杭州電子科技大学
HANGZHOU DIANZI UNIVERSITY

笃学力行 守正求新

机器学习 & 深度学习

支撑向量机 SVM

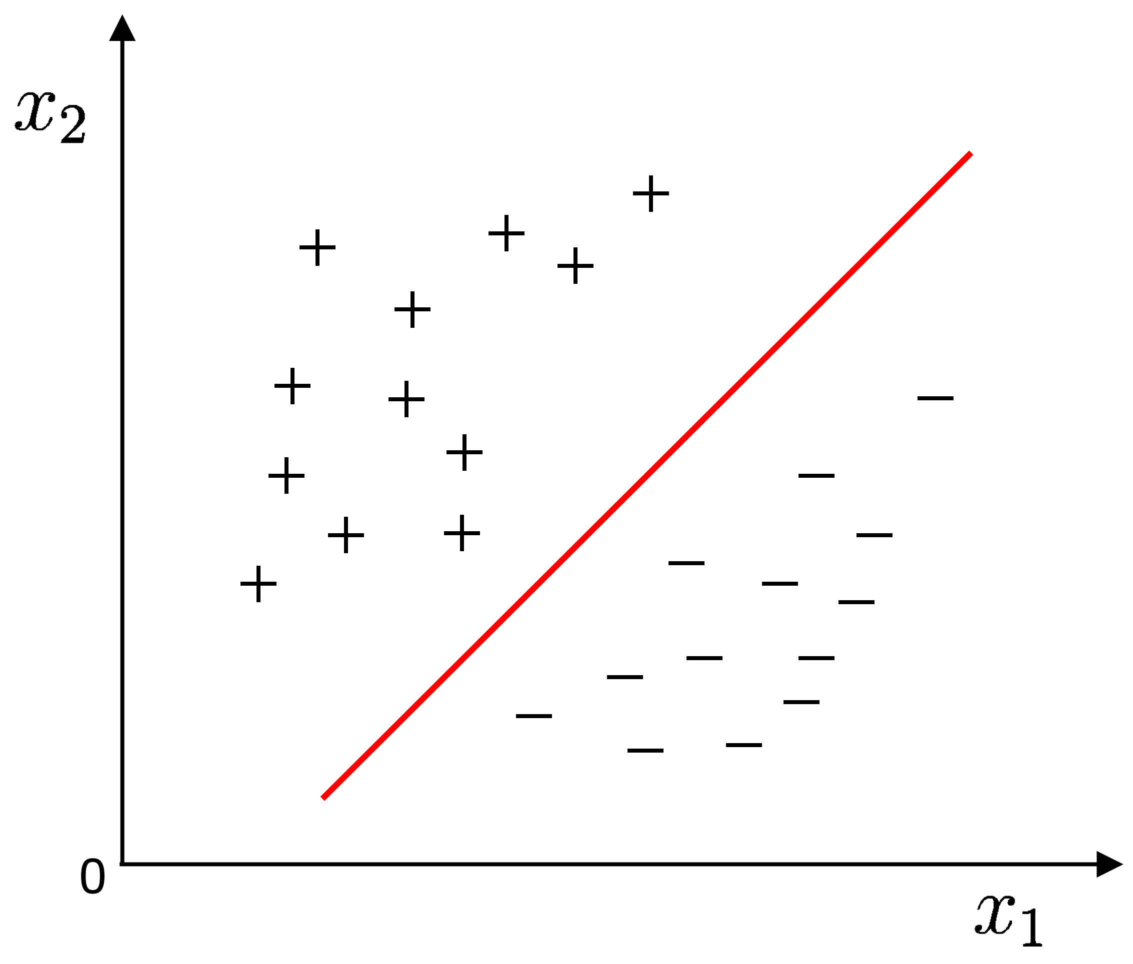
高 飞 Fei Gao

gaofei@hdu.edu.cn

目录

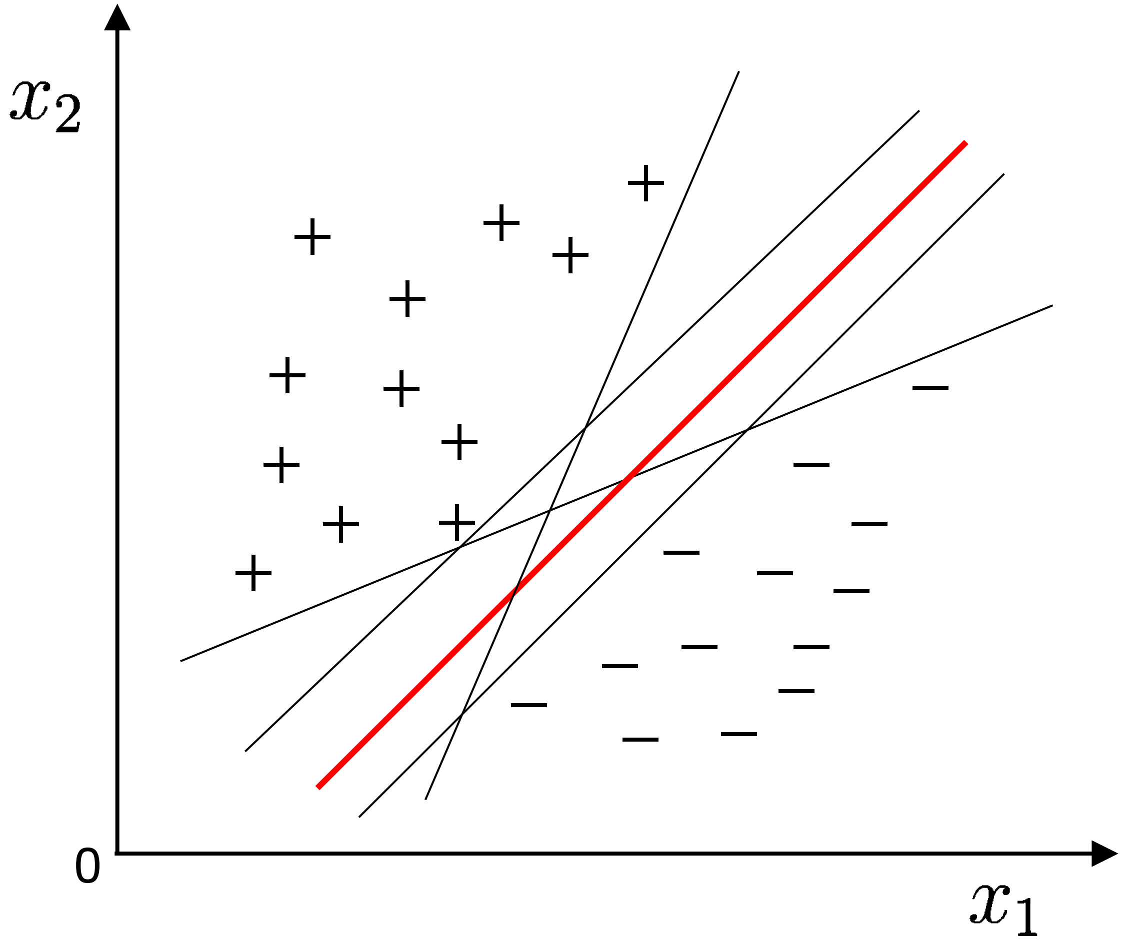
引子

线性模型：在样本空间中寻找一个超平面, 将不同类别的样本分开.



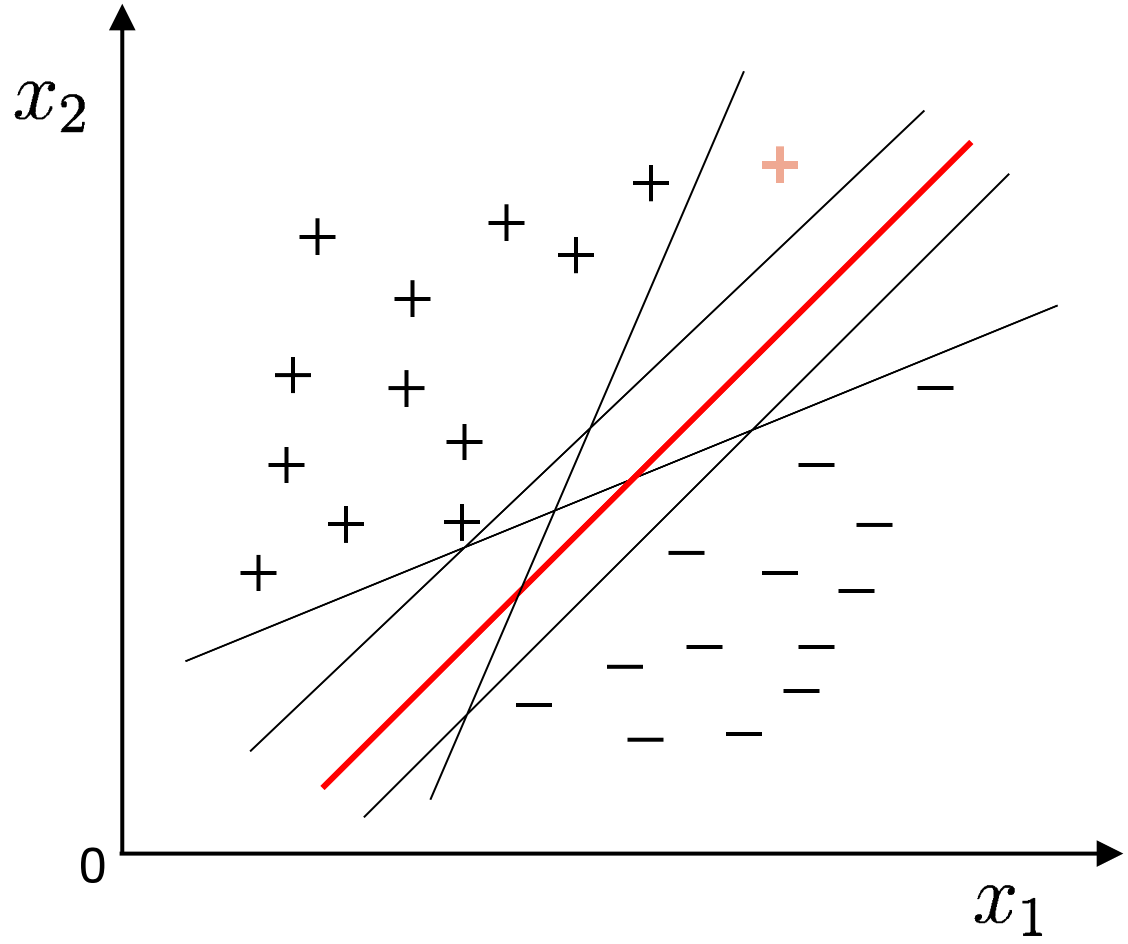
引子

-Q:将训练样本分开的超平面可能有很多，哪一个好呢?



引子

-Q:将训练样本分开的超平面可能有很多，哪一个好呢?

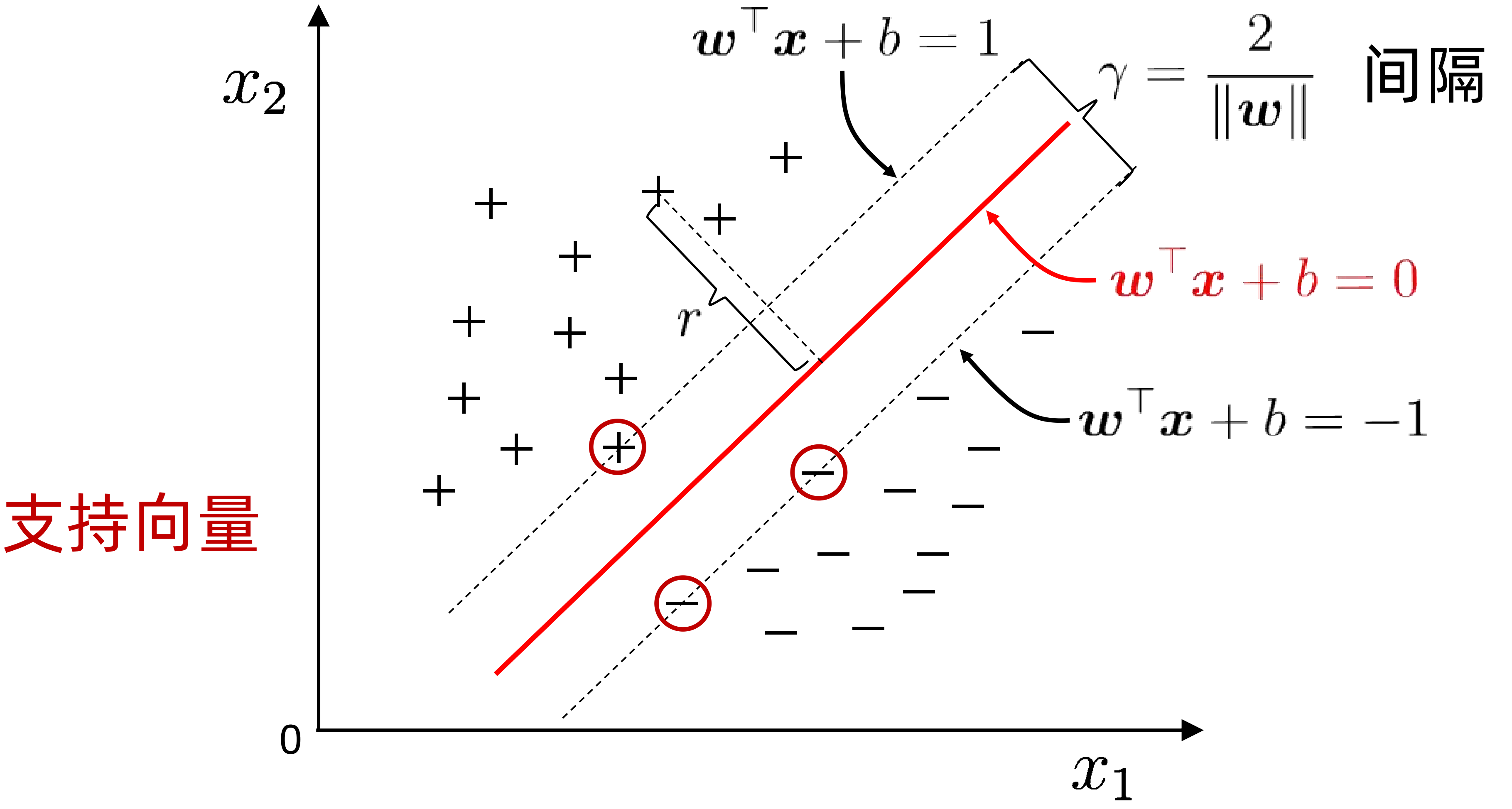


- A:应选择"正中间"，容忍性好，鲁棒性高，泛化能力最强.

间隔与支持向量

ML·DL

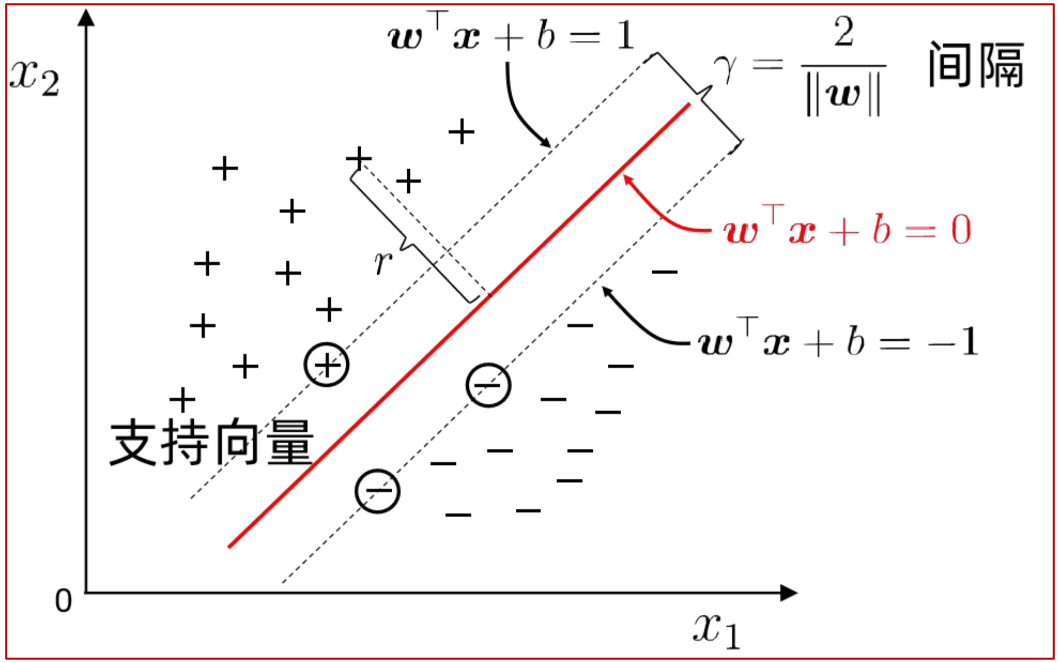
超平面方程: $\boldsymbol{w}^\top \boldsymbol{x} + b = 0$



支持向量机基本型

- 最大间隔: 寻找参数 $\boldsymbol{w}$ 和 b ，使得 γ 最大.

$$\underset{\boldsymbol{w},b}{\arg\max} \quad \frac{2}{\|\boldsymbol{w}\|}$$
$$\text{s.t.} \quad y_i(\boldsymbol{w}^\top \boldsymbol{x}_i + b) \geq 1, \ i = 1, 2, \ldots, m.$$

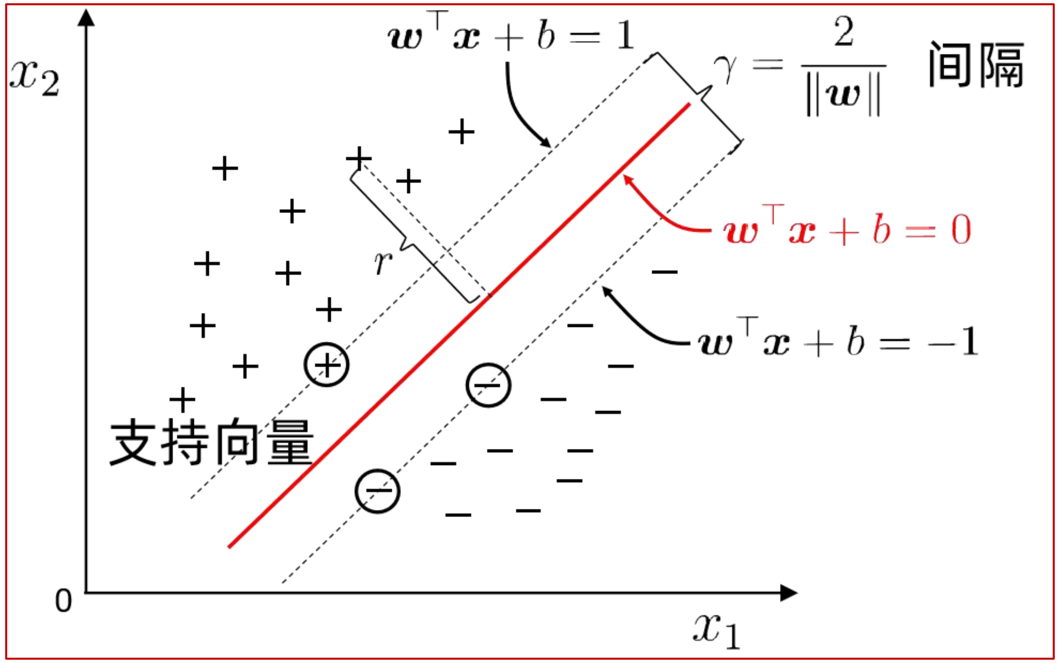


支持向量机基本型

- 最大间隔: 寻找参数 $\boldsymbol{w}$ 和 b ，使得 γ 最大.

$$
\begin{aligned}
\arg\max_{\boldsymbol{w},b} \quad & \frac{2}{\|\boldsymbol{w}\|} \\
\text{s.t.} \quad & y_i(\boldsymbol{w}^\top \boldsymbol{x}_i + b) \geq 1, \; i = 1, 2, \ldots, m.
\end{aligned}
$$

$$
\begin{aligned}
\arg\min_{\boldsymbol{w},b} \quad & \frac{1}{2}\|\boldsymbol{w}\|^2 \\
\text{s.t.} \quad & y_i(\boldsymbol{w}^\top \boldsymbol{x}_i + b) \geq 1, \; i = 1, 2, \ldots, m.
\end{aligned}
$$



对偶问题

对偶问题

- 拉格朗日乘子法
  - 第一步：引入拉格朗日乘子 $\alpha_i \geq 0$ 得到拉格朗日函数

$$L(\boldsymbol{w}, b, \boldsymbol{\alpha}) = \frac{1}{2}\|\boldsymbol{w}\|^2 - \sum_{i=1}^{m} \alpha_i \left(y_i(\boldsymbol{w}^\top \boldsymbol{x}_i + b) - 1\right)$$

对偶问题

- 拉格朗日乘子法
  - 第一步：引入拉格朗日乘子 $\alpha_i \geq 0$ 得到拉格朗日函数

$$L(\boldsymbol{w}, b, \boldsymbol{\alpha}) = \frac{1}{2}\|\boldsymbol{w}\|^2 - \sum_{i=1}^{m} \alpha_i \left(y_i(\boldsymbol{w}^\top \boldsymbol{x}_i + b) - 1\right)$$

  - 第二步：令 $L(\boldsymbol{w}, b, \boldsymbol{\alpha})$ 对 $\boldsymbol{w}$ 和 b 的偏导为零可得

$$\boldsymbol{w} = \sum_{i=1}^{m} \alpha_i y_i \boldsymbol{x}_i, \quad \sum_{i=1}^{m} \alpha_i y_i = 0.$$

对偶问题

- 拉格朗日乘子法
  - 第一步：引入拉格朗日乘子 $\alpha_i \geq 0$ 得到拉格朗日函数

$$L(\boldsymbol{w}, b, \boldsymbol{\alpha}) = \frac{1}{2}\|\boldsymbol{w}\|^2 - \sum_{i=1}^{m} \alpha_i \left(y_i(\boldsymbol{w}^\top \boldsymbol{x}_i + b) - 1\right)$$

  - 第二步：令 $L(\boldsymbol{w}, b, \boldsymbol{\alpha})$ 对 $\boldsymbol{w}$ 和 b 的偏导为零可得

$$\boldsymbol{w} = \sum_{i=1}^{m} \alpha_i y_i \boldsymbol{x}_i, \quad \sum_{i=1}^{m} \alpha_i y_i = 0.$$

  - 第三步：回代

$$\begin{aligned} \min_{\boldsymbol{\alpha}} \quad & \frac{1}{2} \sum_{i=1}^{m} \sum_{j=1}^{m} \alpha_i \alpha_j y_i y_j \boldsymbol{x}_i^\top \boldsymbol{x}_j - \sum_{i=1}^{m} \alpha_i \\ \text{s.t.} \quad & \sum_{i=1}^{m} \alpha_i y_i = 0, \ \alpha_i \geq 0, \ i = 1, 2, \ldots, m. \end{aligned}$$

解的稀疏性

- 最终模型：

$$f(\boldsymbol{x}) = \boldsymbol{w}^\top \boldsymbol{x} + b = \boxed{\sum_{i=1}^{m} \alpha_i y_i \boldsymbol{x}_i^\top \boldsymbol{x}} + b$$

- KKT条件：

$$\begin{cases} \alpha_i \geq 0, \\ y_i f(\boldsymbol{x}_i) \geq 1, \\ \alpha_i (y_i f(\boldsymbol{x}_i) - 1) = 0. \end{cases}$$

解的稀疏性

- 最终模型：

$$f(\boldsymbol{x}) = \boldsymbol{w}^\top \boldsymbol{x} + b = \boxed{\sum_{i=1}^m \alpha_i y_i \boldsymbol{x}_i^\top \boldsymbol{x}} + b$$

- KKT条件：

$$\begin{cases} \alpha_i \geq 0, \\ y_i f(\boldsymbol{x}_i) \geq 1, \\ \alpha_i (y_i f(\boldsymbol{x}_i) - 1) = 0. \end{cases}$$

$$y_i f(\boldsymbol{x}_i) > 1 \quad \Rightarrow \quad \alpha_i = 0$$

支持向量机解的稀疏性

训练完成后，大部分的训练样本都不需保留，最终模型仅与支持向量有关.

求解方法 - SMO

ML·DL

$$\min_{\boldsymbol{\alpha}} \ \frac{1}{2}\sum_{i=1}^{m}\sum_{j=1}^{m}\alpha_i\alpha_j y_i y_j \boldsymbol{x}_i^\top \boldsymbol{x}_j - \sum_{i=1}^{m}\alpha_i$$

$$\text{s.t.} \ \sum_{i=1}^{m}\alpha_i y_i = 0, \ \alpha_i \geq 0, \ i = 1, 2, \ldots, m.$$

- 基本思路：不断执行如下两个步骤直至收敛.
  - 第一步：选取一对需更新的变量 α_i 和 α_j .
  - 第二步：固定 α_i 和 α_j 以外的参数，求解对偶问题更新 α_i 和 α_j .

- 仅考虑 α_i 和 α_j 时，对偶问题的约束变为

$$\alpha_i y_i + \alpha_j y_j = -\sum_{k \neq i,j}\alpha_k y_k, \quad \alpha_i \geq 0, \quad \alpha_j \geq 0.$$

$$\begin{cases} \alpha_i \geq 0, \\ y_i f(\boldsymbol{x}_i) \geq 1, \\ \alpha_i(y_i f(\boldsymbol{x}_i) - 1) = 0. \end{cases}$$

用一个变量表示另一个变量，回代入对偶问题可得一个单变量的二次规划，该问题具有闭式解.

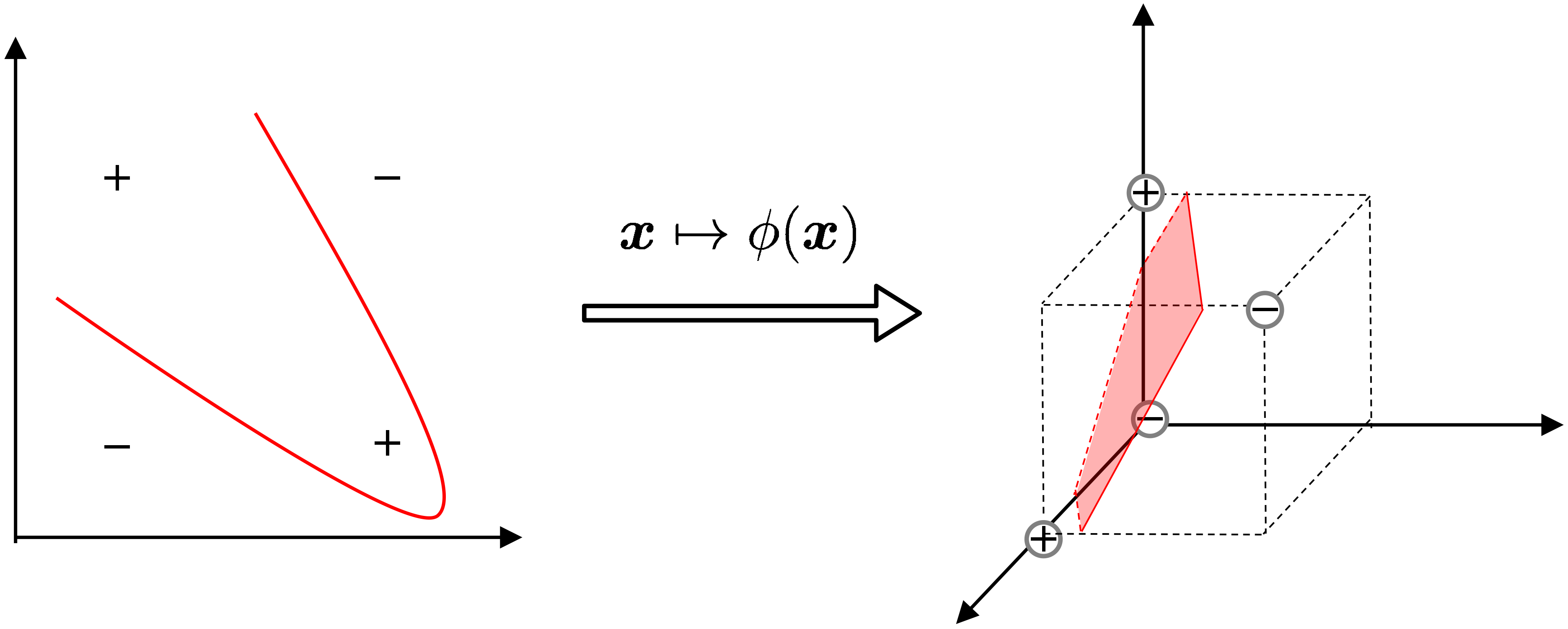
- 偏移项 b ：通过支持向量来确定.

核函数

线性不可分

ML·DL

- Q:若不存在一个能正确划分两类样本的超平面, 怎么办?
- A:将样本从原始空间映射到一个更高维的特征空间, 使得样本在这个特征空间内线性可分.



核支持向量机

- 设样本 $\boldsymbol{x}$ 映射后的向量为 $\phi(\boldsymbol{x})$，划分超平面为 $f(\boldsymbol{x}) = \boldsymbol{w}^\top \phi(\boldsymbol{x}) + b$

原始问题

$$\min_{\boldsymbol{w},b} \ \frac{1}{2}\|\boldsymbol{w}\|^2$$
$$\text{s.t.} \ \ y_i(\boldsymbol{w}^\top \phi(\boldsymbol{x}_i) + b) \geq 1, \ \ i = 1, 2, \ldots, m.$$

对偶问题

$$\min_{\boldsymbol{\alpha}} \ \frac{1}{2}\sum_{i=1}^{m}\sum_{j=1}^{m} \alpha_i \alpha_j y_i y_j \boxed{\phi(\boldsymbol{x}_i)^\top \phi(\boldsymbol{x}_j)} - \sum_{i=1}^{m} \alpha_i$$
$$\text{s.t.} \ \ \sum_{i=1}^{m} \alpha_i y_i = 0, \ \ \alpha_i \geq 0, \ \ i = 1, 2, \ldots, m.$$

只以内积的形式出现

预测

$$f(\boldsymbol{x}) = \boldsymbol{w}^\top \phi(\boldsymbol{x}) + b = \sum_{i=1}^{m} \alpha_i y_i \boxed{\phi(\boldsymbol{x}_i)^\top \phi(\boldsymbol{x})} + b$$

核函数

- 基本想法：不显式地设计核映射, 而是设计核函数.

$$\kappa(\boldsymbol{x}_i, \boldsymbol{x}_j) = \phi(\boldsymbol{x}_i)^\top \phi(\boldsymbol{x}_j)$$

核函数

- 基本想法：不显式地设计核映射, 而是设计核函数.

$$\kappa(\boldsymbol{x}_i, \boldsymbol{x}_j) = \phi(\boldsymbol{x}_i)^\top \phi(\boldsymbol{x}_j)$$

- Mercer定理(充分非必要)：只要一个对称函数所对应的核矩阵半正定, 则它就能作为核函数来使用.

核函数

- 基本想法：不显式地设计核映射, 而是设计核函数.

$$\kappa(\boldsymbol{x}_i, \boldsymbol{x}_j) = \phi(\boldsymbol{x}_i)^\top \phi(\boldsymbol{x}_j)$$

- Mercer定理(充分非必要)：只要一个对称函数所对应的核矩阵半正定, 则它就能作为核函数来使用.
- 常用核函数：

名称	表达式	参数
线性核	$\kappa(\boldsymbol{x}_i, \boldsymbol{x}_j) = \boldsymbol{x}_i^\top \boldsymbol{x}_j$	
多项式核	$\kappa(\boldsymbol{x}_i, \boldsymbol{x}_j) = (\boldsymbol{x}_i^\top \boldsymbol{x}_j)^d$	$d \geq 1$为多项式的次数
高斯核	$\kappa(\boldsymbol{x}_i, \boldsymbol{x}_j) = \exp\left(-\frac{\|\boldsymbol{x}_i - \boldsymbol{x}_j\|^2}{2\delta^2}\right)$	$\delta > 0$为高斯核的带宽(width)
拉普拉斯核	$\kappa(\boldsymbol{x}_i, \boldsymbol{x}_j) = \exp\left(-\frac{\|\boldsymbol{x}_i - \boldsymbol{x}_j\|}{\delta}\right)$	$\delta > 0$
Sigmoid核	$\kappa(\boldsymbol{x}_i, \boldsymbol{x}_j) = \tanh(\beta \boldsymbol{x}_i^\top \boldsymbol{x}_j + \theta)$	tanh为双曲正切函数, $\beta > 0$, $\theta < 0$

核函数

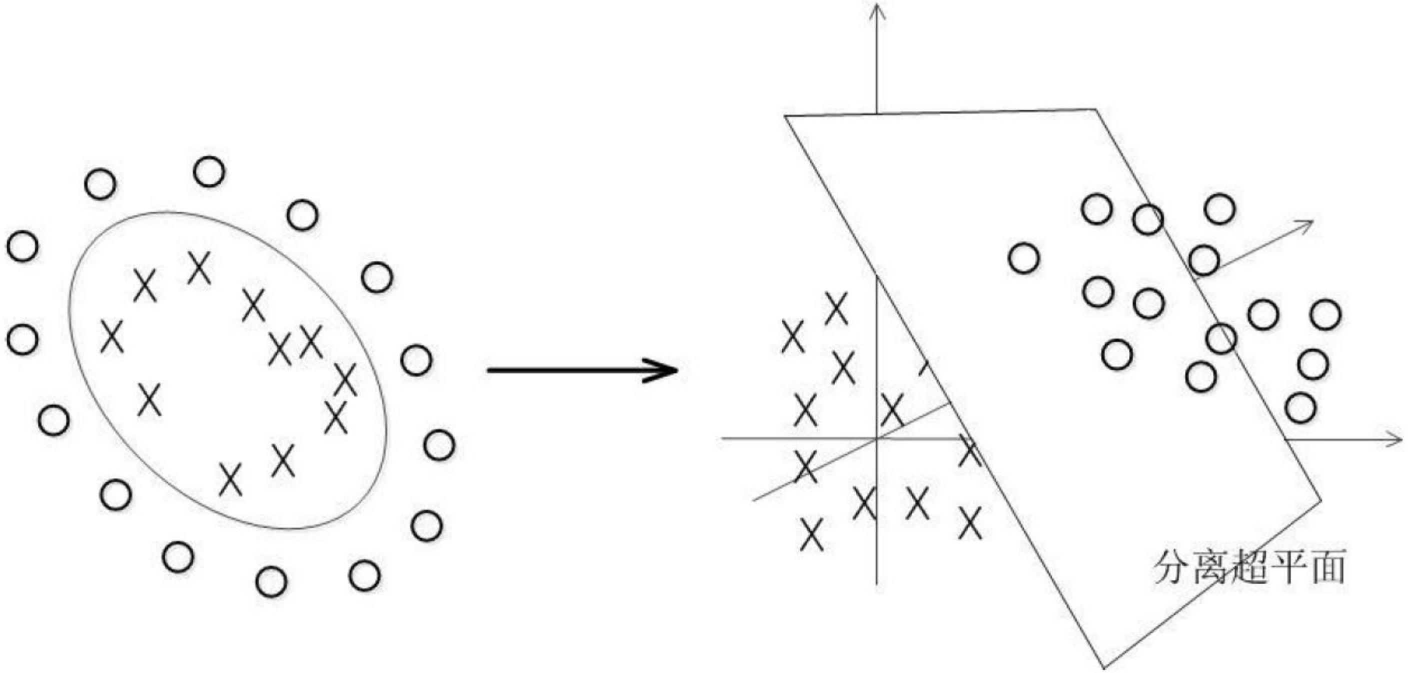
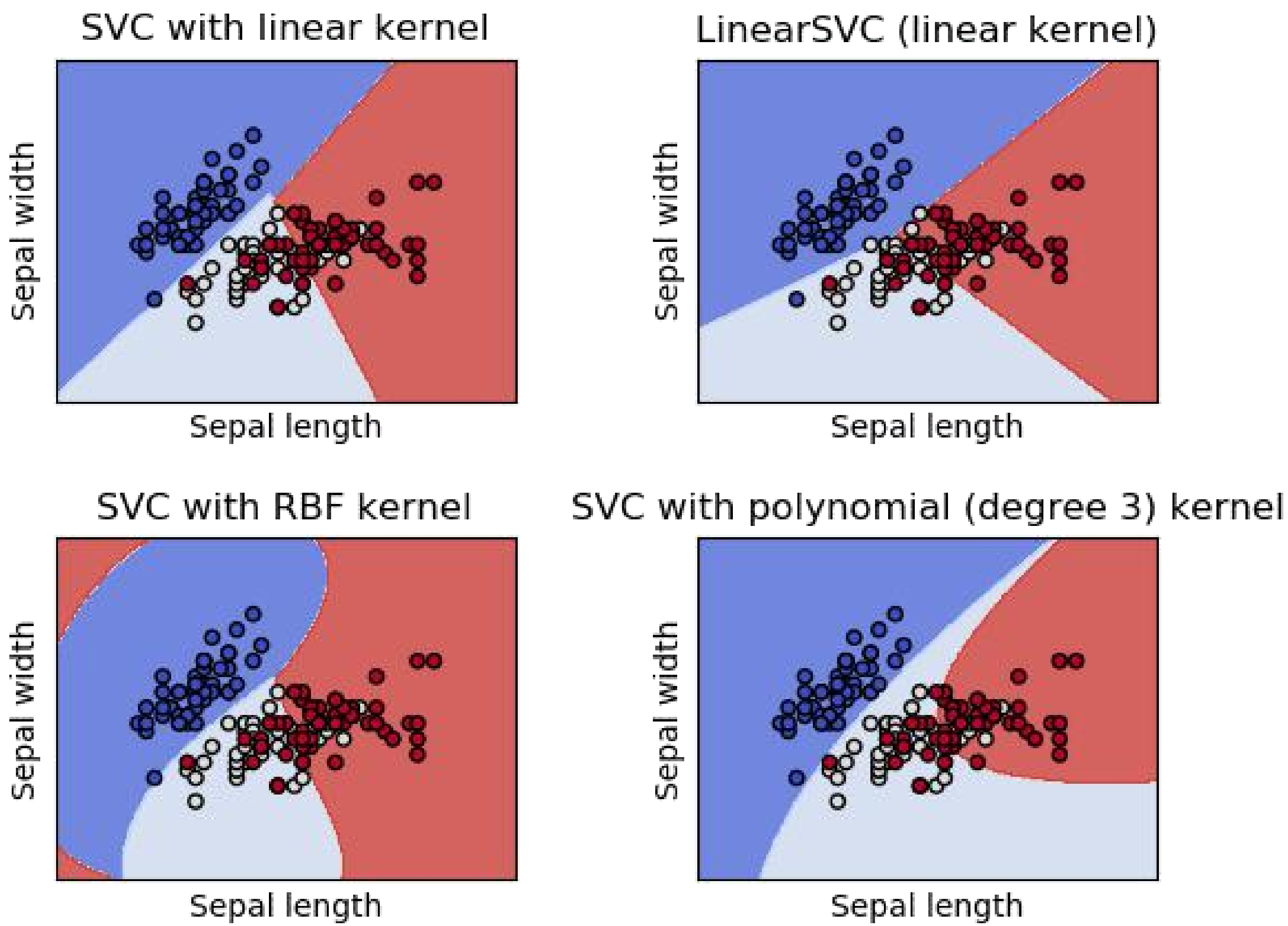


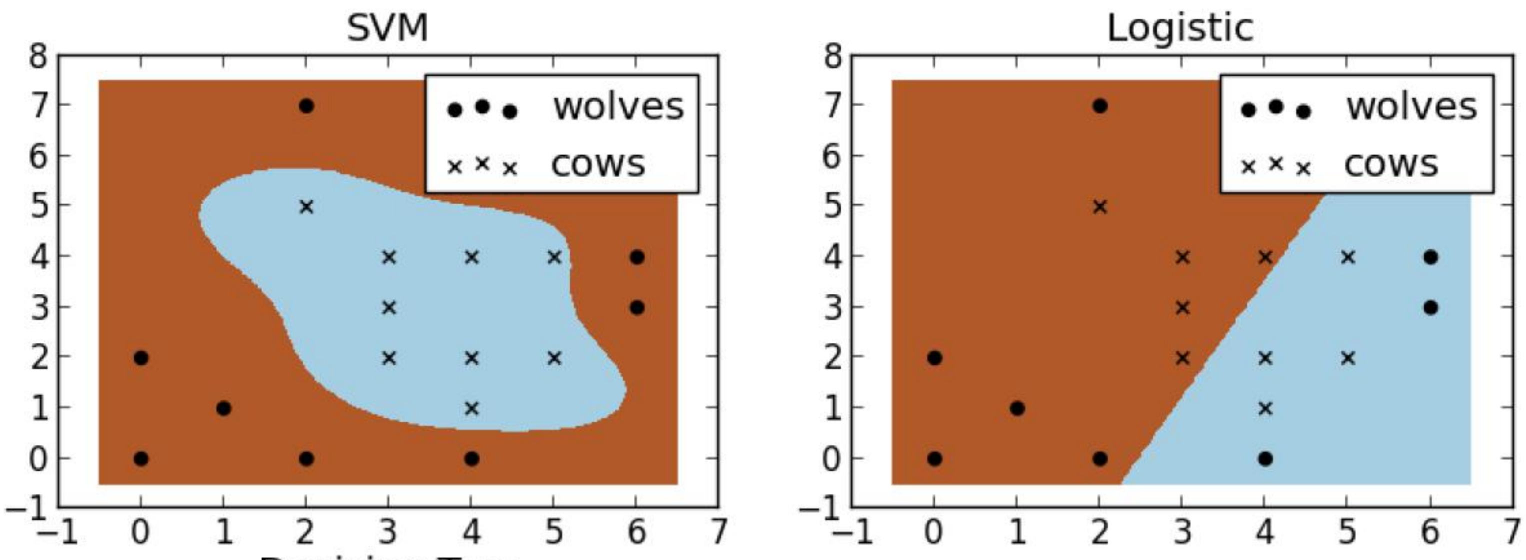
图 7: 核函数映射示意

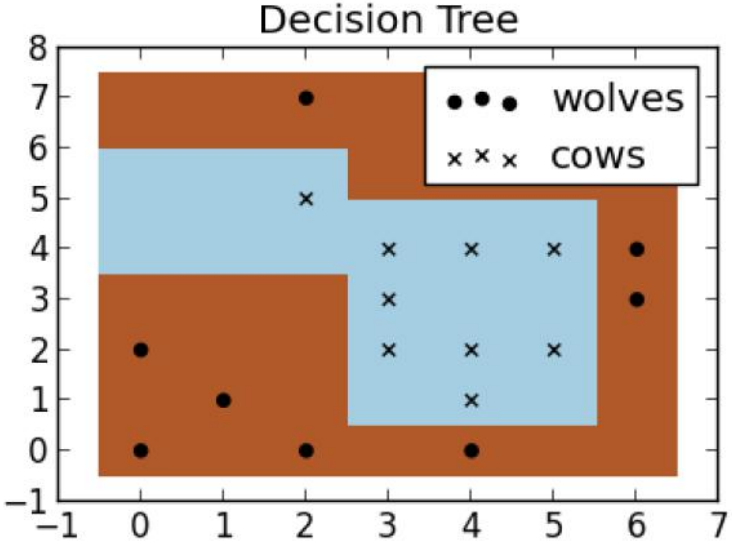
《支持向量机通俗导论：理解SVM 的三层境界》

核函数



http://scikit-learn.org/stable/modules/svm.html





说明了SVM 使用非线性分类器的优势，而Logistic 模式以及决策树模式都是使用了直线方法。

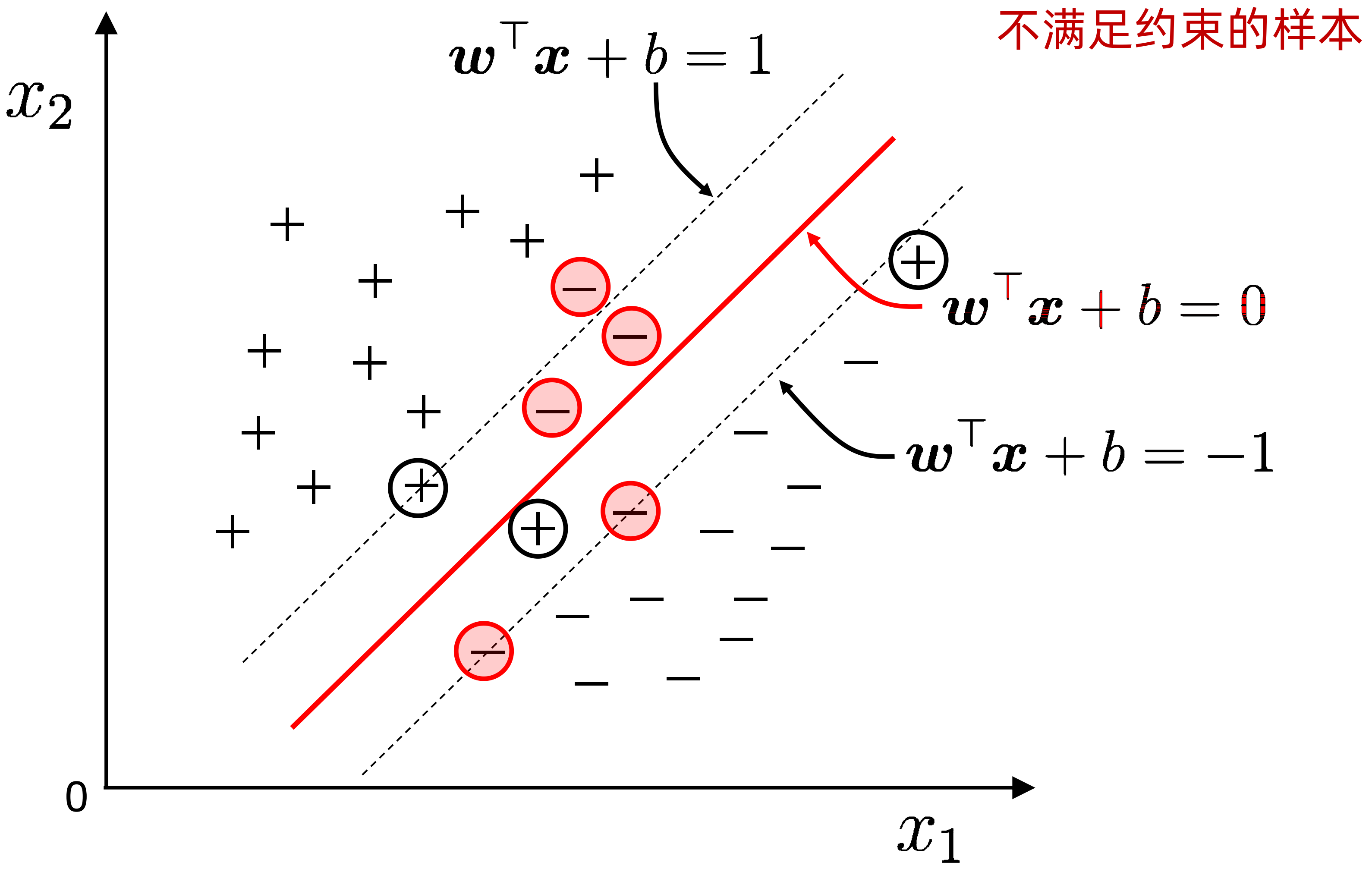
图 11: 分类器例子：圈养

软间隔与正则化

软间隔

- Q:
  - 现实中，很难确定合适的核函数使得训练样本在特征空间中线性可分；
  - 同时一个线性可分的结果也很难断定是否是有过拟合造成的.

- A:引入"软间隔"的概念，
  - 允许支持向量机在一些样本上不满足约束.



0/1损失函数

- 基本想法：最大化间隔的同时，让不满足约束的样本应尽可能少.

$$\min_{\boldsymbol{w},b} \quad \frac{1}{2}\|\boldsymbol{w}\|^2 + C\sum_{i=1}^{m} l_{0/1}\left(y_i(\boldsymbol{w}^\top\phi(\boldsymbol{x}_i)+b)-1\right)$$

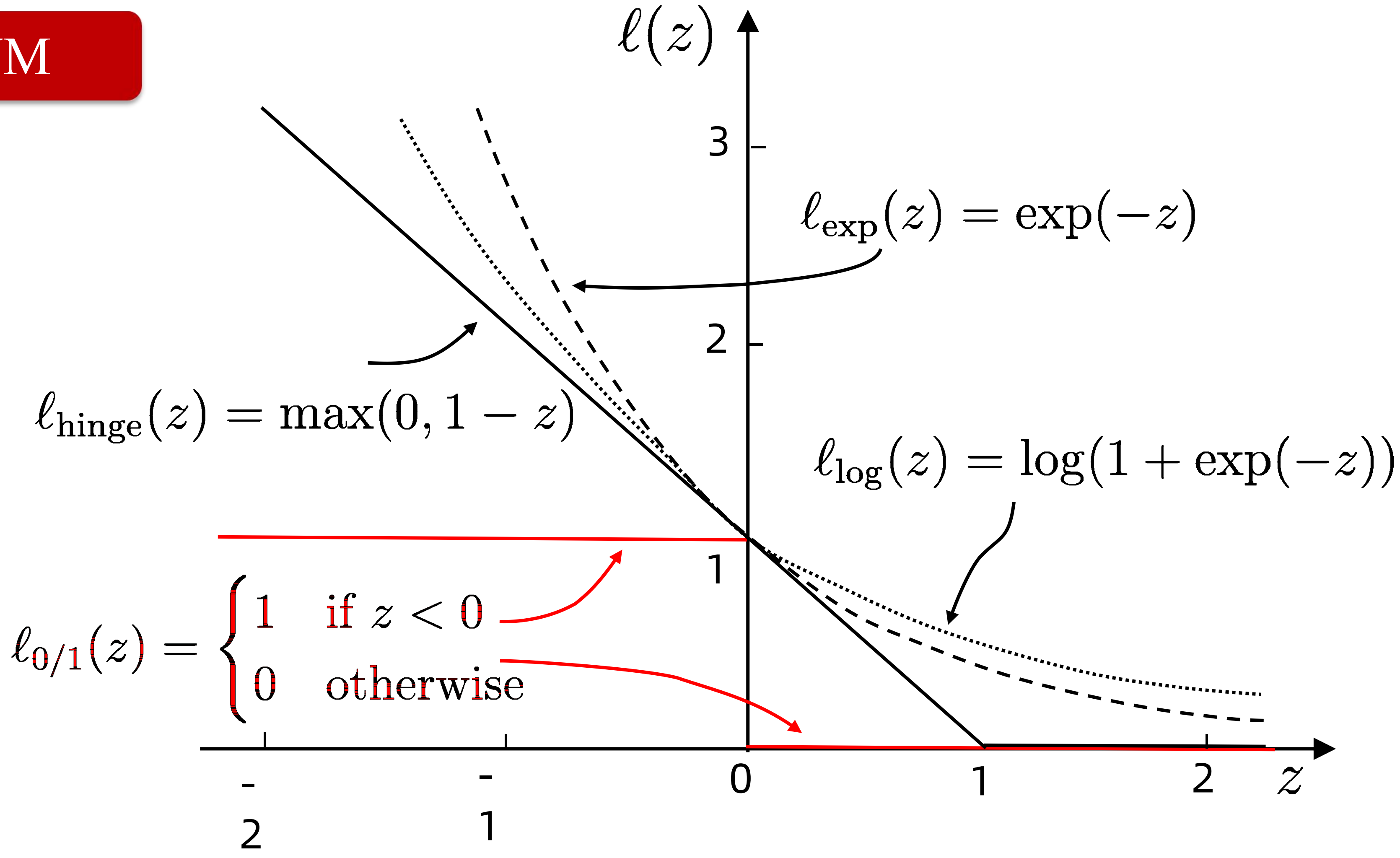
其中 $l_{0/1}$ 是”0/1损失函数”

$$l_{0/1} = \begin{cases} 1 & z<0 \\ 0 & otherwise \end{cases}$$

- 存在的问题：0/1损失函数非凸、非连续，不易优化！

替代损失

软间隔SVM

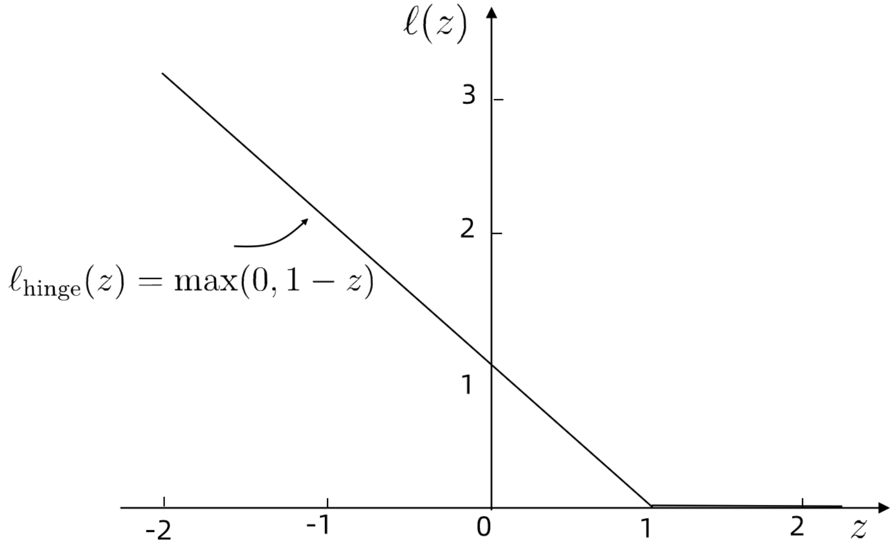


替代损失函数数学性质较好，一般是0/1损失函数的上界

- 原始问题

$$\min_{\boldsymbol{\alpha}} \quad \frac{1}{2}\sum_{i=1}^{m}\sum_{j=1}^{m}\alpha_i\alpha_j y_i y_j \phi(\boldsymbol{x}_i)^\top \phi(\boldsymbol{x}_j) - \sum_{i=1}^{m}\alpha_i$$

$$\text{s.t.} \quad \sum_{i=1}^{m}\alpha_i y_i = 0, \; 0 \le \alpha_i \le C, \; i = 1, 2, \ldots, m.$$

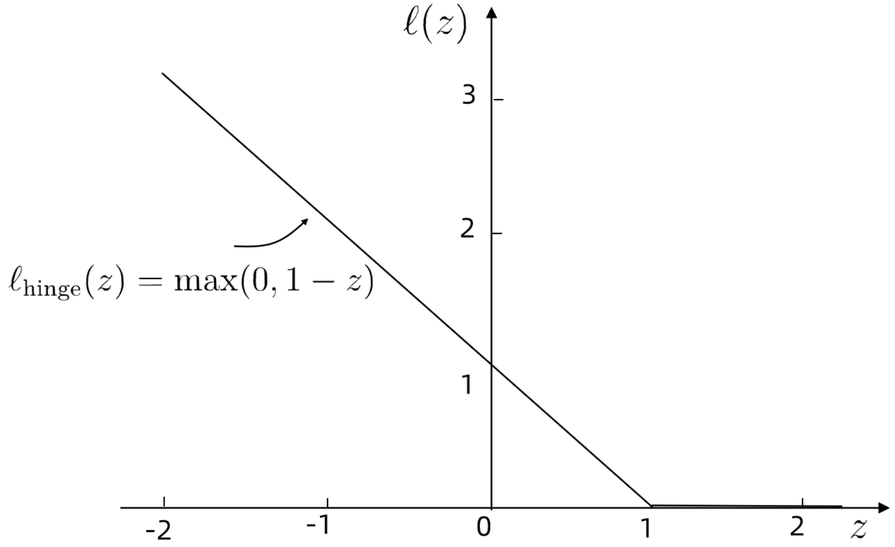


软间隔支持向量机

- 原始问题

$$\min_{\boldsymbol{\alpha}} \quad \frac{1}{2}\sum_{i=1}^{m}\sum_{j=1}^{m}\alpha_i\alpha_j y_i y_j \phi(\boldsymbol{x}_i)^\top\phi(\boldsymbol{x}_j) - \sum_{i=1}^{m}\alpha_i$$

$$\text{s.t.} \quad \sum_{i=1}^{m}\alpha_i y_i = 0,\ \ 0 \le \alpha_i \le C,\ \ i = 1, 2, \ldots, m.$$



- 对偶问题

$$\min_{\boldsymbol{w}, b} \quad \frac{1}{2}\|\boldsymbol{w}\|^2 + C\sum_{i=1}^{m}\max\left(0, 1 - y_i(\boldsymbol{w}^\top\phi(\boldsymbol{x}_i) + b)\right)$$

根据KKT条件可推得最终模型仅与支持向量有关，也即
Hinge损失函数依然保持了支持向量机解的稀疏性.

正则化

- 支持向量机学习模型的更一般形式

$$\min_f \ \Omega(f) + C\sum_{i=1}^{m} l(f(\boldsymbol{x}_i), y_i)$$

结构风险，描述模型的某些性质

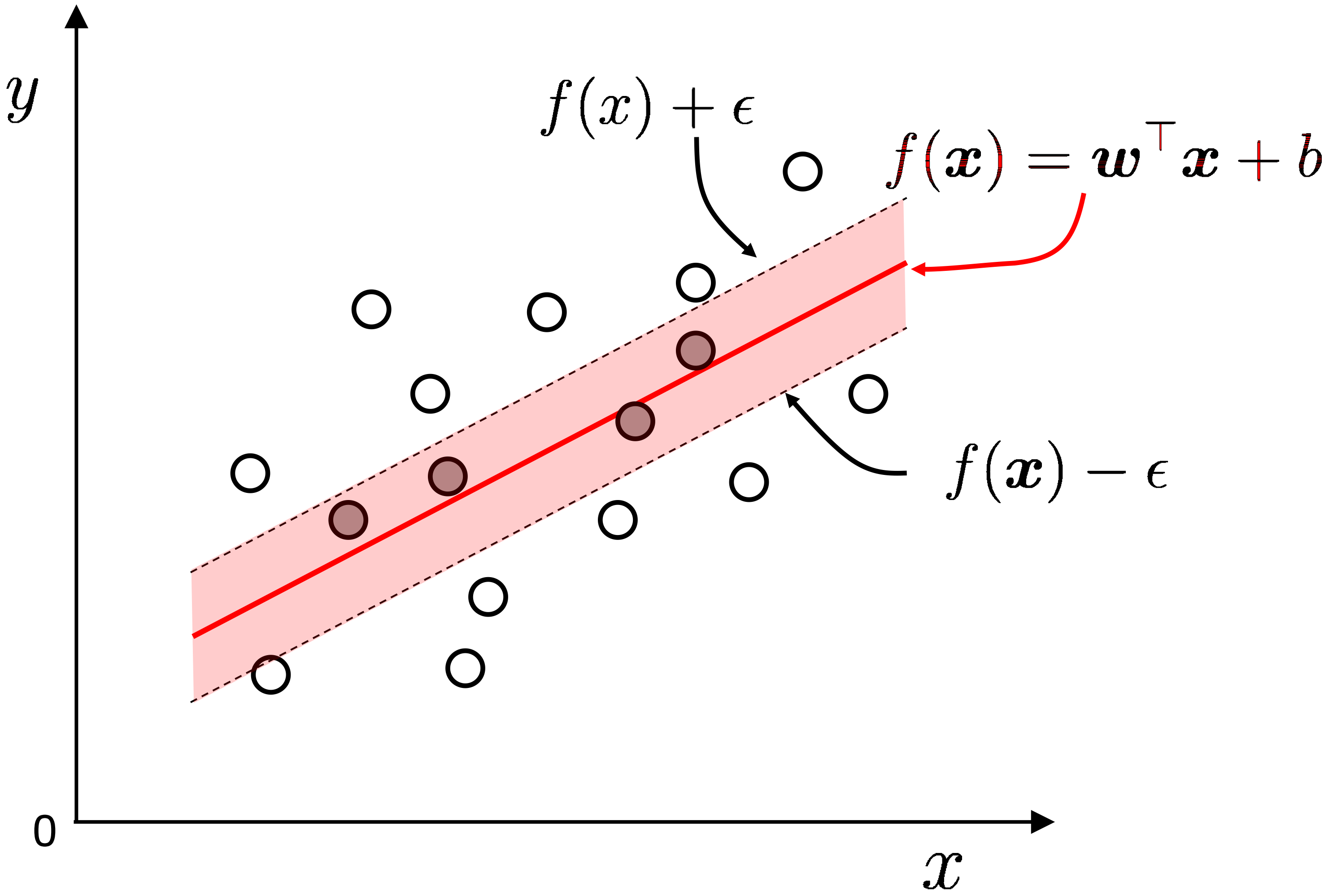
经验风险，描述模型与训练数据的契合程度

- 通过替换上面两个部分，可以得到许多其他学习模型
  - 对数几率回归(Logistic Regression)
  - 最小绝对收缩选择算子(LASSO)
  - ……

支持向量回归

支持向量回归

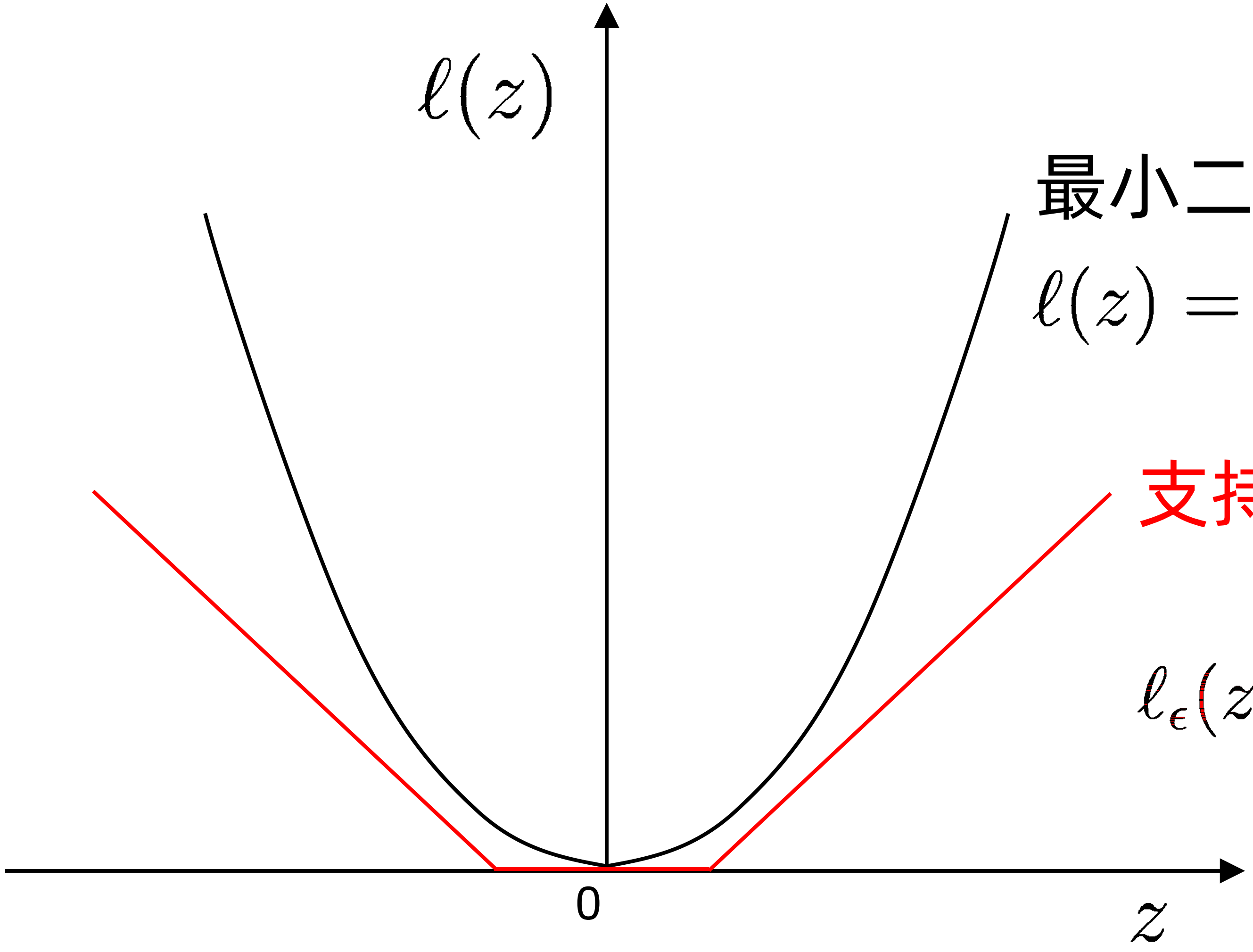
- 特点: 允许模型输出和实际输出间存在 2ϵ 的偏差.



2ϵ 间隔带

损失函数

- 落入中间 2ϵ 间隔带的样本不计算损失, 从而使得模型获得稀疏性.



最小二乘损失函数

$$\ell(z) = z^2$$

支持向量回归损失函数

$$\ell_\epsilon(z) = \begin{cases} 0 & \text{if } |z| \leq \epsilon \\ |z| - \epsilon & \text{otherwise} \end{cases}$$

形式化

- 原始问题

$$\begin{aligned}\min_{\boldsymbol{w},b,\xi_i,\hat{\xi}_i} \quad & \frac{1}{2}\|\boldsymbol{w}\|^2 + C\sum_{i=1}^{m}(\xi_i + \hat{\xi}_i) \\ \text{s.t.} \quad & y_i - \boldsymbol{w}^\top\phi(\boldsymbol{x}_i) - b \leq \epsilon + \xi_i, \\ & y_i - \boldsymbol{w}^\top\phi(\boldsymbol{x}_i) - b \geq -\epsilon - \hat{\xi}_i, \\ & \xi_i \geq 0,\ \hat{\xi}_i \geq 0,\ i = 1, 2, \ldots, m.\end{aligned}$$

- 对偶问题

$$\begin{aligned}\min_{\boldsymbol{\alpha},\hat{\boldsymbol{\alpha}}} \quad & \frac{1}{2}\sum_{i=1}^{m}\sum_{j=1}^{m}(\alpha_i - \hat{\alpha}_i)(\alpha_j - \hat{\alpha}_j)\kappa(\boldsymbol{x}_i, \boldsymbol{x}_j) + \sum_{i=1}^{m}(\alpha_i(\epsilon - y_i) + \hat{\alpha}_i(\epsilon + y_i)) \\ \text{s.t.} \quad & \sum_{i=1}^{m}(\alpha_i - \hat{\alpha}_i) = 0, \\ & 0 \leq \alpha_i \leq C,\ 0 \leq \hat{\alpha}_i \leq C.\end{aligned}$$

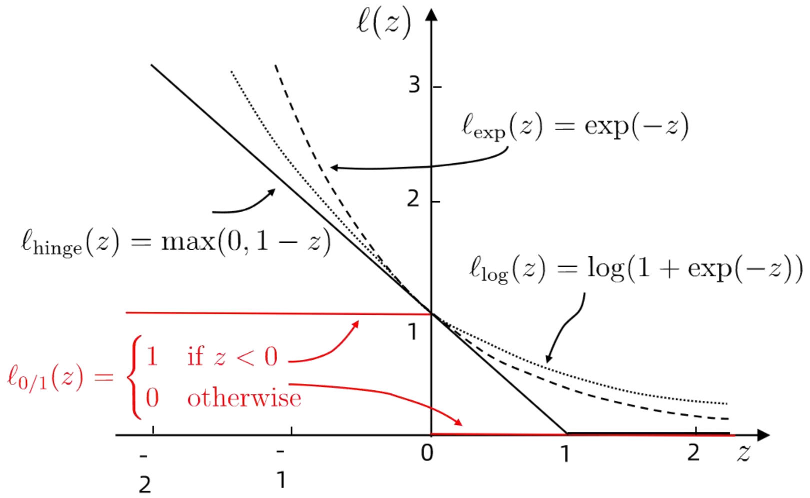
- 预测

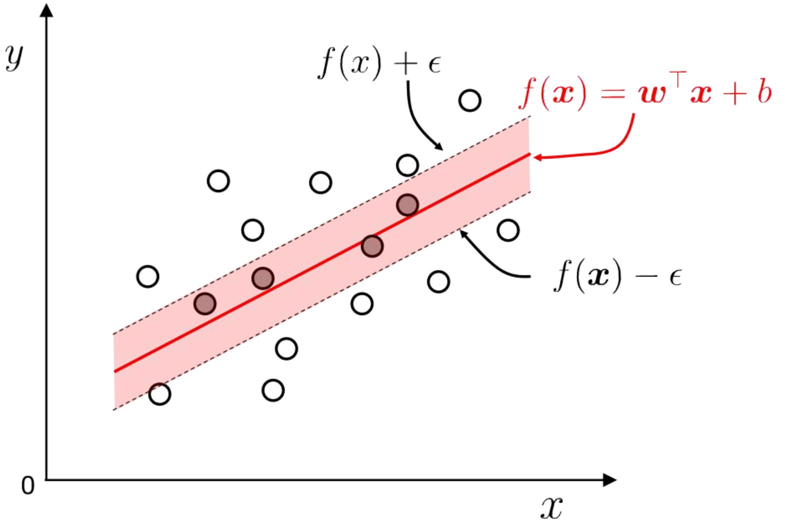
$$f(\boldsymbol{x}) = \boldsymbol{w}^\top\phi(\boldsymbol{x}) + b = \sum_{i=1}^{m}(\hat{\alpha}_i - \alpha_i)y_i\kappa(\boldsymbol{x}_i, \boldsymbol{x}) + b$$

总结

Take Home Message

- 支持向量机的”最大间隔”思想
- 对偶问题及其解的稀疏性
- 通过向高维空间映射解决线性不可分的问题
- 引入”软间隔”缓解特征空间中线性不可分的问题
- 将支持向量的思想应用到回归问题上得到支持向量回归
- 将核方法推广到其他学习模型





成熟的SVM软件包

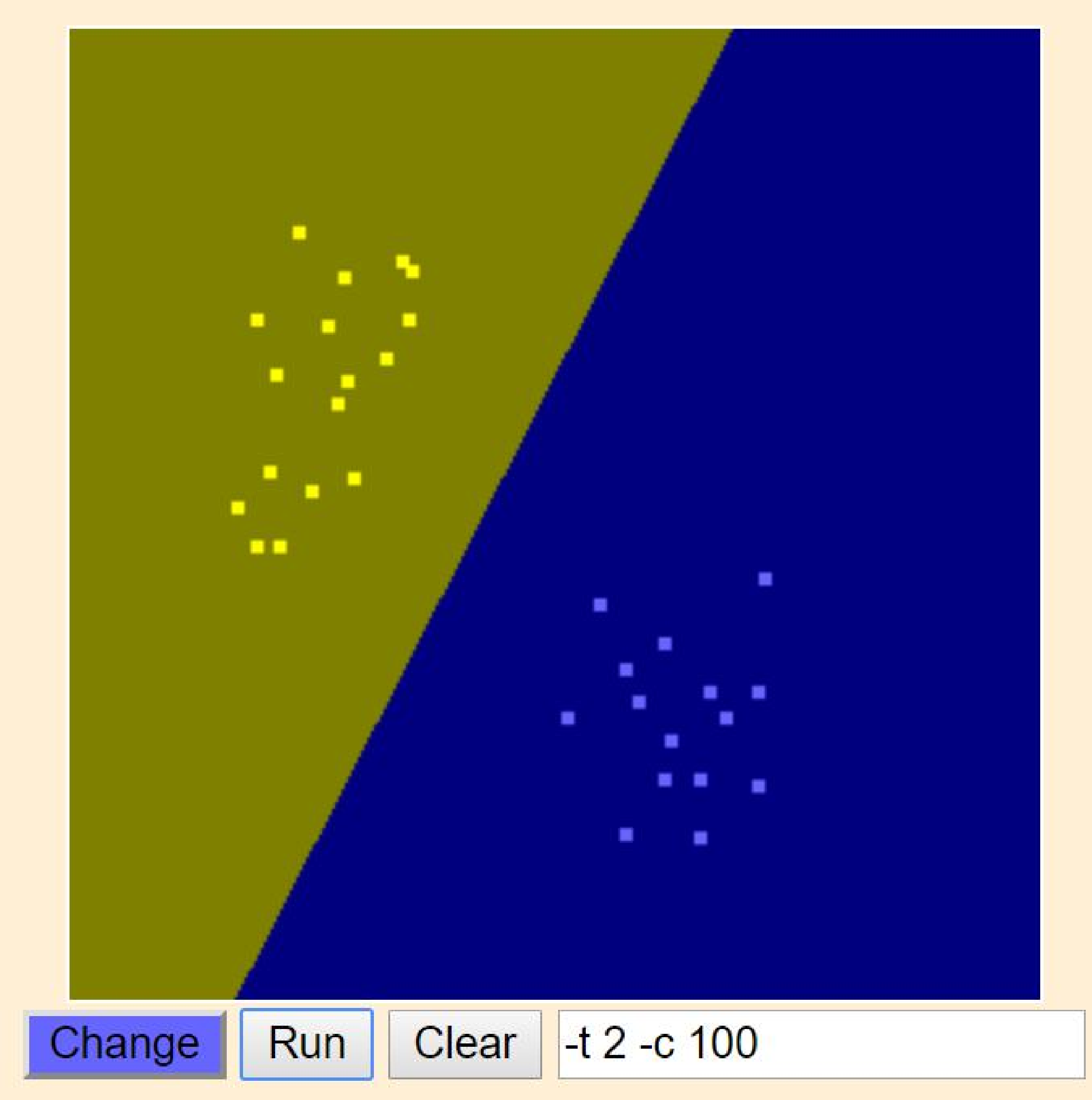
- LIBSVM
  http://www.csie.ntu.edu.tw/~cjlin/libsvm/

- LIBLINEAR
  http://www.csie.ntu.edu.tw/~cjlin/liblinear/

- SVM^{light}、SVM^{perf}、SVM^{struct}
  http://svmlight.joachims.org/svm_struct.html

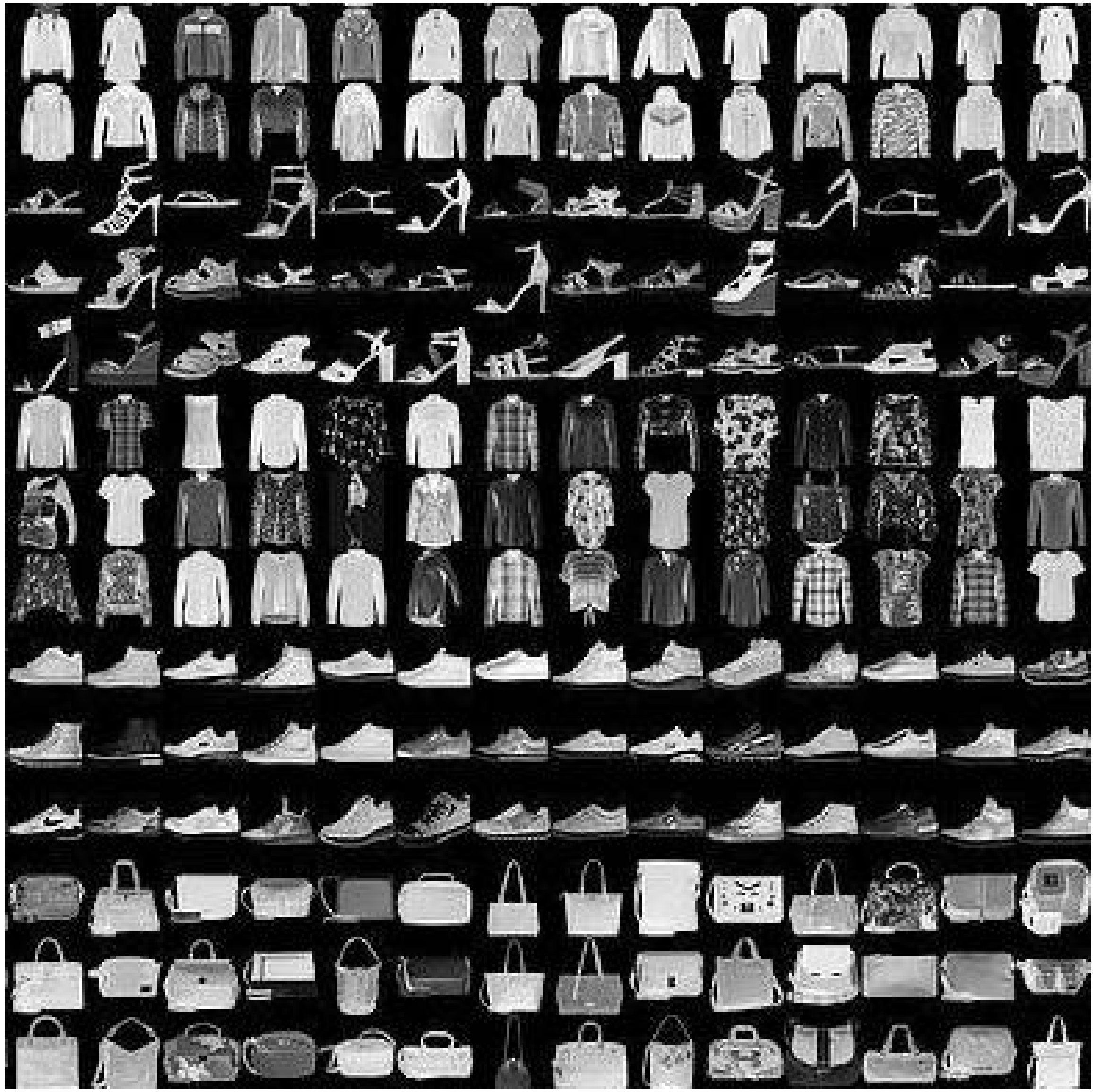
- Pegasos
  http://www.cs.huji.ac.il/~shais/code/index.html

- 附：在线的jupyter notebook环境
  https://www.cocalc.com/app



FashionMNIST

- FashionMNIST 是一个替代 MNIST 手写数字集 [1] 的图像数据集。
  - 由 Zalando（一家德国的时尚科技公司）旗下的研究部门提供。
  - 其涵盖了来自 10 种类别的共 7 万个不同商品的正面图片。
- FashionMNIST
  - 大小、格式和训练集/测试集划分与原始的 MNIST 完全一致。
  - 60000/10000 的训练测试数据划分，
  - 28x28 的灰度图片。



Fashion-MNIST: a Novel Image Dataset for Benchmarking Machine Learning Algorithms. Han Xiao, Kashif Rasul, Roland Vollgraf. arXiv: TBA

FashionMNIST

- 数据可视化
  - t-SNE

https://zhuanlan.zhihu.com/p/28841880

FashionMNIST

- 数据可视化
  - t-SNE：
  - Fashion-MNIST

https://zhuanlan.zhihu.com/p/28841880

FashionMNIST

- 数据可视化
  - t-SNE：
  - Fashion-MNIST
    - 局部放大

FashionMNIST

zalando research | Benchmark | Fashion MNIST | Original MNIST | Side-by-Side | Repository

Filter 129 results by Name, Parameter

Name	Parameter	Accuracy (mean)
SVC	{"C":100,"kernel":"sigmoid"}	0.703
SVC	{"C":100,"kernel":"linear"}	0.833
SVC	{"C":1,"kernel":"poly"}	0.874
SVC	{"C":1,"kernel":"linear"}	0.841
SVC	{"C":1,"kernel":"sigmoid"}	0.712
SVC	{"C":10,"kernel":"sigmoid"}	0.703
SVC	{"C":10,"kernel":"linear"}	0.836
SVC	{"C":1,"kernel":"rbf"}	0.884
SVC	{"C":10,"kernel":"rbf"}	0.896
SVC	{"C":100,"kernel":"rbf"}	0.893
SVC	{"C":10,"kernel":"poly"}	0.897
SVC	{"C":100,"kernel":"poly"}	0.896

http://fashion-mnist.s3-website.eu-central-1.amazonaws.com/#

MNIST

zalando research | Benchmark | Fashion MNIST | Original MNIST | Side-by-Side | Repository

Filter 129 results by Name, Parameter

Name	Parameter	Accuracy (mean)
SVC	{"C":1,"kernel":"poly"}	0.957
SVC	{"C":1,"kernel":"linear"}	0.929
SVC	{"C":10,"kernel":"rbf"}	0.973
SVC	{"C":100,"kernel":"poly"}	0.978
SVC	{"C":10,"kernel":"sigmoid"}	0.873
SVC	{"C":1,"kernel":"rbf"}	0.966
SVC	{"C":10,"kernel":"linear"}	0.927
SVC	{"C":100,"kernel":"linear"}	0.926
SVC	{"C":100,"kernel":"rbf"}	0.972
SVC	{"C":100,"kernel":"sigmoid"}	0.868
SVC	{"C":1,"kernel":"sigmoid"}	0.898
SVC	{"C":10,"kernel":"poly"}	0.976

http://fashion-mnist.s3-website.eu-central-1.amazonaws.com/#

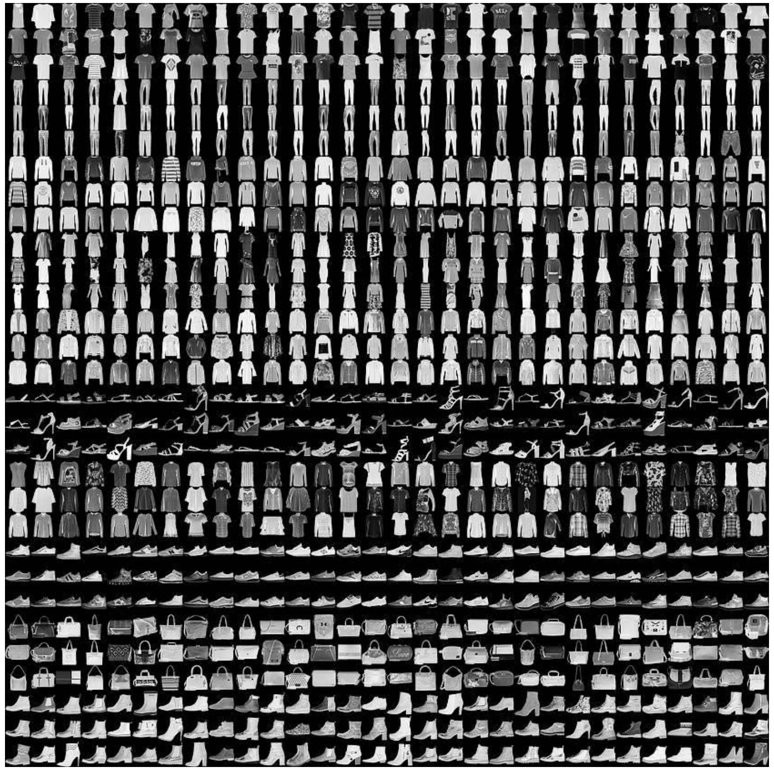
机器学习 & 深度学习

杭州电子科技大学
HANGZHOU DIANZI UNIVERSITY

笃学力行 守正求新

作业：FashionMNIST + SVM

- **FashionMNIST:**
  - 10 种类别，共 7 万个图片，训练集/测试集划分：6：1
  - 28x28 的灰度图片
- **实验设置：（采用FashionMNIST子集）**
  - 10种类别；
  - 每个类别随机选择700个图片；
  - 训练集/测试集划分：6000/1000；
  - 输入为图片灰度值（或梯度方向直方图等图像特征）；
  - 分类器为SVM（也推荐测试线性分类器、决策树）；
    - **测试分类方法数目 ≧ 小组成员数/3**
  - 统计在测试集上的分类精度；
  - 分析不同参数设置对于性能的影响；
- 提交代码及技术报告，择优进行PPT报告；截止日期：2021年12月12日。



http://scikit-learn.org/