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：

$$err(y, \mathbf{w}^T\mathbf{z}) = (y - \mathbf{w}^T\mathbf{z})^2$$

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：

$$\min_{\mathbf{w}} \quad \frac{\lambda}{N}\mathbf{w}^T\mathbf{w} + \frac{1}{N}\sum_{n=1}^{N}(y_n - \mathbf{w}^T\mathbf{z}_n)^2$$

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

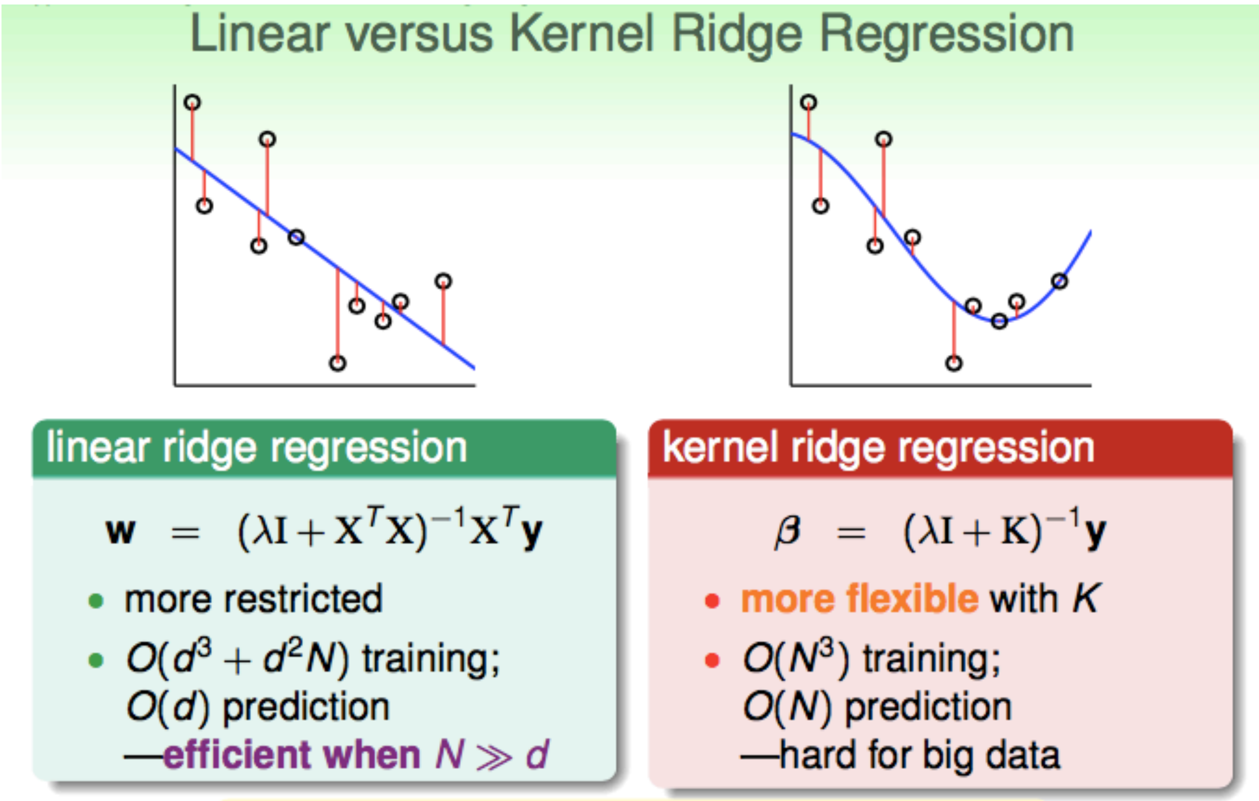
$$\begin{aligned}\min_{\beta} \quad & \frac{\lambda}{N}\underbrace{\sum_{n=1}^{N}\sum_{m=1}^{N}\beta_n\beta_m K(\mathbf{x}_n,\mathbf{x}_m)}_{\text{regularization of } \beta \text{ on } K\text{-based regularizer}} + \underbrace{\frac{1}{N}\sum_{n=1}^{N}\left(y_n - \sum_{m=1}^{N}\beta_m K(\mathbf{x}_n,\mathbf{x}_m)\right)^2}_{\text{linear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

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

$$\beta = (\lambda I + K)^{-1}\mathbf{y}$$

- 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β后，回传的hypothesis是：

$$g(\mathbf{x}) = \sum_{n=1}^{N} \beta_n \cdot K(\mathbf{x}_n, \mathbf{x})$$

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

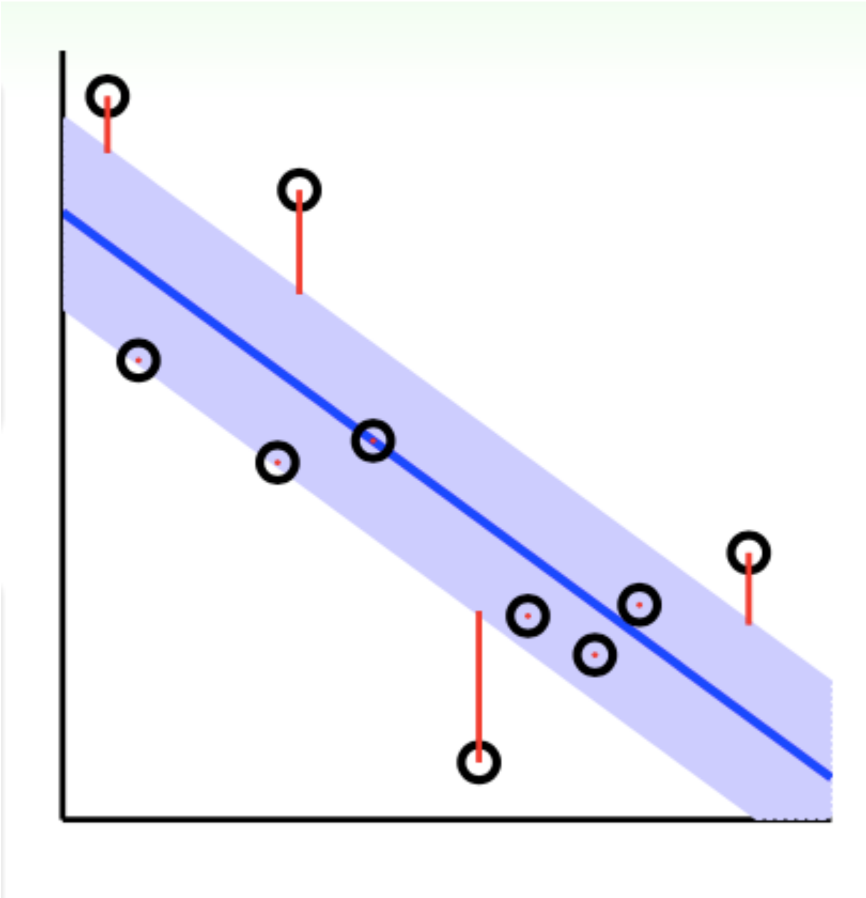
因为平方误差是0-1误差的上界，因此有regression for classification。同样的，也有kernel ridge regression for classification——这样的模型又被称为**least-squares SVM**，最小二乘法SVM，简称**LSSVM**。

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β是Dense的，而SVM的α是Sparse的——Dense就会导致更慢的prediction。我们希望β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)：



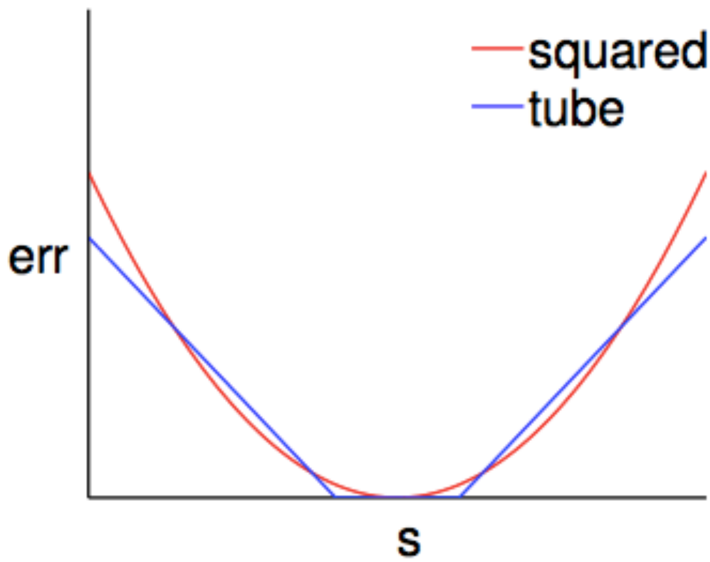
数学化一些，这里的error measure可以写作：

$$err(y, s) = \max(0, |s - y| - \epsilon)$$

- 如果$|s - y| \leq \epsilon$，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**ϵ-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：

$$\min_{\mathbf{w}} \quad \frac{\lambda}{N}\mathbf{w}^T\mathbf{w} + \frac{1}{N}\sum_{n=1}^{N}\max\Big(0, |\mathbf{w}^T\mathbf{z}_n - y_n| - \epsilon\Big)$$

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：

$$\min_{b,\mathbf{w}} \quad \frac{1}{2}\mathbf{w}^T\mathbf{w} + C\sum_{n=1}^{N}\max\Big(0, |\mathbf{w}^T\mathbf{z}_n + b - y_n| - \epsilon\Big)$$

将$\max(\ldots)$记做ξ_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)：

$$\begin{aligned}\min_{b,\mathbf{w},\xi} \quad & \frac{1}{2}\mathbf{w}^T\mathbf{w} + C\sum_{n=1}^{N}\xi_n \\ s.t \quad & |\mathbf{w}^T\mathbf{z}_n + b - y_n| \le \epsilon + \xi_n \\ & \xi_n \ge 0\end{aligned}$$

因为存在绝对值符号，约束条件还不是线性的——打开绝对值：

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

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$\alpha_n^\wedge$，将约束条件2系列的拉格朗日乘子设为$\alpha_n^\vee$。

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

$$
\begin{aligned}
0 \le \alpha_n^{\wedge} \le C \\
0 \le \alpha_n^{\vee} \le C
\end{aligned}
$$

根据KKT条件，对w偏导至零得到：

$$\mathbf{w} = \sum_{n=1}^{N} (\alpha_n^{\wedge} - \alpha_n^{\vee}) \mathbf{z}_n$$

根据KKT条件，对b偏导至零得到：

$$\sum_{n=1}^{N} (\alpha_n^{\wedge} - \alpha_n^{\vee}) = 0$$

根据KKT条件中的complementary slackness，有：

$$
\begin{aligned}
\alpha_n^{\wedge}(\epsilon + \xi_n^{\wedge} - y_n + \mathbf{w}^T \mathbf{z}_n + b) = 0 \\
\alpha_n^{\vee}(\epsilon + \xi_n^{\vee} + y_n - \mathbf{w}^T \mathbf{z}_n - b) = 0
\end{aligned}
$$

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)：

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

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

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

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

最后，讨论SVR解的Sparsity。

我们知道：

$$\mathbf{w} = \sum_{n=1}^{N} (\alpha_n^{\wedge} - \alpha_n^{\vee}) \mathbf{z}_n = \sum_{n=1}^{N} \beta_n \mathbf{z}_n$$

对于在tube内部的样本点，即：

$$\left|\mathbf{w}^T\mathbf{z}_n+b-y_n\right|<\epsilon$$

因为没有任何的违反，所以：

$$\begin{aligned}\xi_n^\wedge&=0\\\xi_n^\vee&=0\end{aligned}$$

因此：

$$\begin{aligned}\epsilon+\xi_n^\wedge-y_n+\mathbf{w}^T\mathbf{z}_n+b&\neq 0\\\epsilon+\xi_n^\vee+y_n-\mathbf{w}^T\mathbf{z}_n-b&\neq 0\end{aligned}$$

根据complementary slackness，有：

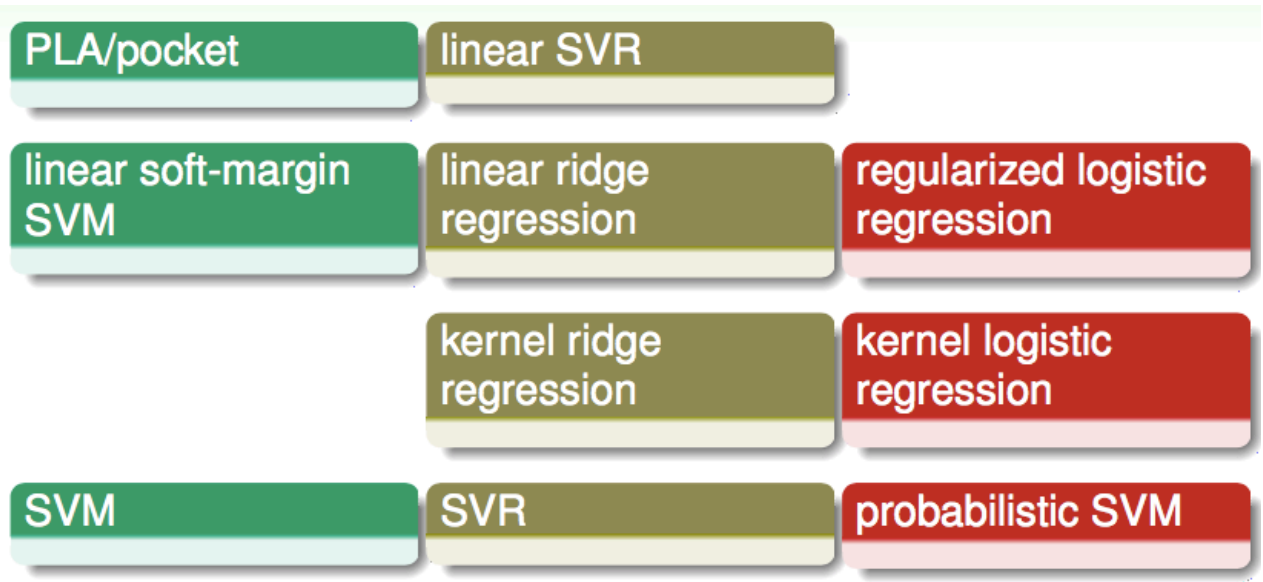
$$\begin{aligned}\alpha_n^\wedge&=0\\\alpha_n^\vee&=0\end{aligned}$$

因此：

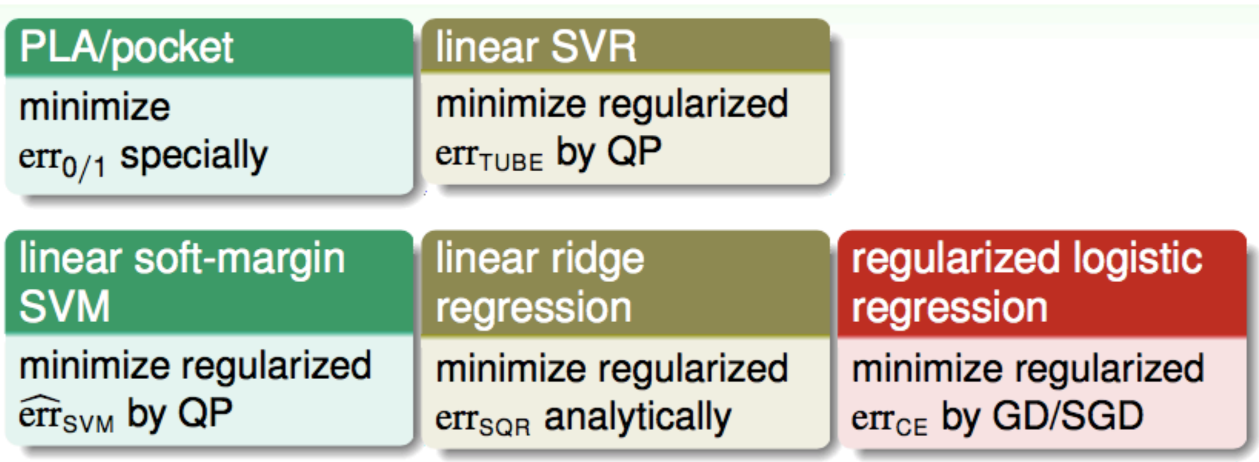
$$\beta_n=0$$

即，在tube内部的样本点，对于$\mathbf{w}$没有一点贡献。因此，SVs，即$\beta_n\neq 0$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

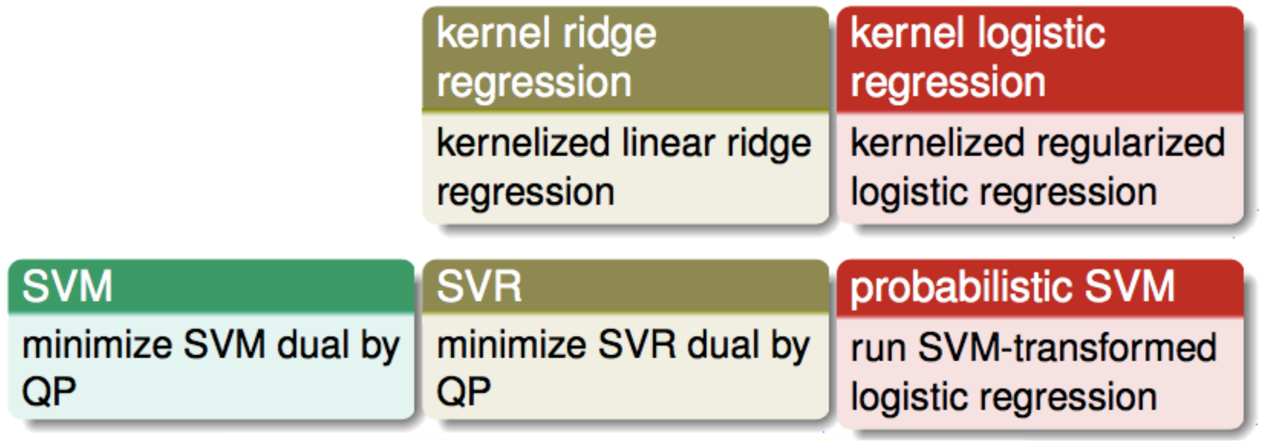


前两行是线性模型：



- 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。