Lecture 6: Support Vector Regression

> 课件链接：[Hsuan-Tien Lin - support vector regression]()
>
> **Support Vector Regression(支撑向量回归)**
>
> - Kernel Ridge Regression: 核岭回归
> - Support Vector Regression Primal: SVR的原始形式
> - Support Vector Regression Dual: SVR的对偶形式
> - Summary of Kernel Models: 核模型的总结

1. Kernel Ridge Regression: 核岭回归

Ridge Regression，即"岭回归"，是L2正则化线性回归。上一章我们介绍了Representer Theorem——任何L2正则化的线性模型，其最佳解都可以被样本点线性表示；而解可以被样本点线性表示，则可以使用kernel trick，例如KLR。由于Ridge Regression也是L2正则化线性模型，因此也可以将其转化为Kernel Ridge Regression。

回忆使用平方误差的回归问题：

对于普通线性回归和岭回归来说，都有analytic solution(封闭解)。那么，对于kernel ridge regression来说，有analytic solution吗？

ridge regression问题：

将\mathbf{w}_* = \sum_{n=1}^N \beta_n \mathbf{z}_n代入即可得到kernel ridge regression问题：

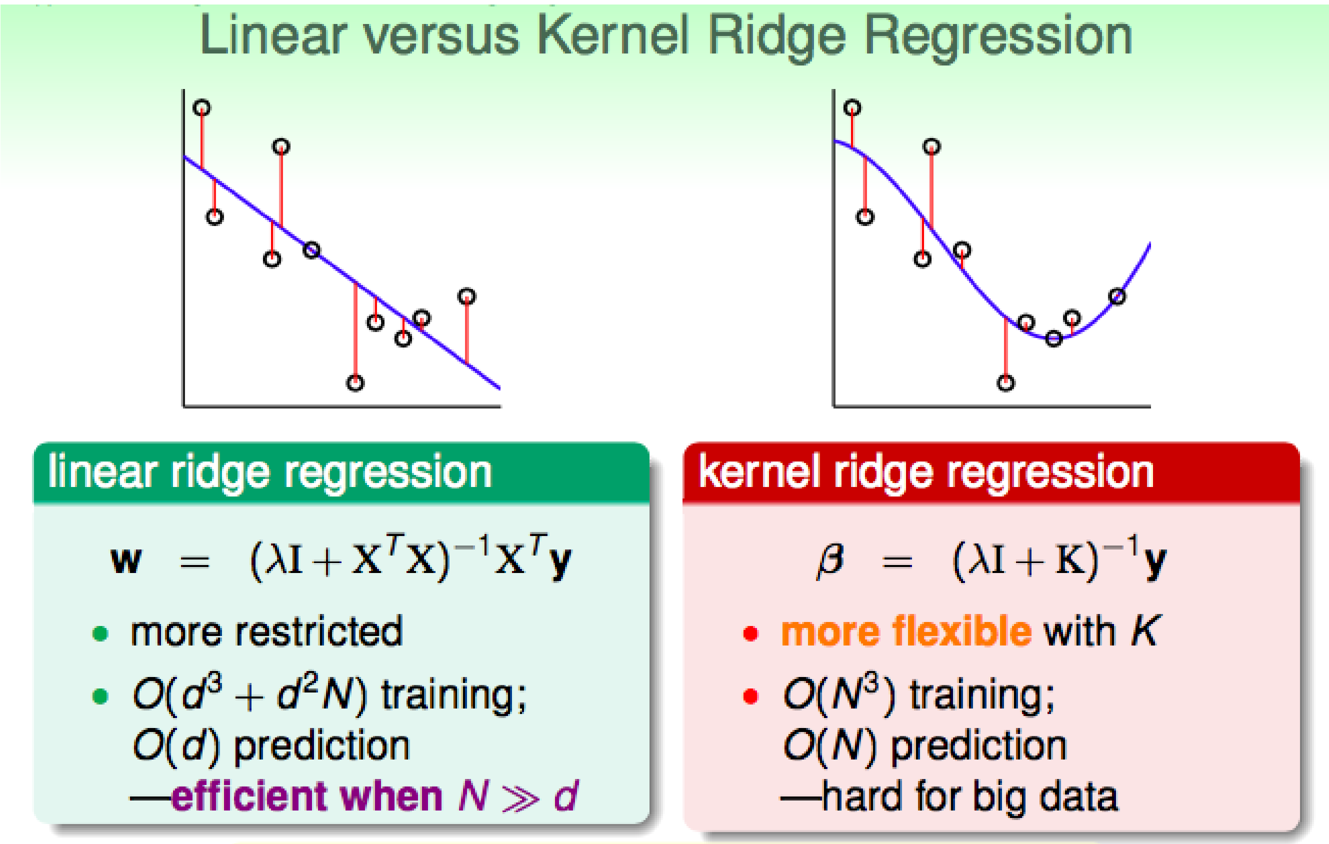
$$\min_{\beta} \quad \frac{\lambda}{N}\underbrace{\sum_{n=1}^{N}\sum_{m=1}^{N}\beta_n\beta_m K(\mathbf{x}_n,\mathbf{x}_m)}_{\text{regularization of }\beta\text{ on }K\text{-based regularizer}} + \underbrace{\frac{1}{N}\sum_{n=1}^{N}\left(y_n-\sum_{m=1}^{N}\beta_m K(\mathbf{x}_n,\mathbf{x}_m)\right)^2}_{\text{linear regression of }\beta\text{ on }K\text{-based features}}$$

$$= \frac{\lambda}{N}\beta^T \mathrm{K}\beta + \frac{1}{N}\left(\beta^T \mathrm{K}^T \mathrm{K}\beta - 2\beta^T \mathrm{K}^T \mathbf{y} + \mathbf{y}^T \mathbf{y}\right)$$

上述无约束最优化问题的目标函数是\mathbf{\beta}的二次式，因此可以直接使用导数置零的方法得到analytic solution：

- 对于任何\lambda > 0，逆一定存在，因为：K是半正定矩阵(Mercer's condition)，对角线加上正数，一定得到正定矩阵，因此可逆；
- 时间复杂度：O(N^3)；并且，该矩阵是dense的，算逆矩阵更加困难。

最后，将ridge regression与kernel ridge regression进行对比：



linear vs kernel：实质是efficiency和flexibility之间的trade-off。

附：对于kernel ridge regression，得到最佳的\mathbf{\beta}后，回传的hypothesis是：

2. Support Vector Regression Primal: SVR的原始形式

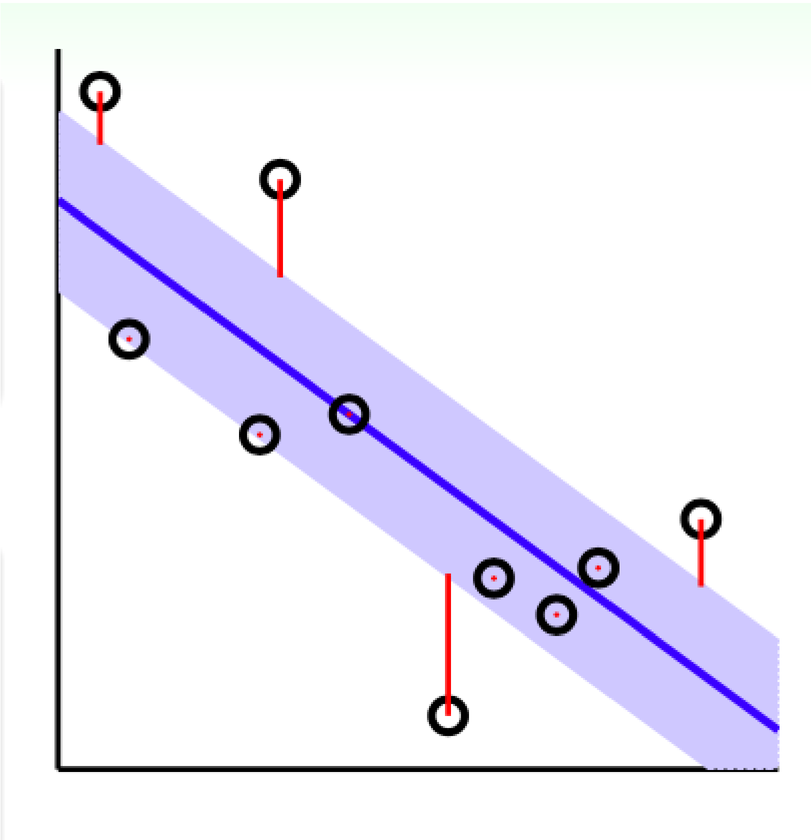
因为平方误差是0-1误差的上界，因此有regression for classification。同样的，也有kernel ridge regression for classification——这样的模型又被称为**least-squares SVM**，最小二乘法SVM，简称**LSSVM**。

Motivation

LSSVM与Soft-Margin SVM的边界形状相差不大，但会有更多的SVs——这是因为LSSVM的\mathbf{\beta}是Dense的，而SVM的\mathbf{\alpha}是Sparse的——Dense就会导致更慢的prediction。我们希望\mathbf{\beta}也能是sparse的。

Tube Regression

在tube内的样本点，error不计；在tube外的样本点，error是到tube边界的距离。如下图红线所示(蓝色区域为tube)：

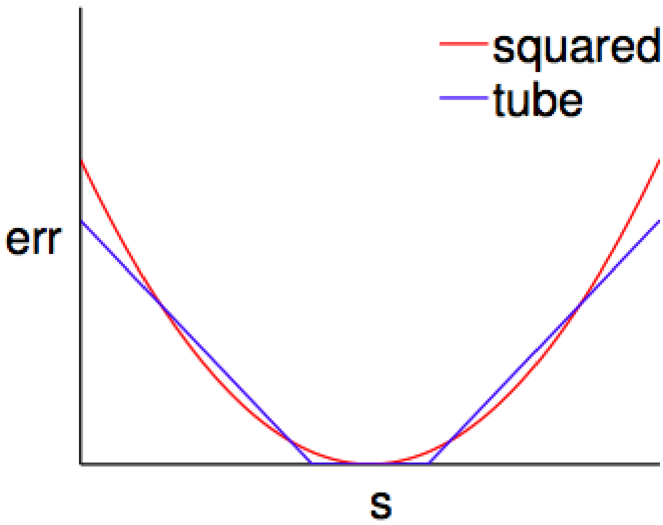


数学化一些，这里的error measure可以写作：

- 如果|s-y| \le \epsilon，则误差记作0；
- 如果|s-y| > \epsilon，则误差记作|s-y|-\epsilon；

这种误差函数被称为\epsilon-**insensitive error**，其中\epsilon > 0。

我们将该误差函数与平方误差函数进行比较：



可见，在s与y很接近的时候，tube的误差函数值与平方误差函数值很接近；随着s与y的偏离的增加，平方误差给予更多的惩罚(二次函数递增)，但tube误差函数则线性递增——**因此，tube误差函数受极端值的影响较小。**

L2-Regularized Tube Regression

加上L2正则化后，Tube Regression的最优化问题如下：

直接解该最优化问题当然可以，但是：

1. max函数是不可微分的——不好解；
2. 可以使用kernel技巧——但得到的解不是sparse的。

因此，我们希望将上面的最优化问题，转换成SVM的形式，这样就可以利用KKT条件保证kernelize的解是sparse的。回忆Soft-Margin SVM primal的无约束条件形式，同这里的最优化目标函数十分类似。因此，我们模仿Soft-Margin SVM primal，将这里的目标函数进行微调：

将\max(...)记做\xi_n，上述无条件最优化问题可以**反推**为等价的有条件最优化问题(完全模仿Soft-Margin SVM primal)：

因为存在绝对值符号，约束条件还不是线性的——打开绝对值：

上述问题即为**Support Vector Regression (SVR) primal**问题。这是一个QP问题，有\tilde{d}+1+2N个变量，2N+2N个约束条件。

3. Support Vector Regression Dual: SVR的对偶形式

将约束条件1系列的拉格朗日乘子设为\alpha_n^{\land}，将约束条件2系列的拉格朗日乘子设为\alpha_n^{\lor}。

注意，我们不必关注\xi_n的拉格朗日乘子，因为根据之前Soft-Margin Dual的推导过程，\xi_n的拉格朗日乘子能够被\alpha_n表示，且最终\xi_n可以被消去；需要添加的条件仅仅为：

根据KKT条件，对w偏导至零得到：

根据KKT条件，对b偏导至零得到：

根据KKT条件中的complementary slackness，有：

SVR Dual的完整形式如下图右下角所示(左侧一列是SVM的primal与dual，右侧上面是SVR的primal)：

$$
\begin{aligned}
\min \quad & \frac{1}{2}\mathbf{w}^T\mathbf{w} + C\sum_{n=1}^{N}\xi_n \\
\text{s.t.} \quad & y_n(\mathbf{w}^T\mathbf{z}_n + b) \geq 1 - \xi_n \\
& \xi_n \geq 0
\end{aligned}
$$

$$
\begin{aligned}
\min \quad & \frac{1}{2}\mathbf{w}^T\mathbf{w} + C\sum_{n=1}^{N}(\xi_n^{\wedge} + \xi_n^{\vee}) \\
\text{s.t.} \quad & 1(y_n - \mathbf{w}^T\mathbf{z}_n - b) \leq \epsilon + \xi_n^{\wedge} \\
& 1(\mathbf{w}^T\mathbf{z}_n + b - y_n) \leq \epsilon + \xi_n^{\vee} \\
& \xi_n^{\wedge} \geq 0, \xi_n^{\vee} \geq 0
\end{aligned}
$$

$$
\begin{aligned}
\min \quad & \frac{1}{2}\sum_{n=1}^{N}\sum_{m=1}^{N}\alpha_n\alpha_m y_n y_m K(\mathbf{x}_n, \mathbf{x}_m) \\
& -\sum_{n=1}^{N} 1 \cdot \alpha_n \\
\text{s.t.} \quad & \sum_{n=1}^{N} y_n\alpha_n = 0 \\
& 0 \leq \alpha_n \leq C
\end{aligned}
$$

$$
\begin{aligned}
\min \quad & \frac{1}{2}\sum_{n=1}^{N}\sum_{m=1}^{N}(\alpha_n^{\wedge} - \alpha_n^{\vee})(\alpha_m^{\wedge} - \alpha_m^{\vee})k_{n,m} \\
& +\sum_{n=1}^{N}\left((\epsilon - y_n)\cdot\alpha_n^{\wedge} + (\epsilon + y_n)\cdot\alpha_n^{\vee}\right) \\
\text{s.t.} \quad & \sum_{n=1}^{N} 1\cdot(\alpha_n^{\wedge} - \alpha_n^{\vee}) = 0 \\
& 0 \leq \alpha_n^{\wedge} \leq C, 0 \leq \alpha_n^{\vee} \leq C
\end{aligned}
$$

最后，讨论SVR解的Sparsity。

我们知道：

对于在tube内部的样本点，即：

因为没有任何的违反，所以：

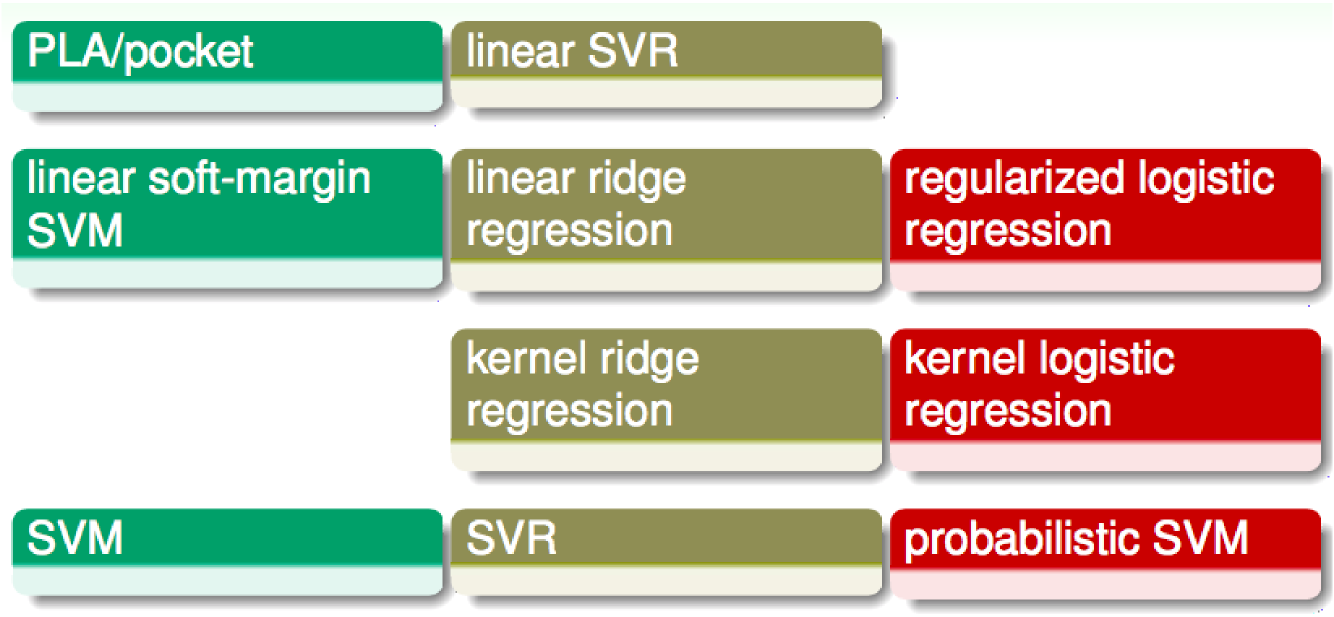
因此：

根据complementary slackness，有：

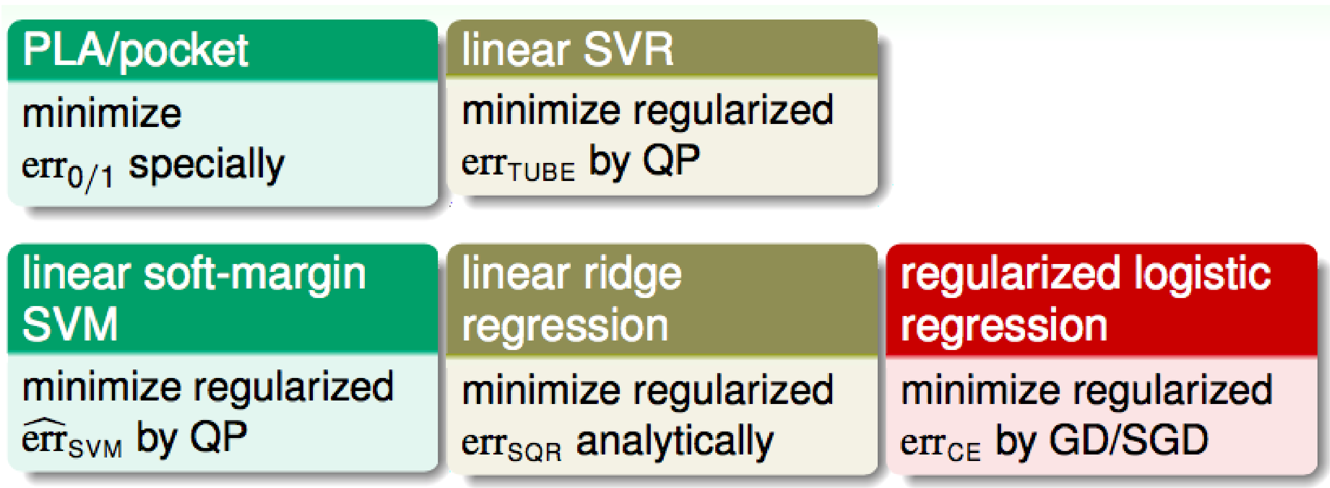
因此：

即，在tube内部的样本点，对于\mathbf{w}没有一点贡献。因此，SVs，即\beta_n \ne 0的样本点，应该在边界上或在tube外面。

4. Summary of Kernel Models: 核模型的总结

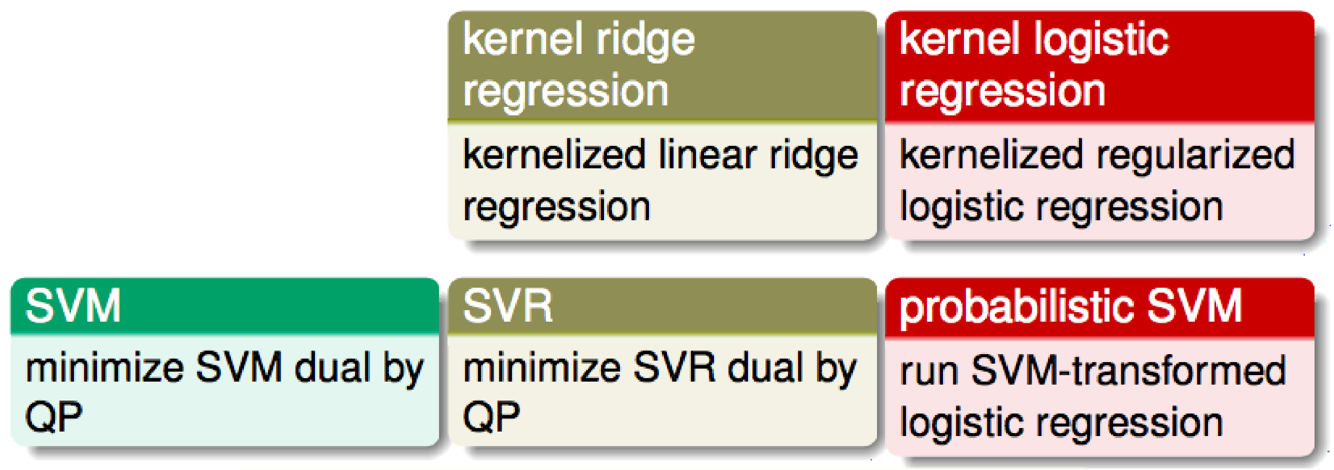


前两行是线性模型：



- 第一行很少用，因为**worse performance**；
- 第二行的模型被集成在**liblinear**中。

后两行是kernel模型，即非线性模型：



- 第三行很少用，因为**dense**解；

- 第四行的模型被集成在**libsvm**中。