SVM

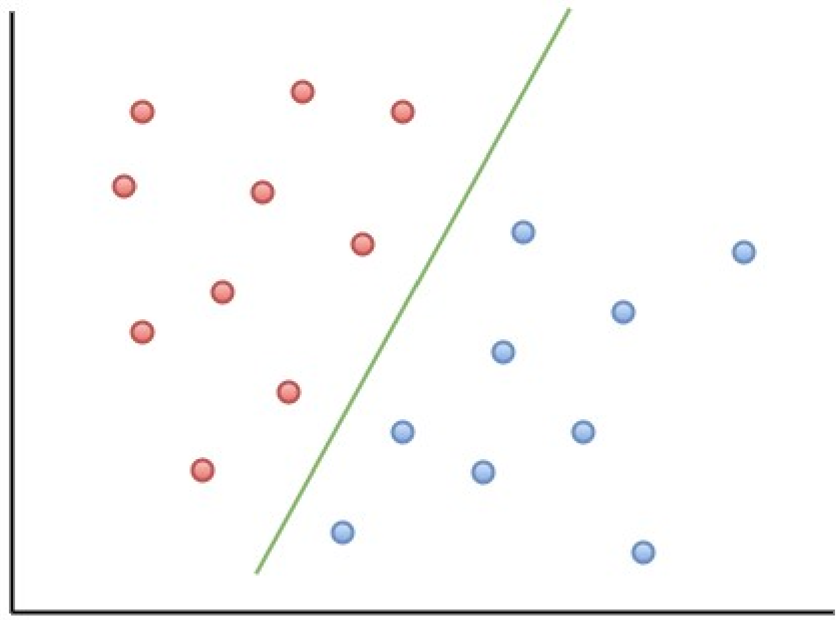
机器学习的一些算法

0. 写在前面

因为习惯上使用列向量表示一条记录，本文后面也会遵循这个准则。不过为了方便有时我会省略转置符号，但我们说到向量默认都是指列向量。

1. 间隔和支持向量

1.1 什么是线性可分？



上面的再二维界面上，两类点被一条直线完全分开，叫做线性可分。

严格的数学定义是:
D_0 和 D_1 是 n 维欧氏空间中的两个点集（点的集合）。如果存在 n 维向量 w 和实数 b，使得所有属于 D_0 的点 x_i 都有 $wx_i + b > 0$，而对于所有属于 D_1 的点 x_j 则有 $wx_j + b < 0$。则我们称 D_0 和 D_1 线性可分。

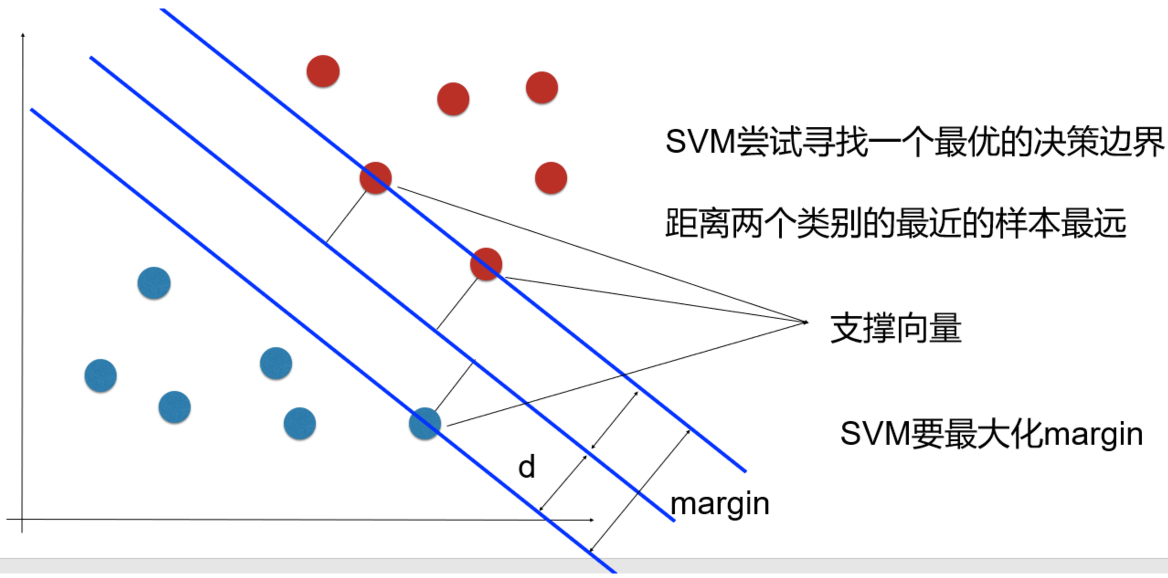
1.2 什么超平面？什么是最大间隔超平面？

上面提到的，将 D_0 和 D_1 完全正确地划分开的 $wx + b = 0$，就是一个超平面。

以最大间隔把两类样本分开的超平面，是最佳超平面！也称之为最大间隔超平面。

- 两类样本分别分隔在该超平面的两侧；
- 两侧距离超平面最近的样本点到超平面的距离被最大化了。

1.3 什么是支持向量？



在蓝色样本中存在一些距离我们的**超平面**最近的一些点，这些点叫做支撑向量。

1.4 svm的最优化问题是什么?

首先我们想要最优化的是各类样本点到超平面的距离最远（其实也就是找到最大间隔超平面）。

然后任意一个超平面可以用下面这个线性方程来描述:

$$w^T x + b = 0$$

n维空间距离又是怎么算的呢?
我们看二维空间点(x, y)到直线的$Ax + By + C = 0$的距离计算公式是:

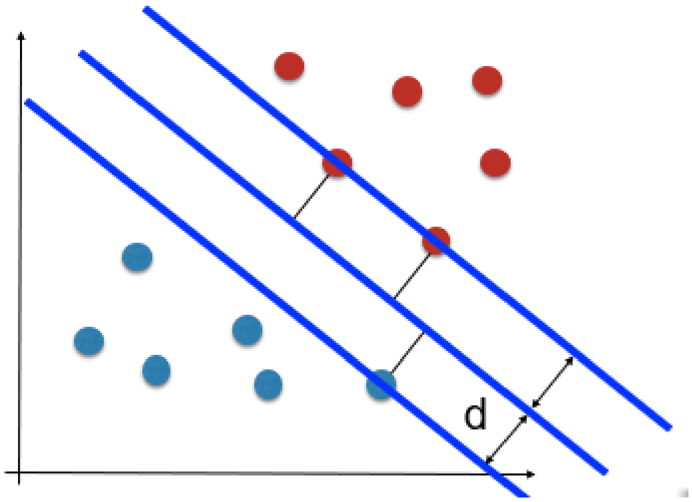
$$\frac{|Ax + By + C|}{\sqrt{A^2 + B^2}}$$

那我们拓展到n维也是同样的，点x到直线$w^T x + b = 0$的距离为:

$$\frac{|w^T x + b|}{||w||}$$

其中$||w|| = \sqrt{w_1^2 + \cdots + w_d^2}$

距离知道怎么计算了，再看这样一幅图:



根据支撑向量的定义，是样本中离超平面最近的点，所以所有的其他的红色点距离超平面的距离一定大于d，那么我们有这样一个公式:

$$\begin{cases} \frac{w^T x_i + b}{||w||} \geq d & y_i = 1 \\ \frac{w^T x_i + b}{||w||} \leq -d & y_i = -1 \end{cases}$$

稍作转化可以得到:

$$\begin{cases} \frac{w^T x_i + b}{||w||d} \geq 1 & y_i = 1 \\ \frac{w^T x_i + b}{||w||d} \leq -1 & y_i = -1 \end{cases}$$

然后能够得到：

$$\begin{cases} w^T x_i + b \geq 1 & y_i = 1 \\ w^T x_i + b \leq -1 & y_i = -1 \end{cases}$$

对于上面这个方程我们还能简写一下：

$$y_i(w^T x_i + b) \geq 1$$

所以我们可以得到上下两个超平面的方程为：

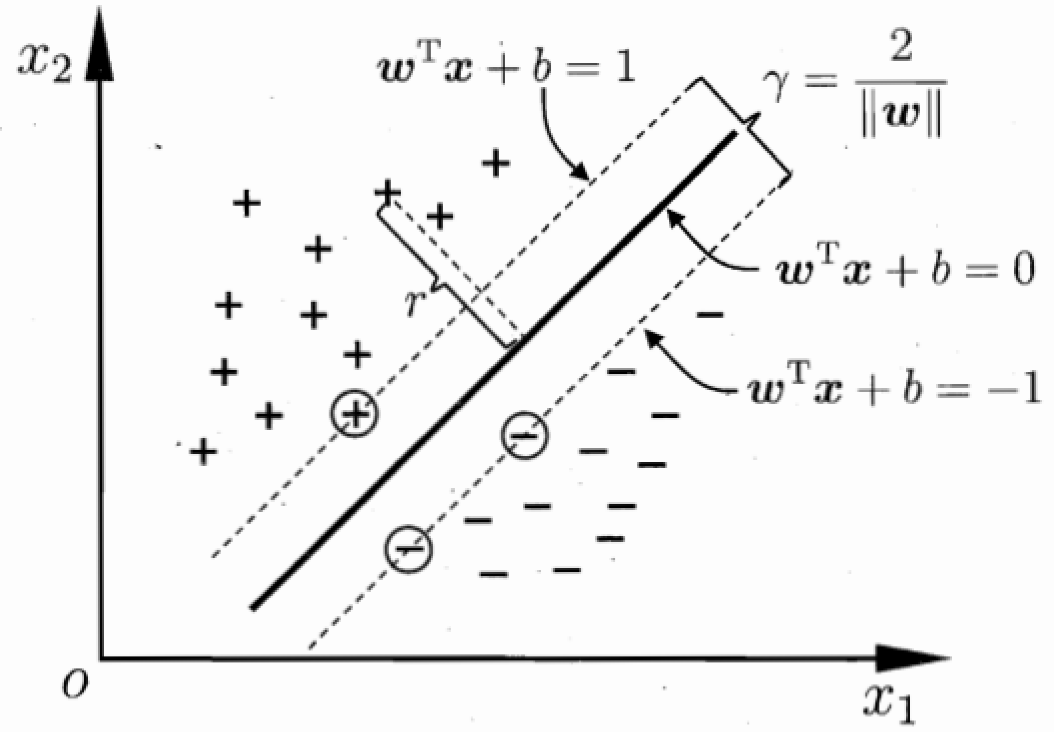


图 6.2 支持向量与间隔

并且每个支撑向量到超平面的距离可以写为：

$$d = \frac{|w^T x_i + b|}{||w||}$$

我们要最大化这个距离也就是

$$max \frac{|w^T x_i + b|}{||w||}$$

在样本点确定以后，$|w^T x_i + b|$是一个常数，所以这个式子就变成了：

$$max \frac{1}{||w||}$$

也就是:

$$min||w||$$

为了计算方便，我们取:

$$min\ \frac{1}{2}||w||^2$$

所以得到最后的优化问题是:

$$min\ \frac{1}{2}||w||^2$$

$$s.t.\ \ y_i(w^T x_i + b) \geq 1$$

2. 对偶问题

2.1 约束条件下的目标函数如何求解最优化问题?

可以使用拉格朗日乘子法进行求解，将原本有约束的优化问题，转化为对拉格朗日函数的无约束优化问题了。

拉格朗日乘子法的定义（以三维空间为例）：

$$L(x, y, \lambda) = f(x, y) + \lambda g(x, y)$$

其中 λ 是拉格朗日乘子。

拉格朗日函数把原本的目标函数和其限制条件整合成了一个函数，这样子约束问题就不存在了，我们可以直接对该目标函数求解其极值。

2.2 怎么理解对偶问题

首先，原问题是:

$$min_{w,b}\ \frac{||w||^2}{2}$$

$$s.t.\quad g_i(w, b) = 1 - y_i(wx_i + b) \leqslant 0,\ \ i = 1, 2, \ldots, m$$

拉格朗日乘子法转化后，变成了:

$$L(w, b, \lambda) = \frac{1}{2}||w||^2 + \sum_{i=1}^{m} \lambda_i [1 - y_i(wx_i + b)]$$

并且原问题变成了:

$$min_{w,b} max_{\lambda} L(w, b, \lambda)$$

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

我们首先直观的看一下，为什么转化后的下面的式子，可以替代上面的式子。
由于$\lambda_i \geq 0$
当$1 - y_i(wx_i + b) \geq 0$时，$max_\lambda L(w, b, \lambda)$是无穷，无意义。
当$1 - y_i(wx_i + b) \leq 0$时，$max_\lambda L(w, b, \lambda)$是$\frac{1}{2}$ $||w||^2$

所以min(无穷大，$\frac{1}{2}$ $||w||^2$)=$\frac{1}{2}$ $||w||^2$

所以你看这个转化后的式子实际上和原来想表达的是的一样的。

2.3 什么是对偶问题

我们简单点来讲，对偶问题实际上就是将

$$min_{w,b} max_\lambda L(w, b, \lambda)$$

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

变成了

$$max_\lambda min_{w,b} L(w, b, \lambda)$$

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

我们假设有一个函数f我们一定有：

$$min\, max f \geq max\, min f$$

也就是说，最大的里面挑出来的最小的，也要比最小的里面挑出来的最大的要大。

这个关系实际上就是弱对偶关系，那什么是强对偶关系呢？

$$min\, max f = max\, min f$$

我们上面实际上就是用了强对偶的关系。

为什么这里能够使用强对偶关系是不做要求的，但我们可以写出来，供大家扩展。

如果主问题是凸优化问题，也就是说当：

1. 拉格朗日函数中的 $f(x)$ 和 $g_j(x)$ 都是凸函数；
2. $h_i(x)$ 是仿射函数；
3. 主问题可行域中至少有一点使得不等式约束严格成立。即存在 x，对所有 j，均有 $g_j(x) < 0$。

1、2、3同时成立时，强对偶性成立。

2.4 KKT约束条件

首先我们看一下什么是kkt条件，以本节SVM为例：

1. $\frac{\partial L}{\partial w}=0$ $\frac{\partial L}{\partial b}=0$
2. $\lambda_i(1-y_i(wx_i+b))=0$
3. $\lambda_i \geq 0$
4. $1-y_i(wx_i+b) \leq 0$

什么时候KKT条件成立呢?
原问题具有强对偶性的**充要条件**是满足KKT条件

上面这个式子告诉了我们什么事?
直观的来讲就是，支撑向量满足$1-y_i(wx_i+b)=0$，所以$\lambda_i>0$即可。
而其他向量，$1-y_i(wx_i+b)<0$，$\lambda_i=0$

2.4 求解svm的优化问题步骤

我们已知svm优化的主问题是:

$$min_{w,b}\frac{||w||^2}{2}$$

$$s.t.\quad g_i(w,b)=1-y_i(wx_i+b)\leqslant 0,\ i=1,2,\ldots,m$$

那么使用对偶算法求解线性可分的svm的步骤为:
步骤1: 对主问题构造拉格朗日函数。
引入拉格朗日乘子$\lambda_i\geqslant 0$，其中$i=1$，2，$\ldots,m$，得到拉格朗日函数:

$$L(w,b,\lambda)=\frac{1}{2}||w||^2+\sum_{i=1}^{m}\lambda_i[1-y_i(wx_i+b)]$$

步骤2: 求拉格朗日函数对于 w，b 的最小（**还记得上面对偶问题的转换吗**）。
我们再把上面对偶关系转化成了形式写一下:

$$max_\lambda min_{w,b}L(w,b,\lambda)$$

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

首先对w求偏导得到:

$$\frac{\partial L}{\partial w}=w-\sum_{i=1}^{m}\lambda_i x_i y_i=0$$

然后再对b求偏导:

$$\frac{\partial L}{\partial b}=\sum_{i=1}^{m}\lambda_i y_i=0$$

最终得到结果:

$$w=\sum_{i=1}^{m}\lambda_i x_i y_i$$

$$\sum_{i=1}^{m} \lambda_i y_i = 0$$

我们将这个结果带回拉格朗日函数中可得：

$$L(w,b,\lambda) = \frac{1}{2}\sum_{i=1}^{m}\sum_{j=1}^{m}\lambda_i\lambda_j y_i y_j (x_i \cdot x_j) + \sum_{i=1}^{m}\lambda_i - \sum_{i=1}^{m}\lambda_i y_i ((\sum_{j=1}^{m}\lambda_j y_j x_j)\cdot x_i + b)$$

$$= \frac{1}{2}\sum_{i=1}^{m}\sum_{j=1}^{m}\lambda_i\lambda_j y_i y_j (x_i \cdot x_j) + \sum_{i=1}^{m}\lambda_i - \sum_{i=1}^{m}\sum_{j=1}^{m}\lambda_i\lambda_j y_i y_j (x_i \cdot x_j) - b\sum_{i=1}^{m}\lambda_i y_i$$

$$= \sum_{i=1}^{m}\lambda_i - \frac{1}{2}\sum_{i=1}^{m}\sum_{j=1}^{m}\lambda_i\lambda_j y_i y_j (x_i \cdot x_j)$$

实际上也就是：

$$min_{w,b}L(w,b,\lambda) = \sum_{i=1}^{m}\lambda_i - \frac{1}{2}\sum_{i=1}^{m}\sum_{j=1}^{m}\lambda_i\lambda_j y_i y_j (x_i \cdot x_j)$$

步骤3：求 $min_{w,b}L(w,b,\lambda)$ 对 λ 的最大。
这还是上面所说的对偶问题，还记得什么是强对偶性吗。

所以我们现在求解变成了这样：

$$max_{\lambda}[\sum_{i=1}^{m}\lambda_i - \frac{1}{2}\sum_{i=1}^{m}\sum_{j=1}^{m}\lambda_i\lambda_j y_i y_j (x_i \cdot x_j)]$$

$$s.t. \sum_{i=1}^{m}\lambda_i y_i = 0$$

$$\lambda_i \geqslant 0, \quad i = 1, 2, \ldots, m$$

对于凸优化问题，我们习惯于求min而不是max，稍作转化问题变成了这样：

$$min_{\lambda}[\frac{1}{2}\sum_{i=1}^{m}\sum_{j=1}^{m}\lambda_i\lambda_j y_i y_j (x_i \cdot x_j) - \sum_{i=1}^{m}\lambda_i]$$

$$s.t. \sum_{i=1}^{m}\lambda_i y_i = 0$$

$$\lambda_i \geqslant 0, \quad i = 1, 2, \ldots, m$$

步骤4：由对偶问题求 $\lambda_1, \lambda_2, \ldots, \lambda_m$。

设：$T(\lambda_1, \lambda_2, \ldots, \lambda_m) = \frac{1}{2}\sum_{i=1}^{m}\sum_{j=1}^{m}\lambda_i\lambda_j y_i y_j (x_i \cdot x_j) - \sum_{i=1}^{m}\lambda_i$

问题就变成了求解T在约束条件下的最优解。

我们可以通过**SMO**算法求出这个最优解λ^*。

步骤5：由 λ^* 求 w。
由步骤1已知：

$$w=\sum_{i=1}^{m}\lambda_i y_i x_i$$

x_i、y_i 已知，λ_i^* 已由上一步求出，将它们带入上式，求w。

步骤6：由 w求 b。

$\lambda_1*, \lambda_2*, \ldots, \lambda_m *$都已经求出来了。

因为λ_i（$1-y_i(wx_i+b)$）$=0; \quad i=1, 2, \ldots, m$是整体约束条件(**KKT约束条件**)；又因为对于所有支持向量(x_s，y_s)，都有$1-y_s(wx_s+b)=0$，因此，所有大于0的λ_k^* 所对应的(x_k, y_k)必然是支持向量。

这样我们就能确认样本点中哪些是支撑向量。

那么既然哪些 (x, y) 对是支持向量都已经清楚了，理论上讲，我们随便找一个支持向量(x_s, y_s)，把它和 w 带入：$y_s(wx_s+b)=1$，求出 b 即可。

$y_s(wx_s)+y_s b=1$，两边乘以y_s。

$y_s^2(wx_s)+y_s^2 b=y_s$，因为$y_s^2=1$，所以：$b=y_s-wx_s$。

为了更加鲁棒，我们可以求所有支持向量的均值：

$b=\frac{1}{|S|}\sum_{s\in S}(y_s-wx_s)$。

步骤7： 求最终结果。
现在w和b都求出来了
我们就能构造出最大间隔超平面：$wx+b=0$。

构造分类决策函数：$f(x)=sign(wx+b)$。

其中，$sign(\cdot)$ 全称为 $SignumFunction$。其定义为：

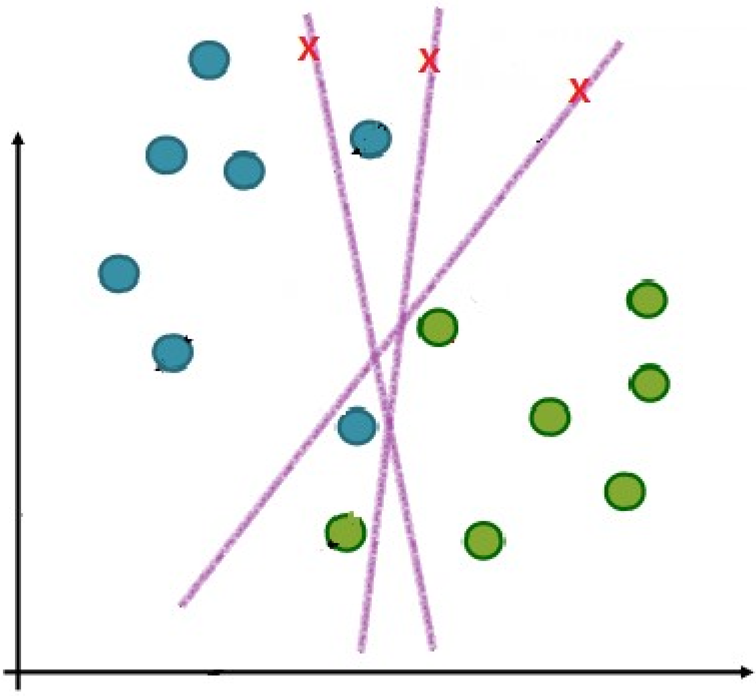
$$\operatorname{sign}(x)=\begin{cases}-1 & : & x<0 \\ 0 & : & x=0 \\ 1 & : & x>0\end{cases}$$

将新的样本点带入到决策函数中，可以得到样本的分类。

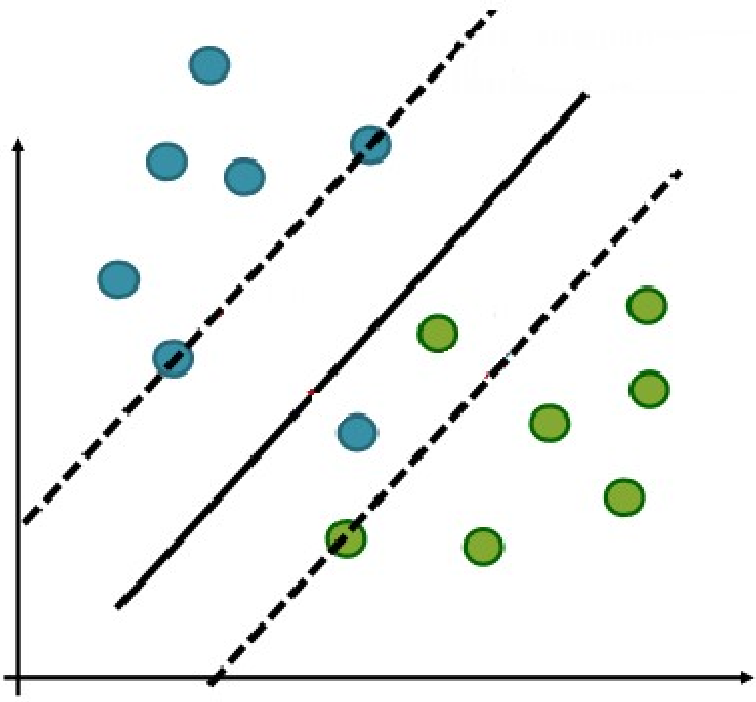
3. 软间隔

3.1 软间隔的提出是解决什么问题的?

在实际的应用中，完全线性可分的样本是很少的，如果遇到了不能够完全线性可分的样本，比如下面这个：



我们应该怎么办？所以提出了软间隔，允许个别样本点出现在间隔带里面，比如：

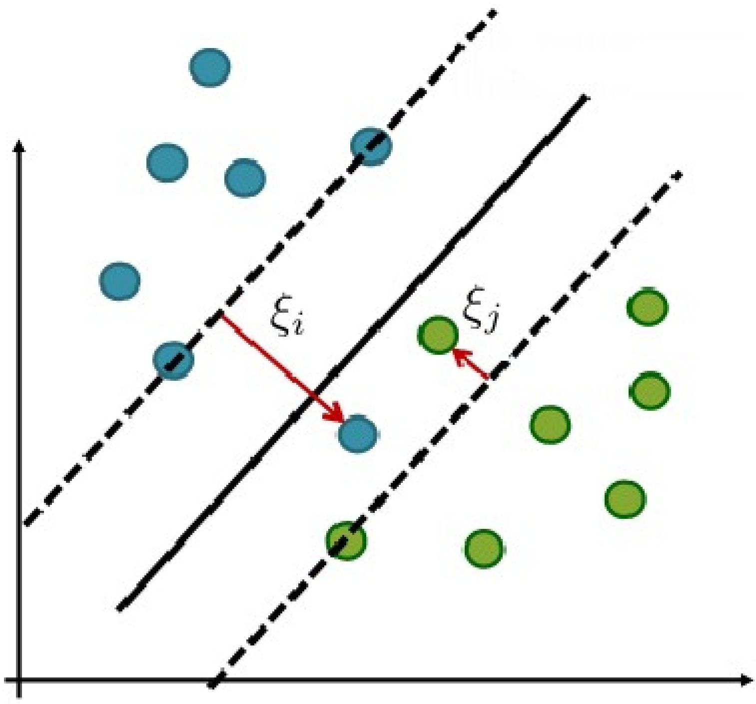


这样就允许了部分样本点不满足约束条件：

$$y_i(wx_i + b) \geqslant 1$$

为了度量这个间隔“软”到何种程度，我们针对每一个样本(x_i, y_i)，引入一个松弛变量ξ_i，令 $\xi_i \geqslant 0$，且 $y_i(wx_i + b) \geqslant 1 - \xi_i$。

对应到图上就是：



3.2 软间隔后的线性svm的最优化问题是什么?

优化目标

从原来的线性可分的优化目标

$$min_{w,b} \frac{||w||^2}{2}$$

$$s.t. \quad 1 - y_i(wx_i + b) \leqslant 0, \ i = 1,2,...,m$$

变成了：

$$min_{w,b,\xi} \frac{1}{2}||w||^2 + C\sum_{i=1}^{m}\xi_i$$

$$s.t. \quad y_i(wx_i + b) \geqslant 1 - \xi_i, \ i = 1,2,...,m; \ \xi_i \geqslant 0, \ i = 1,2,...,m$$

其中 C 是一个大于0的常数，若 C 为无穷大，则 ξ_i 必然为无穷小，否则将无法最小化主问题。如此一来，线性 SVM 就又变成了线性可分 SVM。

当 C 为有限值的时候，才能允许**部分样本**不遵守约束条件 $1 - y_i(wx_i + b) \leqslant 0$。

我们将优化目标整理成和线性可分的形式一样即为：

$$min_{w,b,\xi} \frac{1}{2}||w||^2 + C\sum_{i=1}^{m}\xi_i$$

$$s.t. \quad 1 - \xi_i - y_i(wx_i + b) \leqslant 0, \ i = 1,2,...,m; \quad -\xi_i \leqslant 0, \ i = 1,2,...,m$$

我们开始和上面一样使用对偶算法求解上面的最优化问题：

步骤1：构造拉格朗日函数

$$L(w,b,\xi,\lambda,\mu)=\frac{1}{2}\|w\|^2+C\sum_{i=1}^{m}\xi_i+\sum_{i=1}^{m}\lambda_i[1-\xi_i-y_i(wx_i+b)]+\sum_{i=1}^{m}(-\mu_i\xi_i)$$

$$\lambda_i\geqslant 0,\ \ \mu_i\geqslant 0$$

其中λ_i和 μ_i是拉格朗日乘子，而 w、b 和 ξ_i 是主问题参数。

根据主问题的对偶性，主问题的对偶问题是：

$$max_{\lambda,\mu}min_{w,b,\xi}L(w,b,\xi,\lambda,\mu)$$

步骤2：最小化拉格朗日函数

首先 对 w、b和 ξ 最小化 $L(w,b,\xi,\lambda,\mu)$——分别对 w、b 和 ξ_i 求偏导，然后令导数为0，得出如下关系：

$$w=\sum_{i=1}^{m}\lambda_iy_ix_i$$

$$0=\sum_{i=1}^{m}\lambda_iy_i$$

$$C=\lambda_i+\mu_i$$

将这些关系带入线性 SVM 主问题的拉格朗日函数，得到：

$$min_{w,b,\xi}L(w,b,\xi,\lambda,\mu)=\sum_{i=1}^{m}\lambda_i-\frac{1}{2}\sum_{i=1}^{m}\sum_{j=1}^{m}\lambda_i\lambda_jy_iy_j(x_i\cdot x_j)$$

步骤3：求 $min_{w,b}L(w,b,\xi,\lambda,\mu)$ 对 λ 的最大。

因为上面最小化的结果中只有 λ 而没有 μ，所以现在只需要最大化 λ 就好：

$$max_{\lambda,\mu}min_{w,b,\xi}L(w,b,\xi,\lambda,\mu)=max_{\lambda}(\sum_{i=1}^{m}\lambda_i-\frac{1}{2}\sum_{i=1}^{m}\sum_{j=1}^{m}\lambda_i\lambda_jy_iy_j(x_i\cdot x_j))$$

$$s.t.\ \ \sum_{i=1}^{m}\lambda_iy_i=0;\ \ C-\lambda_i-\mu_i=0;\ \ \lambda_i\geqslant 0;\ \ \mu_i\geqslant 0;\ \ i=1,2,\ldots,m$$

步骤4：使用SMO算法求解

我们同样可以和之前一样，将最大化问题转化为最小化问题：

$$max_{\lambda}(\sum_{i=1}^{m}\lambda_i-\frac{1}{2}\sum_{i=1}^{m}\sum_{j=1}^{m}\lambda_i\lambda_jy_iy_j(x_i\cdot x_j))=min(\frac{1}{2}\sum_{i=1}^{m}\sum_{j=1}^{m}\lambda_i\lambda_jy_iy_j(x_i\cdot x_j)-\sum_{i=1}^{m}\lambda_i)$$

$$s.t.\ \ \sum_{i=1}^{m}\lambda_iy_i=0;\ \ 0\leqslant\lambda_i\leqslant C;\ \ i=1,2,\ldots,m$$

然后我们可以看到，实际上差别只在约束条件上，所以我们同样可以使用SMO算法进行求解出拉个朗日乘子λ^*。

步骤5：求解w和b
由$w = \sum_{i=1}^{m} \lambda_i y_i x_i$求出$w$。

因为最终要求得的超平面满足 w x + b = 0，这一点是和线性可分 SVM 的超平面一样的，因此求解 b 的过程也可以照搬：

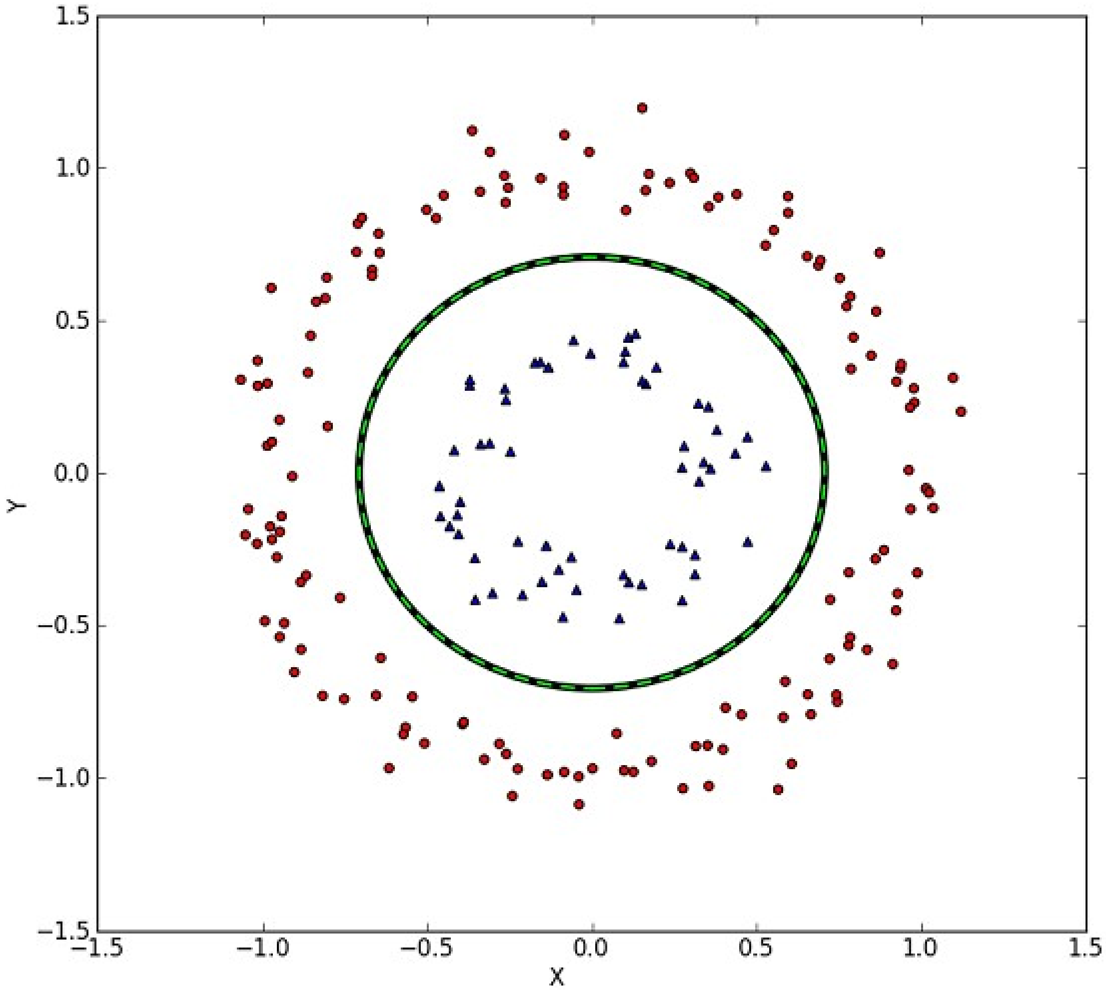
$b = \frac{1}{|S|} \sum_{s \in S}(y_s - w x_s)$
其中 S 是支持向量的集合。
在这里面会存在一个问题，就是到底那部分在间隔中的样本点，是不是支撑向量?
我们可以看到$w = \sum_{i=1}^{m} \lambda_i y_i x_i$，因此对于所有的$\lambda_i > 0$的点都能够影响到我们的超平面，因此都是支撑向量。

4. 核函数

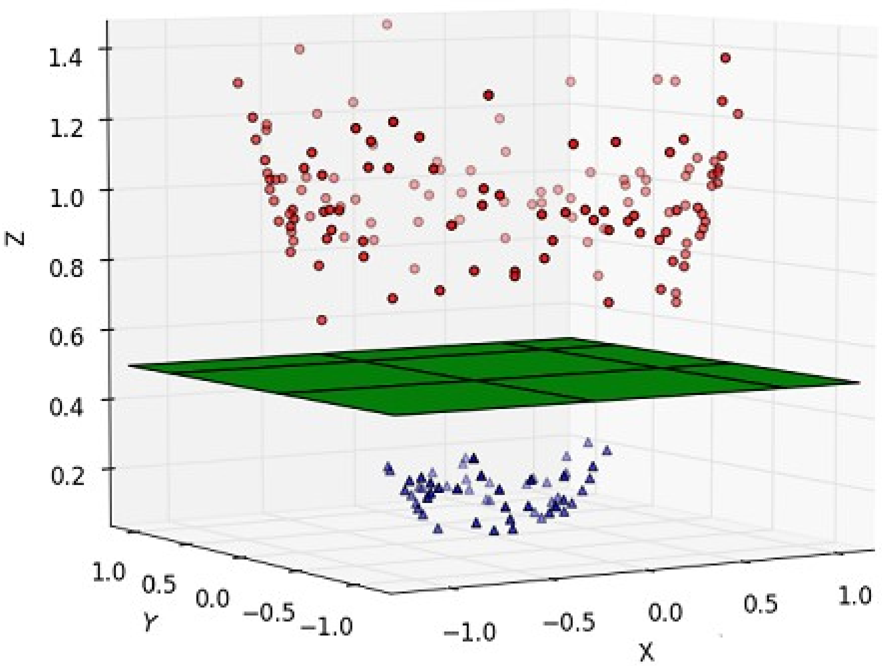
4.1 线性不可分问题怎么解决?

对svm来讲，最好的当然是样本完全线性可分，就算差一点不是完全的我们也希望绝大部分样本点线性可分。

但是我们可能碰到一种情况，样本点不是线性可分的，比如：



这种情况的一种解决办法就是，将二维线性不可分样本，映射到高维空间去，让样本点在高维空间线性可分，比如变成这样：



4.2 什么是非线性SVM

对于在有限维度向量空间中线性不可分的样本，我们将其映射到更高维度的向量空间里，再通过间隔最大化的方式，学习得到支持向量机，就是**非线性 SVM**。

我们将样本映射到的这个更高维度的新空间叫做**特征空间**。

我们现在用x来表示原来的样本点，用$\phi(x)$ 表示 x 映射到特征空间之后的新向量。

那么分隔超平面可以表示为：$f(x)=w\phi(x)+b$。

由上面的线性 SVM 的对偶问题，此处非线性 SVM 的对偶问题就变成了：

$$min(\frac{1}{2}\sum_{i=1}^{m}\sum_{j=1}^{m}\lambda_i\lambda_j y_i y_j \phi(x_i)\cdot\phi(x_j)-\sum_{i=1}^{m}\lambda_i)$$

$$s.t.\quad \sum_{i=1}^{m}\lambda_i y_i=0$$

$$0\leqslant\lambda_i\leqslant C,\quad i=1,2,\ldots,m$$

可以看到，和线性 SVM 唯一的不同就是：之前的 x_i 与x_j 的内积（点乘） 变成了 $\phi(x_i)$与 $\phi(x_j)$ 的内积。

4.3为什么要有核函数？

我们可以看到，对于非线性函数来说，和之前不同的主要是$\phi(x_i)$与 $\phi(x_j)$ 的内积。而由于是低维空间映射到高维空间，维度可能会很大，所以如果将全部样本的点乘全部计算好，这样的计算量太大了。

针对这个问题，我们的解决方式是**先不算**，用一个函数先代替，我们用

$$k(x_i,x_j)=\phi(x_i)\cdot\phi(x_j)$$

这样子函数$k(x_i,x_j)$称之为核函数

这样子大家可能还体会不到核函数的好处，那我们继续看下面的一个例子：
假设我们现在有一个多项式核函数：

$$k(x,y)=(x\cdot y+1)^2$$

对于这个核函数，如果带进样本的话，是这样的：

$$k(x,y)=(\sum_{i=1}^{n}(x_i\cdot y_i)+1)^2$$

这个式子展开式什么样子的？

$$\sum_{i=1}^{n}\left(x_i^2\right)\left(y_i^2\right)+\sum_{i=2}^{n}\sum_{j=1}^{i-1}\left(\sqrt{2}x_ix_j\right)\left(\sqrt{2}y_iy_j\right)+\sum_{i=1}^{n}\left(\sqrt{2}x_i\right)\left(\sqrt{2}y_i\right)+1$$

我们需要先把我们的向量映射成：

$$x^{'} = \left(x_n^2, \ldots, x_1^2, \sqrt{2}x_n x_{n-1}, \ldots, \sqrt{2}x_n, \ldots \sqrt{2}x_1, 1\right)$$

然后再进行计算，可见这个映射不管是计算量还是存储量都是非常巨大的。但是有了核函数，就不需要作这样的映射，直接使用原样本维度的点进行计算即可。

4.4 有了核函数，如何求解非线性SVM问题？

在有了核函数之后，非线性问题重新转变成了线性问题，和之前求解过程一样，先根据对偶函数求解λ，然后根据λ求解w，再根据支撑向量求解b即可。

4.5 一些常用的核函数。

线性核函数

$k(x_i, x_j) = x_i^T x_j$

使用时无须指定参数，它直接计算两个输入向量的内积。经过线性核函数转换的样本，特征空间与输入空间重合，相当于并没有将样本映射到更高维度的空间里去。

很显然这是最简单的核函数，实际训练、使用 SVM 的时候，在不知道用什么核的情况下，可以先试试线性核的效果。

多项式核（Polynomial Kernel）

$k(x_i, x_j) = (\gamma x_i^T x_j + r)^d, \quad \gamma > 0,\ d \geqslant 1$

需要指定三个参数：γ、r 和d。

这是一个不平稳的核，适用于数据做了归一化的情况。

RBF 核（Radial Basis Function Kernel）

$k(x_i, x_j) = \exp(-\gamma \|x_i - x_j\|^2), \quad \gamma > 0$

RBF 核又名高斯核 （Gaussian Kernel），是一个核函数家族。它会将输入空间的样本以非线性的方式映射到更高维度的空间（特征空间）里去，因此它可以处理类标签和样本属性之间是非线性关系的状况。

它有一个参数：γ，这个参数的设置非常关键！

如果设置过大，会使得模型变得非常复杂，容易过拟合，如果设置过小会使得模型变得非常简单，容易欠拟合。

不过相对于多项式核的3个参数，RBF 核只有一个参数需要调，还是相对简单的。

当线性核效果不是很好时，可以用 RBF 试试。或者，很多情况下可以直接使用 RBF。

在具体应用核函数时，最好针对具体问题参照前人的经验。