CDA大数据分析师就业班
之
Python机器学习

覃秉丰

支持向量机
SVM(Support Vector Machines)

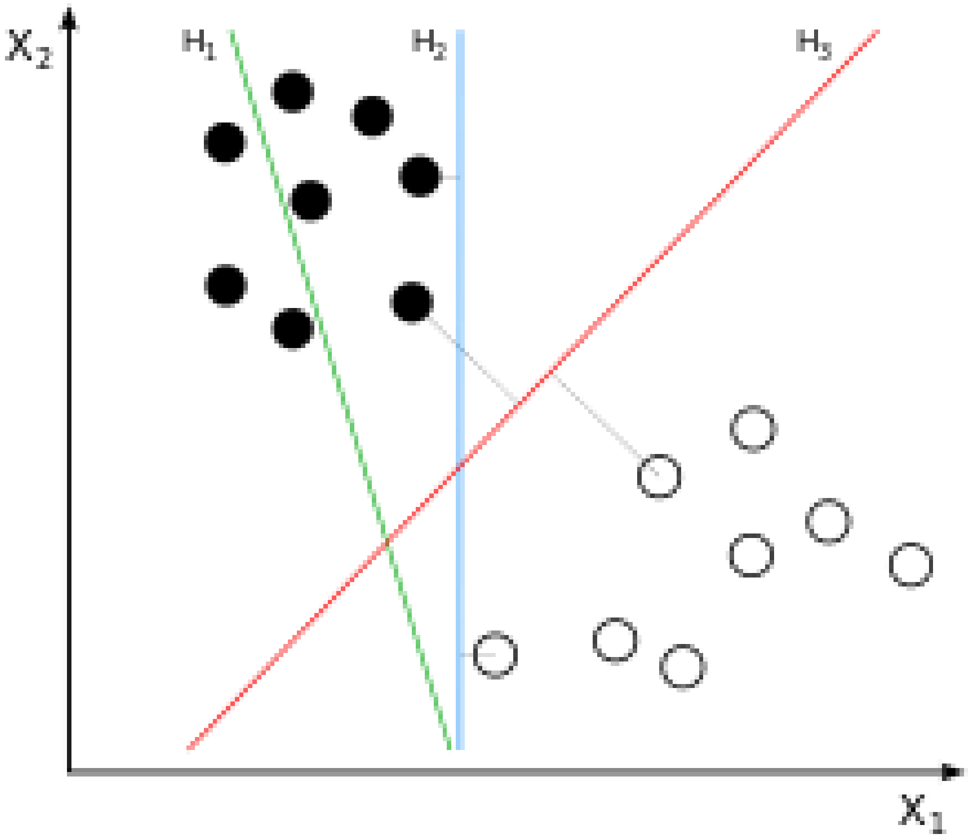
SVM

最早是由 Vladimir N. Vapnik 和 Alexey Ya. Chervonenkis 在1963年提出

目前的版本(soft margin)是由Corinna Cortes 和Vapnik在1993年提出，并在1995年发表

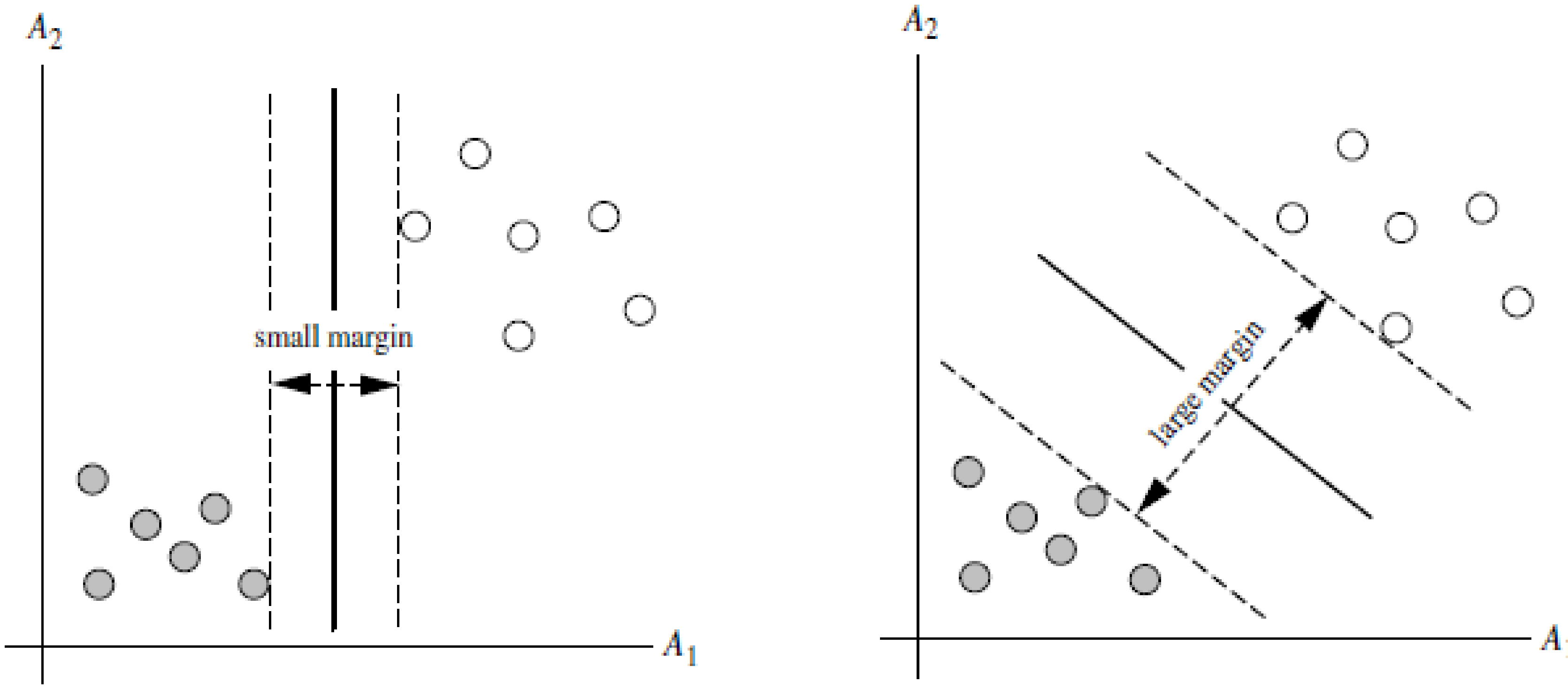
深度学习（2012）出现之前，SVM被认为机器学习中近十几年来最成功，表现最好的算法

SVM



SVM

SVM寻找区分两类的超平面（hyper plane),
使边际(margin)最大



向量内积

$$x = \begin{Bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \cdots \\ x_n \end{Bmatrix} \qquad y = \begin{Bmatrix} y_1 \\ y_2 \\ \cdots \\ y_n \end{Bmatrix}$$

向量内积：$x \cdot y = x_1 y_1 + x_2 y_2 + \cdots + x_n y_n$

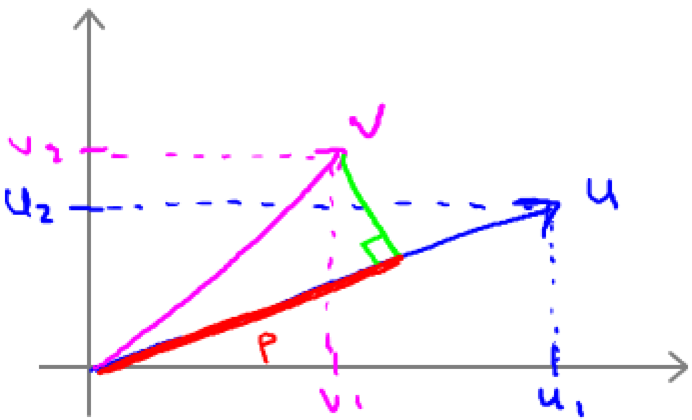
向量内积：$x \cdot y = \|x\|\|y\|\cos(\theta)$

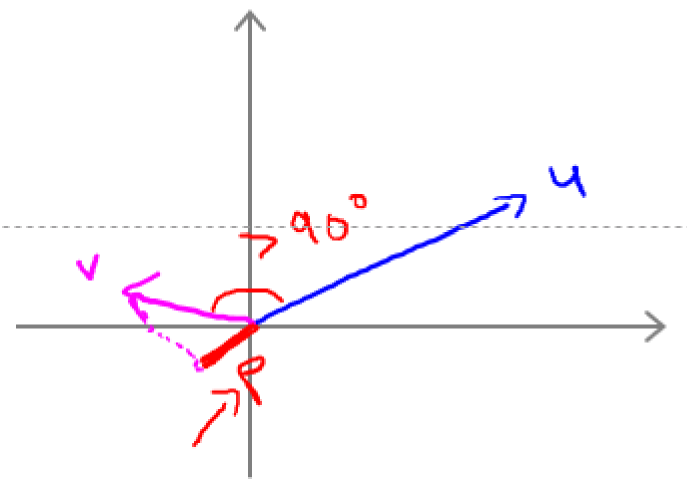
范数：$\|x\| = \sqrt{x \cdot x} = \sqrt{x_1^2 + x_2^2 + \cdots + x_n^2}$

当$\|x\| \neq 0, \|\mathrm{y}\| \neq 0$时，可以求余弦相似度：

$$cos\theta = \frac{x \cdot y}{\|x\|\|y\|}$$

向量内积

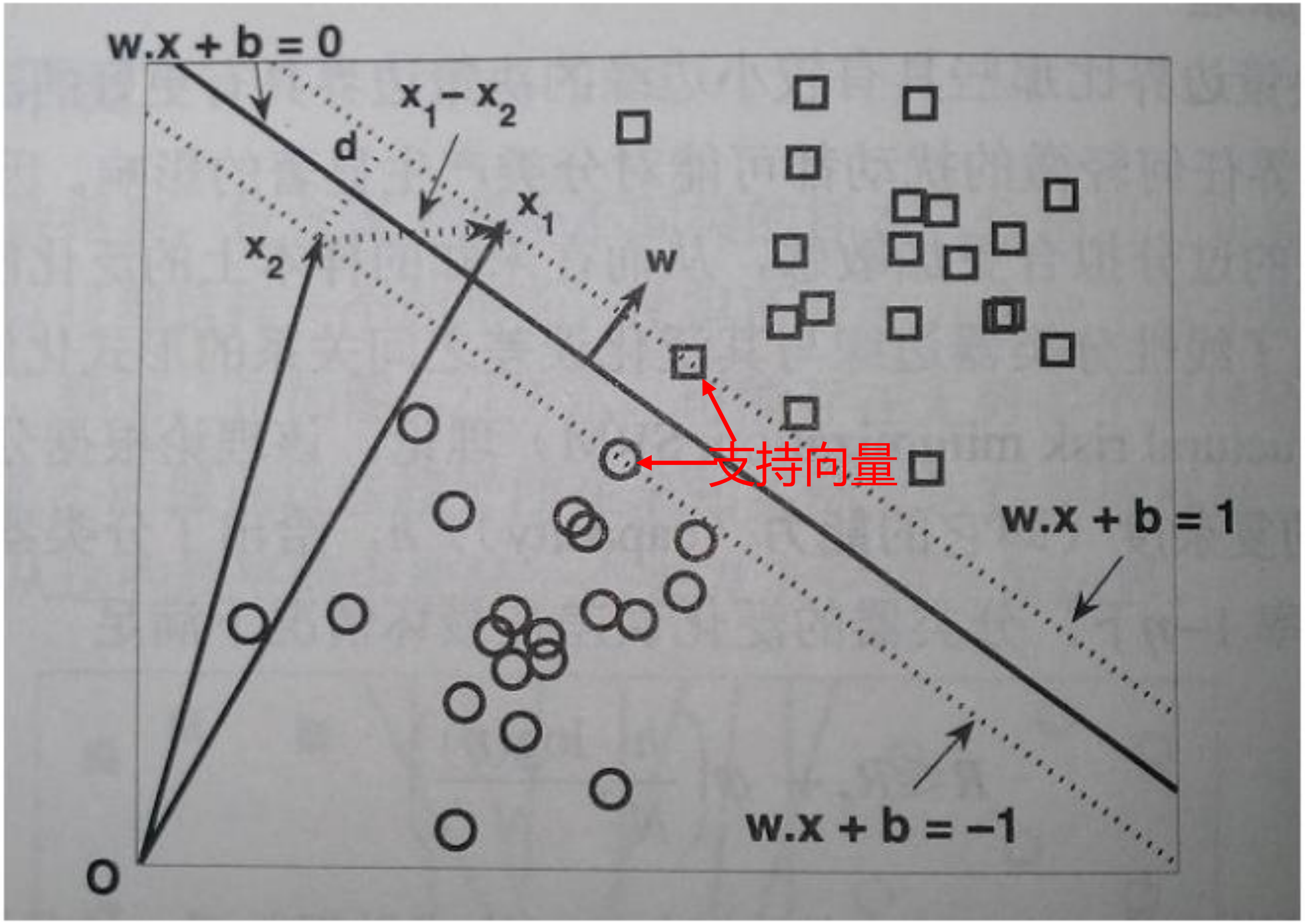




向量内积：$v \cdot u > 0$

向量内积：$v \cdot u < 0$

SVM分类



一些计算

$$w \cdot x + b = 1$$
$$w \cdot x + b = -1$$

$$w \cdot x + b = 2$$
$$w \cdot x + b = -3$$

2*u+v=1
-3*u+v=-1
u=-2/5
v=1/5

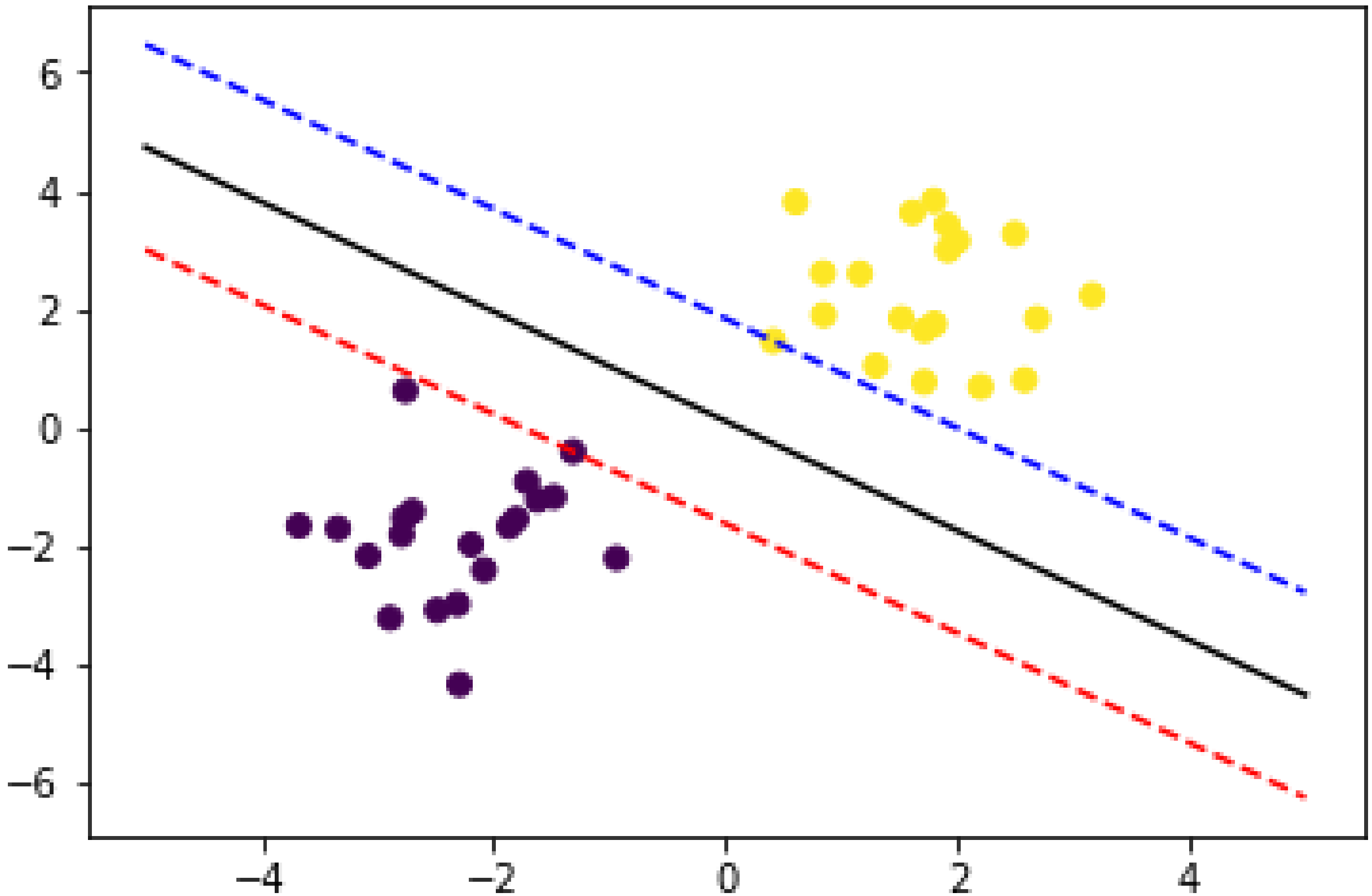
$$w \cdot x_1 + b = 1$$
$$w \cdot x_2 + b = -1$$

$$w \cdot (x_1 - x_2) = 2$$
$$\|w\| \|(x_1 - x_2)\| \cos(\theta) = 2$$
$$\|w\| * d = 2$$
$$d = \frac{2}{\|w\|}$$

SVM简单例子

Talk is cheap
Show me the
CODE

SVM-线性分类



SVM-非线性分类(练习)

Talk is cheap

Show me the

CODE

转化为凸优化问题

$$\left.\begin{array}{l} w \cdot x + b \geq 1\text{，则分类y=1} \\ w \cdot x + b \leq -1\text{，则分类y=-1} \end{array}\right\} \quad y(w \cdot x + b) \geq 1$$

求$d = \frac{2}{\|w\|}$最大值，

也就是求$min\frac{\|w\|^2}{2}$

凸优化问题

1. 无约束优化问题：

$$\min f(\boldsymbol{x})$$

-费马定理

2. 带等式约束的优化问题：

-拉格朗日乘子法：

$$\min f(\boldsymbol{x})$$

$$s.t.\ h_i(\boldsymbol{x}) = 0, \qquad i = 1,2,\cdots n$$

$$\mathcal{L}(\boldsymbol{x},\lambda) = f(\boldsymbol{x}) + \sum_{i=1}^{n} \lambda_i h_i(\boldsymbol{x})$$

3. 带不等式约束的优化问题：

-KKT条件

$$\min f(\boldsymbol{x})$$

$$s.t.\ h_i(\boldsymbol{x}) = 0, \qquad i = 1,2,\cdots,n$$

$$g_i(\boldsymbol{x}) \le 0, \qquad i = 1,2,\cdots,k$$

$$\mathcal{L}(x,\lambda,v) = f(x) + \sum_{i=1}^{k} \lambda_i g_i(x) + \sum_{i=1}^{n} v_i h_i(x)$$

广义拉格朗日乘子法

目标函数 α拉格朗日乘子 约束条件

$$L(w,b,a) = \frac{1}{2}\|w\|^2 - \sum_{i=1}^{n} \alpha_i (y_i(w^T x_i + b) - 1)$$

$$\frac{\partial L}{\partial w} = 0 \rightarrow w = \sum_{i=1}^{n} \alpha_i y_i x_i$$

$$\frac{\partial L}{\partial b} = 0 \rightarrow \sum_{i=1}^{n} \alpha_i y_i = 0$$

跟岭回归和LASSO类似

岭回归代价函数：

$$J(\theta) = \frac{1}{2m}\left[\sum_{i=1}^{m}\left(h_\theta\left(x^{(i)}\right) - y^{(i)}\right)^2 + \lambda\sum_{j=1}^{n}\theta_j^2\right]$$

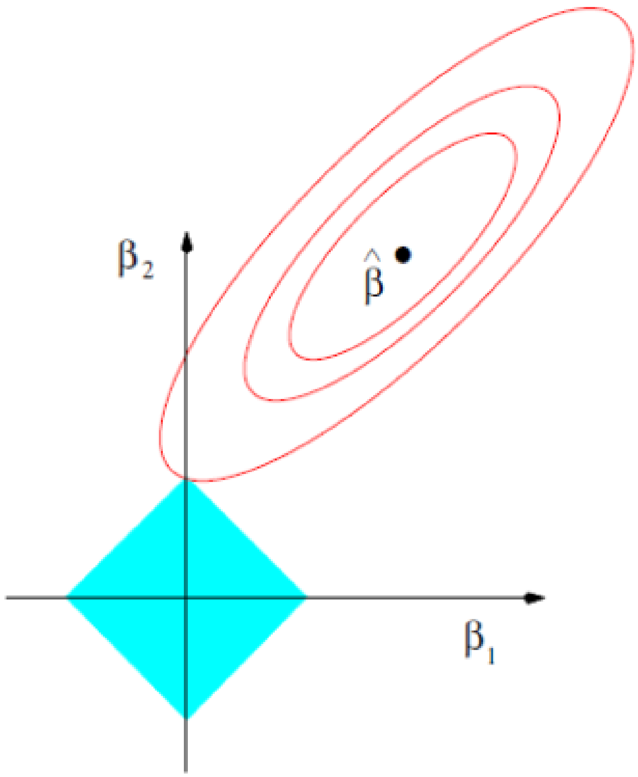
λ的值可以用于限制$\sum_{j=1}^{n}\theta_j^2 \le t$

LASSO代价函数：

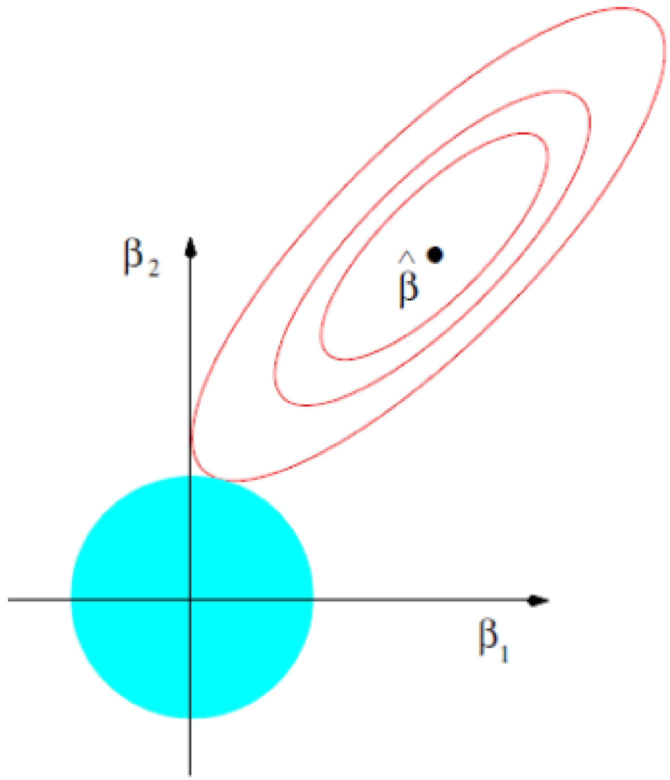
$$J(\theta) = \frac{1}{2m}\left[\sum_{i=1}^{m}\left(h_\theta\left(x^{(i)}\right) - y^{(i)}\right)^2 + \lambda\sum_{j=1}^{n}\left|\theta_\mathrm{j}\right|\right]$$

λ的值可以用于限制$\sum_{j=1}^{n}\left|\theta_\mathrm{j}\right| \le t$

跟岭回归和LASSO类似



LASSO



岭回归

Karush-Kuhn-Tucker最优化条件(KKT条件)

拉格朗日乘子法的一种推广，可以处理有不等号的约束条件。

$$\min f(\boldsymbol{x})$$

$$s.t.\ h_i(\boldsymbol{x}) = 0, \qquad i = 1,2,\cdots,n$$

$$g_i(\boldsymbol{x}) \le 0, \qquad i = 1,2,\cdots,k$$

$$\mathcal{L}(x,\lambda,v) = f(x) + \sum_{i=1}^{k} \lambda_i g_i(x) + \sum_{i=1}^{n} v_i h_i(x)$$

进一步简化为对偶问题

CDA数据分析师 CERTIFIED DATA ANALYST

$$L(w,b,a)=\frac{1}{2}\|w\|^2-\sum_{i=1}^{n}\alpha_i(y_i(w^Tx_i+b)-1)$$

上述问题可以改写成：

$$\min_{\boldsymbol{w},b}\max_{\alpha_i\geq 0}\mathcal{L}(\boldsymbol{w},b,\boldsymbol{\alpha})=p^*$$

可以等价为下列对偶问题：

$$\max_{\alpha_i\geq 0}\min_{\boldsymbol{w},b}\mathcal{L}(\boldsymbol{w},b,\boldsymbol{\alpha})=d^*$$

进一步简化为对偶问题

CDA数据分析师 CERTIFIED DATA ANALYST

$$L(w,b,a)=\frac{1}{2}\|w\|^2-\sum_{i=1}^{n}\alpha_i(y_i(w^Tx_i+b)-1)$$

$$\frac{\partial L}{\partial w}=0\rightarrow w=\sum_{i=1}^{n}\alpha_i y_i x_i$$

$$\frac{\partial L}{\partial b}=0\rightarrow \sum_{i=1}^{n}\alpha_i y_i=0$$

把w和b消除了

$$L(w,b,a)=\sum_{i=1}^{n}\alpha_i-\frac{1}{2}\sum_{i,j=1}^{n}\alpha_i\alpha_j y_i y_j x_i^T x_j$$

进一步简化为对偶问题

$$\max_{\alpha_i \geq 0} \min_{\boldsymbol{w},b} \mathcal{L}(\boldsymbol{w}, b, \boldsymbol{\alpha}) = \max_{\boldsymbol{\alpha}} \left[\sum_{i=1}^{k} \alpha_i - \frac{1}{2} \sum_{i,j=1}^{k} \alpha_i \alpha_j y_i y_j (x_i)^T x_j \right]$$

$$s.t. \sum_{i=1}^{k} \alpha_i y_i = 0, \qquad \alpha_i \geq 0, i = 1,2,\cdots,n$$

$$\min_{\boldsymbol{\alpha}} \left[\frac{1}{2} \sum_{i,j=1}^{k} \alpha_i \alpha_j y_i y_j (x_i)^T x_j - \sum_{i=1}^{k} \alpha_i \right] = \min_{\boldsymbol{\alpha}} \left[\frac{1}{2} \sum_{i,j=1}^{k} \alpha_i \alpha_j y_i y_j \left(x_i \cdot x_j \right) - \sum_{i=1}^{k} \alpha_i \right]$$

$$s.t. \sum_{i=1}^{k} \alpha_i y_i = 0, \qquad \alpha_i \geq 0, i = 1,2,\cdots,n$$

进一步简化为对偶问题

由此可以求出最优解α^*，求出该值后将其带入可以得到：

$$w^* = \sum_{i=1}^{n} \alpha_i^* y_i x_i$$

$$b^* = y_i - (w^*)^T x_i$$

SMO算法

CDA数据分析师 CERTIFIED DATA ANALYST

Microsoft Research的John C. Platt在1998年提出针对线性SVM和数据稀疏时性能更优

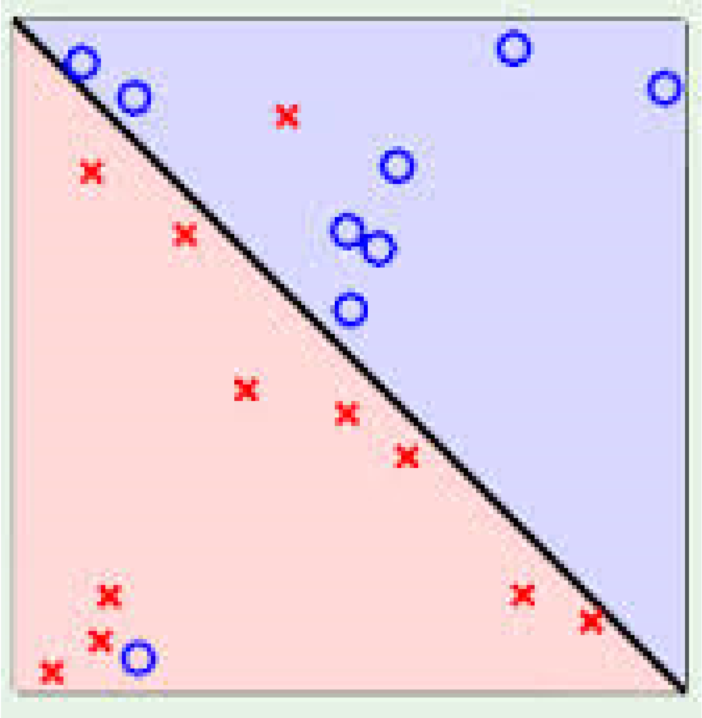
$$\min_{\alpha}\left[\frac{1}{2}\sum_{i,j=1}^{k}\alpha_i\alpha_j y_i y_j (x_i)^T x_j-\sum_{i=1}^{k}\alpha_i\right]=\min_{\alpha}\left[\frac{1}{2}\sum_{i,j=1}^{k}\alpha_i\alpha_j y_i y_j (x_i\cdot x_j)-\sum_{i=1}^{k}\alpha_i\right]$$

$$s.t.\sum_{i=1}^{k}\alpha_i y_i=0,\qquad \alpha_i\geq 0, i=1,2,\cdots,n$$

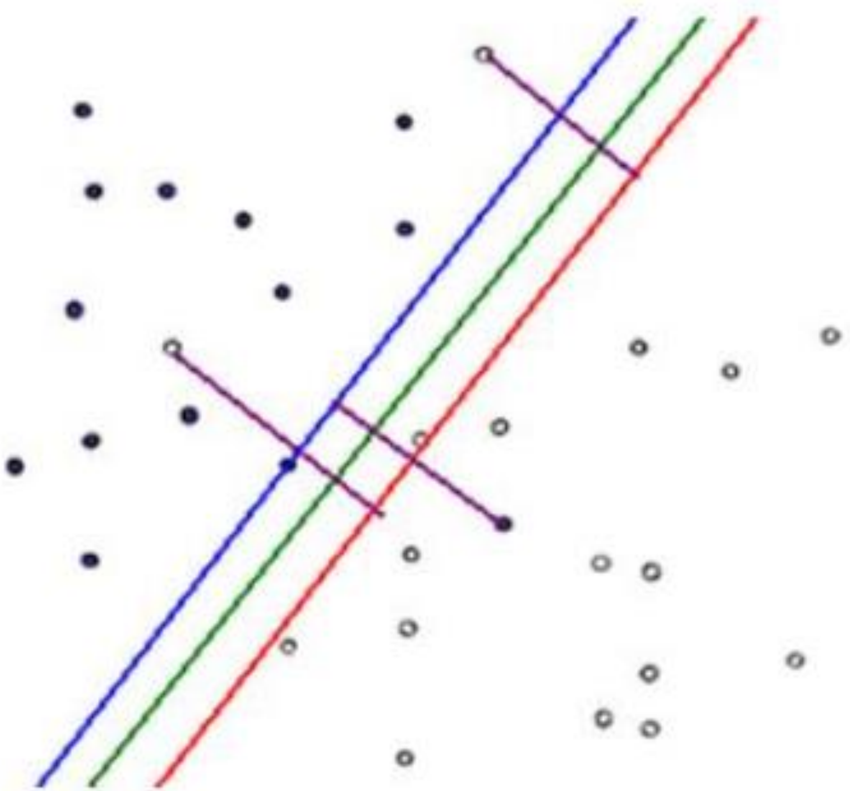
s.t.,C≥α_i≥0,i=1,…,n

基本思路是先根据约束条件随机给α赋值。然后每次选取两个α，调节这两个α使得目标函数最小。然后再选取两个α，调节α使得目标函数最小。以此类推

线性不可分的情况



松弛变量与惩罚函数



$$y_i(w_i \cdot x_i + b) \geq 1 - \varepsilon_i, \varepsilon_i \geq 0$$

约束条件没有体现错误分类的点要尽量接近分类边界

$$min \frac{\|w\|^2}{2} + C\sum_{i=1}^{n} \varepsilon_i$$

使得分错的点越少越好，距离分类边界越近越好

线性不可分情形下的对偶问题

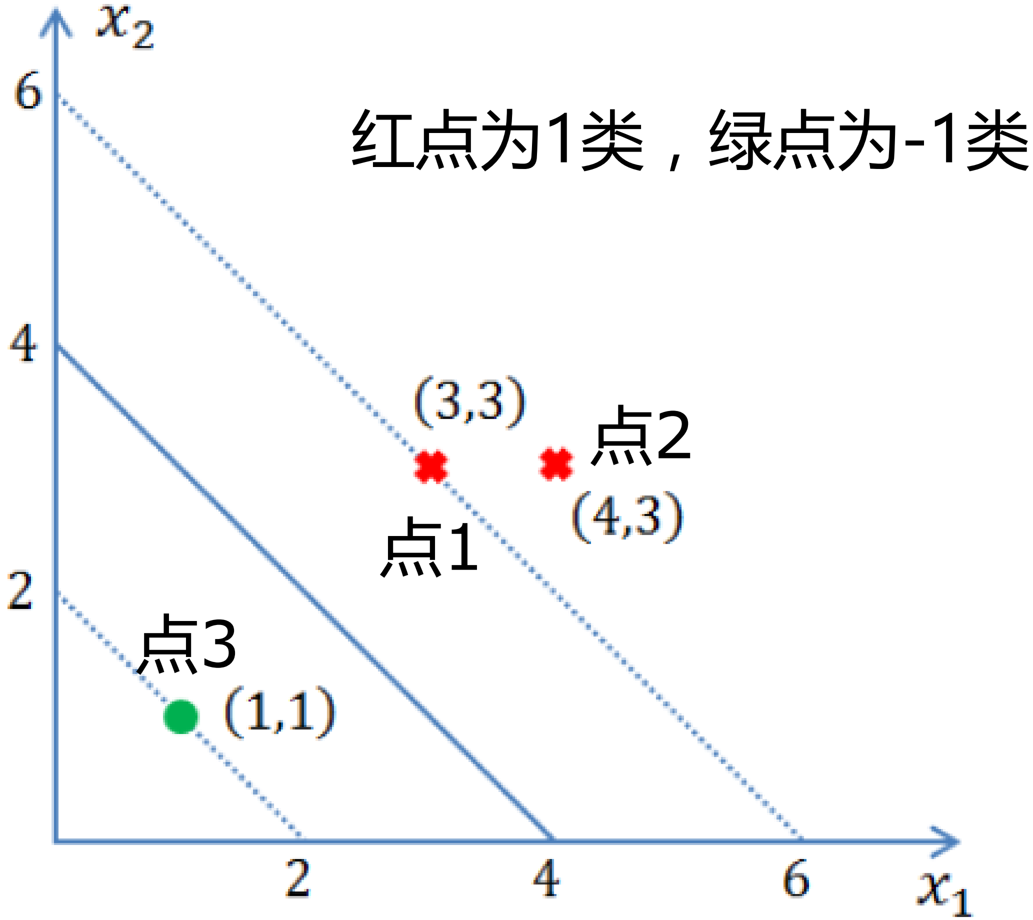
$$\min_{\boldsymbol{\alpha}}\left[\frac{1}{2}\sum_{i,j=1}^{k}\alpha_i\alpha_j y_i y_j (x_i)^T x_j-\sum_{i=1}^{k}\alpha_i\right]=\min_{\boldsymbol{\alpha}}\left[\frac{1}{2}\sum_{i,j=1}^{k}\alpha_i\alpha_j y_i y_j \left(x_i\cdot x_j\right)-\sum_{i=1}^{k}\alpha_i\right]$$

$$s.t.\sum_{i=1}^{k}\alpha_i y_i=0,\qquad \alpha_i\geq 0, i=1,2,\cdots,n$$

s.t.,C≥α_i≥0,i=1,…,n

SVM例子

CDA数据分析师 CERTIFIED DATA ANALYST



SVM例子

CDA数据分析师 CERTIFIED DATA ANALYST

可知目标函数为

$$\min_{\boldsymbol{\alpha}} f(\boldsymbol{\alpha}), \qquad s.t.\ \alpha_1 + \alpha_2 - \alpha_3 = 0, \qquad \alpha_i \geq 0, i = 1,2,3$$

其中

求内积

$$f(\boldsymbol{\alpha}) = \frac{1}{2}\sum_{i,j=1}^{3} \alpha_i \alpha_j y_i y_j (x_i \cdot x_j) - \sum_{i=1}^{3} \alpha_i$$

$$= \frac{1}{2}(18\alpha_1^2 + 25\alpha_2^2 + 2\alpha_3^2 + 42\alpha_1\alpha_2 - 12\alpha_1\alpha_3 - 14\alpha_2\alpha_3) - \alpha_1 - \alpha_2 - \alpha_3$$

然后，将$\alpha_3 = \alpha_1 + \alpha_2$带入目标函数，得到一个关于$\alpha_1$和$\alpha_2$的函数

$$s(\alpha_1, \alpha_2) = 4\alpha_1^2 + \frac{13}{2}\alpha_2^2 + 10\alpha_1\alpha_2 - 2\alpha_1 - 2\alpha_2$$

SVM例子

对α_1和α_2求偏导数并令其为0，易知$s(\alpha_1,\alpha_2)$在点$(1.5,-1)$处取极值。而该点不满足$\alpha_i \geq 0$的约束条件，于是可以推断最小值在边界上达到。经计算当$\alpha_1 = 0$时，$s(\alpha_1 = 0, \alpha_2 = 2/13) = -0.1538$；当$\alpha_2 = 0$时，$s(\alpha_1 = 1/4, \alpha_2 = 0) = -0.25$。于是$s(\alpha_1,\alpha_2)$在$\alpha_1 = 1/4$，$\alpha_2 = 0$时取得最小值，此时亦可算出$\alpha_3 = \alpha_1 + \alpha_2 = 1/4$。因为$\alpha_1$和$\alpha_3$不等于0，所以对应的点$x_1$和$x_3$就应该是支持向量。

SVM例子

进而可以求得

$$w^* = \sum_{i=1}^{3} \alpha_i^* y_i x_i = \frac{1}{4}\times(3,3) - \frac{1}{4}\times(1,1) = \left(\frac{1}{2},\frac{1}{2}\right)$$

即$w_1 = w_2 = 0.5$。进而有

$$b^* = 1 - (w_1, w_2)\cdot(3,3) = -2$$

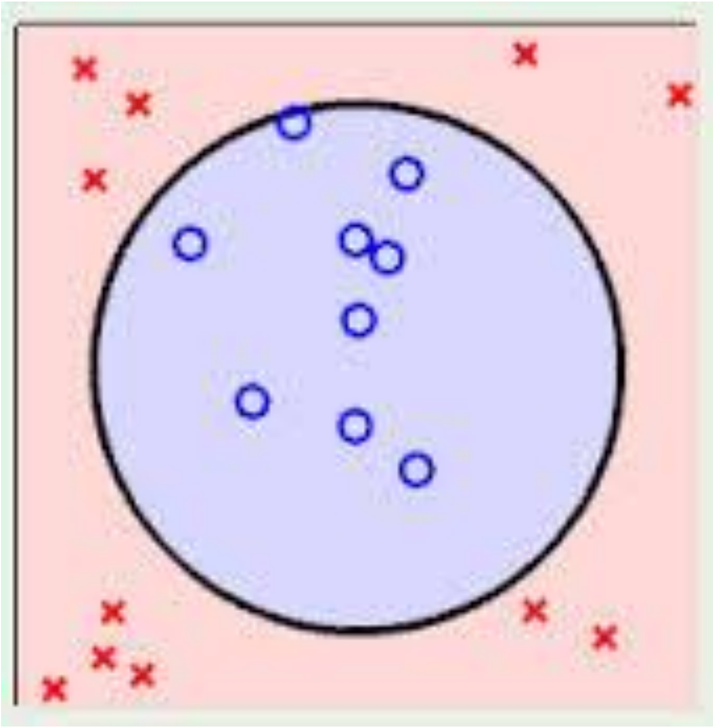
因此最大间隔分类超平面为

$$\frac{1}{2}x_1 + \frac{1}{2}x_2 - 2 = 0$$

分类决策函数为

$$f(\boldsymbol{x}) = sign\left(\frac{1}{2}x_1 + \frac{1}{2}x_2 - 2\right)$$

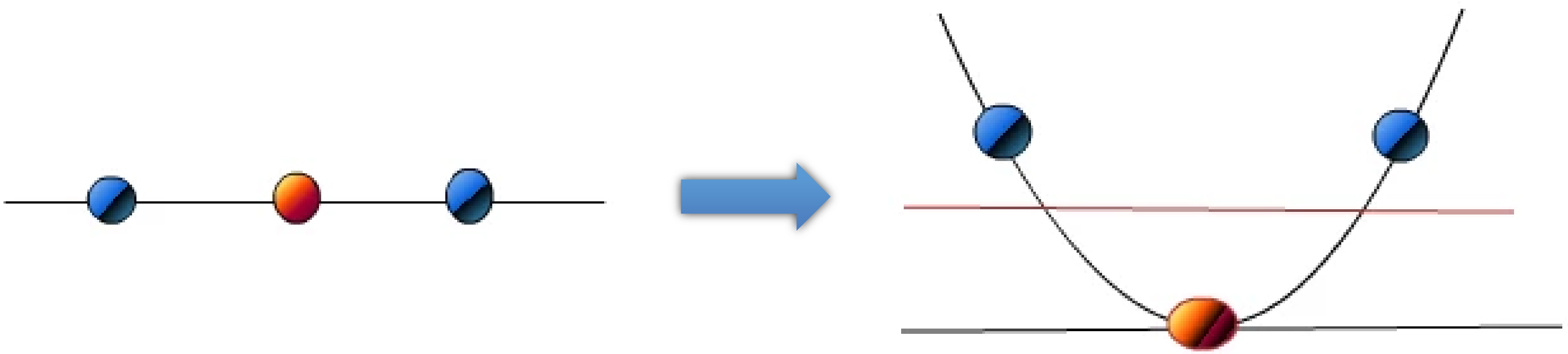
非线性的情况



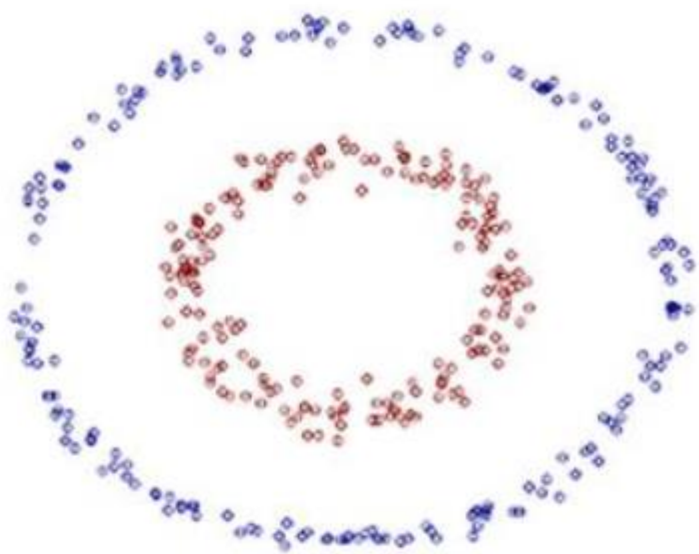
非线性的情况

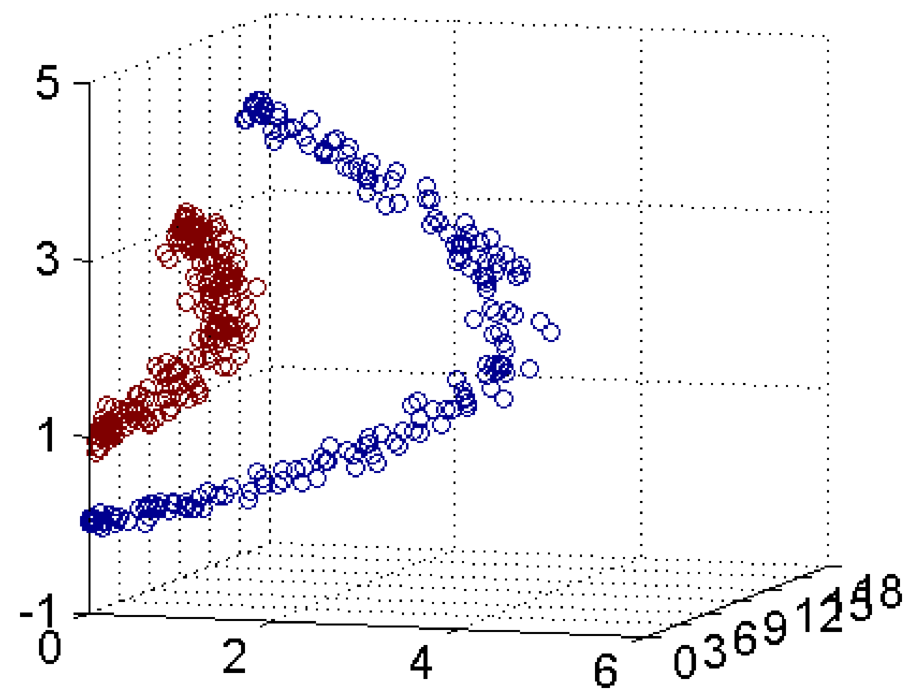
CDA数据分析师 CERTIFIED DATA ANALYST

把低维空间的非线性问题映射到高维空间，变成求解线性问题

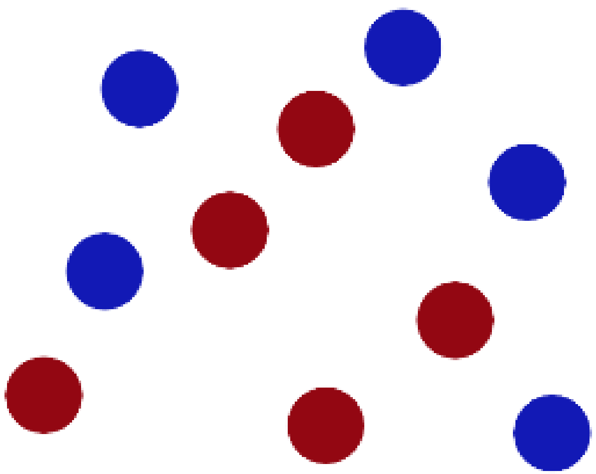


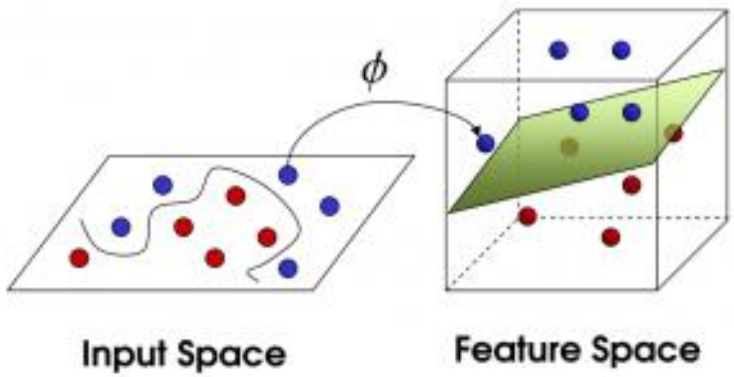
非线性的情况





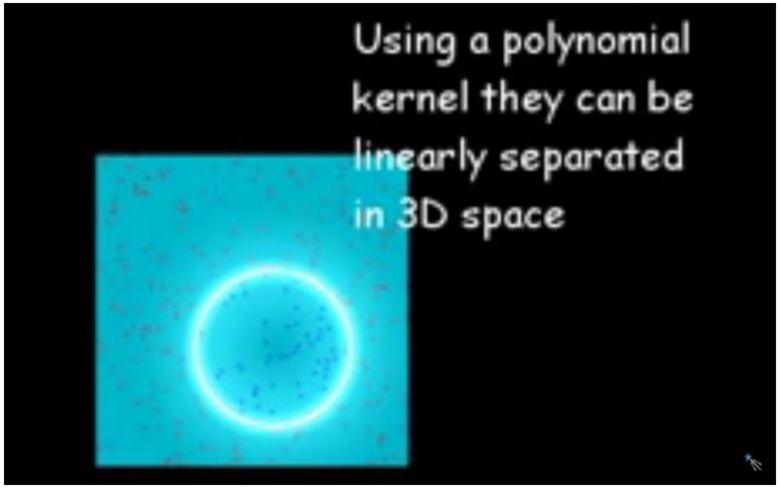
非线性的情况

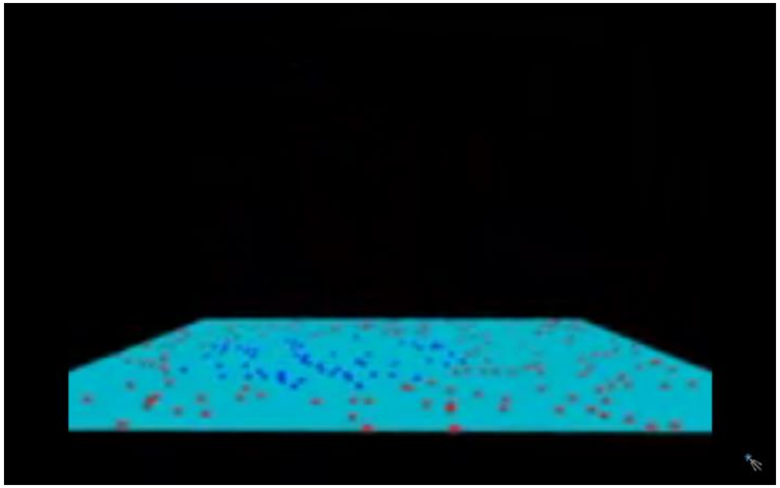




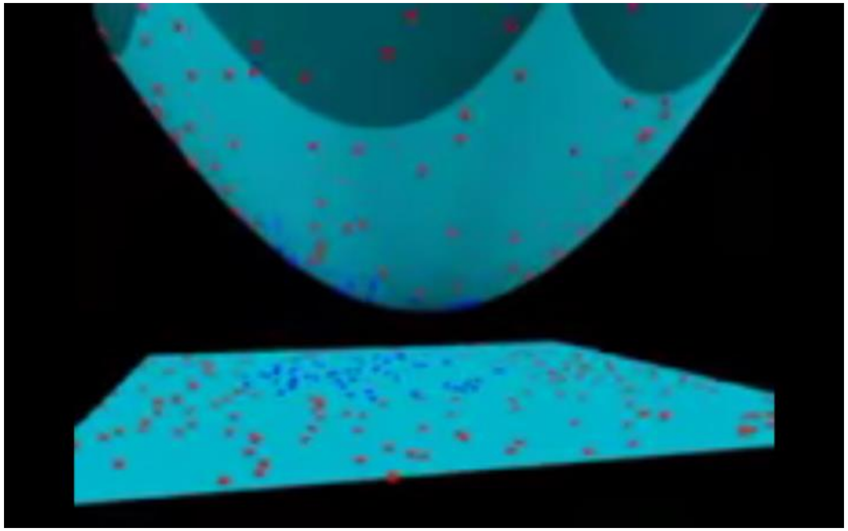
非线性的情况

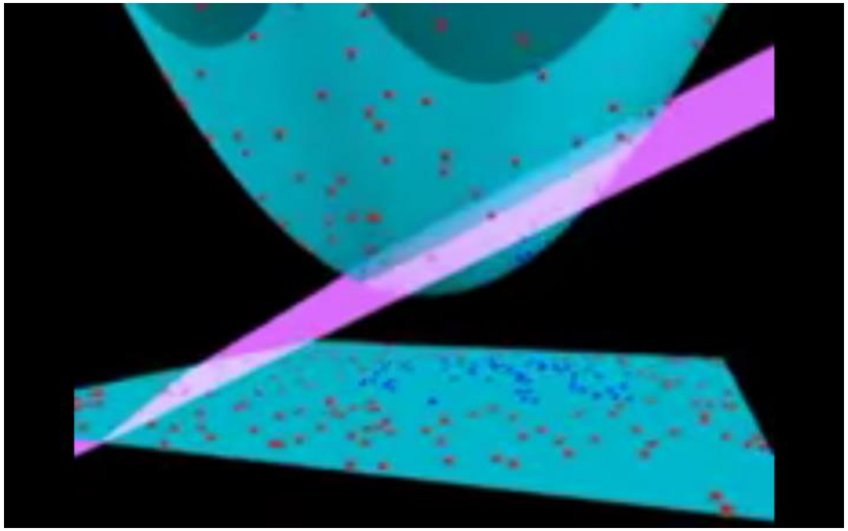
https://v.qq.com/x/page/k05170ntgzc.html



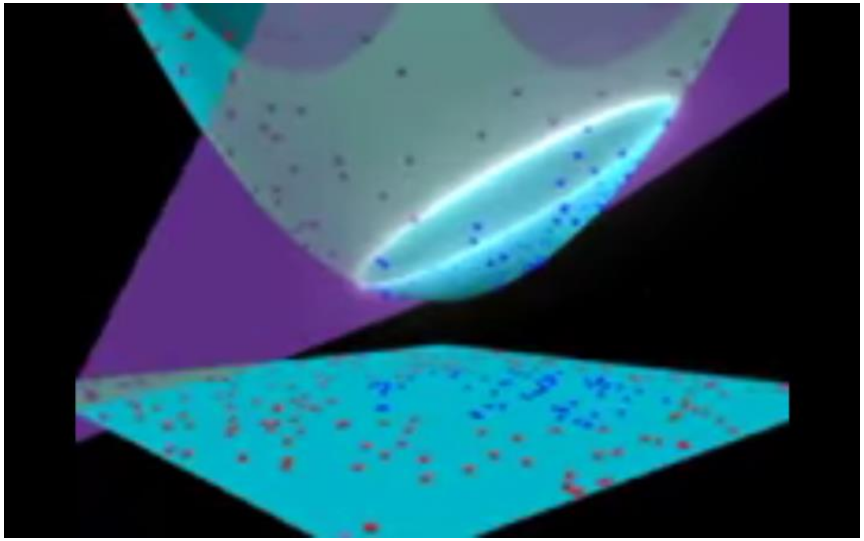


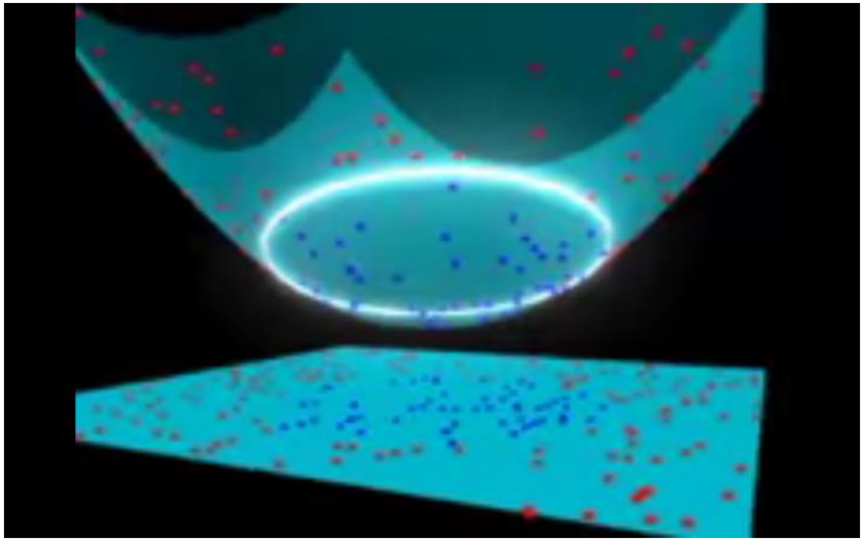
非线性的情况



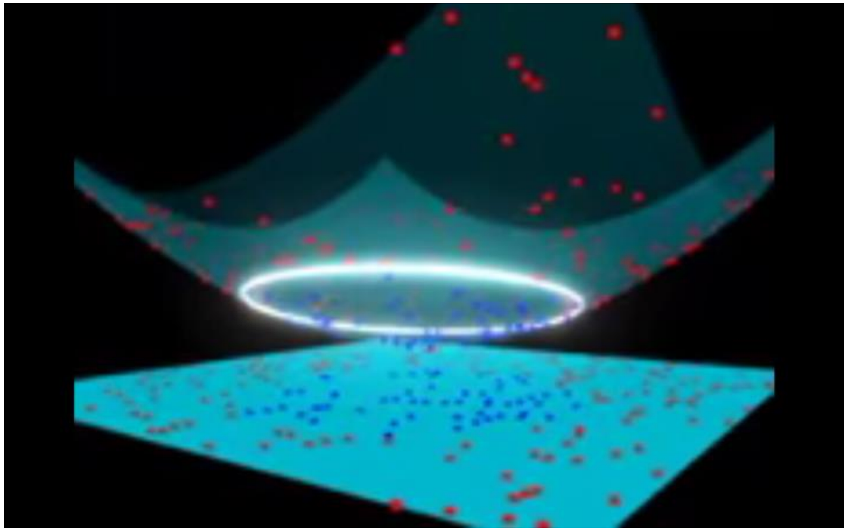


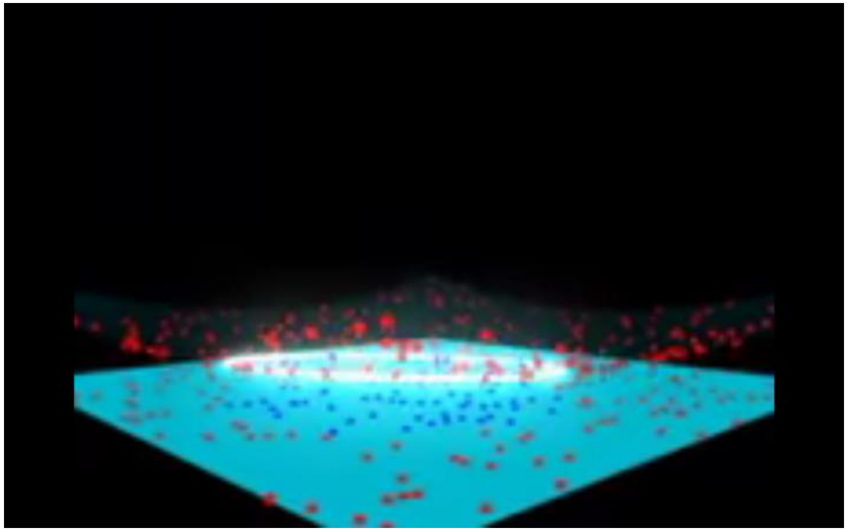
非线性的情况



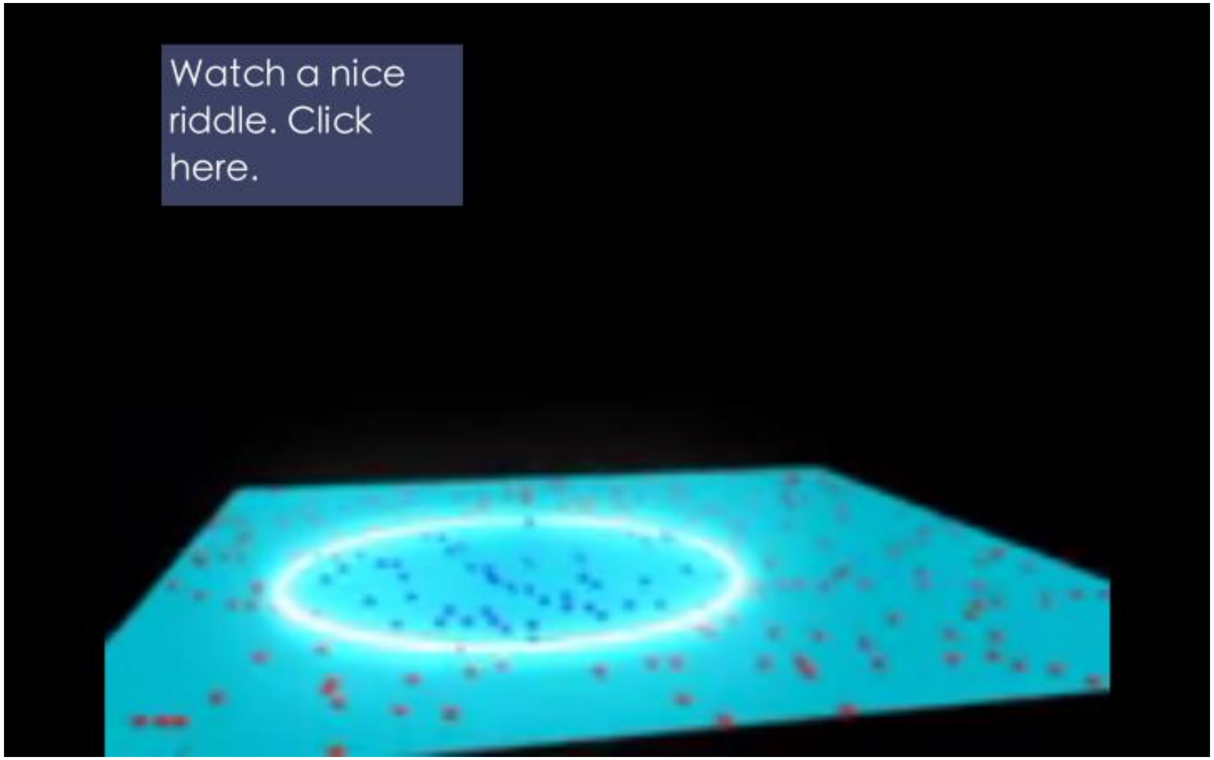


非线性的情况





非线性的情况



SVM-低维映射高维

Talk is cheap

Show me the

CODE

映射举例

3维输入向量：$X = (x_1, x_2, x_3)$

转化到6维空间 Z 中去：

$$\phi_1(X) = x_1,\ \phi_2(X) = x_2,\ \phi_3(X) = x_3,\ \phi_4(X) = (x_1)^2,\ \phi_5(X) = x_1x_2, \text{ and } \phi_6(X) = x_1x_3.$$

新的决策超平面：$d(Z) = WZ + b$,，其中W和Z是向量，这个超平面是线性的，解出W和b之后，并且带回原方程：

$$\begin{aligned} d(Z) &= w_1x_1 + w_2x_2 + w_3x_3 + w_4(x_1)^2 + w_5x_1x_2 + w_6x_1x_3 + b \\ &= w_1z_1 + w_2z_2 + w_3z_3 + w_4z_4 + w_5z_5 + w_6z_6 + b \end{aligned}$$

存在的问题

$$min_\alpha \left[\sum_{i=1}^{n} \alpha_i - \frac{1}{2} \sum_{i,j=1}^{n} \alpha_i \alpha_j y_i y_j x_i^T x_j \right], \sum_{i=1}^{k} \alpha_i y_i = 0 \, , C \geq \alpha_i \geq 0$$

$$min_\alpha \left[\sum_{i=1}^{n} \alpha_i - \frac{1}{2} \sum_{i,j=1}^{n} \alpha_i \alpha_j y_i y_j \emptyset(x_i)^T \emptyset(x_j) \right], \sum_{i=1}^{k} \alpha_i y_i = 0 \, , C \geq \alpha_i \geq 0$$

1.维度灾难
红色的地方要使用映射后的样本向量做内积
假如最初的特征是n维的，我们把它映射到n^2维，然后再计算。这样需要的时间从原来的的O(n)，变成了$O(n^2)$

2.如何选择合理的非线性转换？

引入核函数

我们可以构造核函数使得运算结果等同于非线性映射，同时运算量要远远小于非线性映射。

$$K(X_i, X_j) = \phi(X_i) \cdot \phi(X_j)$$

h 次多项式核函数：$K(X_i, X_j) = (X_i \cdot X_j + 1)^h$

高斯径向基函数核函数：$K(X_i, X_j) = e^{-\|X_i - X_j\|^2 / 2\sigma^2}$

S 型核函数：$K(X_i, X_j) = \tanh(\kappa X_i \cdot X_j - \delta)$

核函数举例

假设定义两个向量： x = (x1, x2, x3); y = (y1, y2, y3)
定义高维映射方程：f(x) = (x1x1, x1x2, x1x3, x2x1, x2x2, x2x3, x3x1, x3x2, x3x3)
假设x = (1, 2, 3)，y = (4, 5, 6).
f(x) = (1, 2, 3, 2, 4, 6, 3, 6, 9)
f(y) = (16, 20, 24, 20, 25, 36, 24, 30, 36)
求内积<f(x), f(y)> = 16 + 40 + 72 + 40 + 100+ 180 + 72 + 180 + 324 = 1024

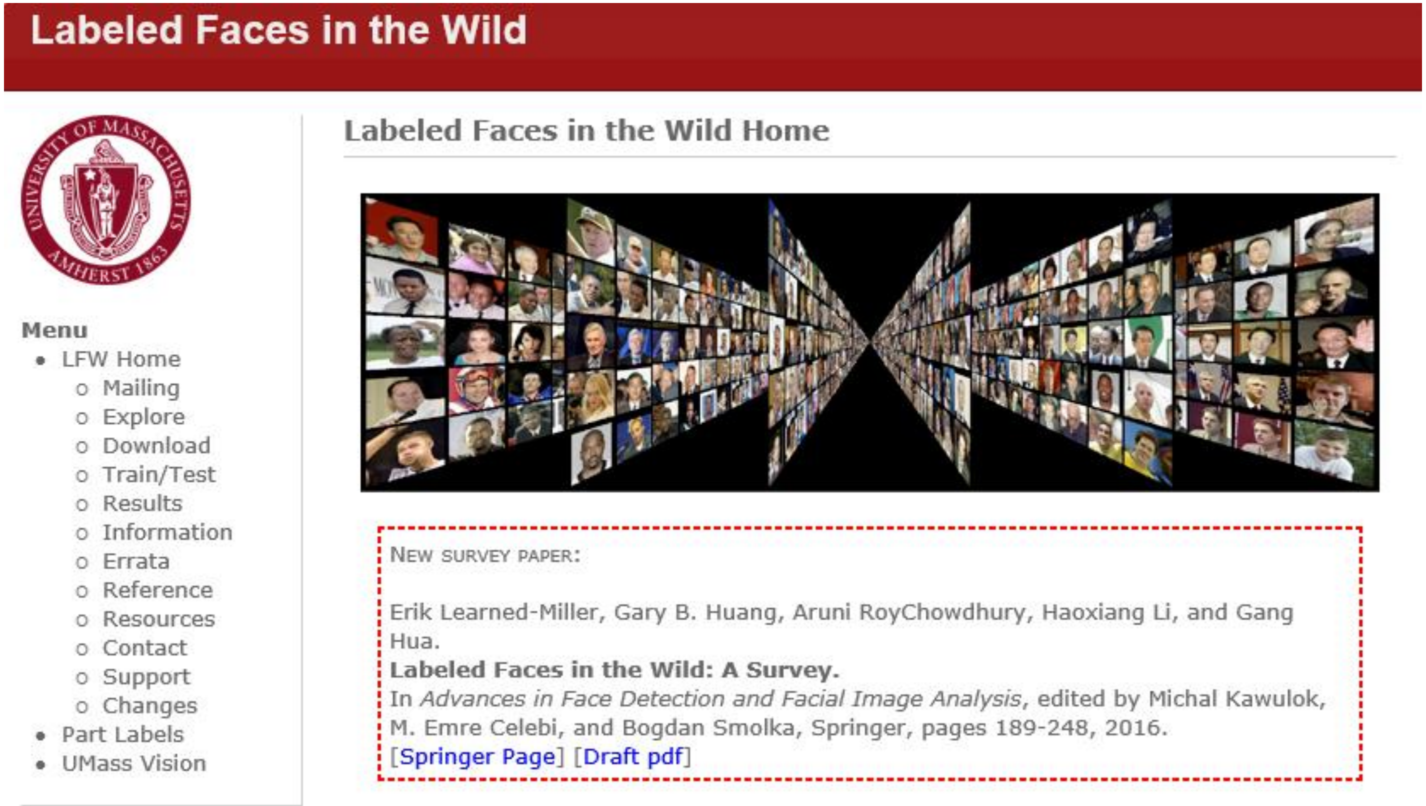
定义核函数：K(x,y) = (<f(x), f(y)>)^2
K(x,y) = (4 + 10 + 18)^2 = 1024
同样的结果，使用核方法计算容易得多。

SVM优点

- 训练好的模型的算法复杂度是由支持向量的个数决定的，而不是由数据的维度决定的。所以SVM不太容易产生overfitting
- SVM训练出来的模型完全依赖于支持向量(Support Vectors), 即使训练集里面所有非支持向量的点都被去除，重复训练过程，结果仍然会得到完全一样的模型。
- 一个SVM如果训练得出的支持向量个数比较小，SVM训练出的模型比较容易被泛化。

LFW人脸数据集

http://vis-www.cs.umass.edu/lfw/



SVM-人脸识别

Talk is cheap

Show me the

CODE