六、支持向量机

主讲教师：周志华

SVM 与统计学习简史

V. Vapnik (1936-)

1963：Vapnik 提出支持向量的概念

1968：Vapnik 和 Chervonenkis 提出 VC 维

1974：提出结构风险最小化原则

… … 苏联解体前一年(1990), Vapnik 来到美国

1995：Support Vector Network 文章发表

1995：《The Nature of Statistical Learning》出版

1998: SVM 在文本分类上取得巨大成功

1998：《Statistical Learning Theory》出版

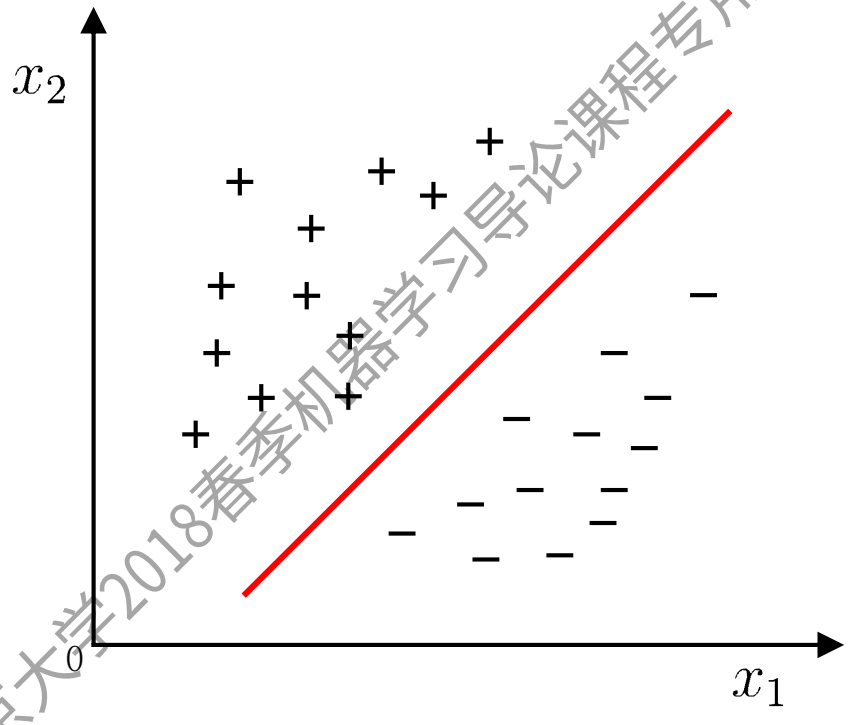
… …

“ Nothing is more practical than a good theory ”

-- V. Vapnik

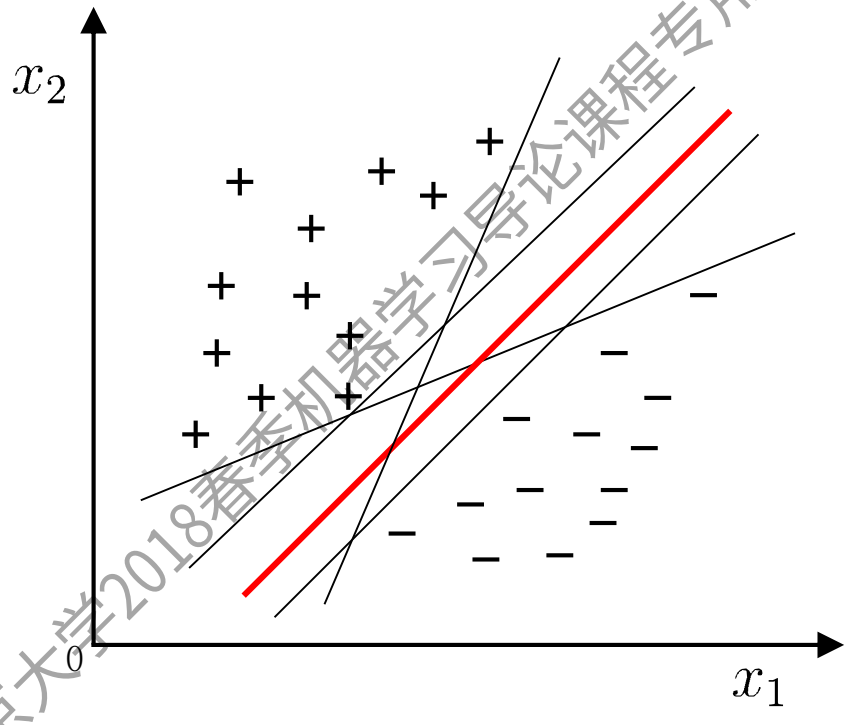
线性分类器回顾

在样本空间中寻找一个超平面，将不同类别的样本分开



线性分类器回顾

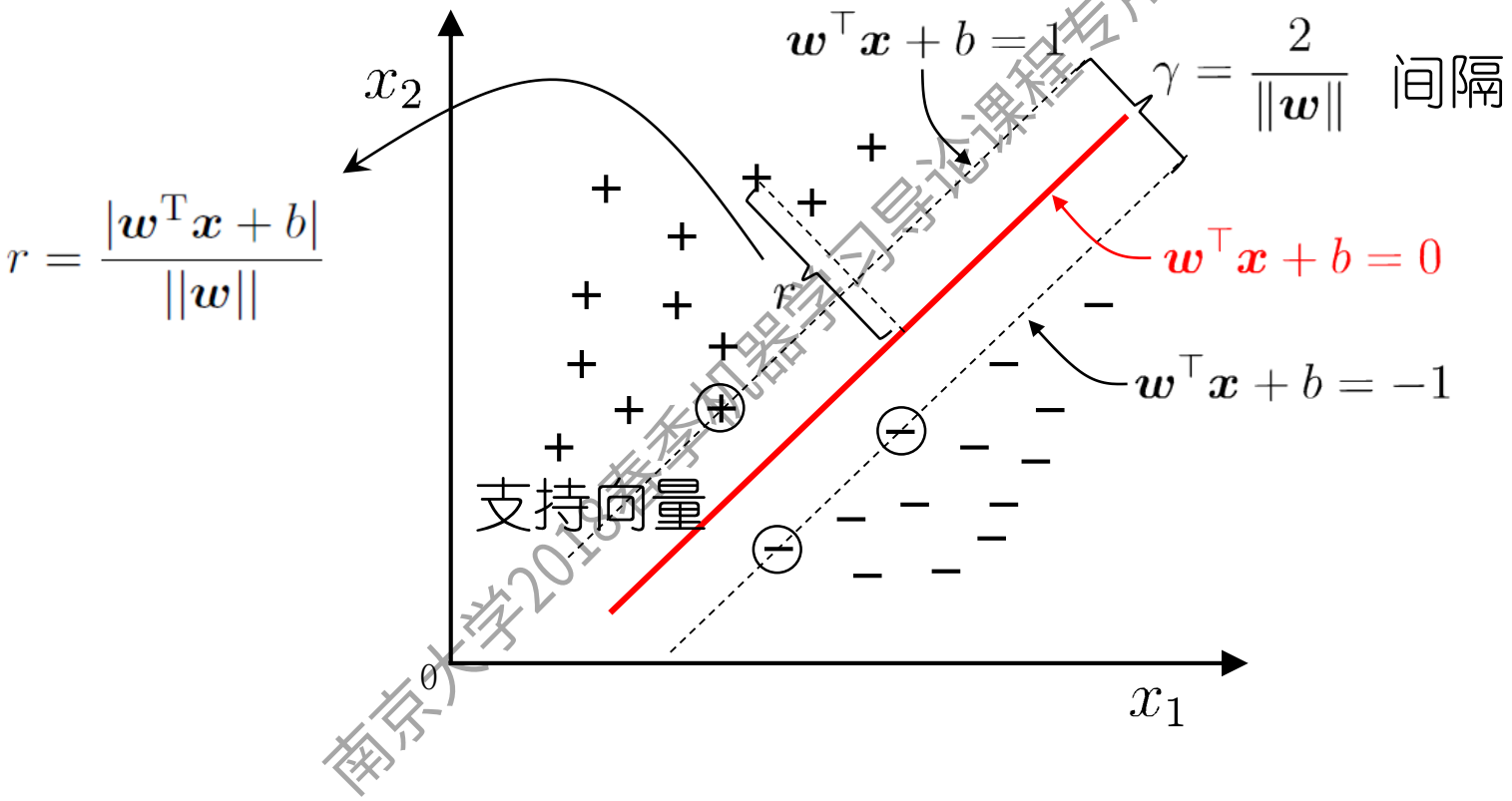
将训练样本分开的超平面可能有很多，哪一个更好呢?



"正中间"的：鲁棒性最好，泛化能力最强

间隔(margin)与支持向量(support vector)

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

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

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

凸二次规划问题，能用优化计算包求解，但可以有更高效的办法

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

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

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

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

- 第三步：回代可得

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

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

求解方法 - SMO

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

$$\alpha_i y_i + \alpha_j y_j = c\,, \quad \alpha_i \geqslant 0, \quad \alpha_j \geqslant 0$$

用 α_i 表示 α_j，代入对偶问题

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

有闭式解！

对任意支持向量 $(\boldsymbol{x}_s, y_s)$ 有 $y_s f(\boldsymbol{x}_s) = 1$，由此可解出 b

为提高鲁棒性，通常使用所有支持向量求解的平均值

解的稀疏性

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

KKT条件：

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

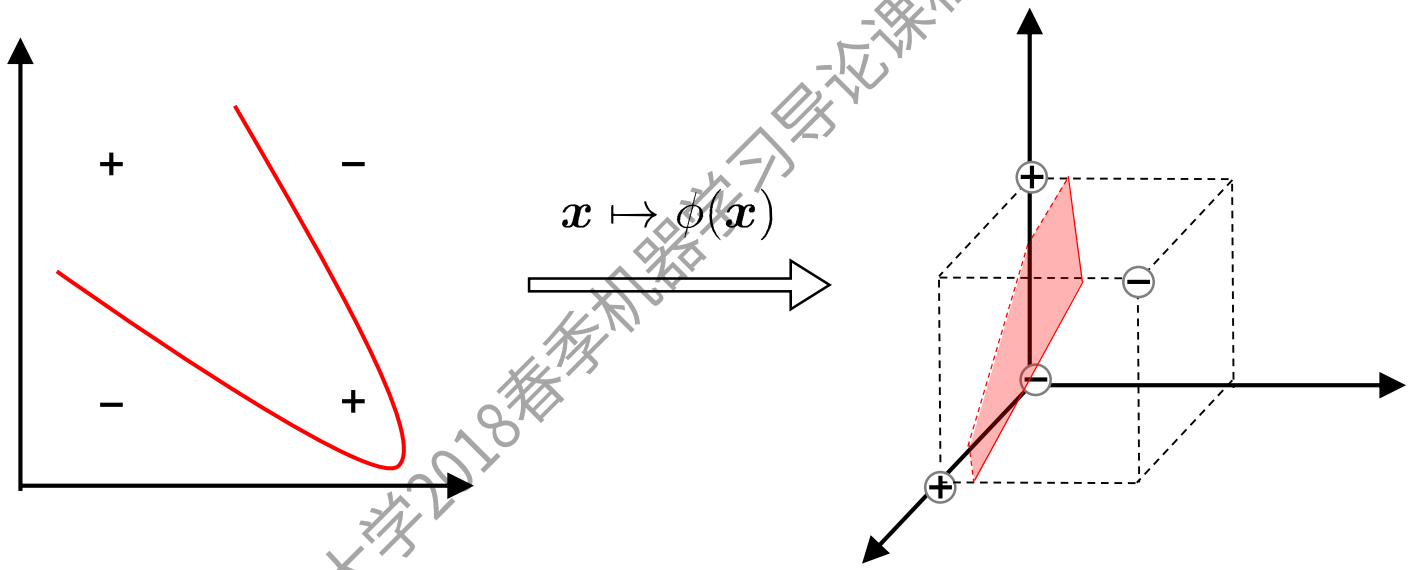
解的稀疏性：训练完成后，最终模型仅与支持向量有关

支持向量机(Support Vector Machine, SVM) 因此而得名

特征空间映射

若不存在一个能正确划分两类样本的超平面，怎么办?

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

在特征空间中

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

原始问题

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

对偶问题

$$\begin{aligned} \max_{\boldsymbol{\alpha}} \quad & \sum_{i=1}^{m} \alpha_i - \frac{1}{2}\sum_{i=1}^{m}\sum_{j=1}^{m} \alpha_i \alpha_j y_i y_j \phi(\boldsymbol{x}_i)^{\mathrm{T}}\phi(\boldsymbol{x}_j) \\ \text{s.t.} \quad & \sum_{i=1}^{m} \alpha_i y_i = 0 \ , \quad \alpha_i \geqslant 0 \ , \quad i = 1, 2, \ldots, m \end{aligned}$$

预测

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

只以内积形式出现

核函数 (kernel function)

基本思路：设计核函数

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

绕过显式考虑特征映射、以及计算高维内积的困难

Mercer 定理：若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

任何一个核函数，都隐式地定义了一个RKHS (Reproducing Kernel Hilbert Space, 再生核希尔伯特空间)

“核函数选择”成为决定支持向量机性能的关键！

核函数

常用核函数

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

基本经验：文本数据常用线性核，
情况不明时可先尝试高斯核

可通过函数组合得到：

若 κ_1和 κ_2 是核函数，则对任意正数 γ_1、γ_2 和任意函数 $g(\boldsymbol{x})$，

均为核函数

$$\gamma_1 \kappa_1 + \gamma_2 \kappa_2$$

$$\kappa_1 \otimes \kappa_2(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{z}) = \kappa_1(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{z}) \kappa_2(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{z})$$

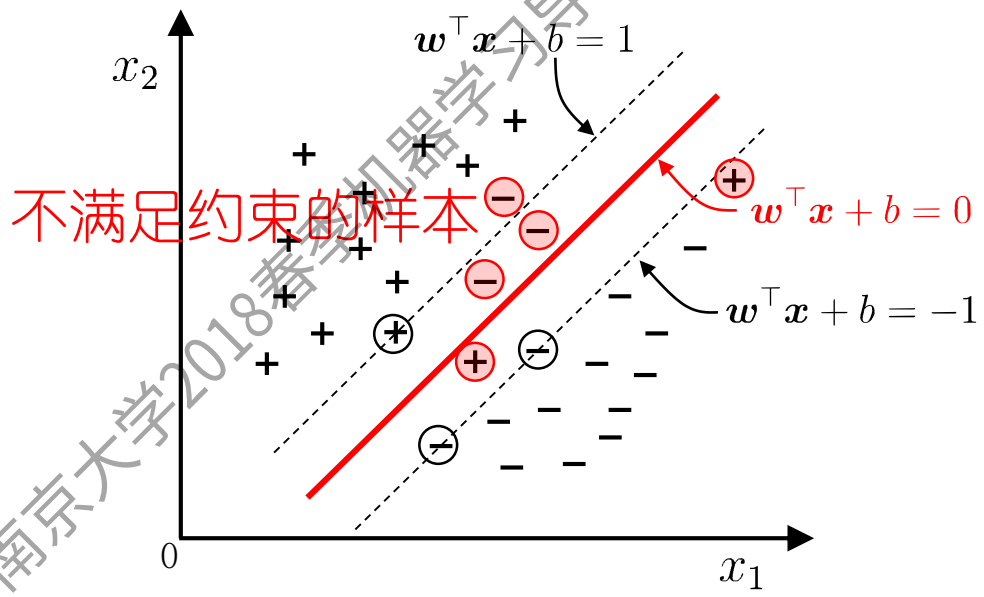
$$\kappa(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{z}) = g(\boldsymbol{x}) \kappa_1(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{z}) g(\boldsymbol{z})$$

软间隔

现实中很难确定合适的核函数，使训练样本在特征空间中线性可分

即便貌似线性可分，也很难断定是否是因过拟合造成的

引入软间隔 (soft margin)，允许在一些样本上不满足约束



优化目标

基本思路：最大化间隔的同时，

让不满足约束 $y_i(\boldsymbol{w}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{x}_i+b)\geqslant 1$ 的样本尽可能少

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

其中 $l_{0/1}$ 是 0/1损失函数 (0/1 loss function)：

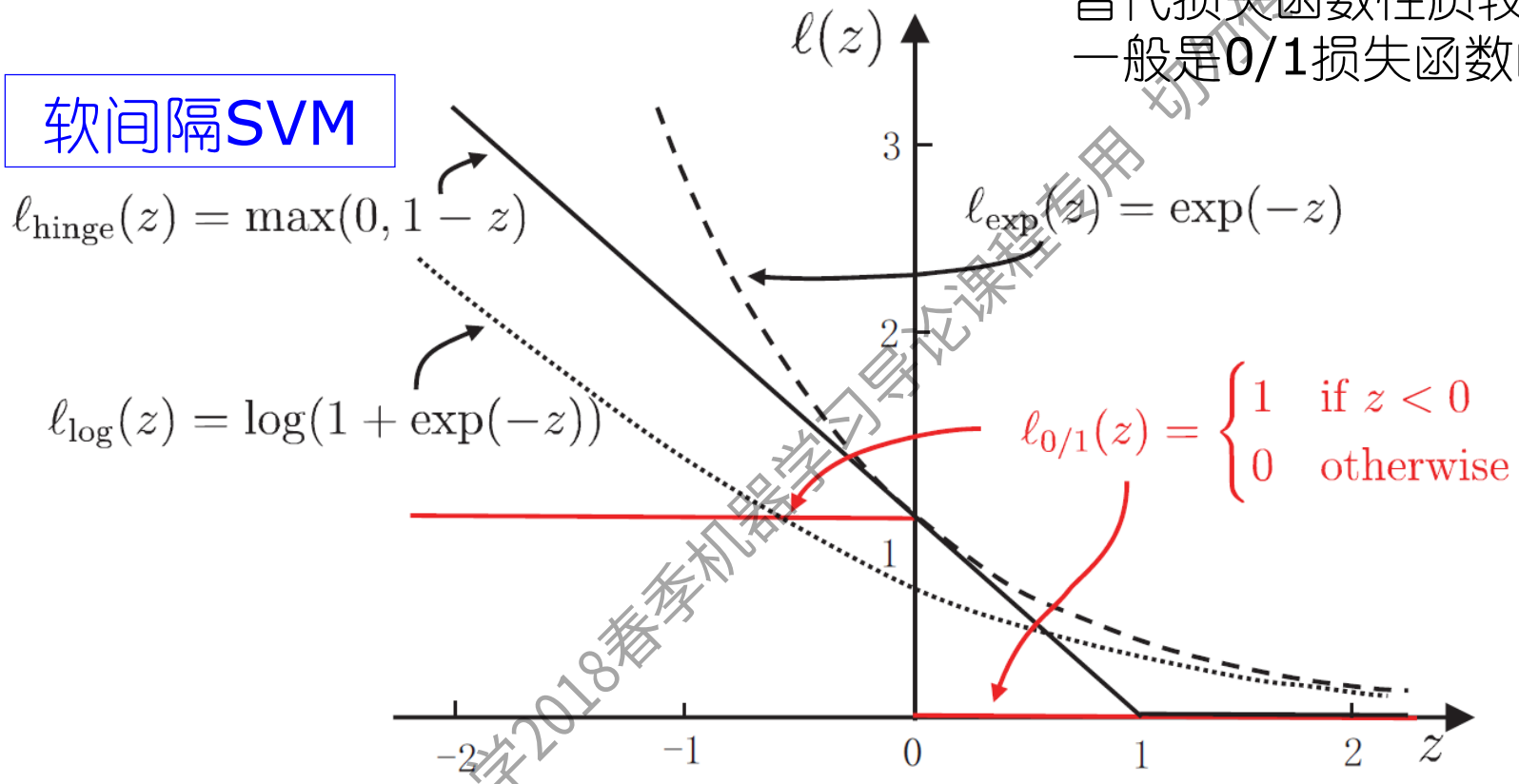
$$\ell_{0/1}(z)=\begin{cases}1, & \text{if } z<0;\\ 0, & \text{otherwise.}\end{cases}$$

障碍：0/1损失函数非凸、非连续，不易优化！

替代损失 (surrogate loss)

替代损失函数性质较好，
一般是0/1损失函数的上界

软间隔SVM



- 采用替代损失函数，是在解决困难问题时的常见技巧
- 求解替代函数得到的解是否仍是原问题的解？理论上称为替代损失的“一致性” (consistency)问题

软间隔支持向量机

原始问题

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

引入“松弛变量” (slack variables) ξ_i

$$\begin{aligned}\min_{\boldsymbol{w},b,\xi_i} \ & \frac{1}{2}\|\boldsymbol{w}\|^2 + C\sum_{i=1}^{m}\xi_i \\ \text{s.t.} \ & y_i(\boldsymbol{w}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{x}_i + b) \geqslant 1 - \xi_i, \ \xi_i \geqslant 0 \ , \ i = 1, 2, \ldots, m.\end{aligned}$$

对偶问题

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

与“硬间隔SVM”的区别

根据 KKT 条件可知，最终模型仅与支持向量有关，也即采用hinge 损失函数后仍保持了 SVM 解的稀疏性

正则化 (regularization)

统计学习模型（例如 SVM）的更一般形式

正则化项

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

结构风险
(structural risk)
描述模型本身
的某些性质

经验风险
(empirical risk)
描述模型与训练
数据的契合程度

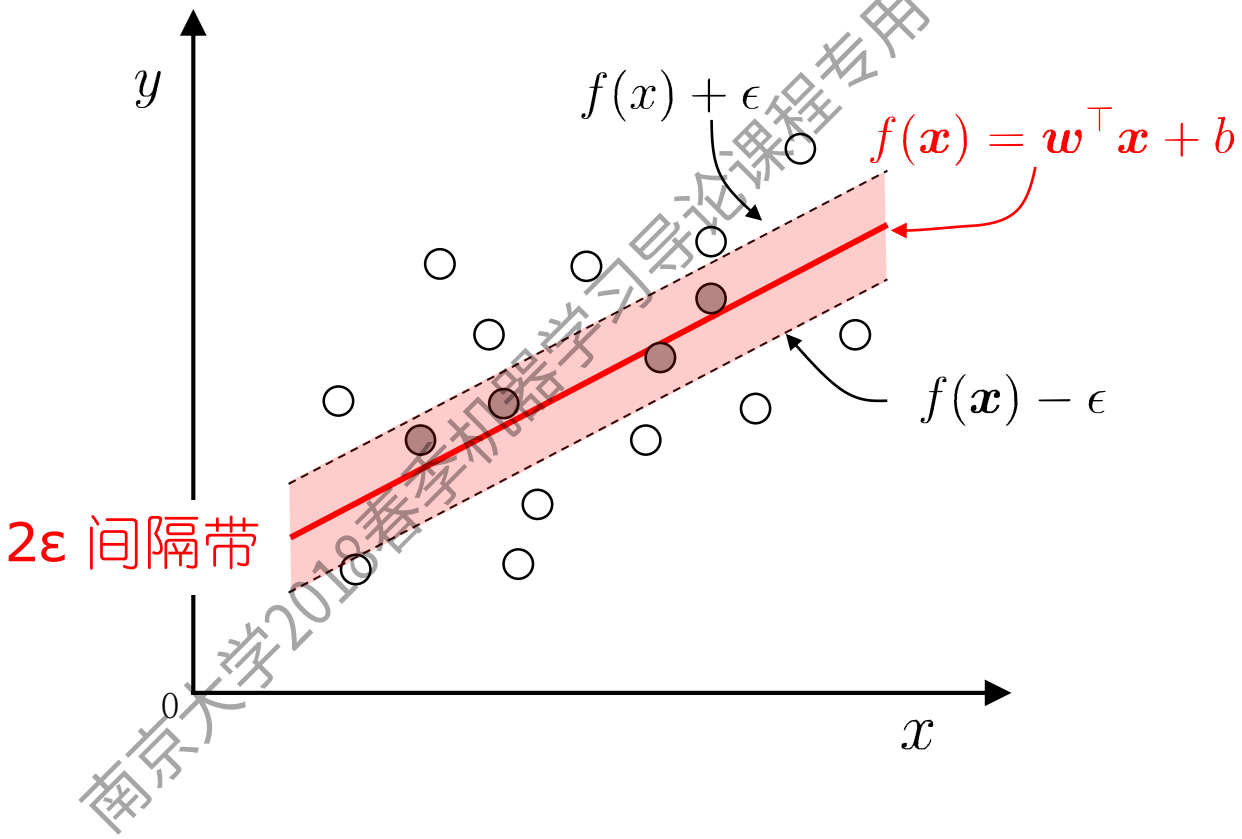
归纳
偏好

- 正则化可理解为“罚函数法”
  通过对不希望的结果施以惩罚，使得优化过程趋向于希望目标
- 从贝叶斯估计的角度，则可认为是提供了模型的先验概率

如何使用SVM
解决自己特定的任务？

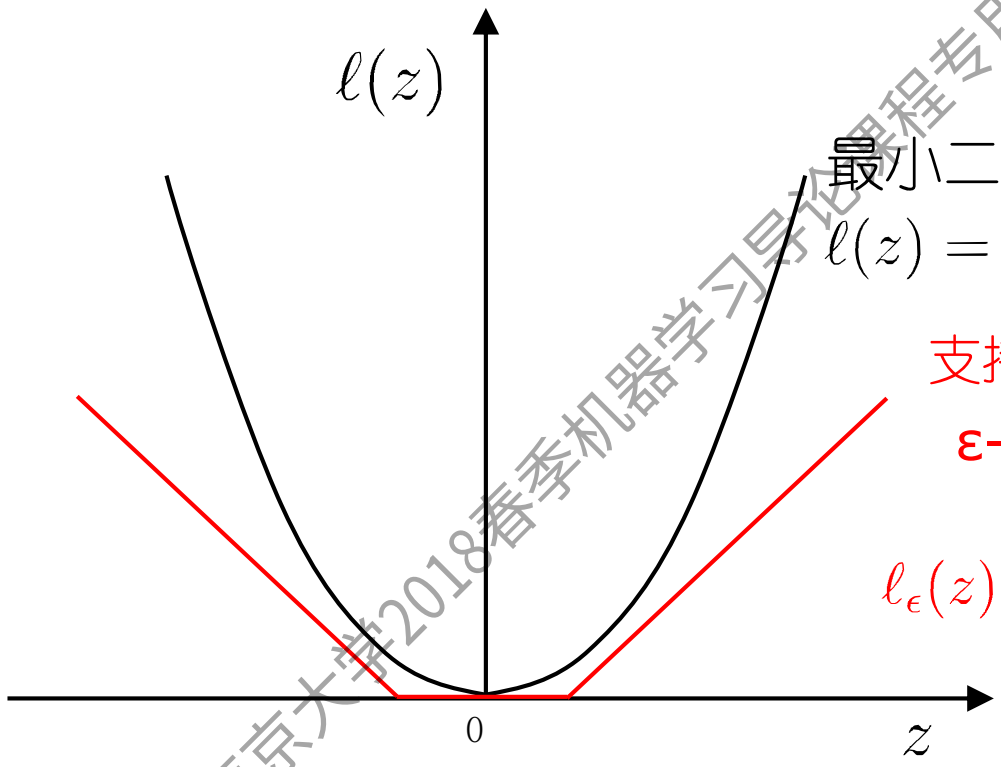
以回归学习为例

基本思路：允许模型输出与实际输出间存在 2ε 的差别



ε-不敏感(insensitive)损失函数

落入 2ε 间隔带的样本不计算损失



最小二乘损失函数

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

支持向量回归使用的

ε-不敏感损失函数

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

支持向量回归 (SVR)

原始问题

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

对偶问题

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

预测

$$f(\boldsymbol{x}) = \sum_{i=1}^{m}(\hat{\alpha}_i - \alpha_i)\boldsymbol{x}_i^{\mathrm{T}}\boldsymbol{x} + b$$

现实应用中 .....

如何使用SVM？

- 入门级—— 实现并使用各种版本SVM
- 专业级—— 尝试、组合核函数
- 专家级—— 根据问题而设计目标函数、替代损失、进而.....

根据当前任务“度身定制”是关键

表示定理 (Representer Theorem)

观察

- 核 SVM: $f(\boldsymbol{x}) = \boldsymbol{w}^{\mathrm{T}}\phi(\boldsymbol{x}) + b = \sum_{i=1}^{m} \alpha_i y_i \kappa(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{x}_i) + b$
- 核 SVR: $f(\boldsymbol{x}) = \boldsymbol{w}^{\mathrm{T}}\phi(\boldsymbol{x}) + b = \sum_{i=1}^{m} (\hat{\alpha}_i - \alpha_i)\kappa(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{x}_i) + b$

无论SVM还是SVR, 学得模型总能表示成核函数的线性组合

更一般的结论(表示定理): 对于任意单调递增函数 $\Omega : [0, \infty] \mapsto \mathbb{R}$ 和任意非负损失函数 $\ell : \mathbb{R}^m \mapsto [0, \infty]$, 优化问题

$$\min_{h \in \mathbb{H}} \; F(h) = \Omega\big(\|h\|_{\mathbb{H}}\big) + \ell\big(h(\boldsymbol{x}_1), h(\boldsymbol{x}_2), \ldots, h(\boldsymbol{x}_m)\big)$$

的解总可写为 $h^*(\boldsymbol{x}) = \sum_{i=1}^{m} \alpha_i \kappa(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{x}_i)$

核方法 (Kernel methods)

基于表示定理能得到很多线性模型的“核化”(kernelized)版本

例如 KLDA (Kernelized LDA)：

将样本映射到高维特征空间，然后在此特征空间中做线性判别分析

$$\max_{\boldsymbol{w}} J(\boldsymbol{w}) = \frac{\boldsymbol{w}^{\mathrm{T}}\mathbf{S}_b^{\phi}\boldsymbol{w}}{\boldsymbol{w}^{\mathrm{T}}\mathbf{S}_w^{\phi}\boldsymbol{w}}$$

$$h(\boldsymbol{x}) = \boldsymbol{w}^{\mathrm{T}}\phi(\boldsymbol{x}) = \sum_{i=1}^{m}\alpha_i\kappa(\boldsymbol{x},\boldsymbol{x}_i)$$

$$\max_{\boldsymbol{\alpha}} J(\boldsymbol{\alpha}) = \frac{\boldsymbol{\alpha}^{\mathrm{T}}\mathbf{M}\boldsymbol{\alpha}}{\boldsymbol{\alpha}^{\mathrm{T}}\mathbf{N}\boldsymbol{\alpha}}$$

“核技巧”(kernel trick)是机器学习中处理非线性问题的基本技术之一

支持向量机常用软件/工具包

- 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

- … …

前往第七站……