运筹学第二次大作业

自22 任亮亮 2012011422
自22 夏　斐 2012011417

June 16, 2015

目录

1 建立模型

原始问题为:

$$\begin{cases} min & R^2 + C\sum\limits_{i=1}^{l}\xi_i \\ s.t. & ||x_i - a||^2 \leq R^2 - \xi_i \\ & \xi_i \geq 0, i = 1, 2 \ldots, l \end{cases} \tag{1}$$

对应的$Lagrange$函数为:

$$L(b, w, \xi, \alpha, \gamma) = R^2 + C\sum_{i=1}^{l}\xi_i + \sum_{i=1}^{l}\alpha_i(||x_i - a|| - R^2 + \xi_i) - \sum_{i=1}^{l}(\gamma_i\xi_i) \tag{2}$$

由$Lagrange$函数极小值条件可以退出

$$\begin{cases} \frac{\partial L}{\partial R} & \rightarrow & \sum\limits_{i=1}^{l}\alpha_i = 1 \\ \frac{\partial L}{\partial a} & \rightarrow & \sum\limits_{i=1}^{l}\alpha_i x_i = a \\ \frac{\partial L}{\partial \xi} & \rightarrow & C - \alpha_i - \gamma_i = 0 \end{cases} \tag{3}$$

原问题的对应的KKT条件为:

$$\begin{cases} \alpha_i = 0 & \Longleftrightarrow & \gamma_i > 0, ||x_i - a||^2 < R^2 - \xi_i, \xi_i = 0 & \Longleftrightarrow & ||x_i - a||^2 < R^2 \\ 0 < \alpha_i < C & \Longleftrightarrow & \gamma_i > 0, ||x_i - a||^2 = R^2 - \xi_i, \xi_i = 0 & \Longleftrightarrow & ||x_i - a||^2 = R^2 \\ \alpha_i = C & \Longleftrightarrow & \gamma_i = 0, ||x_i - a||^2 = R^2 - \xi_i, \xi_i > 0 & \Longleftrightarrow & ||x_i - a||^2 > R^2 \end{cases} \tag{4}$$

化简$Lagrange$函数:

$$L(b, w, \xi, \alpha, \gamma) = \sum_{i=1}^{l}\alpha_i(||x_i - \sum_{i=1}^{l}\alpha_i x_i||) = \sum_{i=1}^{l}\alpha_i(x_i, x_i) - \sum_{i=1}^{l}\sum_{j=1}^{l}\alpha_i\alpha_j(x_i, x_j) \tag{5}$$

则原问题的对偶问题为:

$$\begin{cases} max & \sum\limits_{i=1}^{l}\alpha_i(x_i, x_i) - \sum\limits_{i=1}^{l}\sum\limits_{j=1}^{l}\alpha_i\alpha_j(x_i, x_j) \\ s.t. & \sum\limits_{i=1}^{l}\alpha_i = 1 \\ & 0 \leq \alpha_i \leq C, i = 1, \ldots, l \end{cases} \tag{6}$$

2 SMO算法

由于$\sum\limits_{i=1}^{l}\alpha_i = 1$,所以我们每次需要改变两个$\alpha$的值,然后调整$\alpha$,具体流程如下:

2.1 选取α_i, α_j

这里采用启发式的选择算法,首先我们为了让目标函数的值进一步的增大,每次需要选取能够到达这个要求的α_i, α_j,我们需要减少α_i的同时增加α_j,所以为了尽可能的减少α_i和增加α_j,我们要选取能够减少的α_i里面最大的,和够增加的α_j里面最小,这样做的好处可以在第二步时得到体现

2.2 目标函数的α_i表示

为了方便推导,考虑$i = 1, j = 2$的情形

由$\sum_{i=1}^{l} \alpha_i = 1$ 则用λ表达$\alpha_1^{new} = \alpha_1 - \lambda; \alpha_2^{new} = \alpha_2 + \lambda$带入到目标函数

$W(\alpha_1^{new}, \alpha_2^{new}, \ldots, \alpha_l)$
$= (\alpha_1 - \lambda, \alpha_2 + \lambda, \ldots, \alpha_l)$
$= \sum_{i=1}^{l} \alpha_i(x_i, x_i) - \sum_{i=1}^{l} \sum_{j=1}^{l} \alpha_i\alpha_j(x_i, x_j) + ((x_2, x_2) - (x_1, x_1) - 2\sum_{i=1}^{l} \alpha_i(x_2, x_i) + 2\sum_{i=1}^{l} \alpha_i(x_1, x_i))\lambda - ((x_2, x_2) + (x_1, x_1) - 2(x_1, x_2))\lambda^2;$

则对λ求导后发现, 则求关于λ最大值$\lambda^{unclipped} = \frac{(x_2,x_2)-(x_1,x_1)+2\sum_{i=1}^{l} \alpha_i(x_1,x_i)-2\sum_{i=1}^{l} \alpha_i(x_2,x_i)}{2((x_2,x_2)+(x_1,x_1)-2(x_1,x_2))}$;

然后令$error(i) = (xi, xi) - 2\sum_{j=1}^{l} \alpha_i(x_j, x_i)$;$K(i, j) = (x_i, x_j)$

则$\lambda^{unclipped} = \frac{error(2)-error(1)}{2(K(1,1)+K(2,2)-2K(2,1))}$

又由于$\alpha_1^{new}, \alpha_2^{new} \in (0, C)$:

$$\lambda = min\{\alpha_1, C - \alpha_2, \lambda^{unclipped}\} \tag{7}$$

得到$\alpha_1^{new}, \alpha_2^{new}$后需要对$error(i)$进行调整,有观察到只有$\alpha_1, \alpha_2$发生了变化,所以可以采用迭代的方式更新:

$$error(i)^{new} = error(i) + 2\lambda((x_1, x_i) - (x_2, x_i)) = error(i) + 2\lambda(K(1, i) - K(2, i)) \tag{8}$$

所以可以看到若α_i, α_j的$error(i) - error(j)$较大的话有利于目标函数的改进.所以可以选取较大的$error(i)$和较小的$error(j)$来确定i, j.

2.3 终止条件判断

首先若找不到可以调整的α_i, α_j,则已经没有办法在进行优化;另外若计算出的$\lambda = 0$时, 即$error(i) = error(j)$时,则也无法进行优化.

2.4 R,a的计算

首先根据$lagrange$极值条件可以得到a,然后根据输出的α的值,根据原问题的KKT条件即可得到R.

3 实验

3.1 数据集描述

我们在五个数据集上测试了我们的SVDD实现.
数据集描述如下:

1. 香蕉数据集,这是一个性状像香蕉的二维数据集,我们测试我们的算法能否找打合适的支持向量.
2. UCI-帕金森数据集. 这个数据集包含了帕金森和非帕金森的人的一些测试指标. 共有195个数据. 包含两类.
3. Iris数据集. 这是机器学习中最经典的数据集之一,包含了花瓣的尺寸和花的种类的关系.有150个数据点. 包含三类.
4. UCI-癌症数据集. 这个数据集包含了癌症患者和非癌症患者的一些测试指标. 共有683个数据. 包含两类.
5. UCI-大肠杆菌数据集, 这个数据集包含了几种大肠杆菌的属性和种类的关系, 共有366个数据.

3.2 测试流程

如果想测试我们的程序，直接运行 testsvdd2.m 即可.

我们采用了比较严格的测试流程. 首先，我们构造正例和负例，对于只有两类的数据集，正负例比较明显，对于有多类的数据集，取出其中一类作为正例，其余作为负例。

然后，我们取出一部分正例作为训练样本, 然后将剩下的正例和负例混合起来, 作为测试数据。对于训练数据，我们求出其SVDD表示，这样可以判断一个新的样本是否属于该类。对于测试数据，我们求出我们预测的标签，与真实的标签比较，可以得到真阳性，真阴性，假阳性，假阴性的数目。然后我们进一步求出准确率，召回率，以及准确率。

计算公式如下:

$$Precision = \frac{TP}{TP + FP}$$

$$Recall = \frac{TP}{TP + FN}$$

$$Accuracy = \frac{TP + TN}{TP + TN + FP + FN}$$

对于训练样本的选取，我们随机选取$\frac{2}{3}$的正例, 这样的过程进行10-20次，取平均的结果以消除随机性的影响.

如上所述，我们的测试流程比较严格，结果可信度也比较高。

3.3 测试结果

1. 帕金森数据集

   precision:0.636761, recall:0.857143, accuracy:0.681443

2. Iris数据集

   precision:1.000000, recall:0.791176, accuracy:0.969658

3. 癌症数据集

   precision:1.000000, recall:0.963851, accuracy:0.963851

4. 大肠杆菌数据集

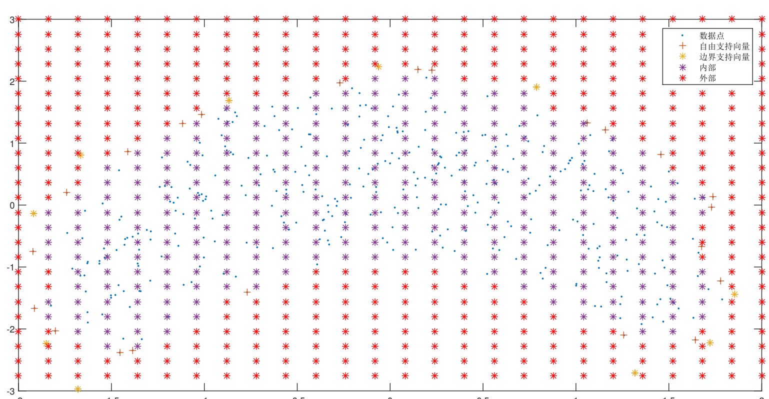
   precision:0.805449, recall:0.889583, accuracy:0.935062

结果为经过参数调整后的结果，关于参数调整，将在分析中说明。
由此可见这样的结果比较理想，分类达到了比较好的效果。

3.4 结果分析

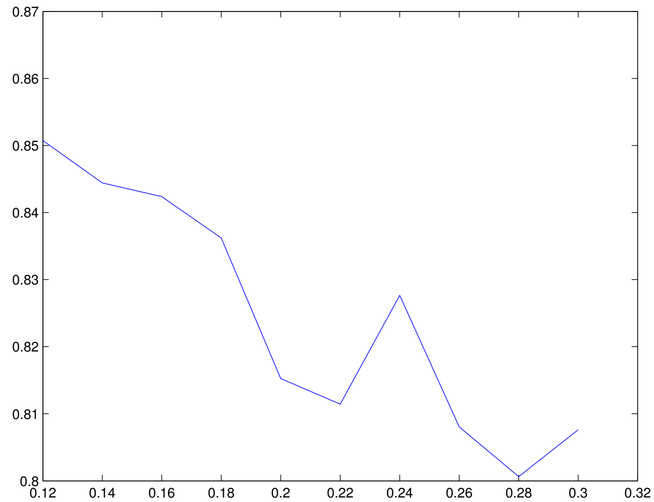
3.4.1 数据可视化分析

对于第一组香蕉数据集，我们进行了数据可视化，观察一下训练数据，测试数据，自由支持向量,边界支持向量，被错分的数据在空间上是如何分布的，如图所示:

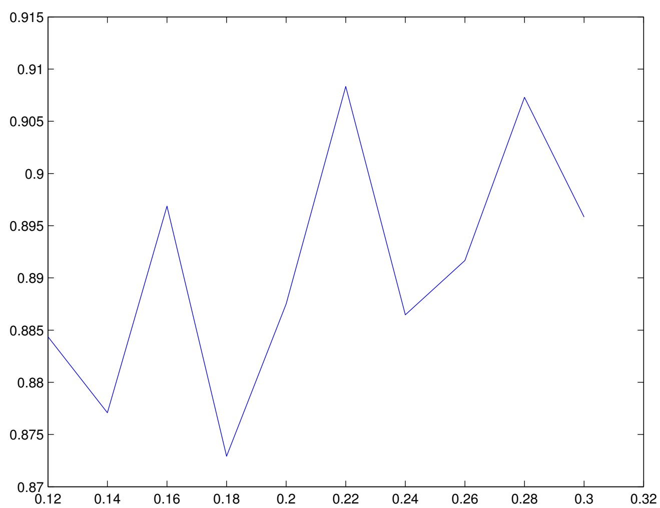


3.4.2 灵敏度分析

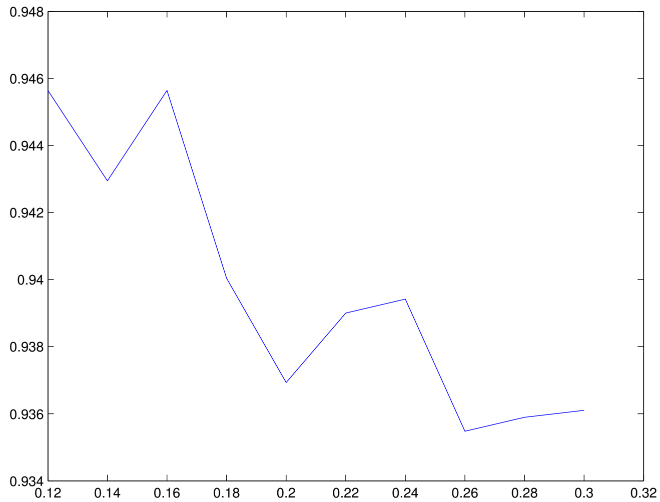
我们选取了一组数据进行灵敏度分析测试，即随着参数的改变，算法的表现如何.
对于大肠杆菌数据集，我们让C增加，观察准确率，召回率，和准确度率的变化.
准确率的变化:



召回率的变化:

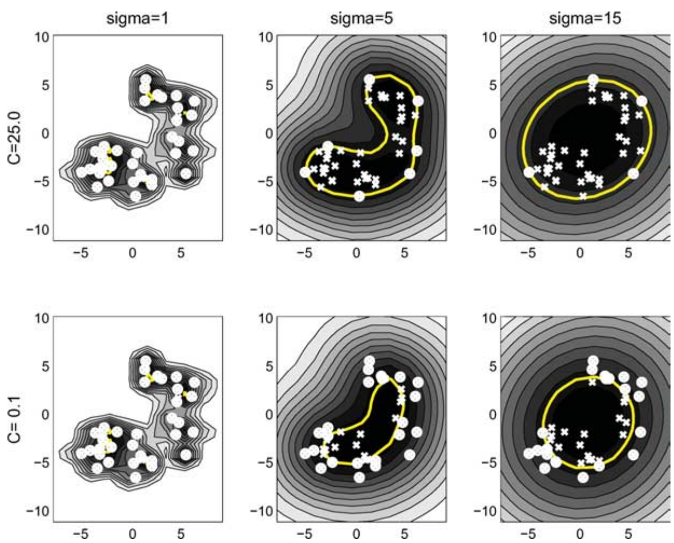


精确度的变化:



由此课件，增加C会增加超球的半径，于是引入一些假阳性，消除了一些假阴性，导致准确率变低，召回率略微上升，精确度也只是略微变低，但不明显。

随着σ变大，超球会变得更加光滑，于是支持向量的数量变少。如图所示:



4 小结

4.1 成员分工

任亮亮同学负责公式的推导，两位同学共同完成了文献的阅读，两位同学共同完成了代码的书写与调试，夏斐同学完成了数据的测试，报告由两位同学共同完成。

4.2 感想与体会

在这次运筹大作业的过程中，我们学会了用优化的方法解决了实际问题。优化在机器学习中有广泛的应用，SMO只是其中的冰山一角，还有更多有意思的算法会用到优化的知识。我们感受到在这次大作业中学到很多。

5 参考文献

1. Bottou, Léon, and Chih-Jen Lin. "Support vector machine solvers." Large scale kernel machines (2007): 301-320. APA

2. Tax, David MJ, and Robert PW Duin. "Support vector data description." Machine learning 54.1 (2004): 45-66.

3. Bache, K., Lichman, M.: UCI machine learning repository (2013).