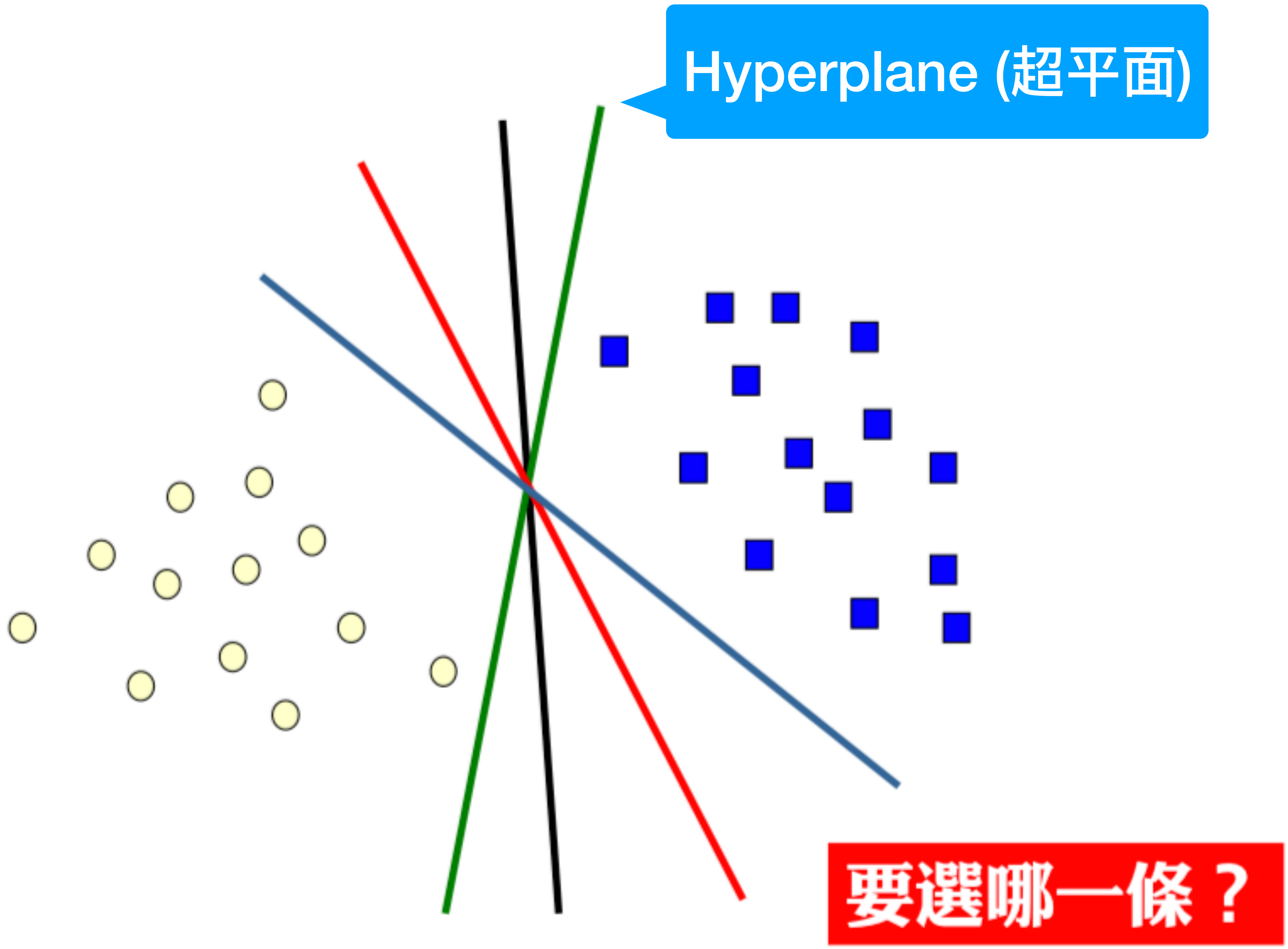
機器學習

Lecture 7 Support Vector Machines (SVM)

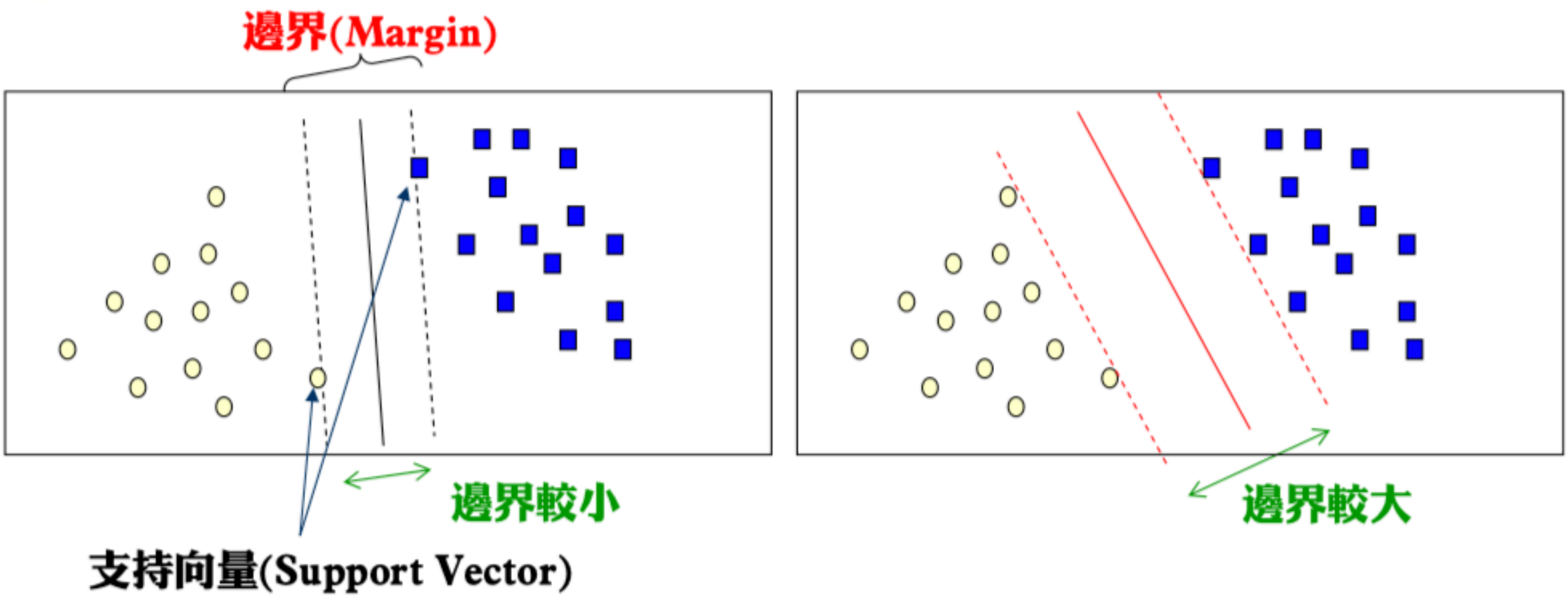
Support Vector Machines



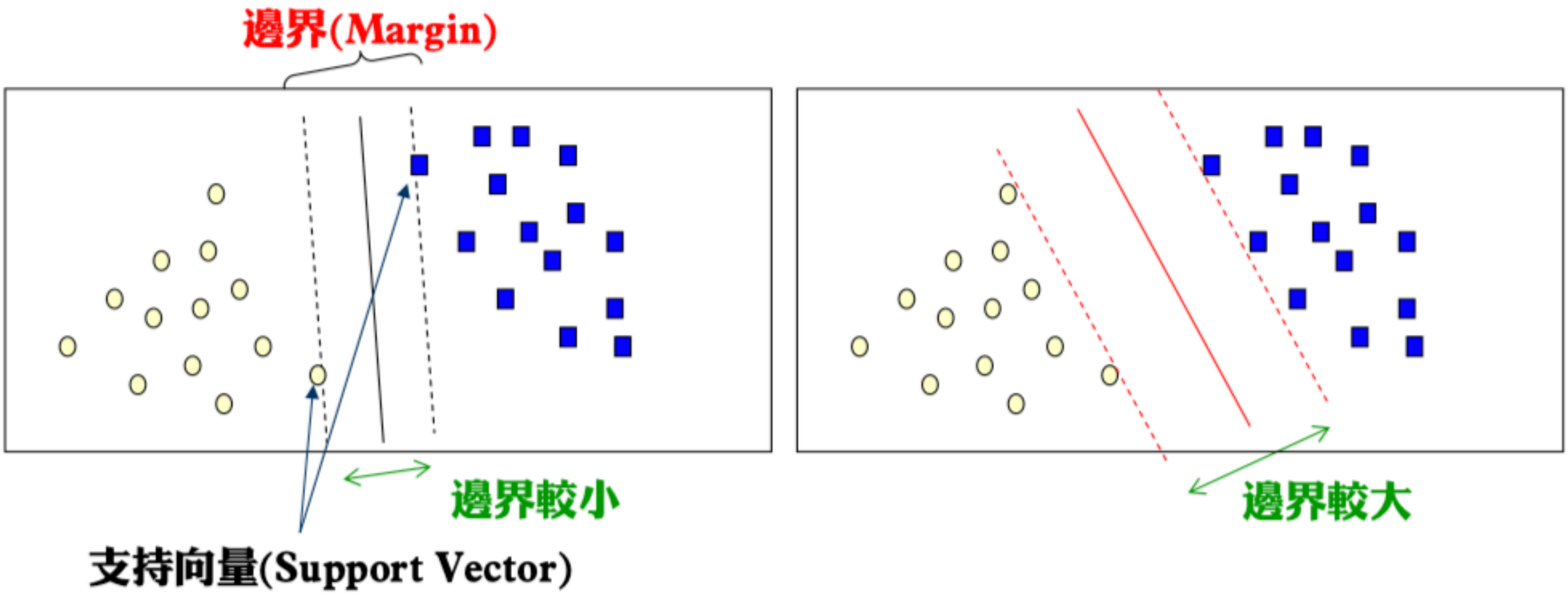
Support Vector Machines

想找到最佳分界線，必須先找出距離另一組資料最近的邊緣資料點

因為最佳分界線由這些邊緣資料點所「支撐」，所以他們被稱為支持向量（Support Vectors）



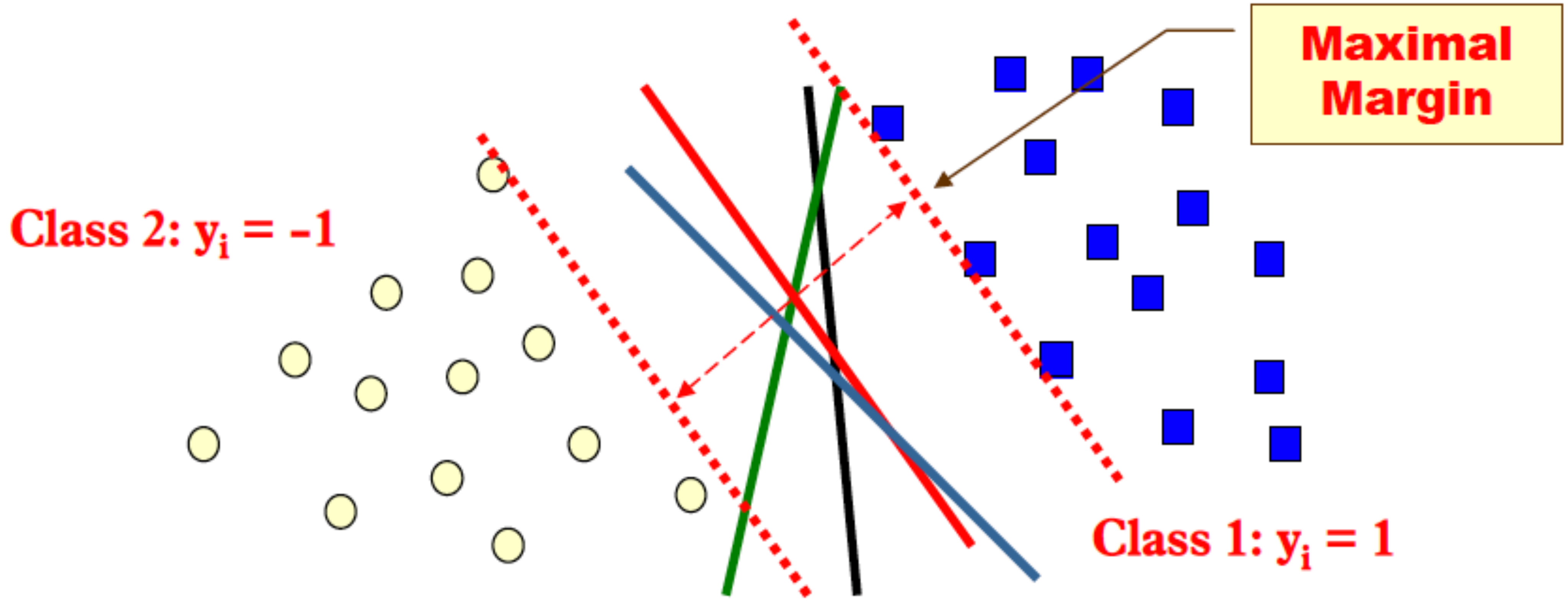
Support Vector Machines



- 選擇**邊界較大**者。
  - 邊界較大者，其推論錯誤率優於邊界較小者，這是因為邊界如果太小，那麼任何些微的變動都會引起顯著的影響。

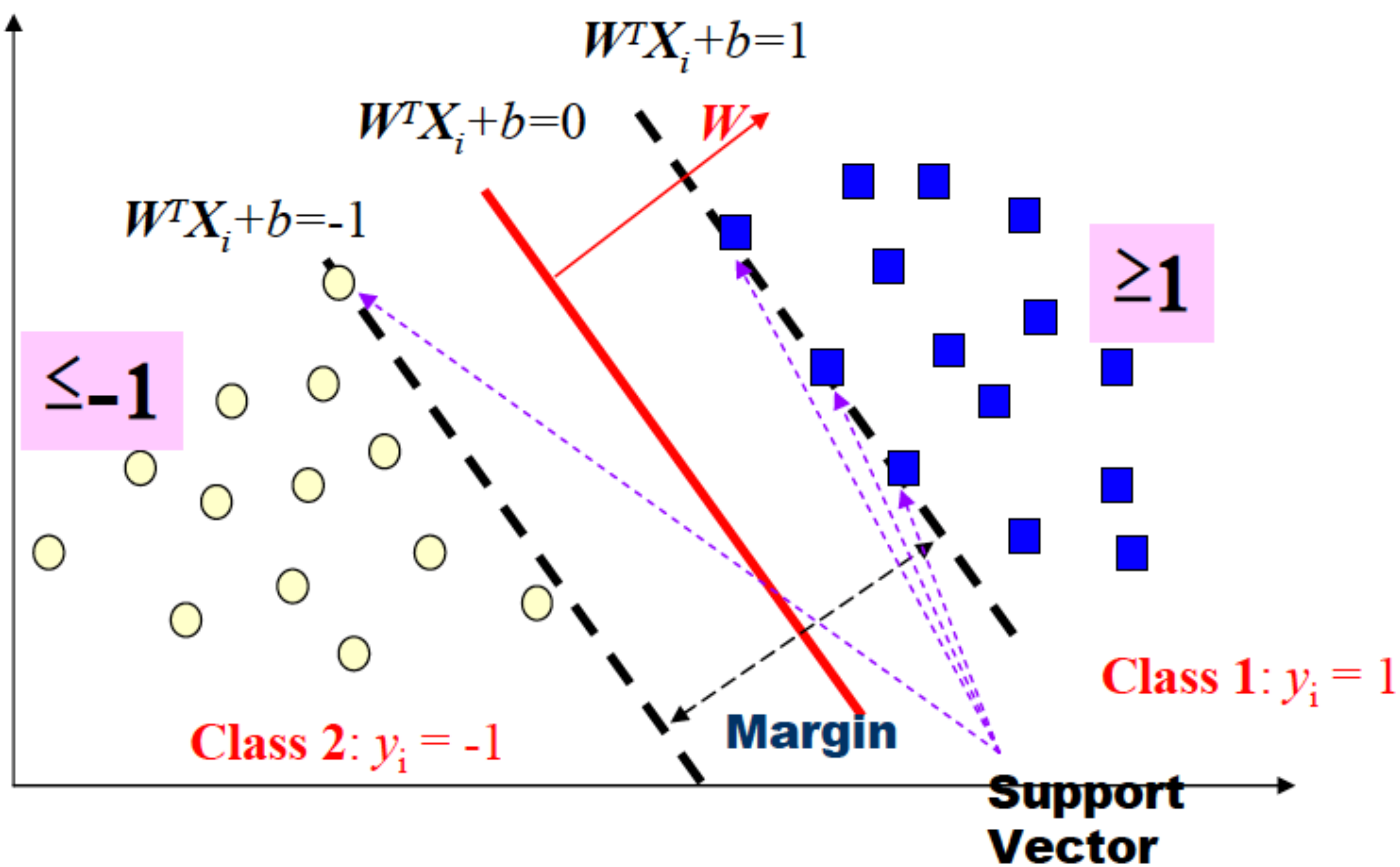
SVM - Linearly Separable

- 我們希望能夠找到一條直線，能將所有 $y_i = -1$ 及 $y_i = 1$ 的訓練資料分別落在此直線的兩側。
  - 此直線稱為分割超平面 (Separating Hyperplane)。
  - Separating Hyperplane往兩側延伸，可以得到兩條平行的直線邊界，稱為Support Hyperplane (支持超平面)。兩個平行的Support Hyperplane間之距離稱為Margin。Margin愈大愈好。
  - 具最大Margin之分割超平面稱為Optimal Separating Hyperplane



SVM - Linearly Separable

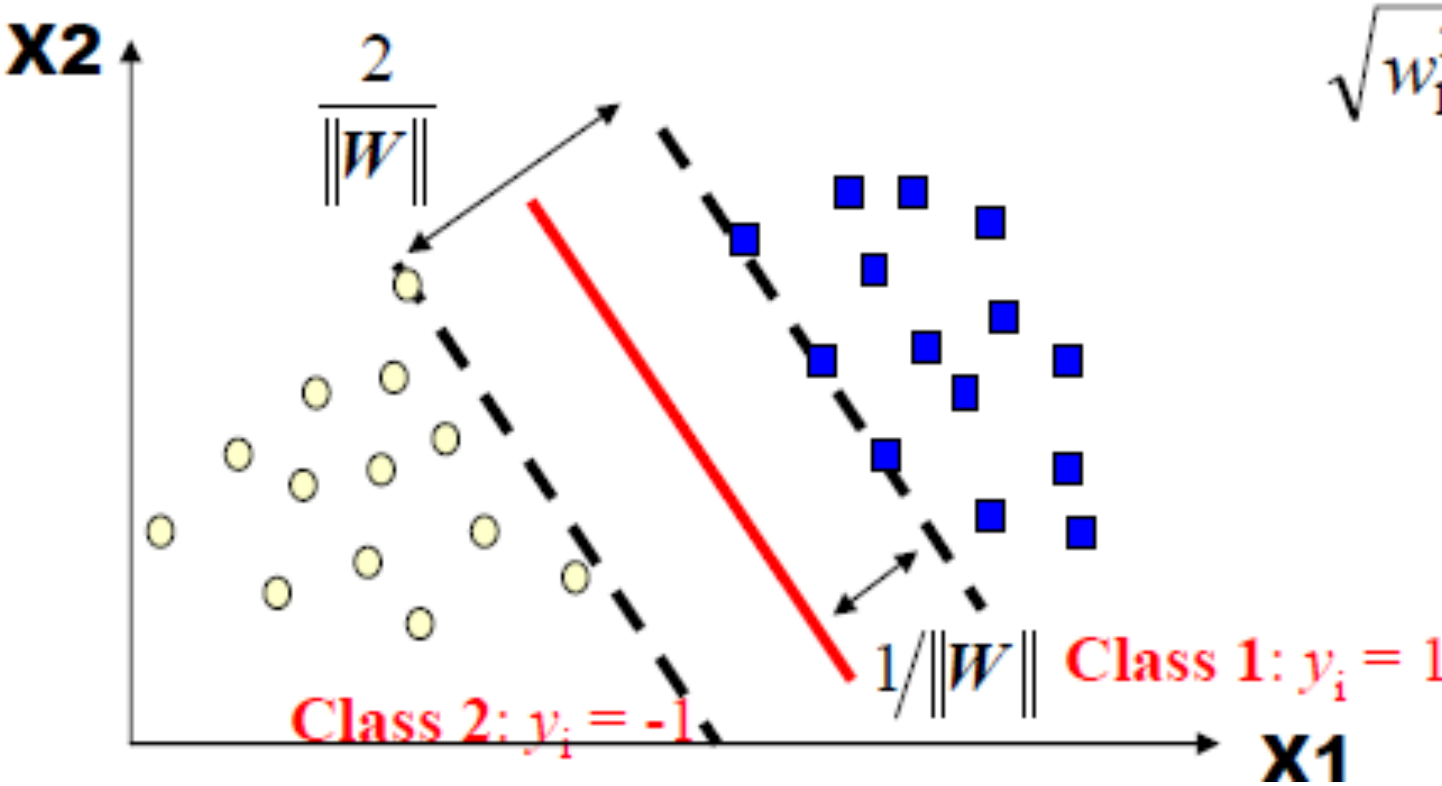
- **目標：Max(Margin)**
  - **由於法向量W和截距b皆會變動。因此希望找出相對應的法向量W和截距b，所構成的直線$W^TX_i+b=0$可使得Margin最大**



SVM - Linearly Separable

- **設計原始問題的目標函數：**
  - **找出兩個邊界之Margin最大化。即求上述兩個公式之等式的距離 (假設資料位於二維空間)：**
    - **公式1的等式：** $W^TX_i+b = 1 \Rightarrow w_1x_1+w_2x_2+(b-1) = 0$
    - **公式2的等式：** $W^TX_i+b = -1 \Rightarrow w_1x_1+w_2x_2+(b+1) = 0$
  - **上述兩平行直線公式的距離為：**

$$\frac{|(b-1)-(b+1)|}{\sqrt{w_1^2+w_2^2}} = \frac{2}{\sqrt{w_1^2+w_2^2}} = \frac{2}{\sqrt{W^TW}} = \frac{2}{\|W\|}$$



SVM - Linearly Separable

- 我們要求上述距離$2/\|W\|$最大化，就類似於將下述公式最小化：

$$f(W)=\frac{\|W\|^2}{2}$$

- **所以，原始的最佳化問題模式如下所示：**

$$\text{Min.} \quad \frac{\|W\|^2}{2}$$

$$\text{Subject to} \quad y_i\,(W^T X_i + b) \geq +1,\ i = 1 \ldots N$$

這就是SVM所要解決的主要問題(Primal Problem)。

可用 Karush-Kuhn-Tucker (KKT) Conditions Method
求出最好的 W* 和 b*

logistic regression v.s. linear SVM

- 實務上，linear logistic regression 和 linear SVM 常會產生相似的結果

Logistic Regression

- 觀察 $\hat{y} = P(y = 1 | x)$
  - 若 y = 1: 希望 $P(y = 1 | x)$ 越大越好
  - 若 y = 0: 希望 $P(y = 0 | x)$ 越大越好

x	y	機率
(80, 150)	0	希望 $P(y = 0 \| x)$ 越大越好
(35, 130)	0	希望 $P(y = 0 \| x)$ 越大越好
(160, 20)	1	希望 $P(y = 1 \| x)$ 越大越好
(125, 30)	1	希望 $P(y = 1 \| x)$ 越大越好

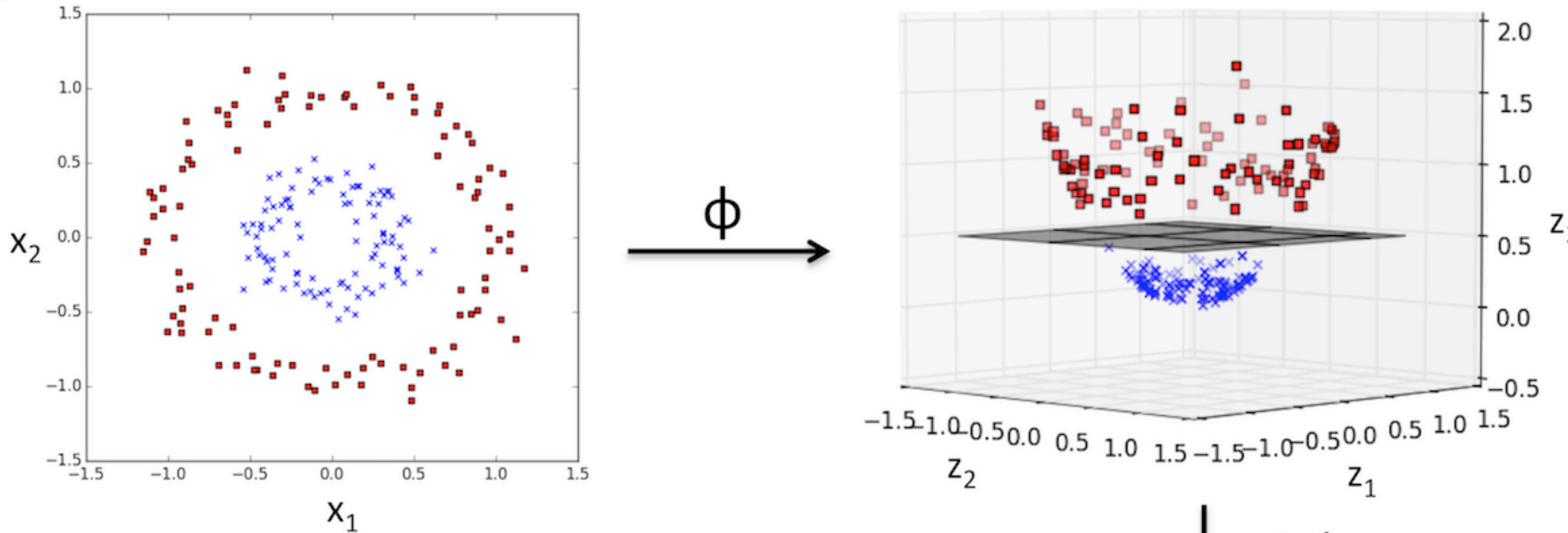
Goal: Maximize

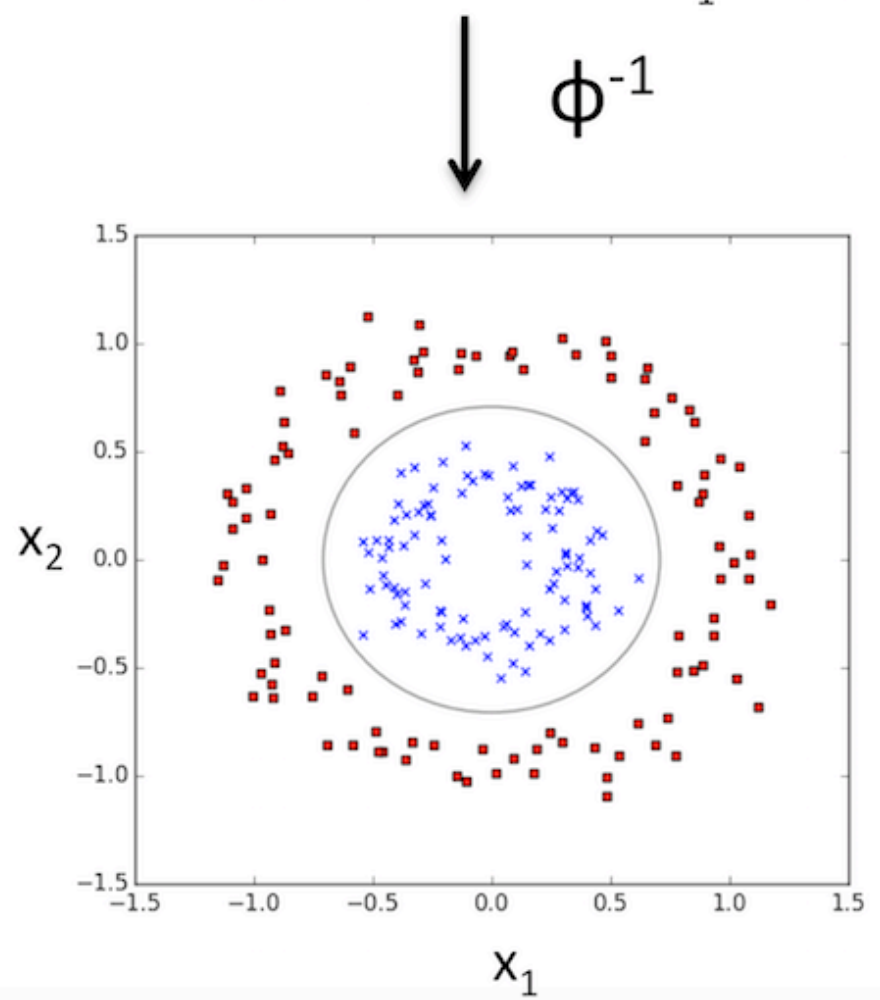
$$P(y^{(1)} = 0 | x^{(1)}) P(y^{(2)} = 0 | x^{(2)}) P(y^{(3)} = 1 | x^{(3)}) P(y^{(4)} = 1 | x^{(4)})$$

logistic regression v.s. linear SVM

- 實務上，linear logistic regression 和 linear SVM 常會產生相似的結果
- 但因 logistic regression 試圖最大化訓練數據集的條件概似(conditional likelihood)，所以較容易受離群值影響；而SVM 主要在意那些非常接近決策邊界的點(支援向量)

Kernel SVM: 非線性分類問題



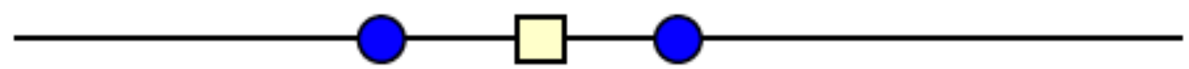


https://youtu.be/3liCbRZPrZA

Python Machine Learning by Sebastian Raschka, Vahid Mirjalili

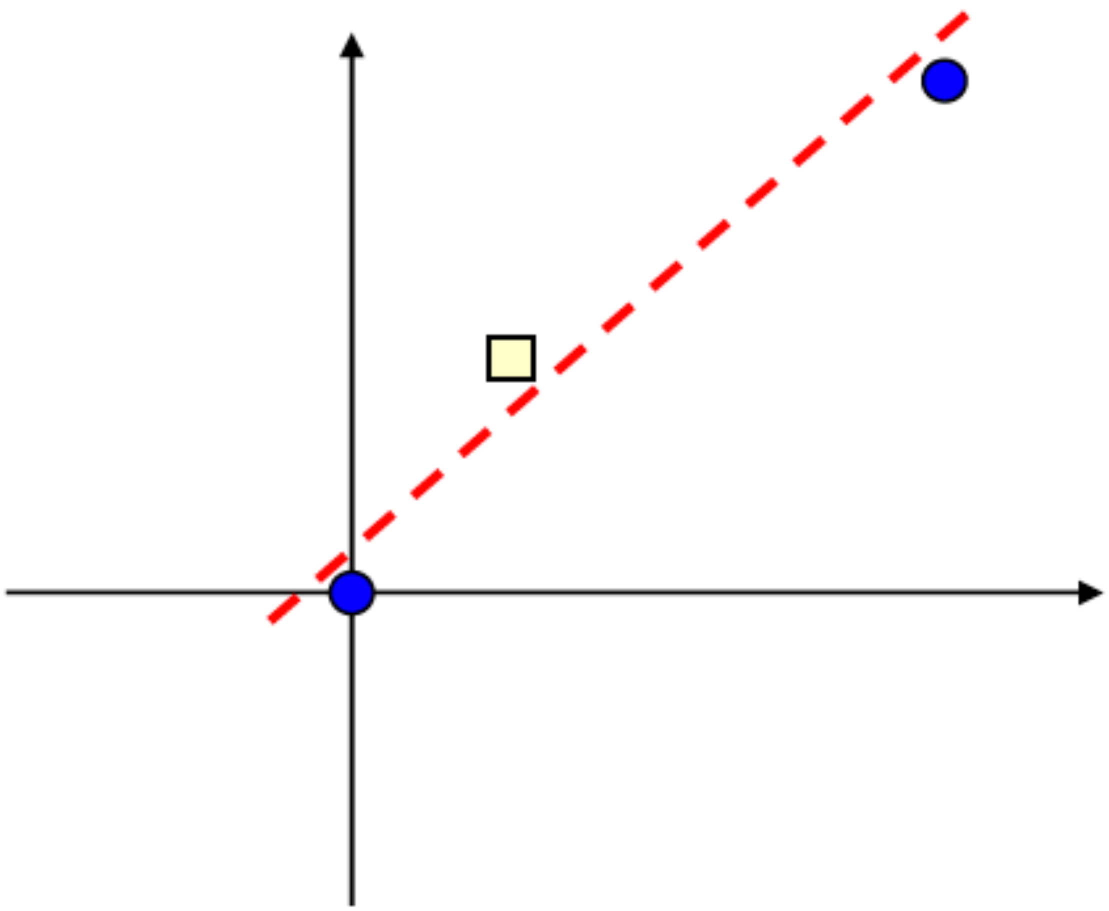
Kernel methods

- **有三個一維資料：**$X_1 = 0, X_2=1, X_3=2$**，這三個資料在一維空間**R^1**之下是線性不可分的** (Nonseparable)



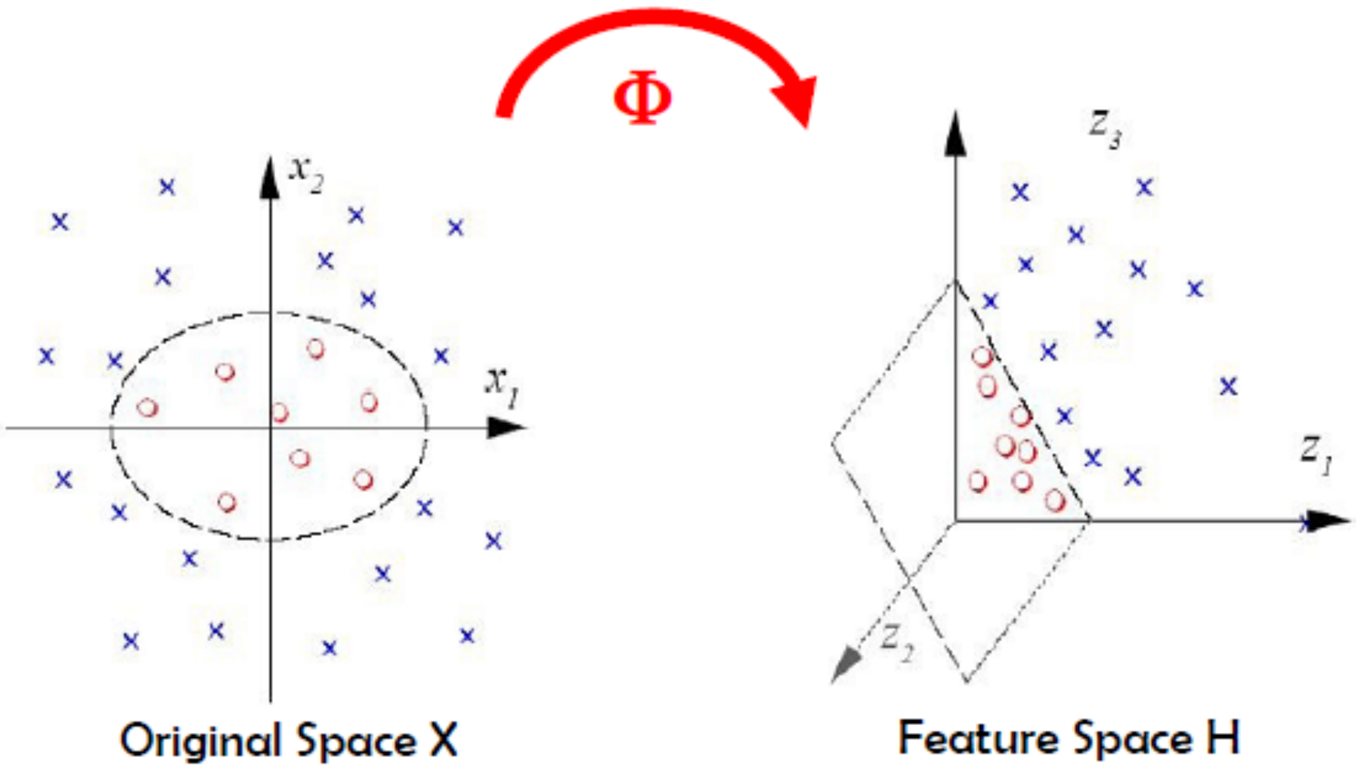
- **將這三個資料透過一個函數** $\Phi(X) = (X^2, \sqrt{2}X)$ **轉換到二維空間**R^2**中，即為線性可分割的**(Separable)

$$\Phi(X_1) = (0, 0)$$
$$\Phi(X_2) = (1, \sqrt{2})$$
$$\Phi(X_3) = (4, 2\sqrt{2})$$



Kernel methods

- 精神：
  - 在原始空間 X (Original Space) 不好區分的資料(無法線性區分)，可以用一個非線性的映射函數Φ，將這些資料轉換到另一個空間 H (特徵空間；Feature Space)，或許比較好區分 (可線性區分)。
  - 特徵空間不一定是更高維的空間，但通常愈高維，資料可以分得愈開。



常用的核函數

- **Linear Kernel (線性核函數)**
  - $k(X_i, X_j) = <X_i, X_j>$
- **Polynomial Kernel (多項式核函數)**
  - $k(X_i, X_j) = (<X_i, X_j>+1)^p$, $P \in Z^+$
- **Gaussian Kernel (高斯核函數)**
  - $k(X_i, X_j) = e^{[-\|X_i - X_j\|^2/(2\sigma^2)]}$

Radial Basis Function kernel (RBF)

- **上述多項式核函數中有一個參數P，而高斯核函數有一個參數σ。若使用這些函數時，參數設定值不同，則所對應到的特徵空間也會不同!!哪一個比較好，就是一個重要的研究課題。**

SVM的優缺點

- 優點
  - SVM對不同類型的數據集都有不錯的表現

- 缺點
  - 當樣本數太大時，SVM很耗費時間
  - 對資料預處理以及參數調節的要求很高

★三個重要的參數

1. 核函數
2. 核函數的參數 （ex. RBF的gamma值）
3. 正規化的參數 （C）