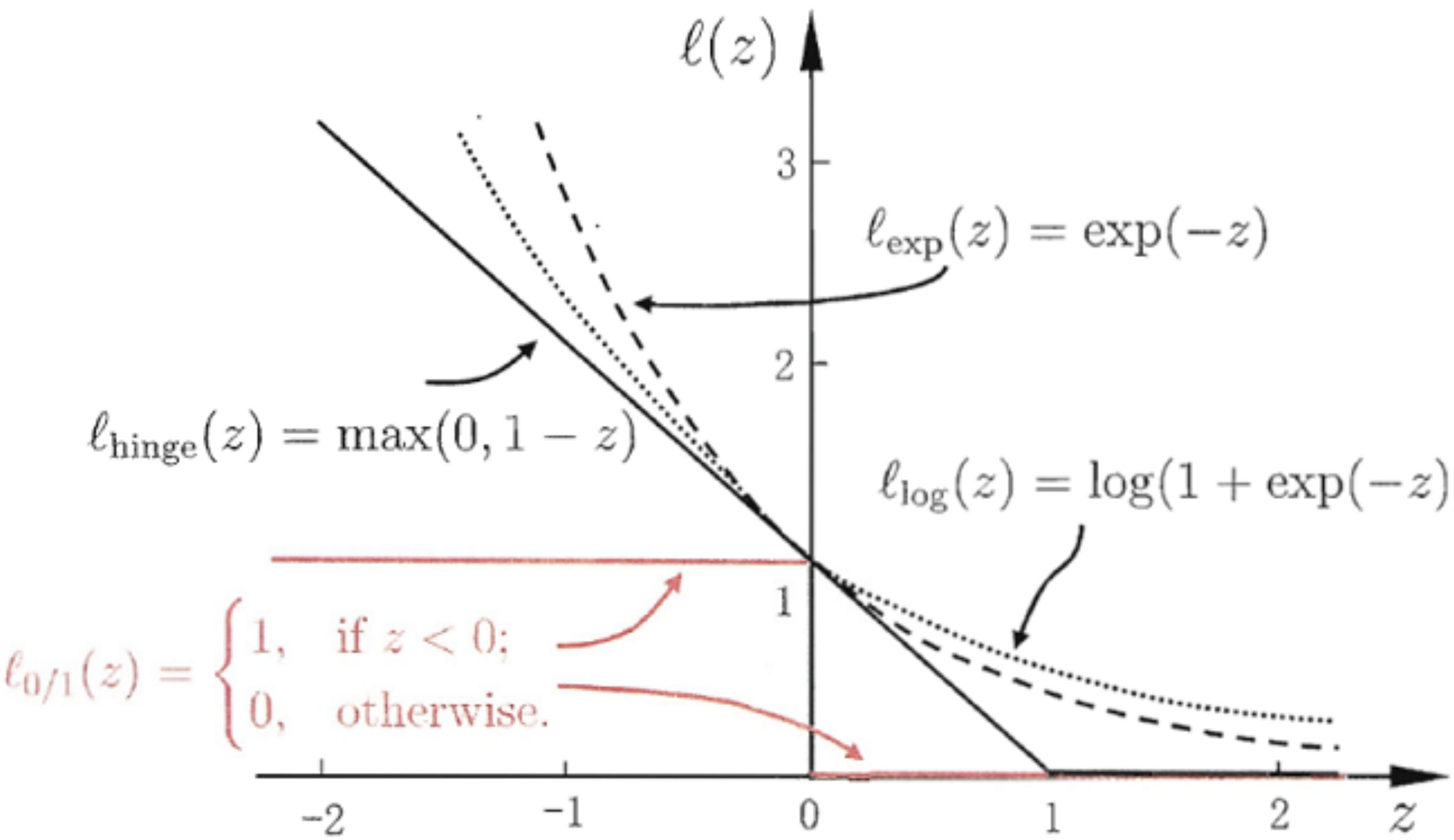
Hinge损失

上一小节已经剧透过，3-1第二项为hinge损失，其它常见的0-1损失替代函数有：

- hinge损失： $l_{hinge}(z) = \max(1 - z, 0)$
- 指数损失： $l_{exp}(z) = \exp(-z)$
- 对率损失：$l_{log}(z) = \log(1 + \exp(-z))$

我们什么始化用到这些损失函数呢？ 对率损失其实是逻辑回归采用的，而指数损失将在后面介绍的Adaboost模型中用到。

这里使用了周志华老师的图来作为对比(PS: 该图的log是以2为底的，这样正好为0-1损失的上界):



上面提到的hinge、指数、对率损失（以2为底）函数都是0-1损失函数的上界。

hinge和逻辑回归使用的损失函数（对率损失）十分相似：

- 当z趋于正无穷，hinge为0，对率损失约等于0
- 当z趋于负无穷，它们都趋于负无穷。

因此可以把软间隔SVM看作是L2正则化的逻辑回归。而正则化的逻辑回归也像是在做SVM。它们的一些区别和相似周志华老师概况如下：

> 支持向量机和对率回归的优化目标相近。通常情形下它们的性能也相当。
>
> 对率回归的优势主要在于其输出具有自然的的概率意义，即在给出预测标记的同时也给出了概率，而支持向量机的输出不具有概率意义，要得到概率输出需要进行特殊处理。此外对率回归可以直接用于多分类任务，支持向量机为此则需要进行推广[Platt, 2000]。
>
> 另一方面，hinge损失有一快“平坦”的区域（就是z >=1），这使得支持向量机的解具有稀疏性。而对率损失函数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，对率回归的解依赖于更多的训练样本，其预测开销更大。
>
> —-From《机器学习》 周志华 P132-133

概率SVM–Platt模型

周志华老师上面总结得很好，逻辑回归一个好处就是直接输出概率，现在我们来讨论如何让SVM模型也有概率输出。

有两种naive的想法：

1. 先跑软间隔SVM得到超平面参数**w**和b，然后将它们直接放在Logistic函数（就是那个s的曲线也叫sigmoid函数）计算。这种做法在实际中效果不错，但是失去了我们推导逻辑回归时采用的最大似然的思想等。
2. S先跑软间隔SVM得到超平面参数**w**和b，将这个结果作为逻辑回归的初始权重，然后使用逻辑回归算法得到最后的分类函数。但是这种方法和直接使用逻辑回归的方法结果差不多，并且丢失了SVM的核方法等特性。

如果能融合上面两种想法就好了。分析一下：

SVM得到的结果$\mathbf{w}_{\text{SVM}}^{\mathsf{T}}\boldsymbol{\Phi}(\mathbf{x})+b_{\text{SVM}}$本质上是一个分数，把这个分数进行放缩和平移，加大自由度。即$g(\mathbf{x})=\theta(A\cdot(\mathbf{w}_{\text{SVM}}^{\mathsf{T}}\boldsymbol{\Phi}(\mathbf{x})+b_{\text{SVM}})+B)$。然后通过逻辑回归训练A和B两个参数来达到使用MLE的目的和效果。这个算法本质上还是SVM，因此对偶、核技巧都可以使用。从几何上说，SVM找出分割面的法向量，然后用逻辑回归进行平移放缩微调。通常，如果SVM的解比较好，A > 0 而B接近0.

因此，新的问题为：

$$\min_{A,B}\quad \frac{1}{N}\sum_{n=1}^{N}\log\left(1+\exp\left(-y_n(A\cdot(\underbrace{\mathbf{w}_{\text{SVM}}^{\mathsf{T}}\boldsymbol{\Phi}(\mathbf{x}_n)+b_{\text{SVM}}}_{\boldsymbol{\Phi}_{\text{SVM}}(\mathbf{x}_n)})+B)\right)\right)\qquad(3\text{-}3)$$

很复杂？其实是两步：

1. 解SVM
2. 解逻辑回归（梯度下降等都行）

这个方法称为Platt模型。

核Logistic回归

上面的问题3-3并没有直接在转换后的空间$\mathcal{Z}$求解逻辑回归，而是通过核函数把数据变换到$\mathcal{Z}$空间中。由于没有直接在$\mathcal{Z}$空间求解逻辑回归，因此可能不是该空间最好的逻辑回归的解。如果要在$\mathcal{Z}$空间中找逻辑回归的最优解怎么做？

像SVM一样用核方法？但是逻辑回归不是二次规划问题。

回想之前的SVM，不仅在求解**w**的时候用到了$\mathcal{Z}$空间的内积，更重要的是，在之后预测的时候，将**w**表示成了一堆已经看过的**z**的线性组合，即$\mathbf{w}^{\mathbf{T}}\mathbf{z}+b=\sum_{i=1}^{n}\alpha_i y_i\Phi(\mathbf{x_i})\Phi(\mathbf{x})+b=\sum_{i=1}^{n}\alpha_i y_i K(\mathbf{x_i},\mathbf{x})+b$。换句话说，**w表示成了z的线性组合，是能使用核方法的关键**。

那么，如果我们的**w**能被**z**表示，那不就可以使用核函数了么！

接下来证明如下（这个定理称为**表示定理**）：

> 对于任何带有L2正则化的线性模型
>
> $$\min_{\mathbf{w}} \quad \frac{\lambda}{n}\mathbf{w}^\top\mathbf{w} + \frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n} \operatorname{err}(y_i, \mathbf{w}^\top\mathbf{z}_i)$$
>
> 其最优的$\mathbf{w}_* = \sum_{i=1}^n \beta_i \mathbf{z_i}$

我们可以将最优的$\mathbf{w}_*$分解为两个向量$\mathbf{w}_{||}$和$\mathbf{w}_\perp$，即$\mathbf{w}_* = \mathbf{w}_{||} + \mathbf{w}_\perp$。其中 $\mathbf{w}_{||} \in \operatorname{span}(\mathbf{z}_i), \mathbf{w}_\perp \perp \operatorname{span}(\mathbf{z}_i)$

- 由于正交的内积为0，因此有 $\operatorname{err}(y_n, \mathbf{w}_*^\top\mathbf{z}_n) = \operatorname{err}(y_n, (\mathbf{w}_\| + \mathbf{w}_\perp)^\top\mathbf{z}_n) = \operatorname{err}(y_n, \mathbf{w}_\|^\top\mathbf{z}_n)$，即$\mathbf{w}_*$和$\mathbf{w}_\|$有相同的error
- 又因为$\mathbf{w}_*^\top\mathbf{w}_* = \mathbf{w}_\|^\top\mathbf{w}_\| + 2\mathbf{w}_\|^\top\mathbf{w}_\perp + \mathbf{w}_\perp^\top\mathbf{w}_\perp = \mathbf{w}_\|^\top\mathbf{w}_\| + \mathbf{w}_\perp^\top\mathbf{w}_\perp > \mathbf{w}_\|^\top\mathbf{w}_\|$这意味着$\mathbf{w}_\|$比最优的$\mathbf{w}_*$的目标值更小，是矛盾的，因此$\mathbf{w}_\perp = \mathbf{0}$
- 所以最优解可以用$\mathbf{z}$的线性组合表示。由此得证。

接下来定义L2正则项的逻辑回归，

$$\min_{\mathbf{w}} \quad \frac{\lambda}{n}\mathbf{w}^\top\mathbf{w} + \frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n} \log(1 + \exp(-y_i\mathbf{w}^\top\mathbf{z}_i))$$

由表示定理，最优的$\mathbf{w}_* = \sum_{i=1}^n \beta_i \mathbf{z_i}$。将该式代入原始问题，可以将原来关于w的问题转化成关于β的问题，即**核逻辑回归（Kernel Logistic Regression）**：

$$\min_{\boldsymbol{\beta}} \frac{\lambda}{n}\sum_{i=1}^{n}\sum_{i=1}^{n}\beta_i\beta_j K(\mathbf{x}_i, \mathbf{x}_j) + \frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n}\log\left(1 + \exp\left(-y_i\sum_{j=1}^{n}\beta_j K(\mathbf{x}_i, \mathbf{x}_j)\right)\right) \tag{3-4}$$

这是没有约束的优化问题，可以用梯度下降等方法求解。

林轩田老师讲解了另一个视角来理解核逻辑回归问题：

- 3-4最后一项$\sum_{j=1}^n \beta_j K(\mathbf{x}_i, \mathbf{x}_j)$可以看成是先求$\mathbf{x_i}$和其它数据点$\mathbf{x_1}, \cdots \mathbf{x_m}$的相似度（前面讲过核函数从某种意义上讲是相似度的一种体现），然后将这个相似度和变量β求内积，其实是一种线性模型。
- 前面的项$\sum_{i=1}^n \sum_{i=1}^n \beta_i\beta_j K(\mathbf{x}_i, \mathbf{x}_j)$写成矩阵的形式是：$\boldsymbol{\beta}^\top \mathrm{K}\boldsymbol{\beta}$，本质上是一个正则化。

- 因此核逻辑回归可以看成是关于β的线性模型，用核函数转换数据，并且用核函数来正则化。(我们原先的理解是将**w**嵌入到核函数的隐式转换并作L2正则)

核逻辑回归和SVM相比，其系数β_i通常不为0。

参考资料

- 机器学习技法 – 林轩田
- 《统计学习方法》 – 李航
- 《机器学习》 – 周志华
- 《从零构建支持向量机(SVM)》 – 张皓

机器学习 (https://www.hrwhisper.me/category/study/machine-learning/) Machine Learning (https://www.hrwhisper.me/tag/machine-learning/), Machine Learning model (https://www.hrwhisper.me/tag/machine-learning-model/). permalink (https://www.hrwhisper.me/machine-learning-support-vector-machine-2-kernel-function-and-soft-margin-svm/).

『我爱机器学习』深入理解SVM(一) 原始问题和对偶问题 (https://www.hrwhisper.me/machine-learning-support-vector-machine-1/)

One thought on “『我爱机器学习』深入理解SVM(二) – 核函数和软边距”

Pingback: 『我爱机器学习』感知机 - 细语呢喃 (https://www.hrwhisper.me/machine-learning-perceptron/)

Leave a Reply

Your email address will not be published. Required fields are marked *

Comment

Name *

Email *

Website

Save my name, email, and website in this browser for the next time I comment.

Post Comment

(http://weibo.com/murmured)
(http://www.linkedin.com/in/huangrong-yang-548632119/)
(https://instagram.com/hr_say/)
(https://github.com/hrwhisper)
(https://www.hrwhisper.me/feed)

Csdn (http://blog.csdn.net/murmured) 博客园 (http://www.cnblogs.com/murmured/)

Lofter (http://hrsay.lofter.com/) 知 乎 (http://www.zhihu.com/people/hrwhisper)

豆瓣 (http://www.douban.com/people/hrwhisper/)

努力的人本身就有奇迹 | 快乐是我们共同的信仰
by hrwhipser.me