SVM summary

Joseph Chen

January 19, 2018

1 Motivation

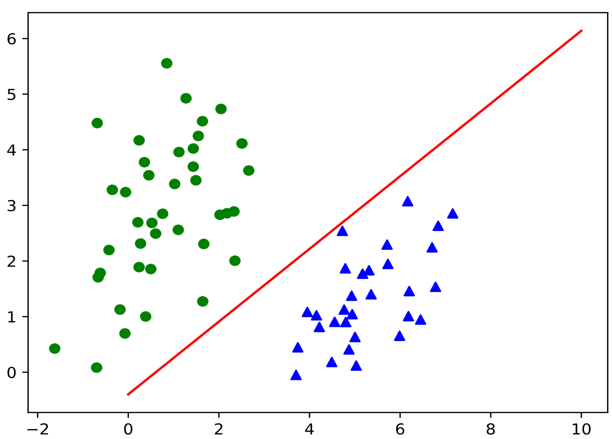


Figure 1: 感知机训练得到的一个线性分类器

假设两类模式线性可分, 如上图所示, 绿色样本标记为正样本 $+1$, 蓝色样本作为负样本标记为 -1. 用感知机的方法得到的一个线性分类器 $y = w^T x + b$, 给定一个新的样本 x, 决策过程

$$\text{if } w^T x + b > 0, \hat{y} = 1; \text{else } \hat{y} = -1$$

这个分类器能用, 然而不够鲁棒 (Robust), 也就是容易对噪声敏感 (上图中分界面十分靠近蓝色). SVM 的想法就是在能够线性可分的条件下, 尽可能增大到两类模式样本边界的距离, 这样鲁棒性得到提升, 示意图如下

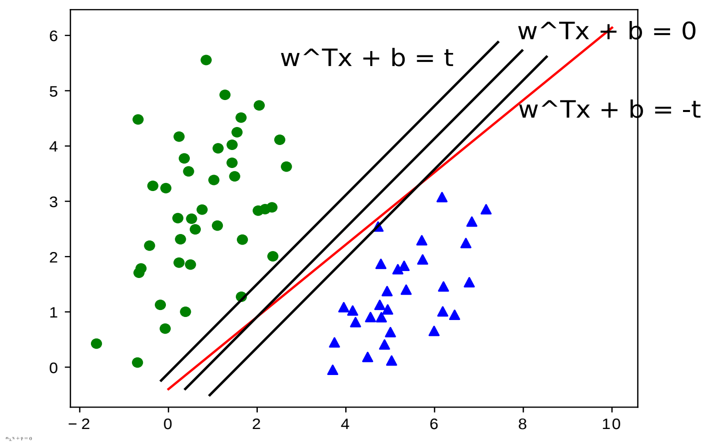


Figure 2: margin

给定一个训练好的线性分类器 $y = w^T x + b$, 对于正样本我们总有

$$w^T x + b \geq t > 0$$

负样本

$$w^T x + b \leq -t < 0$$

对所有样本 (总数为 N) 分类正确, 则

$$y^{(i)}(w^T x^{(i)} + b) \geq t > 0, i = 1, 2, ..., N$$

我们想要做的是找到一个 w 和 b, 既能够将两类模式完全分开, 又能尽可能最大化分界面 $w^T x + b = 0$ 到两边的最小距离, 那么分界面当然选在两个边界的中间是最好的, 最小距离的度量 (求两条平行线的距离)

$$d = \frac{t}{||w||_2}$$

所以整个问题变成了这个优化问题

$$\max_{w,b} \quad \frac{t}{||w||_2}$$
$$\text{subject to } y^{(i)}(w^T x^{(i)} + b) \geq t > 0, i = 1, 2, ..., N$$

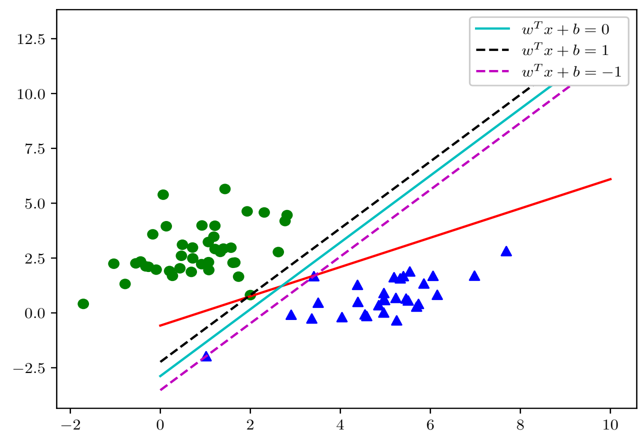
由于目标函数不是凸函数且多了 t, 不利于优化问题求解, 继续改进. 我们可以对 w 和 b 进行缩放 (这样子做分界面的方程并没有改变), 使得问题等价于

$$\max_{w,b} \quad \frac{1}{||w||_2}$$
$$\text{subject to } y^{(i)}(w^T x^{(i)} + b) \geq 1, i = 1, 2, ..., N$$

进一步地 (因为 $\frac{1}{||w||_2}$ 是非凸函数, 继续变形), 最大化 $\frac{1}{||w||_2}$ 就等价于最小化 $\frac{1}{2}||w||_2^2$ 所以就得到了 SVM 问题的原始形式

$$\min_{w,b} \quad \frac{1}{2}||w||_2^2$$
$$\text{subject to } y^{(i)}(w^T x^{(i)} + b) \geq 1, i = 1, 2, ..., N$$

这个问题形式是二次型, 直接用凸优化就可以求解 QP 问题了, 举个例子 (python 跑的结果)



红色曲线是由感知机训练得到的一个分类器, 紫色是直接解 SVM 原始问题得到的分类器, 显然紫色的比红色的要好. 这里是用凸优化的工具直接求解得到参数, 后面之所以要用对偶是为了降低算法复杂度, 用 SMO 算法也是为了加快速度, 用核方法是为了将低维度线性不可分的转到高维度线性可分. 加上松弛是为了应付噪声, 原问题要求所有的样本点分类正确, 所有有如下的约束

$$y^{(i)}(w^T x^{(i)} + b) \geq 1, i = 1, 2, ..., N$$

如果我们允许有个别点可以被忽略错误, 比如正样本点越过分界面跑到了负样本那边, 那么只需要添加辅助变量 $\xi \geq 0$

$$y^{(i)}(w^T x^{(i)} + b) \geq 1 - \xi_i, i = 1, 2, ..., N$$

道理很简单, 以正样本为例, 如果出现正样本 (图中绿色) 跑到负样本方 (蓝色区域), 那么我们依然可以找到一个 t(可正可负) 使得所有正样本都满足

$$y^{(i)}(w^T x^{(i)} + b) \geq t$$

这里让 $t = 1 - \xi$ 既可, 为了不使 ξ 过大 (大了之后分类容忍距离也变大了), 在目标函数里加上 ξ 的 l_1 范数约束, 选择 l_1 范数可以使得 ξ 产生稀疏解.

2 Primary form

直接写出来

$$\min_{w,b} \quad \frac{1}{2}||w||_2^2$$
$$\text{subject to } y^{(i)}(w^T x^{(i)} + b) \geq 1, i = 1, 2, ..., N$$

加上松弛条件, C 越大迫使 ξ 变小, 对噪声的容忍度变小

$$\min_{w,b} \quad \frac{1}{2}||w||_2^2 + C\sum_{i=1}^{N}\xi_i$$
$$\text{subject to } y^{(i)}(w^T x^{(i)} + b) \geq 1 - \xi_i,$$
$$\xi_i \geq 0, i = 1, 2, ..., N$$

3 Dual form

3.1 不加松弛

对偶问题的求解, 上拉格朗日乘数法, $\alpha_i \geq 0$,

$$L(w, b, \alpha) = \frac{1}{2}||w||_2^2 + \sum_{i=1}^{N}\alpha_i[1 - y^{(i)}(w^T x^{(i)} + b)]$$

对 w,b 求导

$$\frac{\partial L}{\partial w} = w - \sum_{i=1}^{N}\alpha_i y^{(i)} x^{(i)} = 0$$
$$\frac{\partial L}{\partial b} = \sum_{i=1}^{N}\alpha_i y^{(i)} = 0$$

$L(w, b, \alpha)$ 的下界为

$$\begin{aligned} g(\alpha) = \inf_{w,b} L(w, b, \alpha) &= \frac{1}{2}w^T w + \sum_{i=1}^{N}\alpha_i - \sum_{i=1}^{N}\alpha_i y^{(i)} w^T x^{(i)} - b\sum_{i=1}^{N}\alpha_i y^{(i)} \\ &= \frac{1}{2}\sum_{i=1}^{N}\alpha_i y^{(i)} w^T x^{(i)} + \sum_{i=1}^{N}\alpha_i - \sum_{i=1}^{N}\alpha_i y^{(i)} w^T x^{(i)} \\ &= \sum_{i=1}^{N}\alpha_i - \frac{1}{2}\sum_{i=1}^{N}\alpha_i y^{(i)} w^T x^{(i)} \\ &= \sum_{i=1}^{N}\alpha_i - \frac{1}{2}\sum_{i=1}^{N}\sum_{j=1}^{N}\alpha_i\alpha_j y^{(i)} y^{(j)} (x^{(j)})^T x^{(i)} \end{aligned}$$

对偶问题

$$
\begin{aligned}
\max_{\alpha} \quad & g(\alpha) = \sum_{i=1}^{N} \alpha_i - \frac{1}{2} \sum_{i=1}^{N} \sum_{j=1}^{N} \alpha_i \alpha_j y^{(i)} y^{(j)} (x^{(j)})^T x^{(i)} \\
\text{subject to } & \alpha_i \geq 0, i = 1, 2, ..., N \\
& \sum_{i=1}^{N} \alpha_i y^{(i)} = 0
\end{aligned}
$$

对偶问题的上界小于等于原问题的下界, 在强对偶条件下 (KKT 可推出强对偶,KKT 就是在原来的约束条件下多了互补松弛和梯度等于 0 这两个条件), 对偶问题的最优解和原始问题的最优解一致 ("no gap"), w 和 b 的最优解

$$
\begin{aligned}
w^* &= \sum_{i=1}^{N} \alpha_i^* y^{(i)} x^{(i)} \\
b^* &= y^{(j)} - \sum_{i=1}^{N} \alpha_i^* y^{(i)} (x^{(i)})^T x^{(j)}
\end{aligned}
$$

3.2 加入松弛

直接上拉格朗日乘数法, $\alpha_i \geq 0, \eta_i \geq 0$

$$
L(w, b, \xi, \alpha, \eta) = \frac{1}{2} ||w||_2^2 + C \sum_{i=1}^{N} \xi_i + \sum_{i=1}^{N} \alpha_i (1 - \xi_i - y^{(i)} (w^T x^{(i)} + b)) + \sum_{i=1}^{N} \eta_i (-\xi_i)
$$

对 w,b,ξ 分别求偏导

$$
\begin{aligned}
\frac{\partial L}{\partial w} &= w - \sum_{i=1}^{N} \alpha_i y^{(i)} x^{(i)} = 0 \\
\frac{\partial L}{\partial b} &= \sum_{i=1}^{N} \alpha_i y^{(i)} = 0 \\
\frac{\partial L}{\partial \xi_i} &= C - \alpha_i - \eta_i = 0
\end{aligned}
$$

因此 $L(w, b, \xi, \alpha, \eta)$ 的下界

$$
\begin{aligned}
g(\alpha, \eta) = \inf_{w,b,\xi} L(w, b, \xi, \alpha, \eta) &= \frac{1}{2} w^T w + C \sum_{i=1}^{N} \xi_i + \sum_{i=1}^{N} \alpha_i (1 - \xi_i) - w^T w - \sum_{i=1}^{N} \eta_i \xi_i \\
&= \sum_{i=1}^{N} \alpha_i + \sum_{i=1}^{N} (C - \alpha_i - \eta_i) \xi_i - \frac{1}{2} w^T w \\
&= \sum_{i=1}^{N} \alpha_i - \frac{1}{2} \sum_{i=1}^{N} \sum_{j=1}^{N} \alpha_i \alpha_j y^{(i)} y^{(j)} (x^{(j)})^T x^{(i)}
\end{aligned}
$$

可见加入松弛后的目标函数与不加松弛的情况相同, 两者的区别在于约束条件的改变, 对偶问题

$$\begin{aligned}\max_{\alpha} \quad & g(\alpha) = \sum_{i=1}^{N} \alpha_i - \frac{1}{2} \sum_{i=1}^{N} \sum_{j=1}^{N} \alpha_i \alpha_j y^{(i)} y^{(j)} (x^{(j)})^T x^{(i)} \\ \text{subject to } & 0 \le \alpha_i \le C, i = 1, 2, ..., N \\ & \sum_{i=1}^{N} \alpha_i y^{(i)} = 0\end{aligned}$$

由 α^* 导出的最优解 w^*,b^* 的形式同不加松弛的情况.

4 Kernel

核方法是将原来样本映射到更高维度的空间里, 来实现低维度线性不可分而高维度空间里线性可分, 将上面的内积换成 $K(\cdot, \cdot)$ 即可.
以带松弛的情况为例,

$$\begin{aligned}\max_{\alpha} \quad & g(\alpha) = \sum_{i=1}^{N} \alpha_i - \frac{1}{2} \sum_{i=1}^{N} \sum_{j=1}^{N} \alpha_i \alpha_j y^{(i)} y^{(j)} K(x^{(i)}, x^{(j)}) \\ \text{subject to } & 0 \le \alpha_i \le C, i = 1, 2, ..., N \\ & \sum_{i=1}^{N} \alpha_i y^{(i)} = 0\end{aligned}$$

最优解的形式

$$w^* = \sum_{i=1}^{N} \alpha_i^* y^{(i)} x^{(i)}$$

$$b^* = y^{(j)} - \sum_{i=1}^{N} \alpha_i^* y^{(i)} K(x^{(i)}, x^{(j)})$$

分界面

$$f_{w^*,b^*}(x) = (w^*)^T \phi(x) + b^* = \sum_{i=1}^{N} \alpha_i^* y^{(i)} K(x^{(i)}, x) + b^*$$

注意 $\phi(x)$ 并没有显式地给出, 只需要核函数 $K(x, z)$.($K(x, z) = \phi(x)^T \phi(z)$, 内积)

几个核函数:
RBF 核函数

$$K(x, z) = \exp\left(-\frac{||x - z||^2}{2\sigma^2}\right)$$

多项式核函数

$$K(x, z) = (x^T z + 1)^p$$

5 SMO

基本思想是每次选择一个变量更新, 其他固定, 进行循环迭代. 用在 SVM 这里每次要选择一对变量 (因为 $\sum_{i=1}^{N} \alpha_i y^{(i)} = 0$, 任意一个 α_i 可由剩下的表示出来). 这个算法就看看吧, 考试应该不考的