支持向量机SVM分类与回归算法推导过程

Friday, April 26, 2024 2:04 PM

支持向量机是一种代理模型，并支持分类与回归两种算法。

由期望风险为：

$$R(w) = \int L(y, f(x,w))\, dP(x,y)$$

(1) 经验风险 $\longrightarrow R_{emp}(w) = \frac{1}{l}\sum_{i=1}^{l} L(y_i, f(x_i, w))$

一般地，Remp最小化往往可能导致过学习，而最小二乘和神经网络一般是以 R_{emp} 最小为准则提出的。

(2) 结构风险：

$$R(w) \leq R_{emp}(w) + \Omega\left(\frac{l}{h}\right)$$

参考支持向量机部分，我们可通过最小化 $\frac{1}{2}\|w\|^2$ 来最大化平面距离 $\gamma = \frac{2}{\|w\|}$

引入松弛变量 ξ_i 之后，引入Lagrange函数为：

$$L(w, b, \xi, \alpha, \gamma) = \boxed{\frac{1}{2}\|w\|^2 + C\sum_{i=1}^{l}\xi_i} - \sum_{i=1}^{l}\alpha_i\left[y_i(w\cdot\varphi(x_i)+b) - 1 + \xi_i\right] - \sum_{i=1}^{l}\gamma_i\xi_i$$

其中 w, b, ξ_i 为优化变量，$\alpha_i \geq 0$，$\gamma_i \geq 0$，为Lagrange乘子

(约束函数是 $y_i(w\cdot\varphi(x_i)+b) \geq 1-\xi_i$ $\xi_i \geq 0$) 求

我们是求解 α, γ 使得 L 最小，实际无需对偶

$$\min_{\alpha,\gamma\geq 0} L(w, b, \xi, \alpha, \gamma)$$

此时利用KKT条件，有：$f(x) + \sum_{i=1}^{m}\alpha_i g_i(x) + \sum_{j=1}^{k}\beta_j h_j(x)$，$g_i(x) \leq 0$，$h_i(x) = 0$ 时：

$$\begin{cases} \frac{\partial L(x, \alpha^*, \beta^*)}{\partial x} = 0 \\ \alpha_i^* g_i(x) = 0 \\ h_j(x^*) = 0,\ g_i(x^*) < 0 \\ \alpha_i(x^*) \geq 0 \end{cases} \Longrightarrow \frac{\partial L}{\partial w} = \frac{\partial L}{\partial b} = \frac{\partial L}{\partial \xi_i} = 0$$

代入：

由第一式，得：
① $\|w\| - \sum_{i=1}^{l}\alpha_i y_i\varphi(x_i) = 0$ (1)

② $-\sum_{i=1}^{l}\alpha_i y_i\ 0,$ $\longrightarrow$ $\sum_{i=1}^{l}\alpha_i y_i = 0$ (2)

③ $C - \alpha_i - \gamma_i = 0 \longrightarrow \gamma_i = C - \alpha_i$ (3)

另外：$\alpha_i \geq 0$，$\gamma_i \geq 0$ (初始条件限制)

代入：有：

$$L(w,b,\xi,\alpha,\gamma) = \frac{1}{2}\sum_{i=1}^{l}\alpha_i y_i\varphi(x_i)\cdot\sum_{j=1}^{l}\alpha_j y_j\varphi(x_j) + C\sum_{i=1}^{l}\xi_i - \sum_{i=1}^{l}(C-\alpha_i)\xi_i$$
$$- \sum_{i=1}^{l}\alpha_i y_i\left(\sum_{j=1}^{l}\alpha_j y_j\right)\cdot\varphi(x_i) - \cancel{b\sum_{i=1}^{l}\alpha_i y_i} - \sum_{i=1}^{l}\alpha_i(\xi_i - 1)$$

$$= -\frac{1}{2}\sum_{i=1}^{l}\sum_{j=1}^{l}\alpha_i\alpha_j y_i y_j\varphi(x_i) + \cancel{\sum_{i=1}^{l}\alpha_i\xi_i} + \sum_{i=1}^{l}\alpha_i(1-\cancel{\xi_i})$$

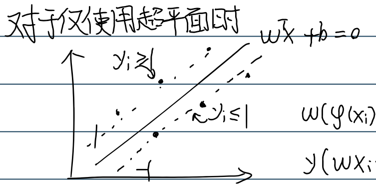
$$= \sum_{i=1}^{l}\alpha_i - \frac{1}{2}\sum_{i=1}^{l}\sum_{j=1}^{l}\alpha_i\alpha_j y_i y_j\varphi(x_i)$$

问题转化：

$$\Rightarrow \boxed{\min_{\alpha\geq 0}\left(\frac{1}{2}\sum_{i=1}^{l}\sum_{j=1}^{l}\alpha_i\alpha_j y_i y_j\varphi(x_i) - \sum_{i=1}^{l}\alpha_i\right),\ s.t.\ \sum_{i=1}^{l}\alpha_i y_i = 0},\quad \alpha_i \in [0, C]$$

需要指出，其中函数 $\varphi(x_i)$ 用于将原空间投射到特征空间。

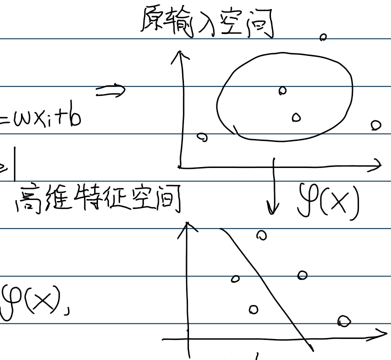
对于仅使用超平面时



$$w(\varphi(x_i)+b)=wx_i+b$$

$$y(wx_i+b)\geq 1$$

$\Rightarrow$



因而我们用核函数代替 $\varphi(x)$，

则有：

$$\boxed{\max\left(\frac{1}{2}\sum_{i=1}^{l}\sum_{j=1}^{l}\alpha_i\alpha_j y_i y_j K(x_i,x_j)-\sum_{i=1}^{l}\alpha_i\right)}\quad\left(\begin{array}{l}\sum_{i=1}^{l}\alpha_i y_i=0\\ 0\leq\alpha_i\leq C\end{array}\right)$$

后面两项都必为0

互补松弛条件

显然：$\alpha\in[0,C]$ 而由 $\alpha_i^* g_i(x)=0$，则 $\boxed{\alpha_i(y_i(w\cdot\varphi(x_i)+b)-1+\xi_i)=0}$，(1)

若 $\alpha_i\neq 0$ 时，显：$y_i(w\varphi(x_i)+b)-1+\xi_i=0$，

又：由互补松弛条件(2)有：$\gamma_i\xi_i=0$，代入 $\gamma_i=C-\alpha_i$

此时：若 $\alpha_i\in(0,C)$ 则显有 $\xi_i=0$，则对应式为

$$\boxed{\alpha_i(y_i(w\varphi(x_i)+b))=1}\quad(\alpha\in(0,C))$$

通过此式可以经过任意一个 α_i, y_i 式子求解出 b 值

而我们往往通过计算所有 b 值并取平均获取 b。

而显然二分类可用分类函数由 $w\varphi(x_i)+b$ 获取，代入有：

$$\boxed{g_{svm}(x)=\mathrm{sgn}\left(\sum_{i=1}^{l}\alpha_i y_i K(x,x_i)+b\right)}.$$ 为分类预测函数

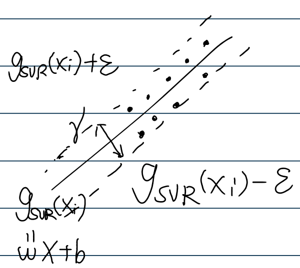
支持向量机回归优化公式推导：

我们考虑训练样本集：

$D=\{(x_1,y_1)(x_2,y_2)\cdots\cdots(x_l,y_l)\}$，而假设对该样本集

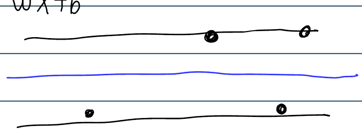
存在一个线性近似使得：

$$|g_{SVR}(x_i)-y_i|\leq\varepsilon,\quad i=1,2,\cdots l$$



由：直线距公式：由：$y_1=w^Tx+b$，$y_2=w^Tx+b+\varepsilon$

$$\gamma=\frac{2|\varepsilon|}{\sqrt{\|w\|^2+1}}\quad 对应地：d_i=\frac{|w^Tx+b-y_i|}{\sqrt{\|w\|^2+1}}\leq\frac{|\varepsilon|}{\sqrt{\|w\|^2+1}},\quad i=1,2,\cdots l。$$



按照支持向量理论所建立的模型即为最大化样本点之间的距离的，而显然同时满足了 $\delta\leq\varepsilon$ 这一需求。

回归问题变为：$\min\frac{1}{2}\|w^2\|$ $\Rightarrow$

回归问题变为: $\min \frac{1}{2}\|w^2\|$

st: $|g_{SVR}(x_i)-y_i| = |w^T X + b - y_i| \leq \varepsilon$ ($\forall$ i=1,2,⋯l 均成立)

另外: 考虑到上式不能严格满足, 引入变量 $\xi_i \geq 0$, $\xi_i^* \geq 0$, 同时考虑

仍然使用拉格朗日乘数法求解:

其中C: 正则化常数

$$\min\left[\frac{1}{2}\|w\|^2 + C\sum_{i=1}^{l}(\xi_i+\xi_i^*)\right]$$

需说明对于回归容差线内的点: ξ_i ξ_i^* 均为 0

使用不敏感损失

$$|y-g_{SVR}(x)| = \begin{cases} 0 & \because <\varepsilon \\ |y-g_{SVR}|-\varepsilon & \text{other} \end{cases}$$

约束条件松弛为:

$$\begin{cases} g_{SVR}(x_i) - y_i - \varepsilon - \xi_i \leq 0 \\ y_i - g_{SVR}(x_i) - \varepsilon - \xi_i^* \leq 0 \end{cases} \Longrightarrow \text{分别表示两侧松弛度}$$

其中: $\xi_i^*, \xi_i \geq 0$ i=1,2,⋯ l.

由于求解最小值, 原问题为:

$$\min_{\substack{w,b,\mu\geq 0\\ \xi_1,\xi_2,\mu^*\geq 0\\ \alpha\geq 0\\ \alpha^*\geq 0}} \max L(w,b,\xi_1,\xi_2,\mu,\mu^*) \overset{\text{对偶}}{=} \max_{\substack{\mu\geq 0\\ \mu^*\geq 0\\ \alpha\geq 0\\ \alpha^*\geq 0}} \min_{\substack{w\\ b\\ \xi_1\\ \xi_2}} L(w,b,\xi_1,\xi_2,\mu,\mu^*)$$

为求解极值点, 构造拉格朗日无条件极值

$$L = \frac{1}{2}\|w\|^2 + C\sum_{i=1}^{l}(\xi_i+\xi_i^*) - \sum_{i=1}^{l}\mu_i\xi_i - \sum_{i=1}^{l}\mu_i^*\xi_i^*$$

$$+\sum_{i=1}^{l}\alpha_i(g_{SVR}(x_i)-y_i-\varepsilon-\xi_i) + \sum_{i=1}^{l}\alpha_i^*(y_i-g_{SVR}(x_i)-\varepsilon-\xi_i^*) \text{ 求最小}$$

求导:

$w - \sum\alpha_i x_i + \sum\alpha_i^* x_i = 0$

$\therefore w = \sum(\alpha_i-\alpha_i^*)x_i$

显然: $\mu_i\xi_i=0$, $\mu_i^*\xi_i^*=0$ 时 最小值

其中 $g_{SVR}(x_i) = wx+b$

① : 极值点

$\frac{1}{2}(\alpha_i-\alpha_j^*)\cdot x_i x_j - (\alpha_i-\alpha_i^*)w x_i$

$$\frac{\partial L}{\partial w} = \frac{\partial L}{\partial C} = \frac{\partial L}{\partial \xi_i} = \frac{\partial L}{\partial \xi_i^*} = 0$$

直接求解, 代入有:

$w = \sum_{i=1}^{l}(\alpha_i^*-\alpha_i)x_i$ ①, $\sum_{i=1}^{l}(\alpha_i-\alpha_i^*) = 0$ ②

$\mu_i^* = C-\alpha_i^*$

$C-\mu_i-\alpha_i = 0$ ③ $C-\mu_i^*-\alpha_i^* = 0$ ④ 代入得: $\mu_i = C-\alpha_i$

$$L = -\frac{1}{2}\sum_{i=1}^{l}(\alpha_i^*-\alpha_i)x_i\sum_{j=1}^{l}(\alpha_j^*-\alpha_j)x_j + \sum_{i=1}^{l}\cancel{\left[-\alpha_i\xi_i-\alpha_i^*\xi_i^*+\alpha_i\xi_i+\alpha_i^*\xi_i^*\right]}$$

$$+\sum_{i=1}^{l}(\alpha_i^*-\alpha_i)y_i - \sum_{i=1}^{l}(\alpha_i+\alpha_i^*)\varepsilon$$

=

$$+\sum_{i=1}(\alpha_i^*-\alpha_i)y_i-\sum_{i=1}(\alpha_i+\alpha_i^*)\varepsilon$$

$$=\underbrace{\max_{\alpha_i,\alpha_i^*\geq 0}\min_{\omega,b}-\frac{1}{2}\sum_{i=1}^{l}\sum_{j=1}^{l}(\alpha_i^*-\alpha_i)(\alpha_j^*-\alpha_j)x_ix_j+\sum_{i=1}^{l}\boxed{(\alpha_i^*-\alpha_i)y_i-(\alpha_i+\alpha_i^*)\varepsilon}}$$

$$s.t.\ \sum_{i=1}^{l}(\alpha_i^*-\alpha_i)=0\ ;\quad 0\leq\alpha_i,\alpha_i^*\leq C\ (\text{由于}\ \mu_i\ \text{限制}).$$

而对于非线性问题，我们只需用核函数将 x 映射到高维空间：

$$\max_{\alpha_i,\alpha_i^*\geq 0}\sum_{i=1}^{l}(\alpha_i^*-\alpha_i)y_i-(\alpha_i+\alpha_i^*)\varepsilon-\frac{1}{2}\sum_{i=1}^{l}\sum_{j=1}^{l}(\alpha_i^*-\alpha_i)(\alpha_j^*-\alpha_j)\ x_ix_j\ K(x_i,x_j)$$

另外：利用松弛条件，有：

$$\rightarrow \mu_i=C-\alpha_i$$

$$\sum_{i=1}^{l}\alpha_i\left(g_{SVR}(x_i)-y_i-\varepsilon-\xi_i\right)=0,\qquad \mu_i\xi_i=0$$

$$\sum_{i=1}^{l}\alpha_i^*\left(y_i-g_{SVR}(x_i)-\varepsilon-\xi_i^*\right)=0,\qquad \mu_i^*\xi_i^*=0$$

又：$g_{SVR}=\omega\varphi(x)+b=\sum_{i=1}^{l}(\alpha_i-\alpha_i^*)k(x_i,x_j)+b$ ☆

因而：

当 $\alpha_i\in(0,C)$ 时，显有 $\xi_i=0$，$\alpha_i\neq 0$，则得：

$$\begin{cases}g_{SVR}(x_i)-y_i-\varepsilon=0, & \alpha_j\in(0,C)\\ y_i-g_{SVR}(x_i)-\varepsilon=0 & \alpha_j^*\in(0,C)\end{cases}$$

代入：
$$\begin{cases}b=y_i+\varepsilon-\sum_{i=1}^{l}(\alpha_i-\alpha_i^*)k(x_i,X) & \alpha_j\in(0,C)\\ b=y_i-\varepsilon-\sum_{i=1}^{l}(\alpha_i-\alpha_i^*)k(x_i,X) & \alpha_j^*\in(0,C)\end{cases}$$

我们只需求解最大化式子的 α_i,α_i^*，然后代入☆

$$g_{SVR}=\omega^Tx+b=\sum_{i=1}^{l}(\alpha_i-\alpha_i^*)k(x_i,x_j)+b\ \text{即可.}$$