Support Vector Machine

Introduction

SVM是一种广泛应用的分类算法，SVM有三个要点：Hard-Margin, Soft-Margin, Kernel。
SVM希望找到一个最好的分类的超平面，离所有的点间隔都最大。

Hard-Margin

硬间隔SVM又称为最大间隔分类器。它需要：

$$\max \operatorname{margin}(W, b)\ s.t.\ y_i(W^T x_i + b) > 0$$

这里的数据集是：

$$\{(x_i, y_i)\}_{i=1}^N, x_i \in \mathbb{R}^p, y_i \in \{-1, 1\}$$

我们选取$f(W) = sign(W^T x + b)$为激活函数。
根据定义，我们可以得出：

$$margin(W, b) = \min_{W,b,i=1,\cdots,N} \operatorname{distance}(W, b, x_i) = \min_{W,b,i=1,\cdots,N} \frac{y_i(W^T x_i + b)}{\| W \|}$$

我们的问题可以由此转换为：

$$\begin{cases} \max\limits_{W,b} \dfrac{\min\limits_{i=1,\cdots,N} y_i(W^T x_i + b)}{\| W \|} \\ s.t.\ y_i(W^T x_i + b) > 0 \end{cases}$$

通过对W进行缩放，我们可以使得$\min\limits_{i=1,\cdots,N} y_i(W^T x_i + b)$为$1$，因此：

$$
\left\{
\begin{array}{l}
\max\limits_{W,b} \dfrac{1}{\parallel W \parallel} \\
\\
s.t. \ \forall i = 1, \cdots, N \ y_i(W^T x_i + b) \geq 1
\end{array}
\right.
$$

$$
\Rightarrow \left\{
\begin{array}{l}
\min\limits_{W,b} \frac{1}{2} W^T W \\
\\
s.t. \ \forall i = 1, \cdots, N, \ 1 - y_i(W^T x_i + b) \leq 0
\end{array}
\right.
$$

这样就转换为一个convex optimization（凸优化）问题，优化函数为二次函数。我们可以用拉格朗日乘子法解决。

$$
\mathcal{L}(W, b, \lambda) = \frac{1}{2} W^T W + \sum_{i=1}^{N} \lambda_i (1 - y_i(W^T x_i + b))
$$

$$
\left\{
\begin{array}{l}
\min\limits_{W,b} \max\limits_{\lambda} \mathcal{L}(W, b, \lambda) \\
\\
s.t. \ \forall i = 1, \cdots, N, \ \lambda_i \geq 0
\end{array}
\right.
$$

这个问题的转换我们可以这样理解，当$1 - y_i(W^T x_i + b) \geq 0$时，$\max\limits_{\lambda} \mathcal{L}(W, b, \lambda) = +\infty$，当$1 - y_i(W^T x_i + b) < 0$时，$\max\limits_{\lambda} \mathcal{L}(W, b, \lambda)$必然存在最大值$\frac{1}{2} W^T W$，则$\min\limits_{W,b} \max\limits_{\lambda} \mathcal{L}(W, b, \lambda)$可以在$1 - y_i(W^T x_i + b) < 0$时找到。因此这两个是等价的。
由于这是一种凸二次优化问题，所以这个问题和它的对偶问题(dual problem)等价：

$$
\left\{
\begin{array}{l}
\max\limits_{\lambda} \min\limits_{W,b} \mathcal{L}(W, b, \lambda) \\
\\
s.t. \ \forall i = 1, \cdots, N, \ \lambda_i \geq 0
\end{array}
\right.
$$

因此，

$$\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial b} = -\sum_{i=1}^{N} \lambda_i y_i = 0$$

$$\Rightarrow \mathcal{L}(W, b, \lambda) = \frac{1}{2} W^T W + \sum_{i=1}^{N} \lambda_i - \sum_{i=1}^{N} \lambda_i y_i W^T x_i$$

$$\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial W} = W - \sum_{i=1}^{N} \lambda_i y_i x_i = 0$$

$$\Rightarrow \begin{aligned} \mathcal{L}(W, b, \lambda) &= \frac{1}{2} (\sum_{i=1}^{N} \lambda_i y_i x_i)^T \sum_{j=1}^{N} \lambda_j y_j x_j - \sum_{i=1}^{N} \lambda_i (y_i (\sum_{j=1}^{N} \lambda_j y_j x_j)^T x_i - 1) \\ &= -\frac{1}{2} \sum_{i=1}^{N} \sum_{j=1}^{N} \lambda_i \lambda_j y_i y_j x_i^T x_j + \sum_{i=1}^{N} \lambda_i \end{aligned}$$

问题转换为（为QP，有现成工具求解）：

$$\begin{cases} \min\limits_{\lambda} \frac{1}{2} \sum_{i=1}^{N} \sum_{j=1}^{N} \lambda_i \lambda_j y_i y_j x_i^T x_j - \sum_{i=1}^{N} \lambda_i \\ s.t.\ \lambda_i \geq 0 \\ \sum_{i=1}^{N} \lambda_i y_i = 0 \end{cases}$$

因为原、对偶问题具有强对偶关系，等价于它们满足KKT条件：

$$\begin{cases} \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial b} = 0,\ \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial W} = 0 \\ \lambda_i (1 - y_i (W^T x_i + b)) = 0 \\ \lambda_i \geq 0 \\ 1 - y_i (W^T x_i + b) \leq 0 \end{cases}$$

观察后三个条件我们可以得出，当数据不在支持向量$W^T x + b = \pm 1$上时，有$\lambda_i = 0$。我们假设$\exists (x_k, y_k)$，$s.t.\ 1 - y_k (W^T x_k + b) = 0$。那么：

$$
\begin{aligned}
&y_k(W^Tx_k+b)=1\\
\Rightarrow &y_k^2(W^Tx_k+b)=y_k\\
\Rightarrow &(W^Tx_k+b)=y_k\\
\Rightarrow &b^*=y_k-W^Tx_k
\end{aligned}
$$

因此，我们可以解出W,b：

$$
\begin{cases}
W^*=\sum_{i=1}^N\lambda_iy_ix_i\\
\\
b^*=y_k-\sum_{i=1}^N\lambda_iy_ix_i^Tx_k
\end{cases}
$$

Soft-Margin

$f(W)=sign(W^Tx+b)$

软间隔SVM产生的初衷是允许我们的分类产生一点点错误，我们回到我们最初的优化问题：

$$
\begin{cases}
\min\limits_{W,b}\frac{1}{2}W^TW\\
\\
s.t.\ \forall i=1,\cdots,N,\ 1-y_i(W^Tx_i+b)\le 0
\end{cases}
$$

我们需要在此基础上对优化函数做出一些改动，加上一个loss function。对于这个loss function，最简单的想法就是发生错误点的个数$\sum_{i=1}^N I\{y_i(W^Tx_i+b)<1\}$，但是这是一个不连续的函数，更好的选择是$loss=\max\{0,1-y_i(W^Tx_i+b)\}$。引入变量$\xi_i=1-y_i(W^Tx_i+b)$，且$\xi_i\ge 0$，那么优化问题可以转换为：

$$
\begin{cases}
\min\limits_{W,b}\frac{1}{2}W^TW+C\sum_{i=1}^N\xi_i\\
\\
s.t.\ y_i(W^Tx_i+b)\ge 1-\xi_i,\ \xi_i\ge 0
\end{cases}
$$

这个问题和上一节的解法类似，在这里不多做介绍。

$f(W)=sigmoid(\theta^Tx)$

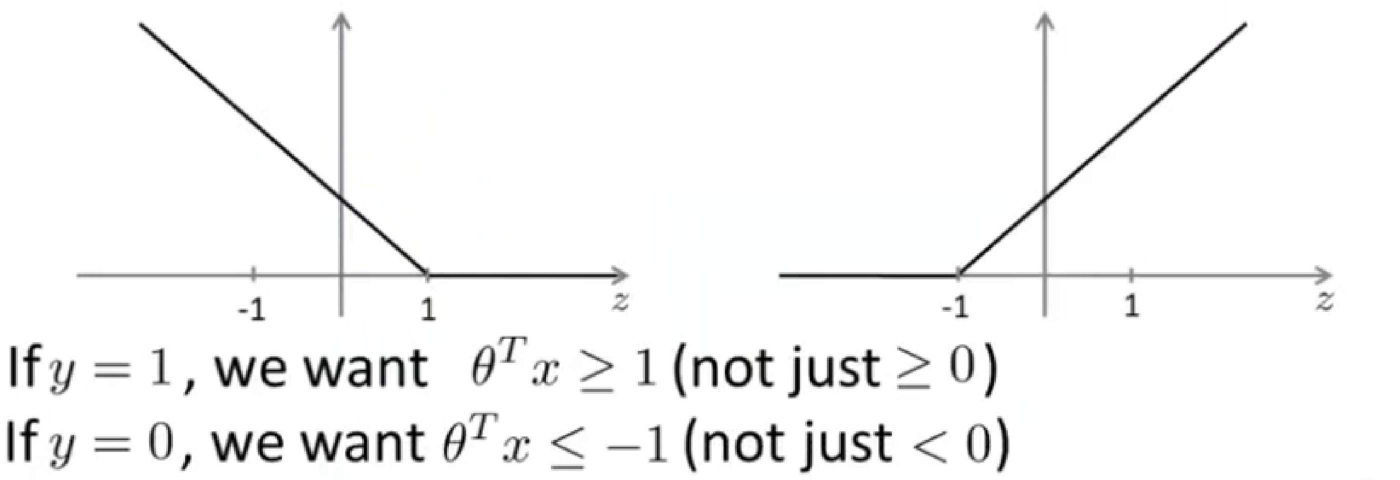
回忆之前的逻辑回归，为了得到更好地分类效果，我们希望：

$$if\ y=1,\ we\ want\ h_\theta(x)\approx 1, \theta^T x \gg 0$$
$$if\ y=0,\ we\ want\ h_\theta(x)\approx 0, \theta^T x \ll 0$$

回忆我们在逻辑回归中提出的cost function：

$$\begin{aligned}&-(y\log h_\theta(x)+(1-y)\log(1-h_\theta(x)))\\=&-(y\log\frac{1}{1+e^{-\theta^T x}}+(1-y)\log(1-\frac{1}{1+e^{-\theta^T x}})\end{aligned}$$

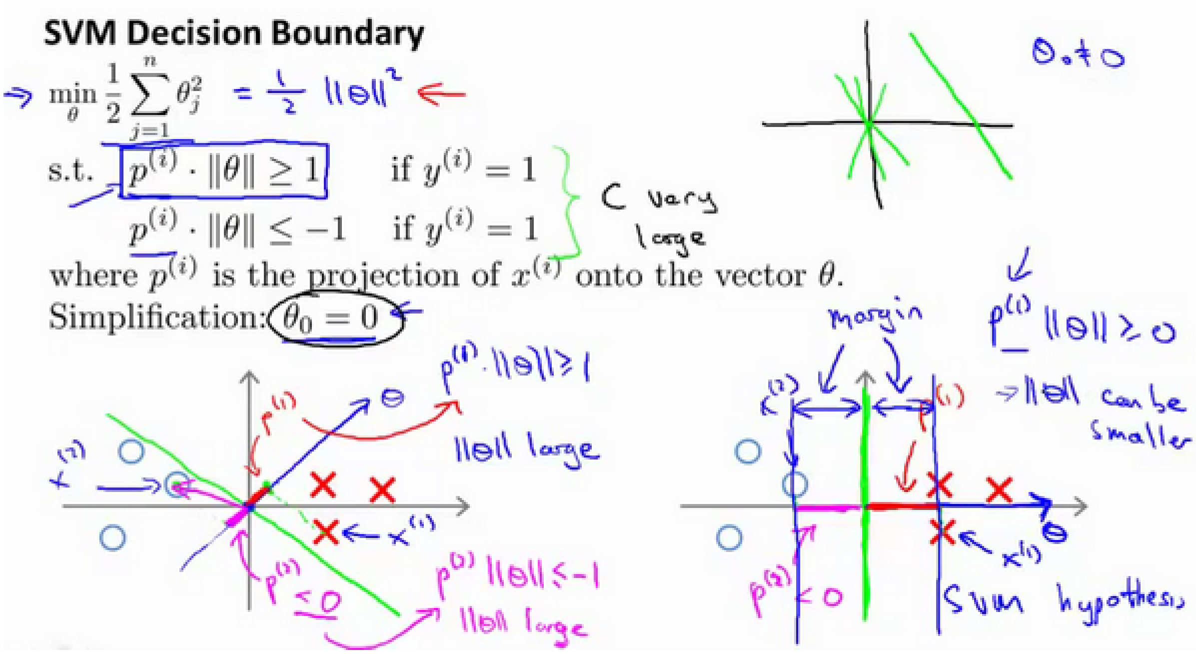
我们把$\log h_\theta(x)$转换成折线$cost(z)$



因此我们的优化函数便转换成了（C可以理解为$\frac{1}{\lambda}$）：

$$\min_\theta C\sum_{i=1}^{m}[y^{(i)}cost_1(\theta^T x^{(i)})+(1-y^{(i)})cost_0(\theta^T x^{(i)})]+\frac{1}{2}\sum_{j=1}^{n}\theta_j^2$$

当C较大时，我们可以忽略优化函数的的第一项。我们对$\theta^T x$做一个转换，$\theta^T x$可以视作向量θ和x的内积，我们设$x^{(i)}$在θ上的投影为$p^{(i)}$，那么$\theta^T x = p^{(i)}\cdot \parallel \theta \parallel$。我们对分类器做一个简单的理解：



对于如下的数据集，如果我们用左图进行分类的话，那么我们得到的$p^{(i)}$会很小，如果要做到$|p^{(i)}\cdot\|\theta\||\gg 1$的话，那么我们需要让$\|\theta\|$充分大，这样就无法使得我们的目标函数尽可能地小，如果使用右图的分类方法的话，那么就可以满足我们的优化条件。因此SVM产生的是大间隔的分类器。

Kernel Method

我们从线性分类这个问题开始讲起，依据数据的特点我们可以采用不同的算法：

线性可分	一点点错误	严格线性不可分
PLA	Pocket Algorithm	φ(x)+PLA/NN/DL
Hard-Margin SVM	Soft-Margin SVM	Kernel SVM

为了处理严格线性不可分的问题，一种想法是使用多层感知机（神经网络）、深度学习算法；另一种则是把这个问题转换成线性可分问题，根据Cover Theorem，高维空间比低维空间更容易线性可分，我们需要一个非线性的映射，把我们的原问题转换为高维问题。
回忆之前我们对问题的处理，我们先是将其转换为了一个凸优化问题：

$$\begin{cases}\min\limits_{W,b}\frac{1}{2}W^TW\\ s.t.\ \forall i=1,\cdots,N,\ 1-y_i(W^Tx_i+b)\leq 0\end{cases}$$

然后演变成了求解它的对偶问题：

$$
\begin{cases}
\min\limits_{\lambda} \frac{1}{2}\sum_{i=1}^{N}\sum_{j=1}^{N}\lambda_i\lambda_j y_i y_j x_i^T x_j - \sum_{i=1}^{N}\lambda_i \\
s.t.\ \lambda_i \geq 0 \\
\sum_{i=1}^{N}\lambda_i y_i = 0
\end{cases}
$$

问题中的$x_i^T x_j$我们可以理解为两个向量的内积，那么经过我们的映射，这就会变成$\phi(x_i)^T\phi(x_j)$，问题在于映射之后得到的$\phi(x)$维数很高甚至是无限维的，我们在得到$\phi(x)$的基础上还要计算内积，计算量难以接受，这时候就有一个想法，我们能否找到一个函数$\mathcal{K}(x, x')$它的值就是$\phi(x)^T\phi(x')$？
从这一点出发，我们可以引出核函数(Kernel Function)的定义：

$$
\forall x, x' \in \mathcal{X}, \exists \phi : \mathcal{X} \mapsto \mathcal{Z}, \phi \in \mathcal{H}, s.t.\ \mathcal{K}(x, x') = \phi(x)^T\phi(x')
$$

这里的$\mathcal{H}$指的是$Hilbert\ space$，它是完备的、可能是无限维的、被赋予内积的线性空间。
这样的核函数又叫正定核函数，它满足如下两条性质：

$$
\begin{aligned}
&symmetric:\ \mathcal{K}(x, z) = \mathcal{K}(z, x) \\
&positive\ definite:\ \forall x_1, x_2, \cdots, x_N \in \mathcal{X}, K = [K(x_i, x_j)] \\
&\qquad\qquad\qquad (Gram\ Matrix)\ is\ positive\ semi-definite
\end{aligned}
$$

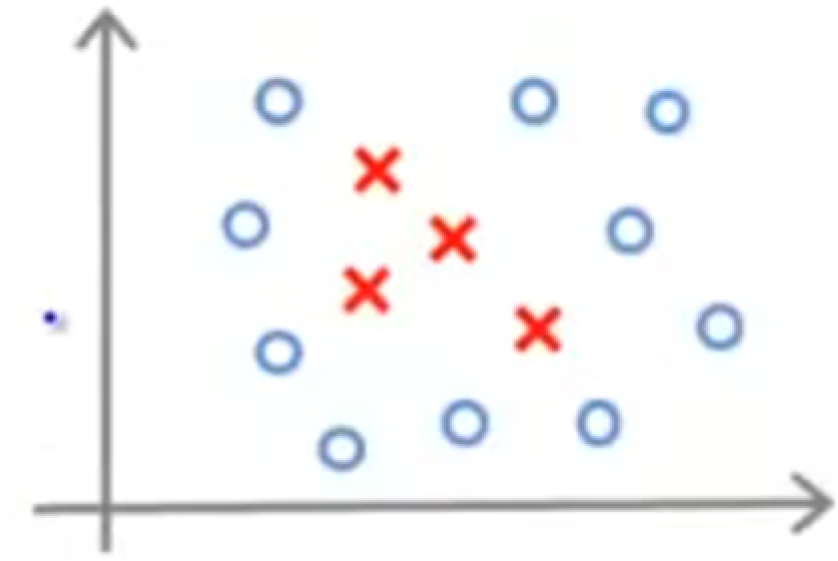
一个常见的核函数是：

$$
\mathcal{K}(x, z) = \exp(-\frac{\parallel x - z \parallel^2}{2\sigma^2})
$$

它又被称为“高斯核函数(Gauss Kernel Function)”，我们举一个例子来应用这个核函数。
假设我们的数据集为：

$$
\{(x_i, y_i)\}_{i=1}^{m}, x_i \in \mathbb{R}^p, y_i \in \{0, 1\}
$$

它的分布如下图所示：



很显然这不是一个线性可分的例子，在学习核函数之前，我们处理这样的问题可能会采用多项式回归的方法，即加入一些高次项作为特征值，但是在核函数当中，我们将会采取不一样的方法。我们把这些数据点记作$l^{(i)}$，我们定义特征值$f^{(i)} = \mathcal{K}(x, l^{(i)})(i \geq 1, f^{(0)} = 1)$
那么SVM with Kernel可以表示为：

$$Hypothesis: \ Given\ x,\ compute\ features\ f \in \mathbb{R}^{m+1}$$
$$Predict\ y = 1, if\ \theta^T f \geq 0$$

$$Training:$$
$$\min_\theta C \sum_{i=1}^{m} [y^{(i)} cost_1(\theta^T f^{(i)}) + (1 - y^{(i)}) cost_0(\theta^T f^{(i)})] + \frac{1}{2} \sum_{j=1}^{m} \theta_j^2$$