支持向量机

高　阳，李文斌

http://cs.nju.edu.cn/rl

2023年10月31日

大纲

回顾

感知机

线性支持向量机

非线性支持向量机

多类支持向量机

从统计学的观点来看

- 机器学习的目的是得到映射：$\mathcal{X} \mapsto \mathcal{Y}$

  ✓ 类的先验概率：$p(y=i)$

  ✓ 样本的先验概率：$p(\boldsymbol{x})$

  ✓ 类条件概率（似然）：$p(\boldsymbol{x}|y=i)$

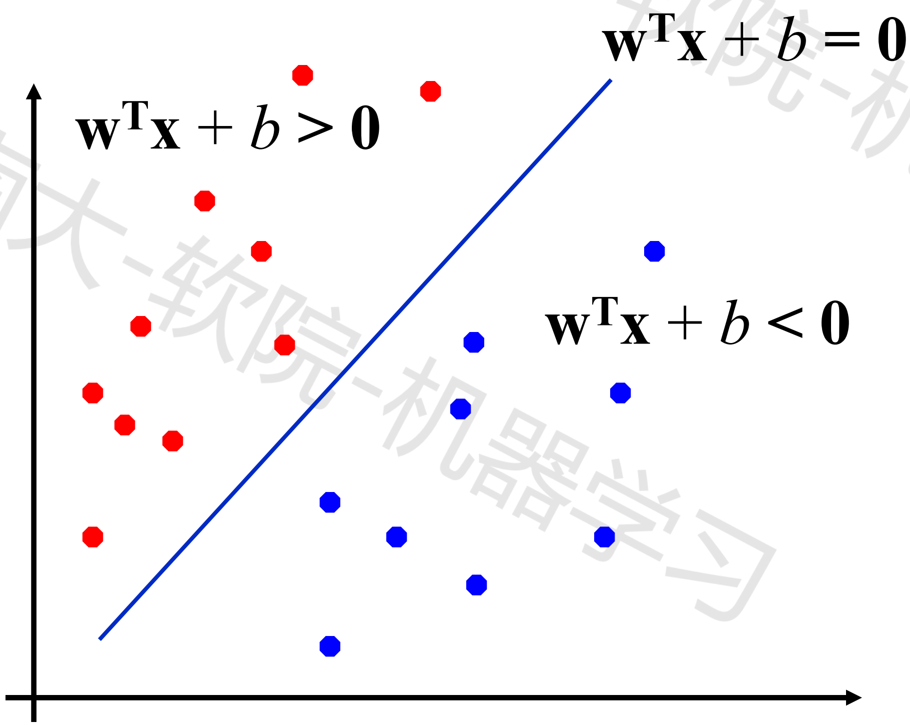
  ✓ 后验概率：$p(y=i|\boldsymbol{x})$

统计机器学习方法粗略分类

- 从概率框架的角度
  - ✓ 生成式模型（Generative models）
    - ○ 估计$p(\boldsymbol{x}|y=i)$和$p(y=i)$，然后用贝叶斯定理求$p(y=i|\boldsymbol{x})$
  - ✓ 判别式模型（Discriminative models）
    - ○ 直接估计$p(y=i|\boldsymbol{x})$
    - ○ 判别函数（Discriminant function）：不假设概率模型，直接求一个把各类分开的边界

感知机：线性超平面

- 二分类
  - ✓ 二分类问题可以看作是在特征空间上对类别进行划分的任务



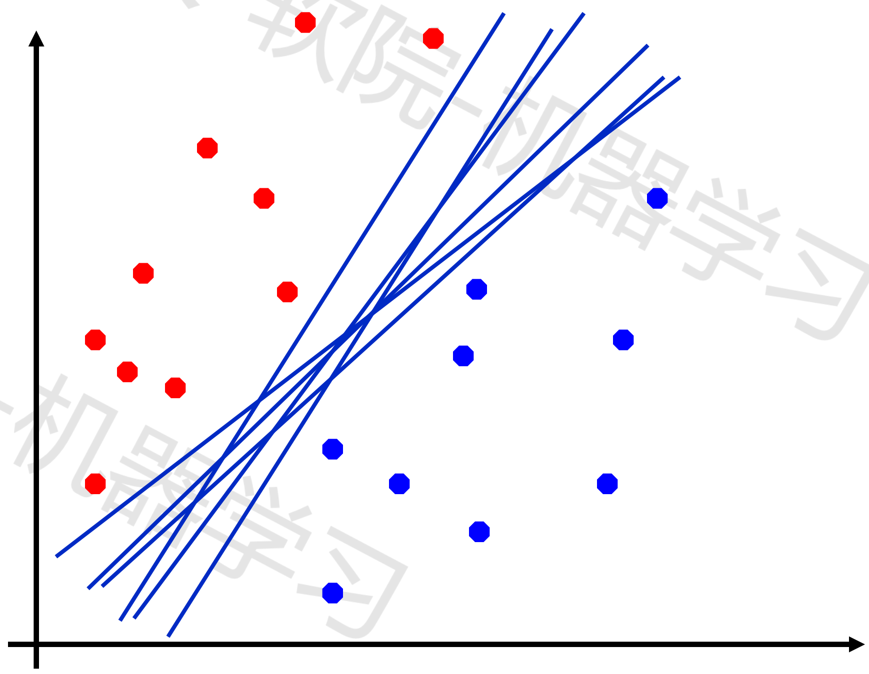
划分超平面的线性方程

w为法向量，决定超平面的方向；b为位移项，决定了超平面与原点之间的距离

$$f(\mathbf{x}) = \mathrm{sign}(\mathbf{w}^{\mathrm{T}}\mathbf{x} + b)$$

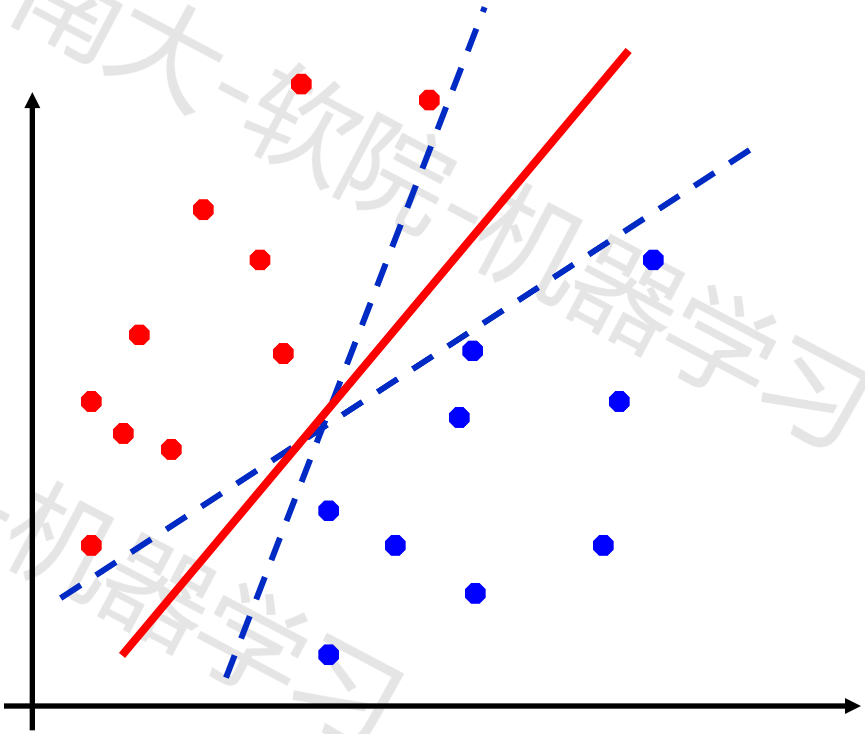
感知机：线性超平面

- 将训练样本分开的超平面很多，哪一个更好？



感知机：线性超平面

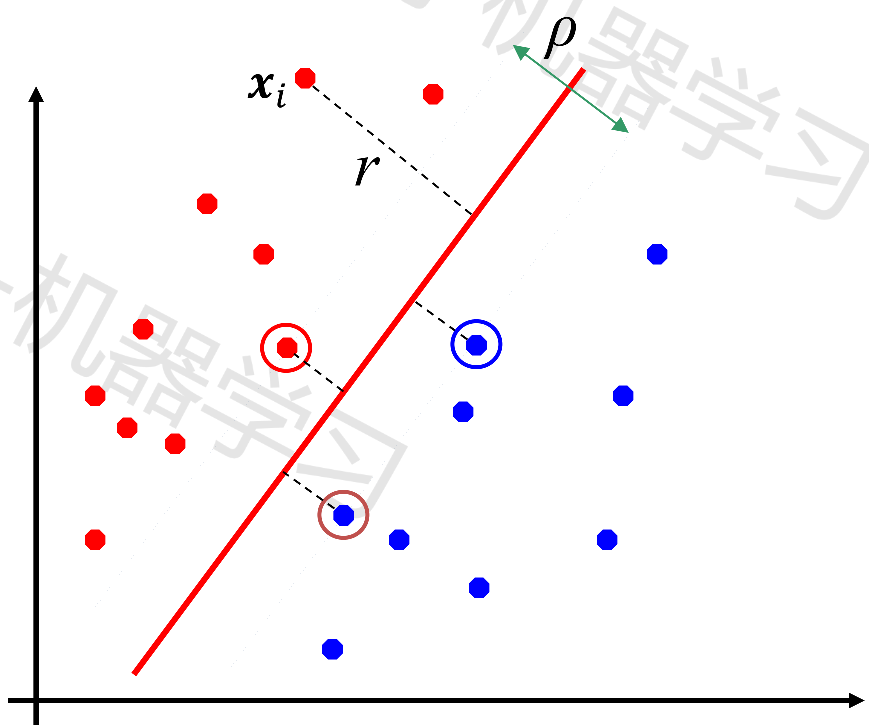
- 将训练样本分开的超平面很多，哪一个更好?



“正中间”的：鲁棒性最好，泛化能力最强

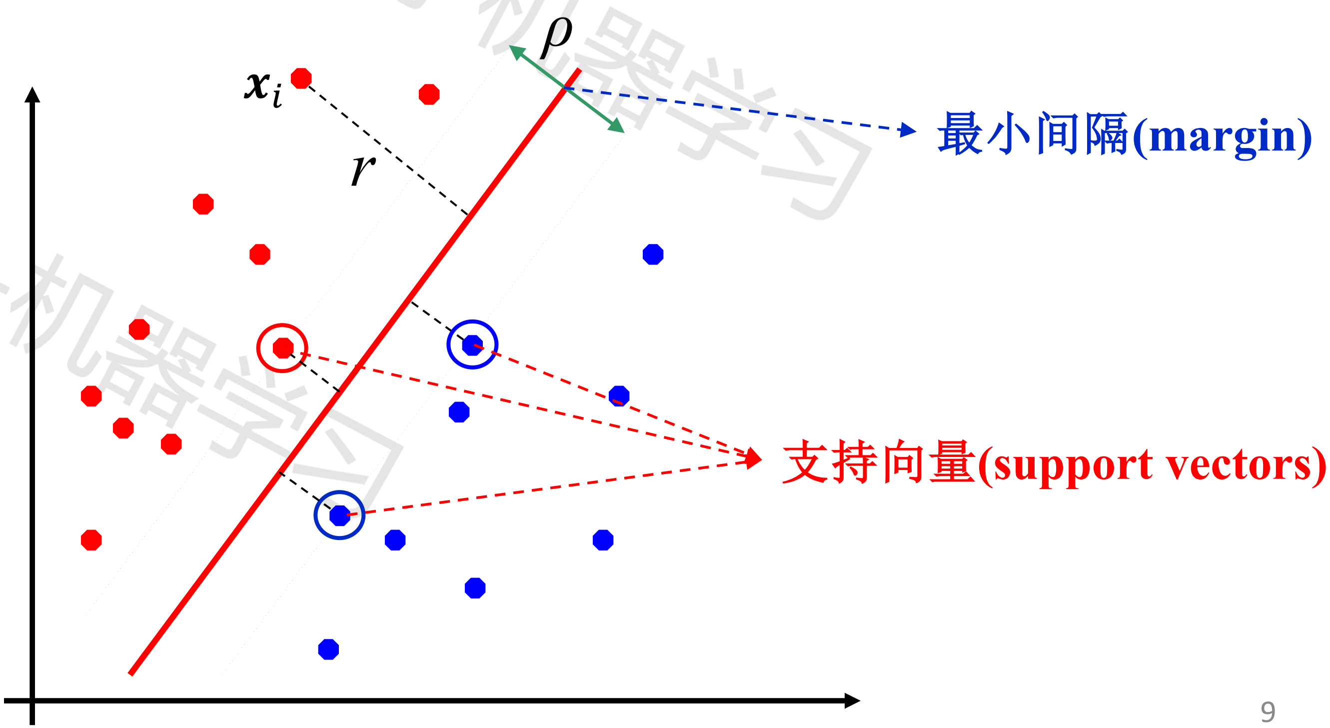
线性支持向量机

- 间隔与支持向量
  - ✓ 一个点（样例）对应的“间隔”margin是其到分界超平面的垂直距离
  - ✓ SVM最大化（所有训练样本的）最小间隔margin
  - ✓ 具有最小间隔的点称为支持向量(support vectors)
    - ❖ 所以叫支持向量机support vector machine



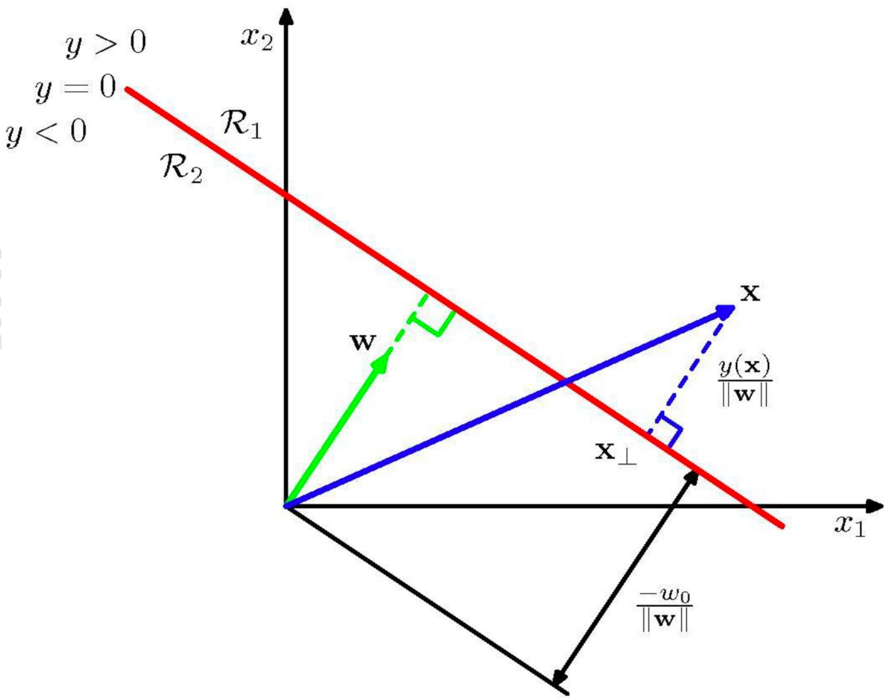
线性支持向量机

- 间隔与支持向量
  - ✓ 一个点（样例）对应的“间隔”margin是其到分界超平面的垂直距离
  - ✓ SVM最大化（所有训练样本的）最小间隔margin
  - ✓ 具有最小间隔的点称为支持向量(support vectors)
    - ❖ 所以叫支持向量机support vector machine



线性支持向量机

- 几何示意图



- ○ 分类超平面（红色）

  $f(\boldsymbol{x}) = \boldsymbol{w}^T\boldsymbol{x} + b = 0$

- ○ 绿色 $\boldsymbol{w}$ 为其法向量(normal vector)

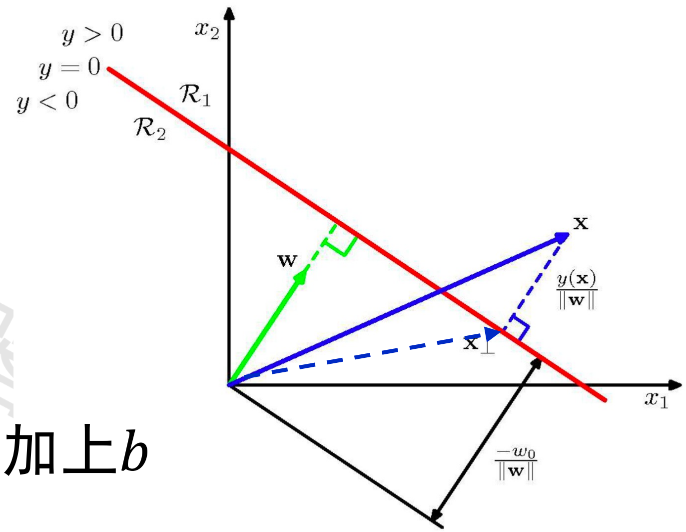
- ○ $\boldsymbol{x}$为任一点/样例，其到超平面的距离r为?

线性支持向量机

- 计算Margin

✓ $\boldsymbol{x}$的投影点为$\boldsymbol{x}_\perp$， $\boldsymbol{x}-\boldsymbol{x}_\perp$为距离向量

  - 其方向与$\boldsymbol{w}$相同，为$\frac{\boldsymbol{w}}{\|\boldsymbol{w}\|}$
  - 其大小r可为0，或正，或负;
    margin为其大小的绝对值



$f(\boldsymbol{x}_\perp)=0$

✓ $\boldsymbol{x}=\boldsymbol{x}_\perp+r\frac{\boldsymbol{w}}{\|\boldsymbol{w}\|}$，两边同乘以$\boldsymbol{w}^T$，然后加上$b$

  - $\boldsymbol{w}^T\boldsymbol{x}+b=\boldsymbol{w}^T\boldsymbol{x}_\perp+\boldsymbol{b}+r\frac{\boldsymbol{w}^T\boldsymbol{w}}{\|\boldsymbol{w}\|}$
  - $f(\boldsymbol{x})=f(\boldsymbol{x}_\perp)+r\|\boldsymbol{w}\|$ 为什么？
  - $r=\frac{f(x)}{\|\boldsymbol{w}\|}$ 为什么?

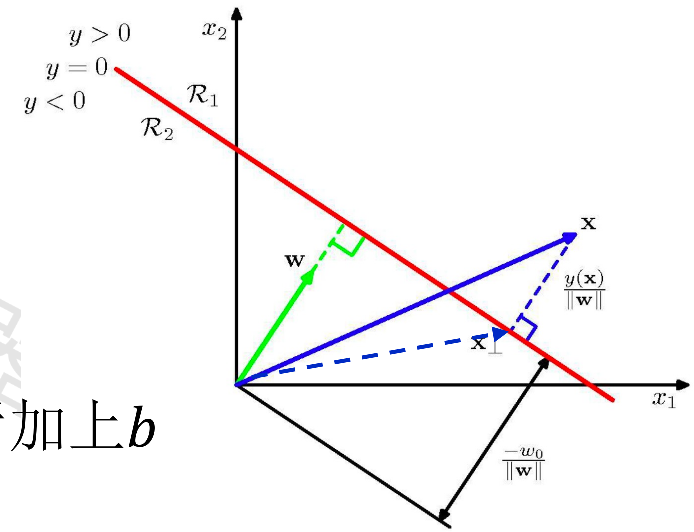
线性支持向量机

- 计算Margin

✓ $\boldsymbol{x}$的投影点为$\boldsymbol{x}_\perp$， $\boldsymbol{x}-\boldsymbol{x}_\perp$为距离向量

  ○ 其方向与$\boldsymbol{w}$相同，为$\frac{\boldsymbol{w}}{\|\boldsymbol{w}\|}$

  ○ 其大小r可为0，或正，或负;
  margin为其大小的绝对值



✓ $\boldsymbol{x}=\boldsymbol{x}_\perp+r\frac{\boldsymbol{w}}{\|\boldsymbol{w}\|}$，两边同乘以$\boldsymbol{w}^T$，然后加上$b$

  ○ $\boldsymbol{w}^T\boldsymbol{x}+b=\boldsymbol{w}^T\boldsymbol{x}_\perp+\boldsymbol{b}+r\frac{\boldsymbol{w}^T\boldsymbol{w}}{\|\boldsymbol{w}\|}$

  ○ $f(\boldsymbol{x})=f(\boldsymbol{x}_\perp)+r\|\boldsymbol{w}\|$ 为什么？

  ○ $r=\frac{f(x)}{\|\boldsymbol{w}\|}$ 为什么?

✓ $\boldsymbol{x}$的margin是$\frac{|f(x)|}{\|\boldsymbol{w}\|}=\frac{|\boldsymbol{w}^T\boldsymbol{x}+b|}{\|\boldsymbol{w}\|}$

线性支持向量机

- 分类与评价
  - ✓ 怎样分类?
    - $f(\boldsymbol{x}) > 0$----分为正类； $f(\boldsymbol{x}) < 0$----分为负类
    - 那么$f(\boldsymbol{x}) = 0$ 怎么办?
  - ✓ 对于任何一个样例，判断预测的对错？（$y_i = \{-1，1\}$）
    - $y_i f(\boldsymbol{x}_i) > 0$----正确； $y_i f(\boldsymbol{x}_i) < 0$----错误
    - 如果我们假设能完全分开，并且$|y_i| = 1$，那么

$$y_i f(\boldsymbol{x}_i) = |f(\boldsymbol{x}_i)|$$

线性支持向量机

- SVM的形式化描述
  - ✓ SVM的问题是什么？

$$\underset{\boldsymbol{w},b}{\operatorname{argmax}}\left(\min_i\left(\frac{|\boldsymbol{w}^T\boldsymbol{x}_i+b|}{\|\boldsymbol{w}\|}\right)\right) \dashrightarrow r=\frac{|f(x)|}{\|\boldsymbol{w}\|}=\frac{|\boldsymbol{w}^T\boldsymbol{x}+b|}{\|\boldsymbol{w}\|}$$

$$\underset{\boldsymbol{w},b}{\operatorname{argmax}}\left(\min_i\left(\frac{y_i(\boldsymbol{w}^T\boldsymbol{x}_i+b)}{\|\boldsymbol{w}\|}\right)\right) \dashrightarrow y_i f(\boldsymbol{x}_i)=|f(\boldsymbol{x}_i)|$$

$$\underset{\boldsymbol{w},b}{\operatorname{argmax}}\left(\frac{1}{\|\boldsymbol{w}\|}\min_i\big(y_i(\boldsymbol{w}^T\boldsymbol{x}_i+b)\big)\right)$$

  - ✓ 非常难以优化，怎么办？
    - 继续简化

线性支持向量机

- 换个角度看问题
  - ✓ 到目前为止
    - ○ 对$\boldsymbol{w}$没有限制，要求最大化最小的间隔，难优化
  - ✓ 判断对错：如果$yf(\boldsymbol{x}) > 0$即正确
    - ○ 即$\mathrm{y}(\boldsymbol{w}^{\boldsymbol{T}}\boldsymbol{x} + b) > 0$，只需要方向，完全不需要大小！
    - ○ 如果$(\boldsymbol{w}, b)$变为$(c\boldsymbol{w}, cb)$，预测和间隔会变吗？

线性支持向量机

- 换个角度看问题
  - ✓ 选择一个合适$c>0$，使得$\|w\|=1$

$$\max_{\boldsymbol{w},b} \quad \min_{1\le i\le n} y_i f(\boldsymbol{x}_i)$$

$$\text{s.t.} \quad y_i f(\boldsymbol{x}_i) > 0, \qquad 1 \le i \le n$$

$$\boldsymbol{w}^T \boldsymbol{w} = 1\,.$$

仍然难求解！

  - ✓ 假设某个最优解为$(\boldsymbol{w}^\star, b^\star)$，选择$c$为

$$c = \min_{1\le i\le n} y_i((\boldsymbol{w}^\star)^T \boldsymbol{x} + b^\star)$$

两边同时除以c

  - ✓ 那么$\frac{1}{c}(\boldsymbol{w}^\star, b^\star)$也是一个最优解

$$\min_{1\le i\le n} y_i \left(\left(\frac{1}{c} \boldsymbol{w}^\star \right)^T \boldsymbol{x} + \frac{1}{c} b^\star \right) = 1 > 0$$

线性支持向量机

- 换个角度看问题

  ✓ 我们限定$\min_i \left(y_i(\boldsymbol{w}^T\boldsymbol{x}_i + b)\right)$为1，不改变最优目标值

  ○ 问题变为：在限制$\min_i \left(y_i(\boldsymbol{w}^T\boldsymbol{x}_i + b)\right)$为1时，最大化$\frac{1}{\|\boldsymbol{w}\|}$

$$\underset{\boldsymbol{w},b}{\operatorname{argmax}}\left(\min_i\left(\frac{|\boldsymbol{w}^T\boldsymbol{x}_i + b|}{\|\boldsymbol{w}\|}\right)\right)$$

$$\underset{\boldsymbol{w},b}{\operatorname{argmax}}\left(\min_i\left(\frac{y_i(\boldsymbol{w}^T\boldsymbol{x}_i + b)}{\|\boldsymbol{w}\|}\right)\right)$$

$$\underset{\boldsymbol{w},b}{\operatorname{argmax}}\left(\frac{1}{\|\boldsymbol{w}\|}\boxed{\min_i\left(y_i(\boldsymbol{w}^T\boldsymbol{x}_i + b)\right)}\right) \longrightarrow 1$$

$$s.t.\ \ y_i(\boldsymbol{w}^T\boldsymbol{x}_i + b) \geq 1, \forall i$$

线性支持向量机

- 换个角度看问题
  - ✓ 我们限定$\min_i \left(y_i(\boldsymbol{w}^T\boldsymbol{x}_i + b)\right)$为1，不改变最优目标值
    - ○ 问题变为：在限制$\min_i \left(y_i(\boldsymbol{w}^T\boldsymbol{x}_i + b)\right)$为1时，最大化$\frac{1}{\|\boldsymbol{w}\|}$

$$\arg\min_{\boldsymbol{w},b} \quad \frac{1}{2}\boldsymbol{w}^T\boldsymbol{w}$$

$$s.t.\ \ y_i(\boldsymbol{w}^T\boldsymbol{x}_i + b) \geq 1, \forall i$$

线性支持向量机

- 拉格朗日乘子法
  - ✓ $L(\boldsymbol{w}, b, \boldsymbol{a}) = \frac{1}{2}\boldsymbol{w}^T\boldsymbol{w} - \sum_{i=1}^{n} a_i \left(y_i\left(\boldsymbol{w}^T\boldsymbol{x}_i + b\right) - 1\right)$
    - Subject to $a_i \geq 0$
  - ✓ 证明最优化的必要条件

$$\frac{\partial L}{\partial \boldsymbol{w}} = \boldsymbol{0} \quad \Rightarrow \quad \boxed{\boldsymbol{w} = \sum_{i=1}^{n} a_i\, y_i \boldsymbol{x}_i}$$

$$\frac{\partial L}{\partial b} = 0 \quad \Rightarrow \quad 0 = \sum_{i=1}^{n} a_i\, y_i$$

  - ✓ 在此两条件下，将两个等式代入回L

$$\tilde{L}(\boldsymbol{a}) = \sum_{i=1}^{n} a_i - \frac{1}{2}\sum_{i=1}^{n}\sum_{j=1}^{n} a_i a_j y_i y_j \boxed{\boldsymbol{x}_i^T \boldsymbol{x}_j} \quad 内积$$

线性支持向量机

- Karush-Kuhn-Tucker条件，KKT

$$\boldsymbol{w} = \sum_{i=1}^{n} \alpha_i y_i \boldsymbol{x}_i$$

$$\sum_{i=1}^{n} \alpha_i y_i = 0$$

$$\boxed{\alpha_i \left(y_i(\boldsymbol{w}^T \boldsymbol{x}_i + b) - 1\right) = 0 \qquad i = 1, 2, \ldots, n}$$

互补松弛性质

$$\alpha_i \geq 0 \qquad i = 1, 2, \ldots, n$$

$$y_i(\boldsymbol{w}^T \boldsymbol{x}_i + b) \geq 1 \qquad i = 1, 2, \ldots, n$$

✓ 一般而言，KTT条件不是充分必要的；但在原始SVM问题里，这些条件对于确定最优解即是充分又必要的

线性支持向量机

- SVM的对偶形式
  - ✓ 在原来的空间（即输入空间）中
    - ○ 变量是$\boldsymbol{x}_i$，称为SVM的原始形式（primal form）
  - ✓ 现在的问题里面
    - ○ 变量是a_i，即拉格朗日乘子，称为对偶空间（dual space）
    - ○ 对偶空间完成优化后，得到最优的$\boldsymbol{a}^\star$，可以得到原始空间中的最优解$\boldsymbol{w}^\star$
  - ✓ SVM的对偶形式（dual form）

$$\underset{\boldsymbol{a}}{\arg\max} \sum_{i=1}^{n} a_i - \frac{1}{2}\sum_{i=1}^{n}\sum_{j=1}^{n} a_i a_j y_i y_j \boldsymbol{x}_i^T \boldsymbol{x}_j$$

$$s.t. \quad a_i \geq 0$$

$$\sum_{i=1}^{n} a_i y_i = 0 \longrightarrow \frac{\partial L}{\partial b} = 0 \rightarrow 0 = \sum\nolimits_{i=1}^{n} a_i y_i$$

线性支持向量机

- 最优$\boldsymbol{b}^{\star}$和支持向量
  - ✓ 对偶形式下求解$\boldsymbol{w}^{\star}$
    - ○ 对偶空间完成优化后，得到最优的$\boldsymbol{a}^{\star}$，可以得到原始空间中的最优解$\boldsymbol{w}^{\star}$

$$\boldsymbol{w}^{\star} = \sum_{i=1}^{n} a_i^{\star} y_i \boldsymbol{x}_i$$

  - ✓ 对偶形式下求解b*

互补松弛性质 $a_i(y_i(\boldsymbol{w}^T\boldsymbol{x}_i + b) - 1) = 0 \qquad i = 1,2,\ldots,n$

若存在 $a_i > 0$： $y_i(\boldsymbol{w}^T\boldsymbol{x}_i + b) - 1 = 0$

线性支持向量机

- 最优$\boldsymbol{b}^{\star}$和支持向量
  - ✓ 对偶形式下求解b*

互补松弛性质 $a_i(y_i(\boldsymbol{w}^T\boldsymbol{x}_i+b)-1)=0 \qquad i=1,2,\ldots,n$

若存在 $a_i>0$： $y_i(\boldsymbol{w}^T\boldsymbol{x}_i+b)-1=0$

因此，对于特定i： $b_i^{\star}=y_i-(\boldsymbol{w}^{\star})^T\boldsymbol{x}_i$

所有 $a_i>0$的样本，即支持向量：

$$b^{\star}=\sum_{a_i>0} b_i^{\star}$$

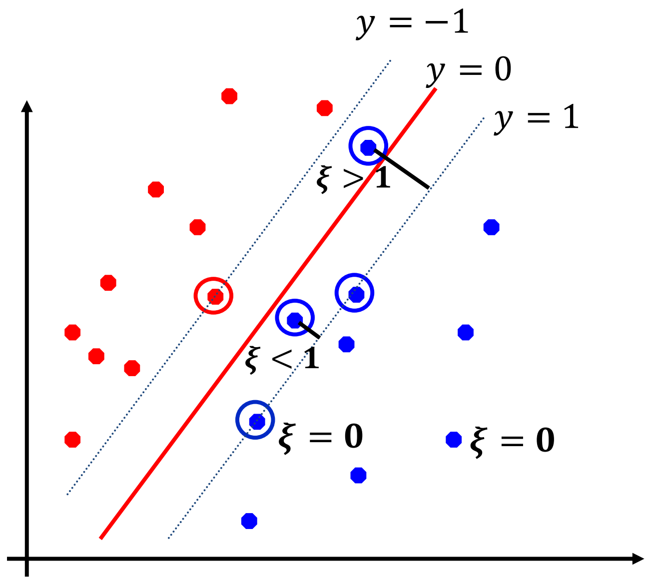
线性支持向量机

- 剩下的问题
  - ✓ 如何最优化？
    - 对偶空间中
    - 原始空间中
  - ✓ 如果能允许少数点$y_i f(\boldsymbol{x}_i) < 1$
    - 如果允许一个点$y_i f(\boldsymbol{x}_i) < 1$，但是大幅度增加margin呢？
  - ✓ 如果不是线性可分的（linearly separable），但是可以用非线性的（non-linearly separable）边界分开？
  - ✓ 如果不是两个类，而是多个呢？

$$\underset{\boldsymbol{w},b}{\operatorname{argmin}} \quad \frac{1}{2}\boldsymbol{w}^T\boldsymbol{w}$$
$$s.t. \quad y_i(\boldsymbol{w}^T\boldsymbol{x}_i + b) \geq 1, \forall i$$

线性支持向量机

- Soft margin
  - ✓ 可以允许少数点margin比1小
    - ○ 但是犯错误是有惩罚的，否则？
    - ○ $y_i(\boldsymbol{w}^T\boldsymbol{x}_i + b) \geq 1 \rightarrow y_i(\boldsymbol{w}^T\boldsymbol{x}_i + b) \geq 1 - \xi_i$
    - ○ ξ_i: 松弛变量（slack variable），即允许犯的错误
    - ○ $\xi_i \geq 0$
    - ○ 右图$\xi = 0$，> 1各自代表什么？



线性支持向量机

- 如何惩罚？
  - ✓ 原始空间（Primal space）

$$
\underset{\boldsymbol{w},b,\xi}{\operatorname{argmin}} \quad \frac{1}{2}\boldsymbol{w}^T\boldsymbol{w} + C\sum_{i=1}^{n}\xi_i
$$

$$
s.t. \quad y_i(\boldsymbol{w}^T\boldsymbol{x}_i + b) \geq 1 - \xi_i
$$

$$
\xi_i \geq 0
$$

  - ✓ $C > 0$: 正则化参数（regularization parameter）
    - ○ ξ_i ---- 代价，我们要最小化代价函数（总代价）
    - ○ $\frac{1}{2}\boldsymbol{w}^T\boldsymbol{w}$ ---- 正则项（ regularization term），对分类器进行限制，使得模型复杂度不至于太高（另一个角度，还是最大化间隔）
    - ○ 那么，如何确定C的值？

线性支持向量机

- Soft margin的对偶形式

$$\underset{\boldsymbol{a}}{\operatorname{argmax}} \sum_{i=1}^{n} a_i - \frac{1}{2}\sum_{i=1}^{n}\sum_{j=1}^{n} a_i a_j y_i y_j \boldsymbol{x}_i^T \boldsymbol{x}_j$$

$$s.t. \qquad C \geq a_i \geq 0$$

$$\sum_{i=1}^{n} a_i\, y_i = 0$$

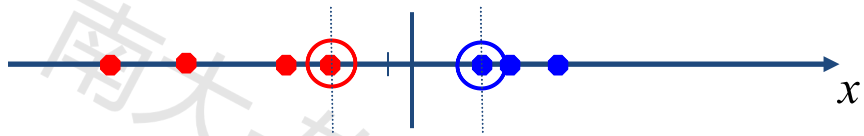
✓ 对偶形式仅依赖于内积！

线性支持向量机

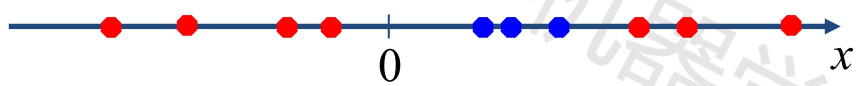
- 总结
  - ✓ 分类器是一个分离超平面（separating hyperplane ）
  - ✓ 最重要的训练样本是“支持向量”，它们定义了超平面，而其他训练样本被忽略了。二次优化算法可以识别哪些样本是具有非零朗格朗日乘子a_i的支持向量
  - ✓ 对偶问题中，训练样本只以内积形式出现。

非线性支持向量机

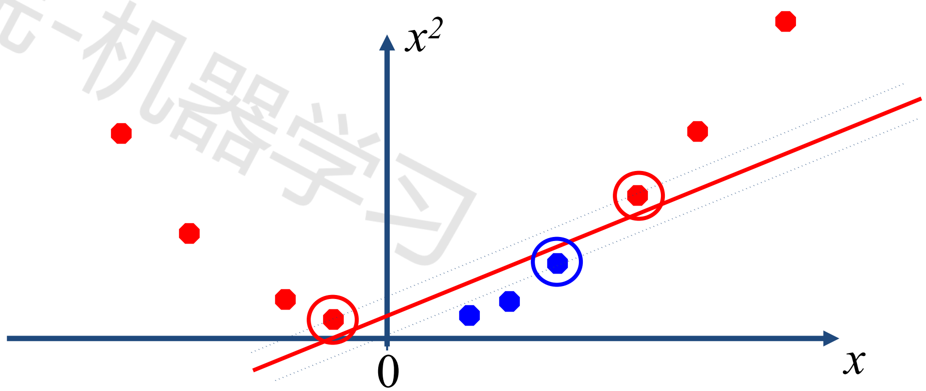
- ✓ 数据集是线性可分，效果会很好



- ✓ 数据集太困难了，怎么办？

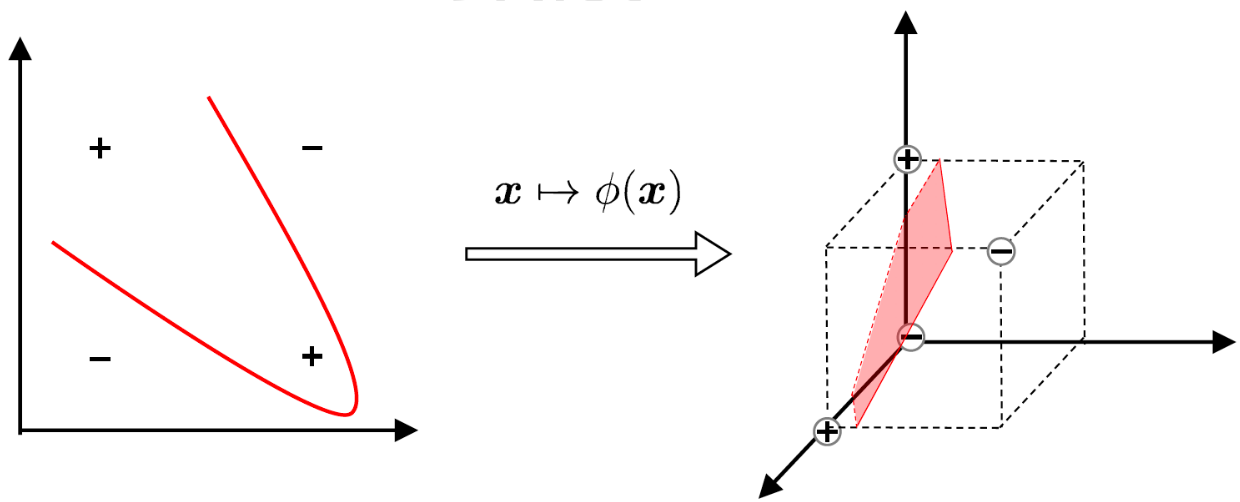


- ✓ 如果把数据映射到高纬空间里？



非线性支持向量机

- 特征空间映射
  - ✓ 将样本从原始空间映射到一个更高维的特征空间，使样本在这个特征空间内线性可分



  - ✓ 如果原始空间是有限维(属性数有限)，那么一定存在一个高维特征空间使样本可分

非线性支持向量机

- 内积：线性和非线性的联系
  - ✓ 线性和非线性有时候紧密联系在一起----通过内积
  - ✓ $\boldsymbol{x} = (x_1, x_2), \boldsymbol{z} = (z_1, z_2)$

$$K(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{z}) = (1 + \boldsymbol{x}^T \boldsymbol{z})^2 = (1 + x_1 z_1 + x_2 z_2)^2$$

$$= 1 + 2x_1 z_1 + 2x_2 z_2 + x_1^2 z_1^2 + x_2^2 z_2^2 + 2x_1 z_1 x_2 z_2$$

$$= \begin{pmatrix} 1 \\ \sqrt{2}x_1 \\ \sqrt{2}x_2 \\ x_1^2 \\ x_2^2 \\ \sqrt{2}x_1 x_2 \end{pmatrix}^T \begin{pmatrix} 1 \\ \sqrt{2}z_1 \\ \sqrt{2}z_2 \\ z_1^2 \\ z_2^2 \\ \sqrt{2}z_1 z_2 \end{pmatrix}$$

非线性支持向量机

- Kernel trick
  - ✓ 两个向量$\boldsymbol{x}, \boldsymbol{y} \in \mathbb{R}^d$，一个非线性函数$K(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{y})$
  - ✓ 对于满足某些条件的函数K，一定存在一个映射（mapping）$\emptyset: \mathbb{R}^d \rightarrow \Phi$，使得对任意$\boldsymbol{x}, \boldsymbol{y}$

$$K(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{y}) = \emptyset(\boldsymbol{x})^T \emptyset(\boldsymbol{y})$$

    - ○ 非线性函数K表示两个向量的相似程度
    - ○ 其等价于$\emptyset$里面的内积
  - ✓ Φ：特征空间（feature space）
    - ○ 可以是有限维的空间，但也可以是无穷维的空间（infinite dimensional Hilbert space）

非线性支持向量机

- 什么样的限制条件
  - ✓ 必须存在特征映射（feature mapping），才可以将非线性函数表示为特征空间中的内积
  - ✓ Mercer's condition（Mercer条件，是充分必要的）：
    - 对任何满足$\int g^2(\boldsymbol{u})d\boldsymbol{u} < \infty$的非零函数（平方可积函数），对称函数$K$满足条件：

$$\iint K(\boldsymbol{u},\boldsymbol{v})g(\boldsymbol{u})g(\boldsymbol{v})\,d\boldsymbol{u}d\boldsymbol{v} \geq 0$$

  - ✓ 另一种等价形式：
    - 对任何一个样本集合$\{x_1,\dots,x_n\}, x_i \in \mathbb{R}^d$，如果矩阵$K = [K_{ij}]_{ij}$（矩阵的第$i$行、第$j$列元素$K_{ij} = K(x_i, x_j)$）总是半正定的，那么函数$K$满足Mercer条件

非线性支持向量机

- 核支持向量机Kernel SVM
  - ✓ 核函数（kernel function）: K
  - ✓ 对偶形式：

$$\underset{\boldsymbol{a}}{\operatorname{argmax}} \sum_{i=1}^{n} a_i - \frac{1}{2} \sum_{i=1}^{n} \sum_{j=1}^{n} a_i a_j y_i y_j K(\boldsymbol{x}_i, \boldsymbol{x}_j)$$

  - ✓ 分类边界：　$\boldsymbol{w} = \sum_{i=1}^{n} a_i \, y_i \phi(\boldsymbol{x}_i)$
  - ✓ 怎样预测：

$$\boldsymbol{w}^T \phi(\boldsymbol{x}) = \phi(\boldsymbol{x})^T \left(\sum_{i=1}^{n} a_i \, y_i \phi(\boldsymbol{x}_i)\right) = \sum_{i=1}^{n} a_i \, y_i K(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{x}_i)$$

    - ○ 线性：$\boldsymbol{w} = \sum_{i=1}^{n} a_i y_i \boldsymbol{x}_i$，$\boldsymbol{w}^T x$的计算量为$O(d)$
    - ○ 非线性（核）方法测试所需时间为？
    - ○ 假设计算K的时间为$O(d)$，是$O(nd)$吗？

非线性支持向量机

- 非线性核

  ✓ 线性核（linear kernel），dot-product kernel:

  $$K(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{y}) = \boldsymbol{x}^T \boldsymbol{y}$$

  ✓ 非线性核（non-linear kernel）

  - RBF (radial basis function)/高斯（Gaussian）核

    $$K(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{y}) = \exp(-\gamma \|\boldsymbol{x} - \boldsymbol{y}\|^2)$$

  - 多项式核

    $$K(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{y}) = (\gamma \boldsymbol{x}^T \boldsymbol{y} + c)^d$$

  - 。。。

非线性支持向量机

- 非线性核
  - ✓ $\boldsymbol{x} = (x_1, x_2), \boldsymbol{z} = (z_1, z_2)$

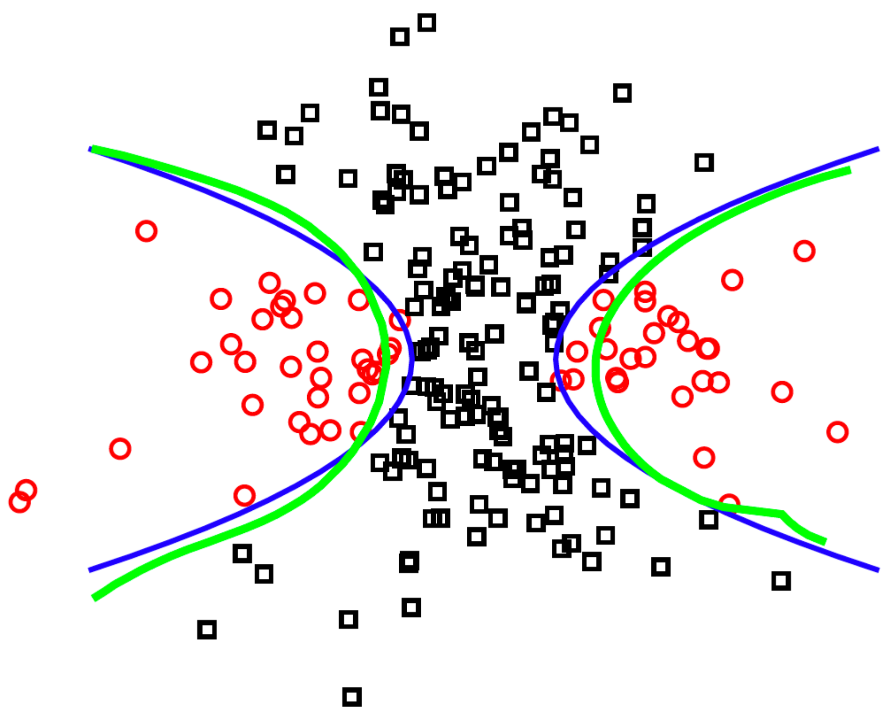
$\gamma = 1, c = 1, d = 2$
多项式kernel的一个特例

$$
\begin{aligned}
K(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{z}) &= (1 + \boldsymbol{x}^T \boldsymbol{z})^2 = (1 + x_1 z_1 + x_2 z_2)^2 \\
&= 1 + 2x_1 z_1 + 2x_2 z_2 + x_1^2 z_1^2 + x_2^2 z_2^2 + 2x_1 z_1 x_2 z_2 \\
&= \begin{pmatrix} 1 \\ \sqrt{2}x_1 \\ \sqrt{2}x_2 \\ x_1^2 \\ x_2^2 \\ \sqrt{2}x_1 x_2 \end{pmatrix}^T \begin{pmatrix} 1 \\ \sqrt{2}z_1 \\ \sqrt{2}z_2 \\ z_1^2 \\ z_2^2 \\ \sqrt{2}z_1 z_2 \end{pmatrix}
\end{aligned}
$$

2维空间被映射到6维空间！

非线性支持向量机

- 非线性核的例子（RBF）
  - Ground Truth boundary 真实分类边界
  - 使用RBF核的SVM得到的分类边界



非线性支持向量机

- **超参数**
  - ✓ 如何决定C、γ、…
    - 必须给定这些参数的值，才能进行SVM学习，SVM本身不能学习这些参数
    - 称为超参数（hyper-parameter）
    - 对SVM的结果有极大的影响
  - ✓ 用交叉验证在训练集上学习
    - 在训练集上得到不同参数的交叉验证准确率
    - 选择准确率最高的超参数的数值

多类支持向量机

- 多类（Multiclass）
  - ✓ 思路：转化为2类问题
  - ✓ $1-vs.-1$（one versus one）：
    - ○ C个类$\{1,2,\dots,C\}$
    - ○ 设计$\binom{C}{2}$个分类器，用i和j两类$(i\ >j)$的训练数据进行学习
    - ○ 一共$C(C-1)/2$个，其中每个类出现$C-1$次
    - ○ 对测试样本$\boldsymbol{x}$，一共会得到$C(C-1)/2$个结果，然后投票
    - ○ 对每个分类器f_i采用其二值输出，即$\mathrm{sign}(f_i(\boldsymbol{x}))$

	1	2	3
1			
2	1		
3	1	3	

多类支持向量机

- 多类（Multiclass）
  - ✓ $1-vs.-all$（或$1-vs.-\text{rest}$）：
    - ○ 设计C个分类器，第i个分类器用类i做正类，把其他所有$C-1$个类别的数据合并在一起做负类
      - ❖ 和交叉验证的步骤有些类似
      - ❖ 每个新的分类器f_i采用其实值输出，即$f_i(\boldsymbol{x})$
    - ○ $f_i(\boldsymbol{x})$的实数输出可以看成是属于第i类的“信心”(confidence)
    - ○ 最终选择信心最高的那个类为输出

$$\underset{i}{\operatorname{argmax}} f_i(\boldsymbol{x})$$

多类支持向量机

- 多类（Multiclass）
  - ✓ 直接解决多类问题
    - Crammer-Singer方法
    - http://jmlr.org/papers/v2/crammer01a.html
  - ✓ DAGSVM
    - https://www.microsoft.com/en-us/research/wp-content/uploads/2016/02/dagsvm.pdf
  - ✓ ECOC
    - https://arxiv.org/pdf/cs/9501101.pdf

支持向量机的实现

- ✓ SVM Website: http://www.kernel-machines.org/
- ✓ 代表性实现
  - ○ **LIBSVM**: 非常有效且出名的SVM实现，实现了multi-class classifications, nu-SVM, one-class SVM等，而且有很多java、python等接口
  - ○ **SVM-light**: 简单但是性能不如LIBSVM，仅支持二分类，并且只用C语言实现
  - ○ **SVM-torch**: C语言实现

支持向量机的启发

- 从SVM的介绍学到的思想？

1. 确定问题，对问题有充分的认识（实践、理论）
2. 好的思路、想法idea（如margin）
   - 从理论（概率、统计？）中来
   - 从实践（已有线性分类器的缺点，如感知机）中来
3. 形式化
   - 用精确的数学形式表达出来
   - 如果不能精确描述，或说明你的idea有问题
   - 简化，开始时避免复杂、模糊的想法：限制条件（如，线性可分），从较小范围开始（如，2类）
4. 数学基础和研究
   - 用到的几何、凸优化、拉格朗日乘子法、Hilbert空间。。。
   - 经典的相关数学背景要熟悉：至少知道到哪里查

支持向量机的启发

- 简化：一种可靠的思路
  - ✓ 问题（特别是数学问题）难以解决时，尽量简化
    - 问题的表述，如果难以形式化，可以将问题简化
    - 简化后的问题可以去除很多复杂的考虑，但是原问题的核心要保持
    - 如SVM从二类、线性、可分的情况开始
  - ✓ 有时可以通过换思路的方法等价简化
    - 如SVM限定$\min_i \left(y_i(\boldsymbol{w}^T \boldsymbol{x}_i + b)\right)$为1
    - 也可以对原问题做不重复的修改以使简化成为可能

支持向量机的延伸

- 深度学习时代的SVM？

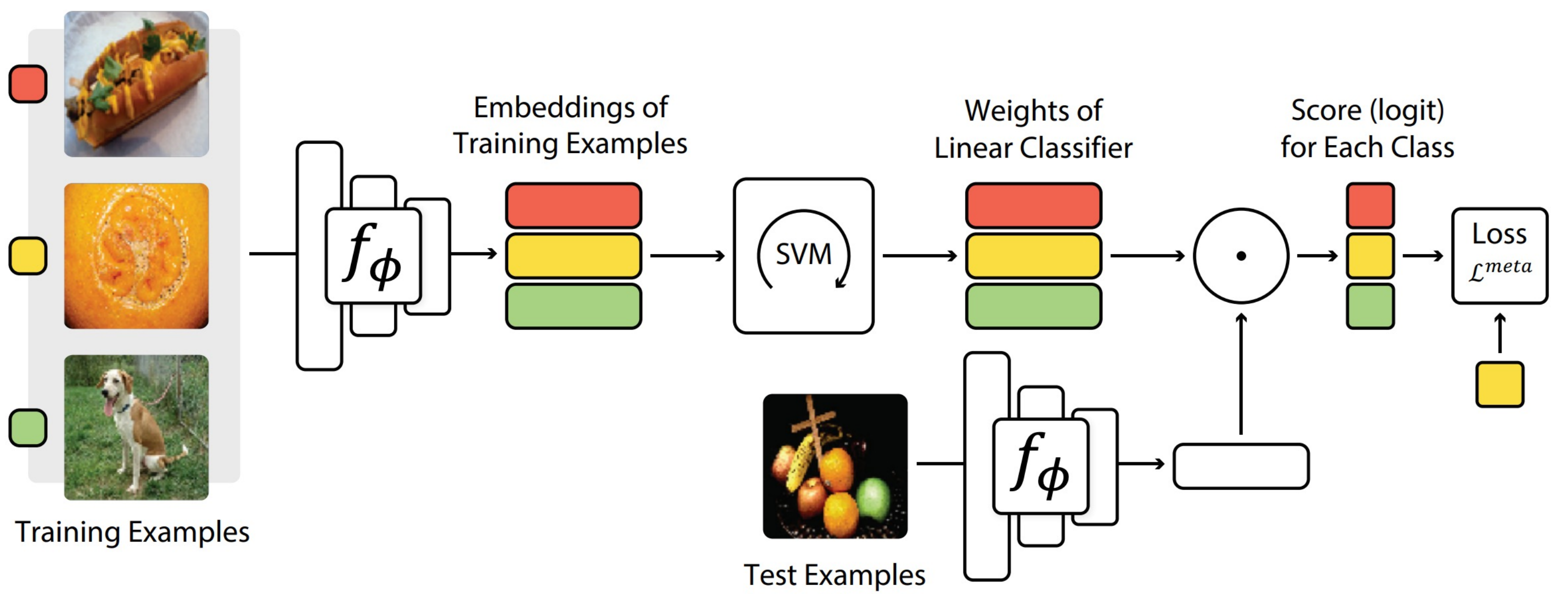


Figure 1. **Overview of our approach.** Schematic illustration of our method MetaOptNet on an 1-shot 3-way classification task. The meta-training objective is to learn the parameters ϕ of a feature embedding model f_ϕ that generalizes well across tasks when used with regularized linear classifiers (*e.g.*, SVMs). A task is a tuple of a few-shot training set and a test set (see Section 3 for details).

Lee K, Maji S, Ravichandran A, et al. Meta-learning with differentiable convex optimization. CVPR 2019: 10657-10665.

谢 谢！