2020

中北大學 Android Lab

NORTH UNIVERSITY OF CHINA

机器学习培训-SVM

许超

本次培训主要目标：

1.理解Hard-Margin SVM算法
2.了解Soft-Margin SVM算法
3.了解核函数的作用
4.了解libsvm库
5.使用sklearn 库对鸢尾花数据集进行分类
6.assignment：使用SVM对MNIST进行分类

Support Vector Machine

SVM有三宝：间隔，对偶， 核技巧

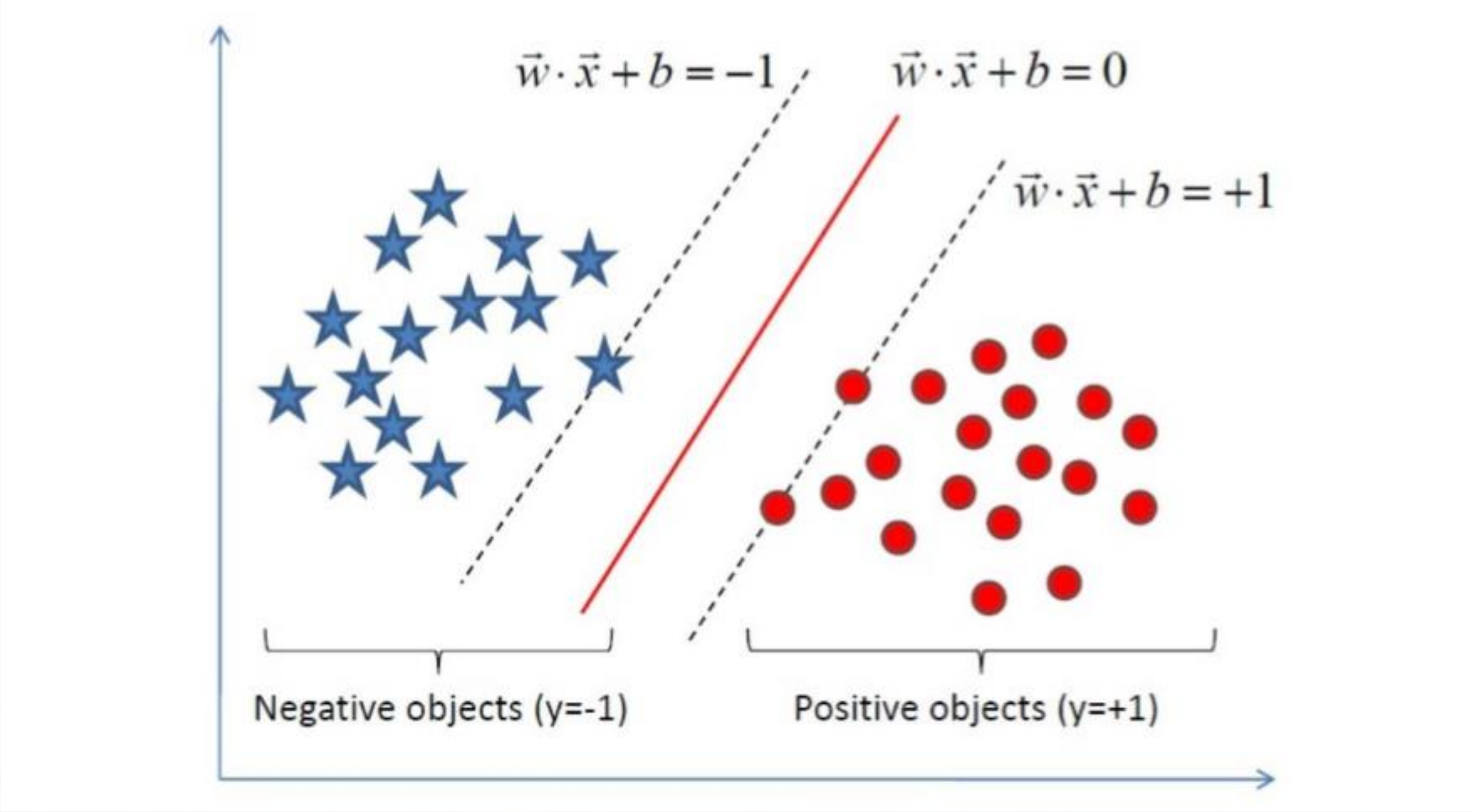
SVM

Hard-Margin SVM算法（线性）*
不允许犯错

Soft-Margin SVM算法（线性）*
允许犯错

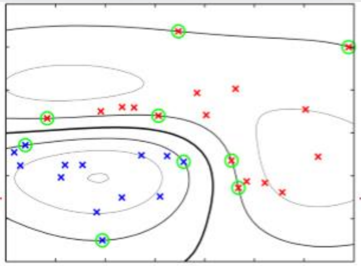
Kernel SVM算法（非线性）
允许犯错
加入核函数

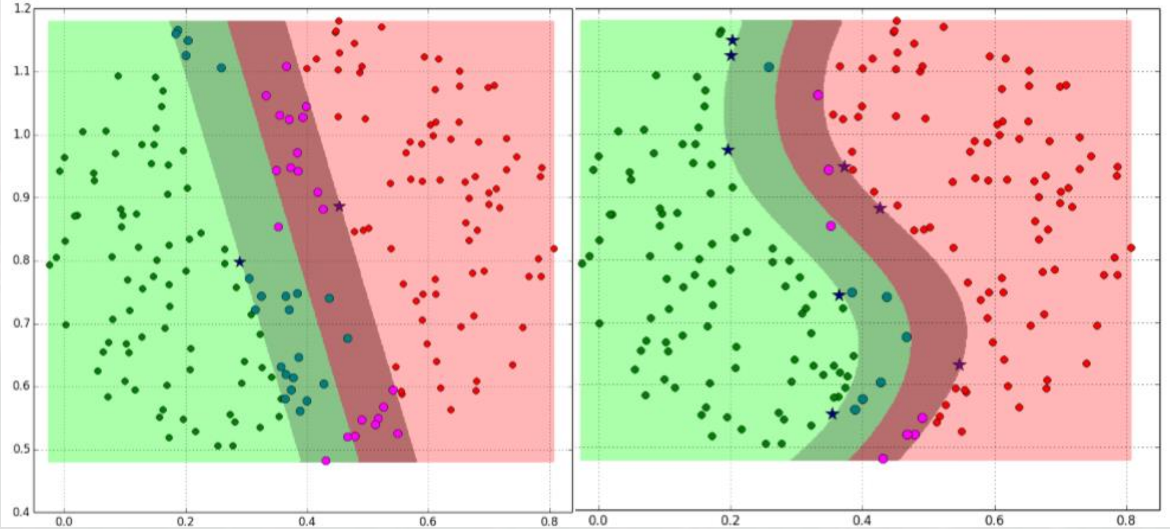
线性可分支持向量机

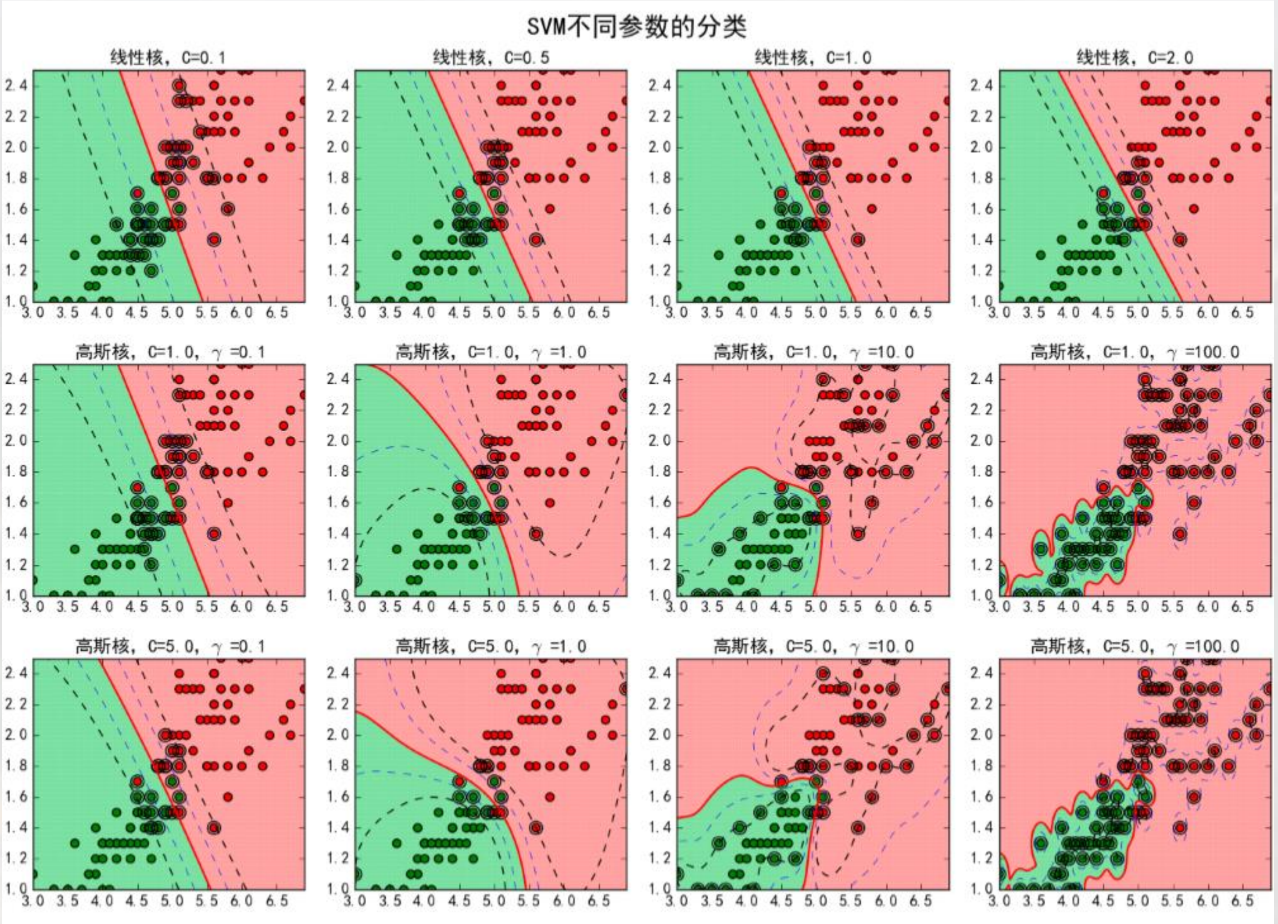

$\vec{w}\cdot\vec{x}+b=-1$
$\vec{w}\cdot\vec{x}+b=0$
$\vec{w}\cdot\vec{x}+b=+1$
Negative objects (y=-1)
Positive objects (y=+1)

Support Vector Machine

使用核解决线性不可分



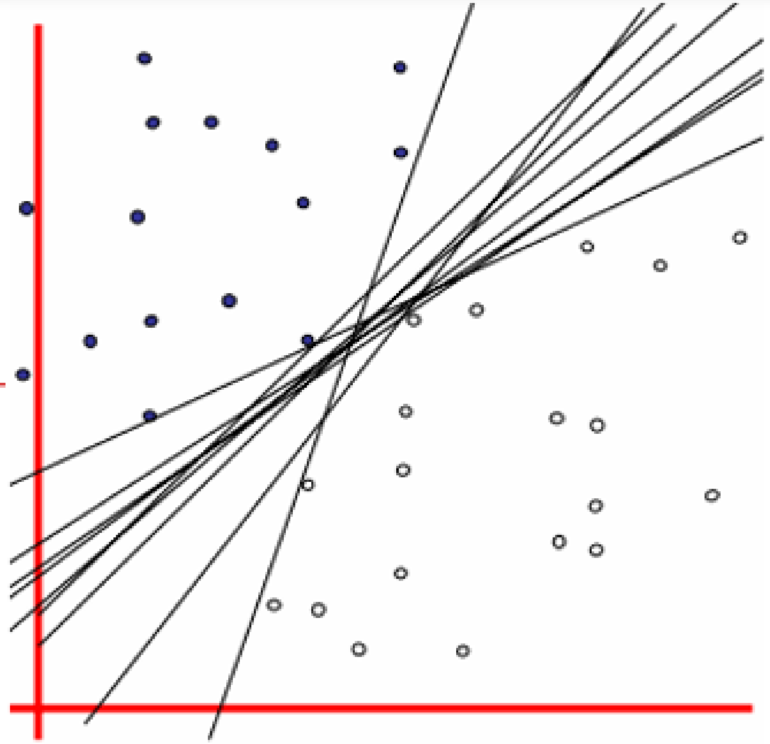




输入数据

- 假设给定一个特征空间上的训练数据集 $T=\{(\mathbf{x}_1,y_1),(\mathbf{x}_2,y_2)\ldots(\mathbf{x}_N,y_N)\}$
  - 其中，$\mathbf{x}_i \in R^n$，$y_i \in \{+1,-1\}$，$i=1,2,\ldots N$。
- $\mathbf{x}_i$为第i个实例(若n>1，$\mathbf{x}_i$为向量)；
- y_i为$\mathbf{x}_i$的类标记；
  - 当$y_i=+1$时，称$\mathbf{x}_i$为正例；
  - 当$y_i=-1$时，称$\mathbf{x}_i$为负例；
- $(\mathbf{x}_i,y_i)$称为样本点。

线性可分支持向量机



- 给定线性可分训练数据集，通过**间隔最大化**得到的分离超平面为

$$y(x) = w^T \Phi(x) + b$$

相应的分类决策函数 $f(x) = sign\left(w^T \Phi(x) + b\right)$

该决策函数称为线性可分支持向量机。

整理符号

- 分割平面： $y(x)=w^T\Phi(x)+b$
- 训练集： $x_1,x_2,\cdots,x_n$
- 目标值： $y_1,y_2,\cdots,y_n,\quad y_i\in\{-1,1\}$
- 新数据的分类：$sign(y(x))$

推导目标函数

- 根据题设 $y(x)=w^T\Phi(x)+b$
- 有：

$$\begin{cases} y(x_i)>0 \Leftrightarrow y_i=+1 \\ y(x_i)<0 \Leftrightarrow y_i=-1 \end{cases} \Rightarrow y_i\cdot y(x_i)>0$$

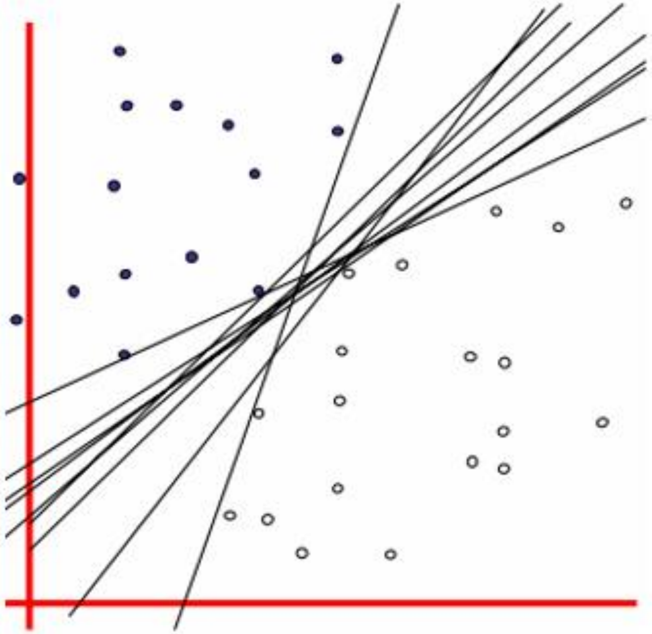
- w,b等比例缩放，则t*y的值同样缩放，从而：

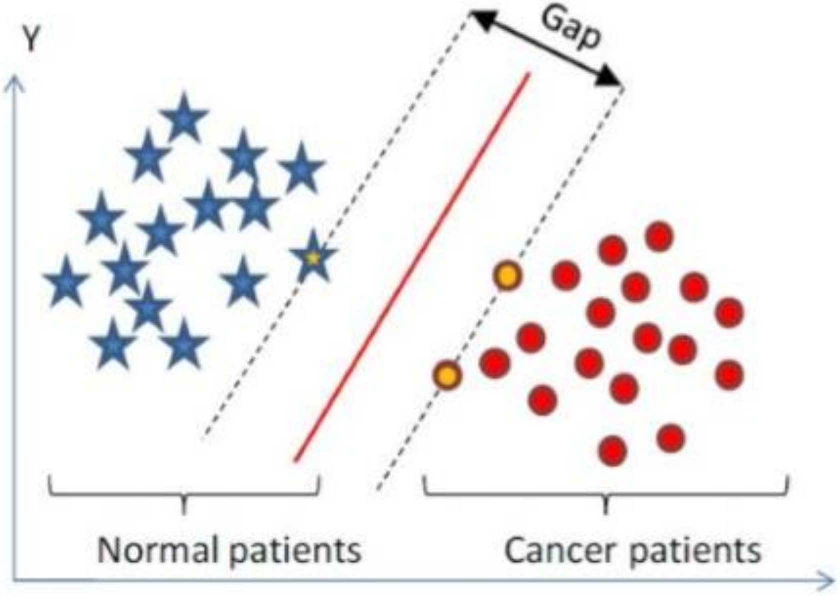
$$\frac{y_i\cdot y(x_i)}{\|w\|}=\frac{y_i\cdot\left(w^T\cdot\Phi(x_i)+b\right)}{\|w\|}$$

点到直线的距离公式

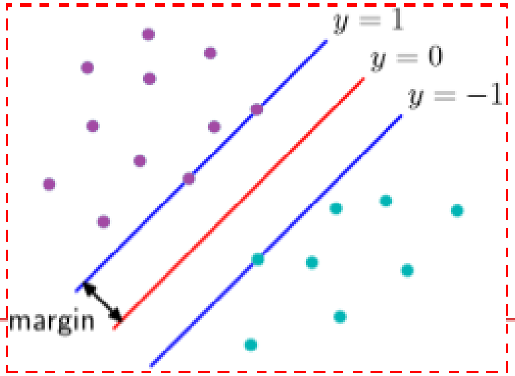
最大间隔分离超平面 $\frac{y_i \cdot y(x_i)}{\|w\|} = \frac{y_i \cdot \left(w^T \cdot \Phi(x_i) + b\right)}{\|w\|}$

- 目标函数：$\arg\max_{w,b} \left\{ \frac{1}{\|w\|} \min_i \left[y_i \cdot \left(w^T \cdot \Phi(x_i) + b \right) \right] \right\}$





建立目标函数



- 总可以通过等比例缩放w的方法，使得两类点的函数值都满足$|y|\geq 1$
- 约束条件：$y_i \cdot \left(w^T \cdot \Phi(x_i)+b\right) \geq 1$
- 原目标函数：$$\underset{w,b}{\arg\max}\left\{\frac{1}{\|w\|}\min_i\left[y_i \cdot \left(w^T \cdot \Phi(x_i)+b\right)\right]\right\}$$
- 新目标函数：$$\underset{w,b}{\arg\max}\frac{1}{\|w\|}$$

建立目标函数

$$\max_{w,b} \frac{1}{\|w\|}$$

$$s.t. \quad y_i\left(w^T \cdot \Phi(x_i) + b\right) \geq 1, \quad i = 1,2,\cdots,n$$

$$\min_{w,b} \frac{1}{2}\|w\|^2$$

$$s.t. \quad y_i\left(w^T \cdot \Phi(x_i) + b\right) \geq 1, \quad i = 1,2,\cdots,n$$

拉格朗日乘子法 $\min_{w,b} \frac{1}{2}\|w\|^2, s.t.\ y_i\left(w^T \cdot \Phi(x_i)+b\right) \geq 1, i=1,2\cdots N$

$$L(w,b,\alpha)=\frac{1}{2}\|w\|^2-\sum_{i=1}^{n}\alpha_i\left(y_i\left(w^T\cdot\Phi(x_i)+b\right)-1\right)$$

- 原问题是极小极大问题

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

- 原始问题的对偶问题，是极大极小问题

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

拉格朗日函数

- 将拉格朗日函数L(**w**,b,**a**)分别对**w**，b求偏导并令其为0：

$$\frac{\partial L}{\partial w}=0\Rightarrow w=\sum_{i=1}^{n}\alpha_i y_i \Phi(x_n)$$

$$\frac{\partial L}{\partial b}=0\Rightarrow 0=\sum_{i=1}^{n}\alpha_i y_i$$

计算拉格朗日函数的对偶函数

$$w=\sum_{i=1}^{n}\alpha_i y_i \Phi(x_n)$$

$$0=\sum_{i=1}^{n}\alpha_i y_i$$

$$\begin{aligned}
L(w,b,\alpha)&=\frac{1}{2}\|w\|^2-\sum_{i=1}^{n}\alpha_i\left(y_i\left(w^T\cdot\Phi(x_i)+b\right)-1\right)\\
&=\frac{1}{2}w^Tw-w^T\sum_{i=1}^{n}\alpha_i y_i\Phi(x_i)-b\sum_{i=1}^{n}\alpha_i y_i+\sum_{i=1}^{n}\alpha_i\\
&=\frac{1}{2}w^T\sum_{i=1}^{n}\alpha_i y_i\Phi(x_i)-w^T\sum_{i=1}^{n}\alpha_i y_i\Phi(x_i)-b\cdot 0+\sum_{i=1}^{n}\alpha_i\\
&=\sum_{i=1}^{n}\alpha_i-\frac{1}{2}\left(\sum_{i=1}^{n}\alpha_i y_i\Phi(x_i)\right)^T\sum_{i=1}^{n}\alpha_i y_i\Phi(x_i)\\
&=\sum_{i=1}^{n}\alpha_i-\frac{1}{2}\sum_{i,j=1}^{n}\alpha_i\alpha_j y_i y_j\Phi^T(x_i)\Phi(x_j)
\end{aligned}$$

$$a^*=\arg\max_{\alpha}\left(\sum_{i=1}^{n}\alpha_i-\frac{1}{2}\sum_{i,j=1}^{n}\alpha_i\alpha_j y_i y_j\Phi^T(x_i)\Phi(x_j)\right)$$

继续求$\min_{w,b} L(w,b,\alpha)$对α的极大

$$\max_{\alpha} \sum_{i=1}^{n} \alpha_i - \frac{1}{2} \sum_{i=1}^{n} \sum_{j=1}^{n} \alpha_i \alpha_j y_i y_j \left(\Phi(x_i) \cdot \Phi(x_j) \right)$$

$$s.t. \ \sum_{i=1}^{n} \alpha_i y_i = 0$$

$$\alpha_i \geq 0, \quad i = 1,2,\ldots,n$$

整理目标函数：添加负号

$$\min_{\alpha} \quad \frac{1}{2}\sum_{i=1}^{n}\sum_{j=1}^{n}\alpha_i\alpha_j y_i y_j\left(\Phi(x_i)\cdot\Phi(x_j)\right)-\sum_{i=1}^{n}\alpha_i$$

$$s.t. \ \sum_{i=1}^{n}\alpha_i y_i = 0$$

$$\alpha_i \geq 0, \quad i = 1,2,\ldots,n$$

线性可分支持向量机学习算法

- 构造并求解约束最优化问题

$$\min_{\alpha} \quad \frac{1}{2}\sum_{i=1}^{n}\sum_{j=1}^{n}\alpha_i\alpha_j y_i y_j \left(\Phi(x_i)\cdot\Phi(x_j)\right)-\sum_{i=1}^{n}\alpha_i$$

$$s.t. \ \sum_{i=1}^{n}\alpha_i y_i = 0$$

$$\alpha_i \geq 0, \quad i=1,2,\ldots,n$$

- 求得最优解α*

线性可分支持向量机学习算法

- 计算

$$w^* = \sum_{i=1}^{N} \alpha_i^* y_i \Phi(x_i)$$

$$b^* = y_i - \sum_{i=1}^{N} \alpha_i^* y_i \left(\Phi(x_i) \cdot \Phi(x_j)\right)$$

- 求得分离超平面

$$w^* \Phi(x) + b^* = 0$$

- 分类决策函数

$$f(x) = sign\left(w^* \Phi(x) + b^*\right)$$

核函数

- 可以使用核函数，将原始输入空间映射到新的特征空间，从而，使得原本线性不可分的样本可能在核空间可分。
  - 多项式核函数： $\kappa(x_1,x_2)=(x_1\cdot x_2+c)^d$
  - 高斯核RBF函数： $\kappa(x_1,x_2)=\exp\left(-\gamma\cdot\|x_1-x_2\|^2\right)$
  - Sigmoid核函数： $\kappa(x_1,x_2)=tanh(x_1\cdot x_2+c)$
- 在实际应用中，往往依赖先验领域知识/交叉验证等方案才能选择有效的核函数。
  - 没有更多先验信息，则使用高斯核函数

多项式核函数 $\kappa(\vec{x},\vec{y})=(\vec{x}\cdot\vec{y})^2$

$$\kappa(\vec{x},\vec{y})=(\vec{x}\cdot\vec{y})^2$$

$$\Rightarrow\left(\sum_{i=1}^{n}x_i y_i\right)^2 \qquad \Rightarrow \Phi(\vec{x})=vec\left(x_i x_j\right)\Big|_{i,j=1}^{n}$$

$$=\sum_{i=1}^{n}\sum_{j=1}^{n}x_i x_j y_i y_j$$

特殊的，若n=3，即：$\Phi(\vec{x})=\begin{pmatrix} x_1x_1 \\ x_1x_2 \\ x_1x_3 \\ x_2x_1 \\ x_2x_2 \\ x_2x_3 \\ x_3x_1 \\ x_3x_2 \\ x_3x_3 \end{pmatrix}$

$$=\sum_{i=1}^{n}\sum_{j=1}^{n}\left(x_i x_j\right)\left(y_i y_j\right)$$

多项式核 $\kappa(\vec{x},\vec{y})=(\vec{x}\cdot\vec{y}+c)^2$

$$\kappa(\vec{x},\vec{y})=(\vec{x}\cdot\vec{y}+c)^2$$

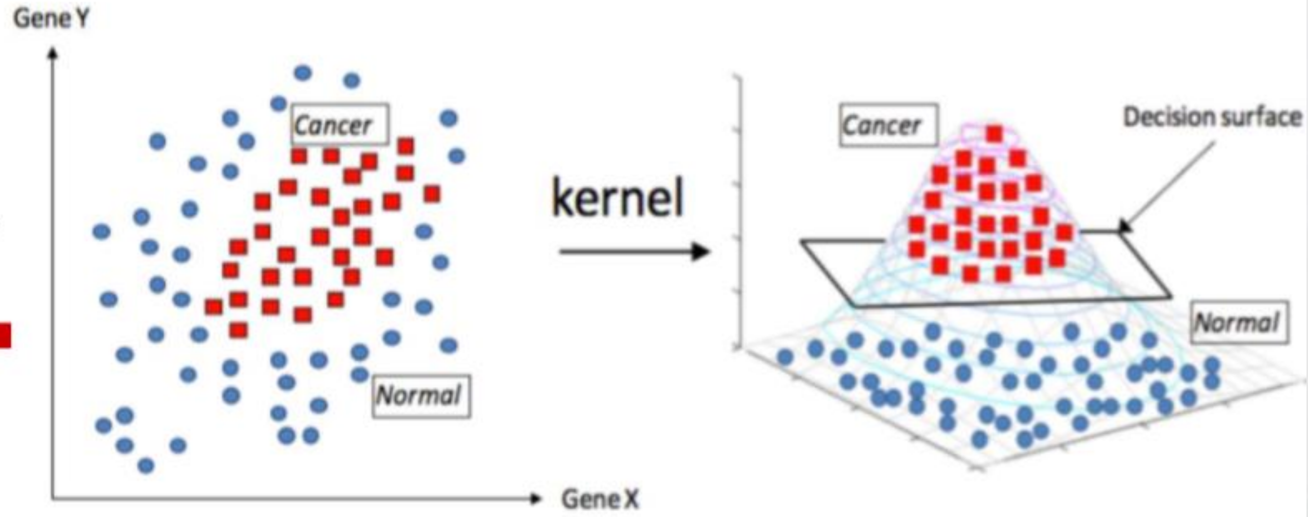
$$\Rightarrow(\vec{x}\cdot\vec{y})^2+2c\vec{x}\cdot\vec{y}+c^2$$

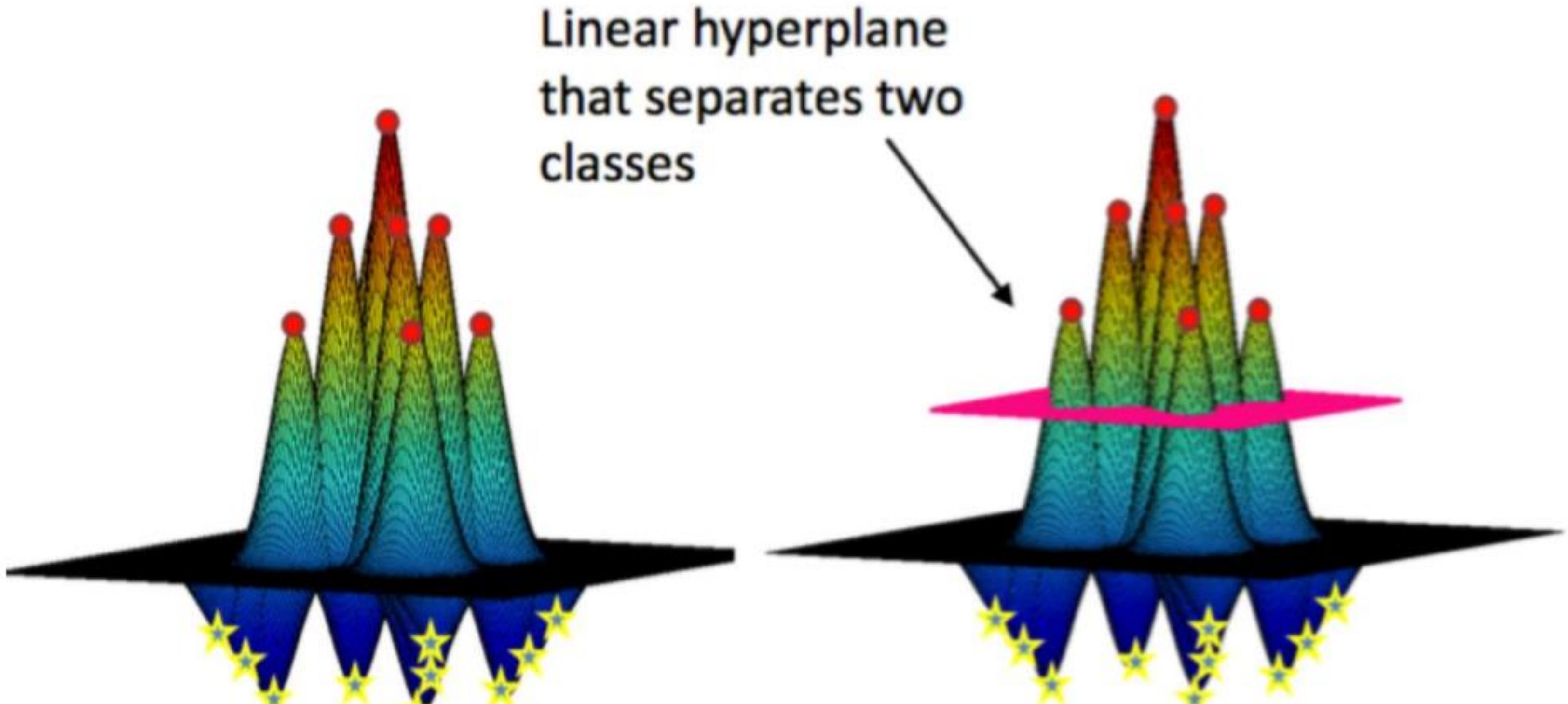
$$=\sum_{i=1}^{n}\sum_{j=1}^{n}(x_ix_j)(y_iy_j)+\sum_{i=1}^{n}\left(\sqrt{2c}x_i\cdot\sqrt{2c}x_j\right)+c^2$$

$$\Rightarrow\Phi(\vec{x})=\left(vec(x_ix_j)\Big|_{i,j=1}^{n},vec\left(\sqrt{2c}x_i\right)\Big|_{i=1}^{n},c\right)$$

特殊的，若n=3，即：$\Phi(\vec{x})=\begin{pmatrix} x_1x_1 \\ x_1x_2 \\ x_1x_3 \\ x_2x_1 \\ x_2x_2 \\ x_2x_3 \\ x_3x_1 \\ x_3x_2 \\ x_3x_3 \\ \sqrt{2c}x_1 \\ \sqrt{2c}x_2 \\ \sqrt{2c}x_3 \\ c \end{pmatrix}$

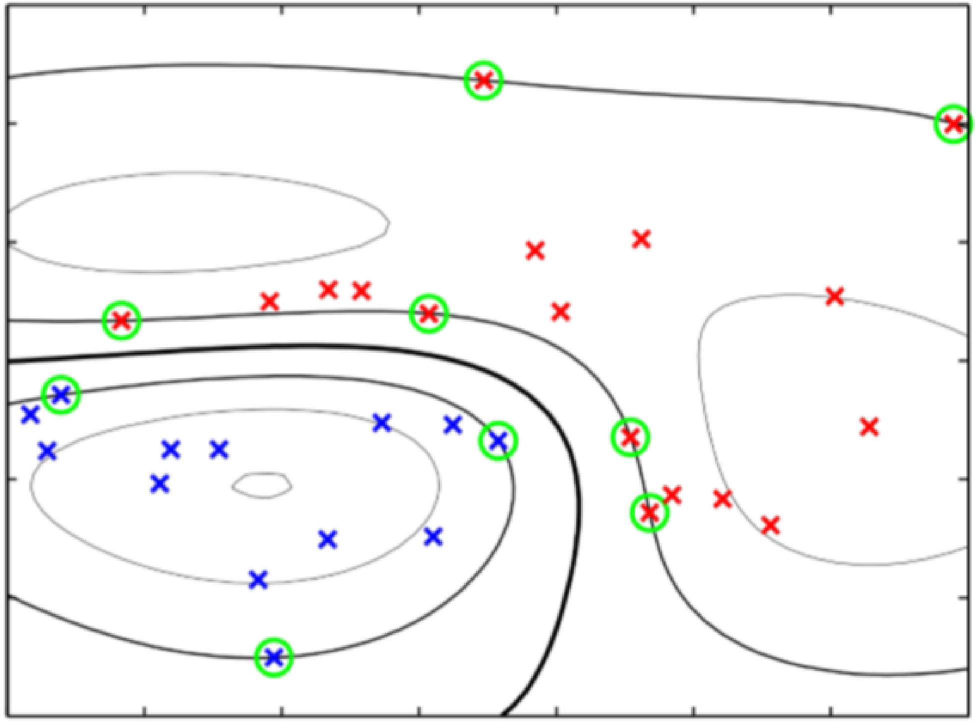
核函数映射


Gene Y
Cancer
Normal
Gene X
kernel
Cancer
Decision surface
Normal


Linear hyperplane
that separates two
classes

高斯核

- 粗线是分割超“平面”
- 其他线是y(x)的等高线
- 绿色圈点是支持向量点



高斯核是无穷维的 $e^x = 1 + x + \frac{x^2}{2!} + \frac{x^3}{3!} + \cdots + \frac{x^n}{n!} + R_n$

$$\kappa(x_1, x_2) = e^{-\frac{\|x_1 - x_2\|^2}{2\sigma^2}} = e^{-\frac{(x_1 - x_2)^2}{2\sigma^2}} = e^{-\frac{x_1^2 + x_2^2 - 2x_1x_2}{2\sigma^2}} = e^{-\frac{x_1^2 + x_2^2}{2\sigma^2}} \cdot e^{\frac{x_1x_2}{\sigma^2}}$$

$$= e^{-\frac{x_1^2 + x_2^2}{2\sigma^2}} \cdot \left(1 + \frac{1}{\sigma^2} \cdot \frac{x_1x_2}{1!} + \left(\frac{1}{\sigma^2}\right)^2 \cdot \frac{(x_1x_2)^2}{2!} + \left(\frac{1}{\sigma^2}\right)^3 \cdot \frac{(x_1x_2)^3}{3!} + \cdots + \left(\frac{1}{\sigma^2}\right)^n \cdot \frac{(x_1x_2)^n}{n!} + \cdots\right)$$

$$= e^{-\frac{x_1^2 + x_2^2}{2\sigma^2}} \cdot \left(1 \cdot 1 + \frac{1}{1!}\frac{x_1}{\sigma} \cdot \frac{x_2}{\sigma} + \frac{1}{2!} \cdot \frac{x_1^2}{\sigma^2} \cdot \frac{x_2^2}{\sigma^2} + \frac{1}{3!} \cdot \frac{x_1^3}{\sigma^3} \cdot \frac{x_2^3}{\sigma^3} + \cdots + \frac{1}{n!} \cdot \frac{x_1^n}{\sigma^n} \cdot \frac{x_2^n}{\sigma^n} + \cdots\right)$$

$$= \Phi(x_1)^T \cdot \Phi(x_2)$$

- 其中 $\Phi(x) = e^{-\frac{x^2}{2\sigma^2}} \left(1, \sqrt{\frac{1}{1!}}\frac{x}{\sigma}, \sqrt{\frac{1}{2!}}\frac{x^2}{\sigma^2}, \sqrt{\frac{1}{3!}}\frac{x^3}{\sigma^3}, \cdots, \sqrt{\frac{1}{n!}}\frac{x^n}{\sigma^n}, \cdots\right)$

理论拓展:

1.SVM多分类（比如1,2,3,4）

1-234　2-134　3-124　4-123 or

1-2　1-3　1-4　2-3　2-4　3-4

2.CNN+SVM

CNN提取特征，SVM进行分类

3.SVM是可做回归——SVR

OVER