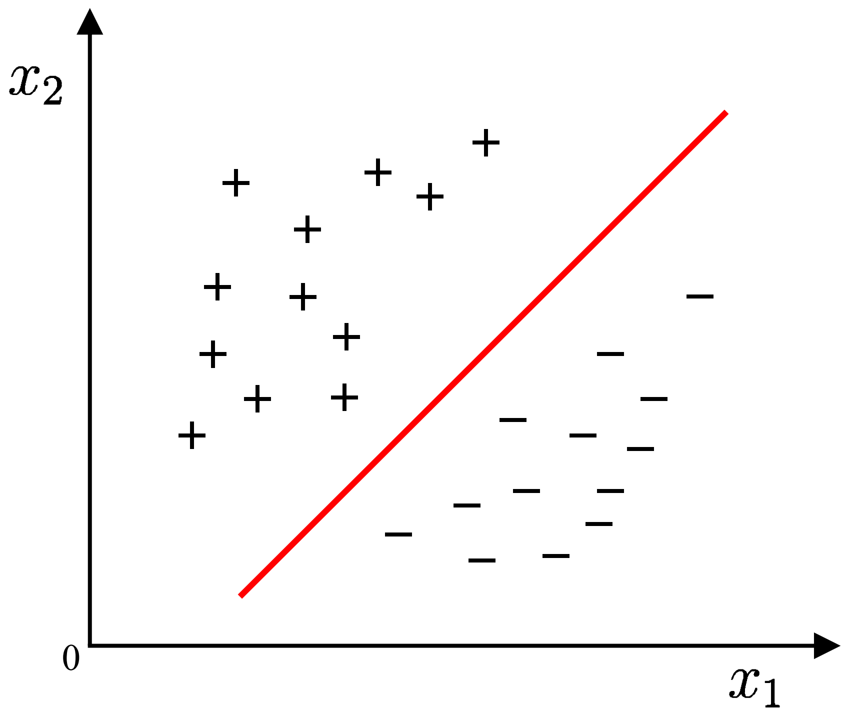
模式识别与机器学习

Pattern Recognition and Machine Learning

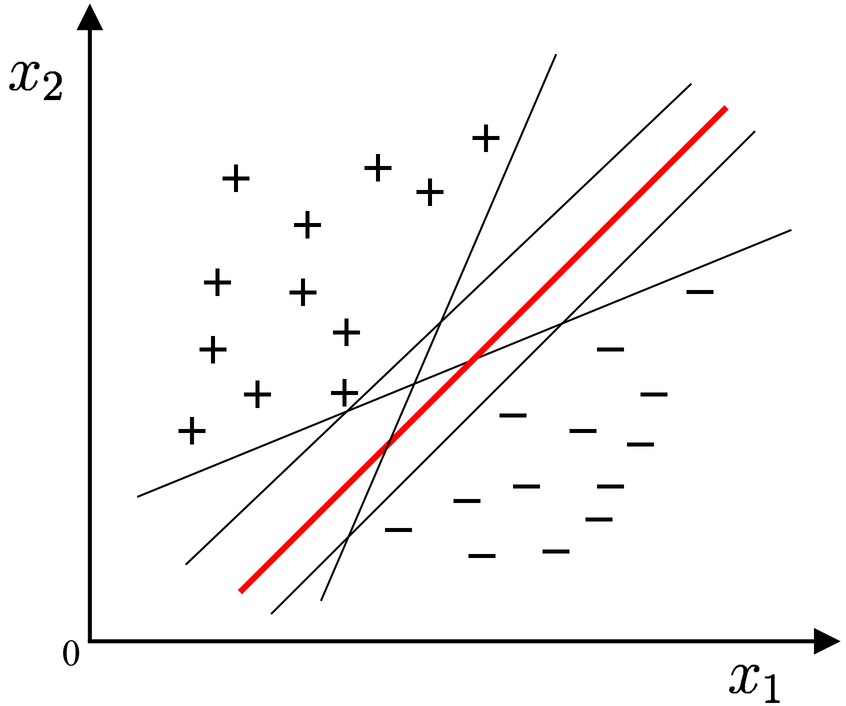
SVM概述

线性模型：在样本空间中寻找一个超平面, 将不同类别的样本分开.



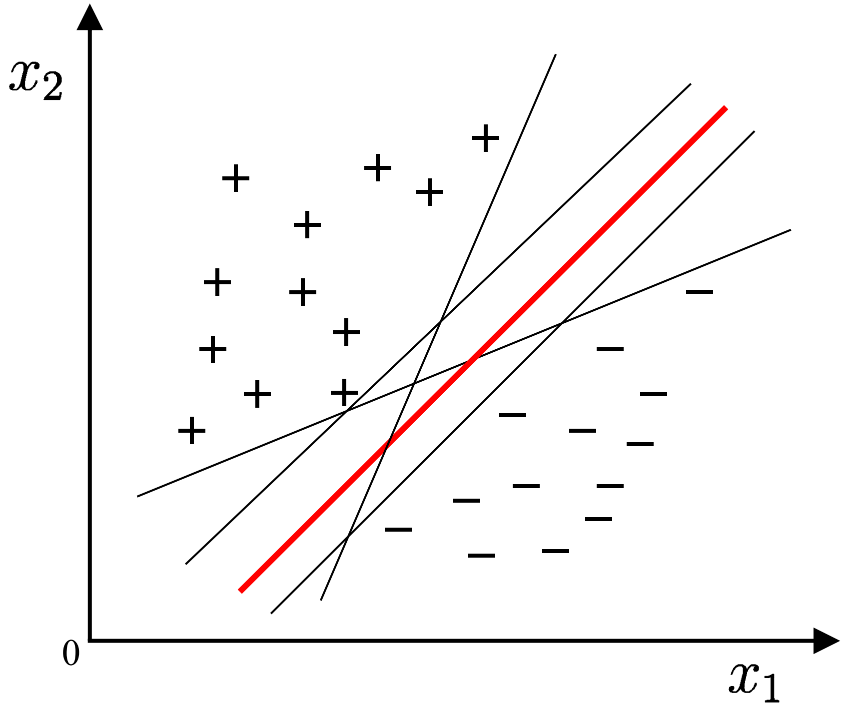
SVM概述

-Q:将训练样本分开的超平面可能有很多, 哪一个好呢?



SVM概述

-Q:将训练样本分开的超平面可能有很多, 哪一个好呢?

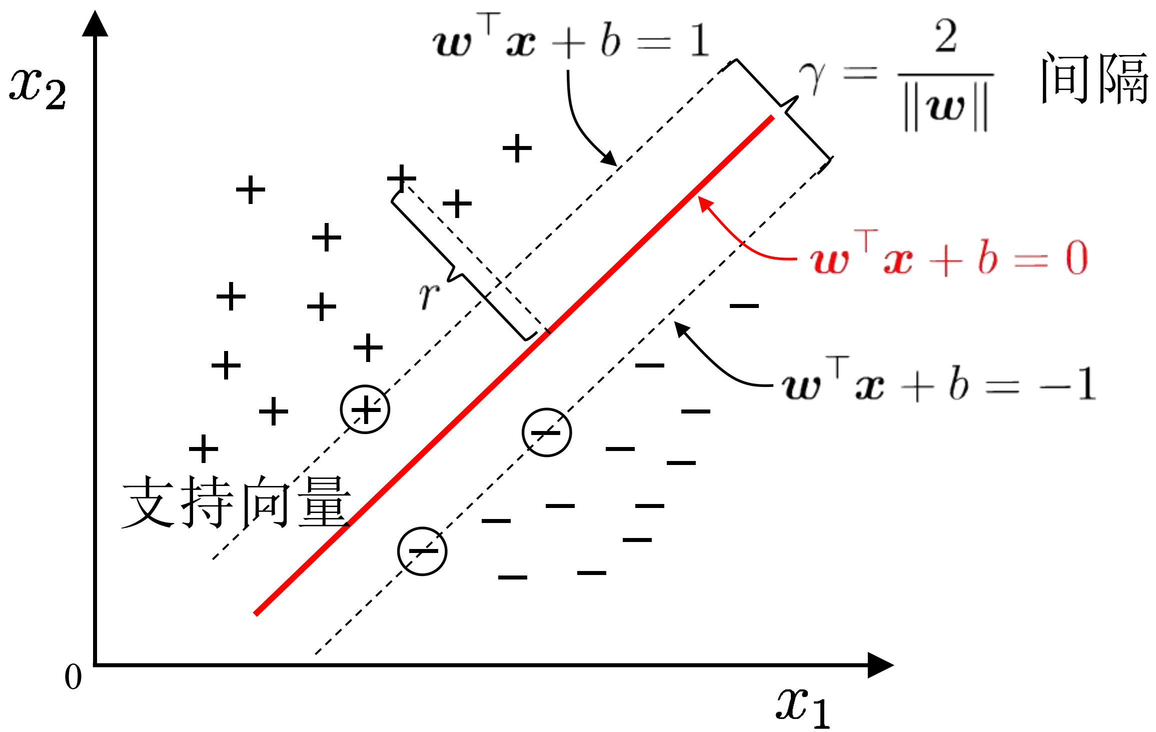


-A:应选择”正中间”, 容忍性好, 鲁棒性高, 泛化能力最强.

SVM概述

间隔与支持向量

超平面方程: $\boldsymbol{w}^{\top}\boldsymbol{x}+b=0$



SVM概述

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.

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

$\Downarrow$

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

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

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

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

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

  - 第三步：回代

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

对偶问题

解的稀疏性

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

- KKT条件：

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

$$y_i f(\boldsymbol{x}_i) > 1 \quad \Rightarrow \quad \alpha_i = 0$$

支持向量机解的稀疏性：训练完成后，大部分的训练样本都不需保留，最终模型仅与支持向量有关.

对偶问题

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

$$\alpha_i y_i + \alpha_j y_j = -\sum_{k \neq i,j} \alpha_k y_k, \quad \alpha_i \geq 0, \quad \alpha_j \geq 0.$$

> 用一个变量表示另一个变量, 回代入对偶问题可得一个单变量的二次规划, 该问题具有闭式解.

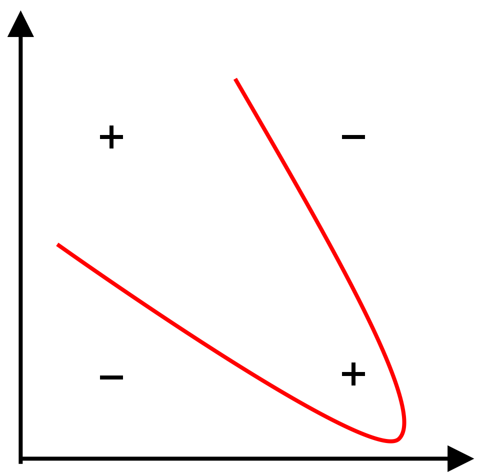
- 偏移项 b：通过支持向量来确定.

核函数

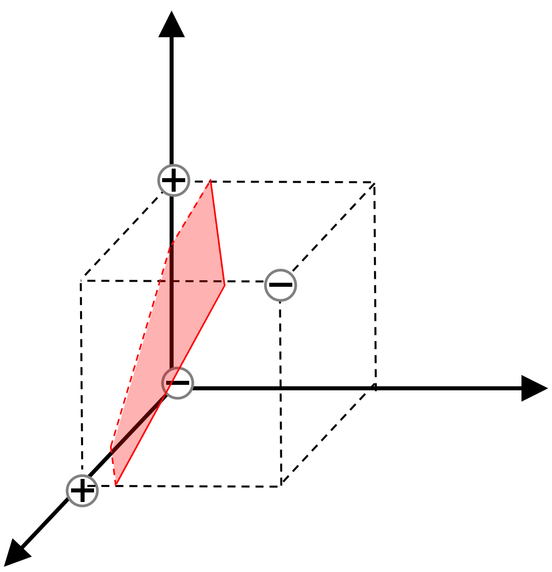
线性不可分

-Q:若不存在一个能正确划分两类样本的超平面, 怎么办?

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



$$\boldsymbol{x} \mapsto \phi(\boldsymbol{x})$$



核支持向量机

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

原始问题

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

对偶问题

$$\min_{\boldsymbol{\alpha}} \quad \frac{1}{2}\sum_{i=1}^{m}\sum_{j=1}^{m}\alpha_i\alpha_j y_i y_j \boxed{\phi(\boldsymbol{x}_i)^\top \phi(\boldsymbol{x}_j)} - \sum_{i=1}^{m}\alpha_i$$
$$\text{s.t.} \quad \sum_{i=1}^{m}\alpha_i y_i = 0,$$

只以内积的形式出现

预测

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

核函数

核函数

- 基本想法：不显式地设计核映射, 而是设计核函数.

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

- Mercer定理(充分非必要)：只要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.

- 常用核函数:

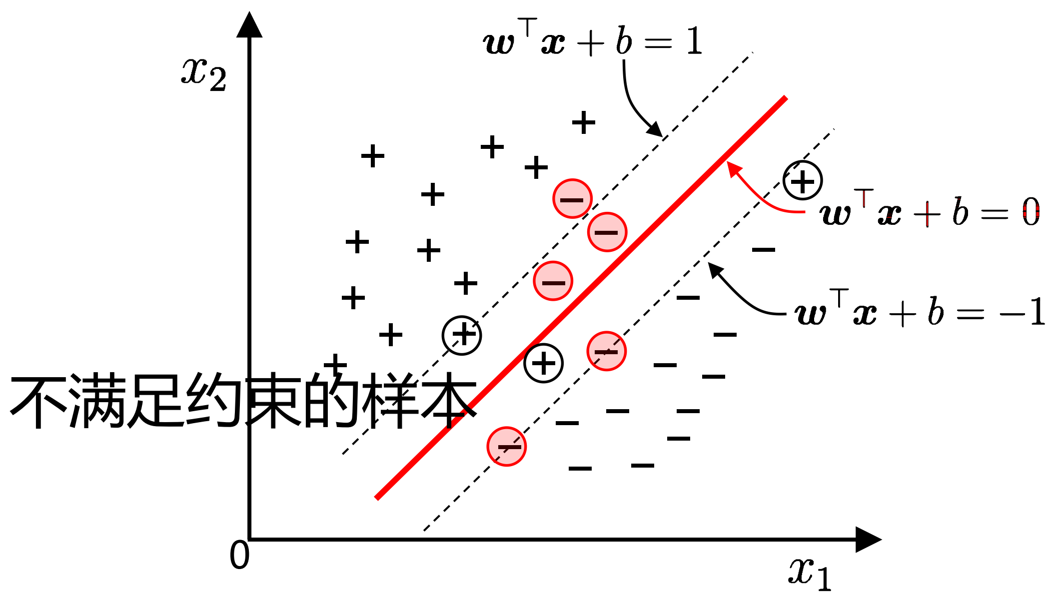
名称	表达式	参数
线性核	$\kappa(\boldsymbol{x}_i, \boldsymbol{x}_j) = \boldsymbol{x}_i^\top \boldsymbol{x}_j$	
多项式核	$\kappa(\boldsymbol{x}_i, \boldsymbol{x}_j) = (\boldsymbol{x}_i^\top \boldsymbol{x}_j)^d$	$d \geq 1$为多项式的次数
高斯核	$\kappa(\boldsymbol{x}_i, \boldsymbol{x}_j) = \exp\left(-\frac{\\|\boldsymbol{x}_i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

软间隔与正则化

软间隔

-Q:现实中, 很难确定合适的核函数使得训练样本在特征空间中线性可分; 同时一个线性可分的结果也很难断定是否是有过拟合造成的.

-A:引入"软间隔"的概念, 允许支持向量机在一些样本上不满足约束.



软间隔与正则化

0/1损失函数

- 基本想法：最大化间隔的同时, 让不满足约束的样本应尽可能少.

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

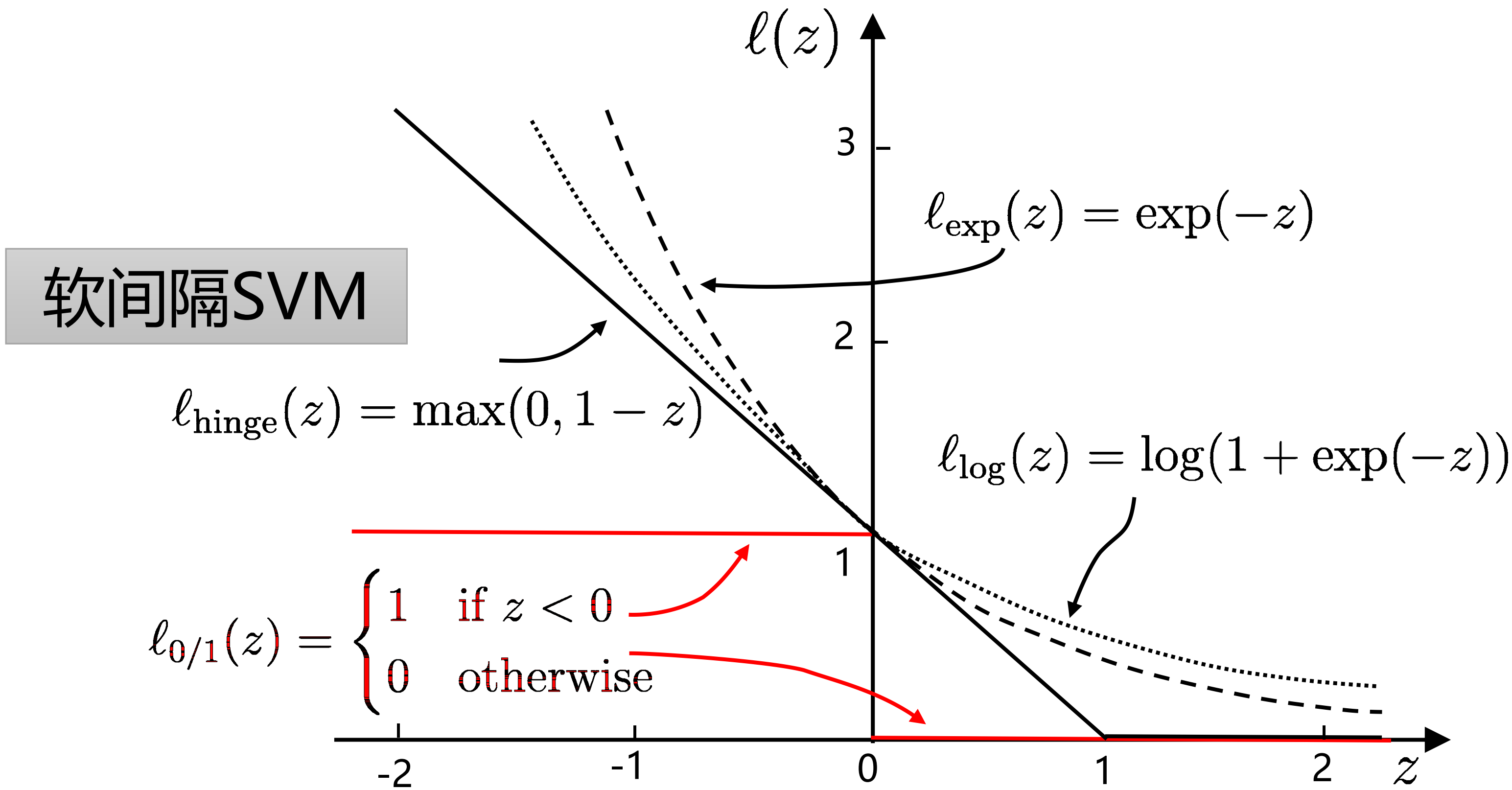
其中 $l_{0/1}$是”0/1损失函数”

$$l_{0/1} = \begin{cases} 1 & z < 0 \\ 0 & otherwise \end{cases}$$

- 存在的问题：0/1损失函数非凸、非连续, 不易优化!

软间隔与正则化

替代损失



替代损失函数数学性质较好，一般是0/1损失函数的上界

软间隔支持向量机

原始问题

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

对偶问题

$$\min_{\boldsymbol{\alpha}} \frac{1}{2}\sum_{i=1}^{m}\sum_{j=1}^{m}\alpha_i\alpha_j y_i y_j \phi(\boldsymbol{x}_i)^\top\phi(\boldsymbol{x}_j) - \sum_{i=1}^{m}\alpha_i$$

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

根据KKT条件可推得最终模型仅与支持向量有关, 也即hinge损失函数依然保持了支持向量机解的稀疏性.

正则化

- 支持向量机学习模型的更一般形式

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

结构风险，描述模型的某些性质

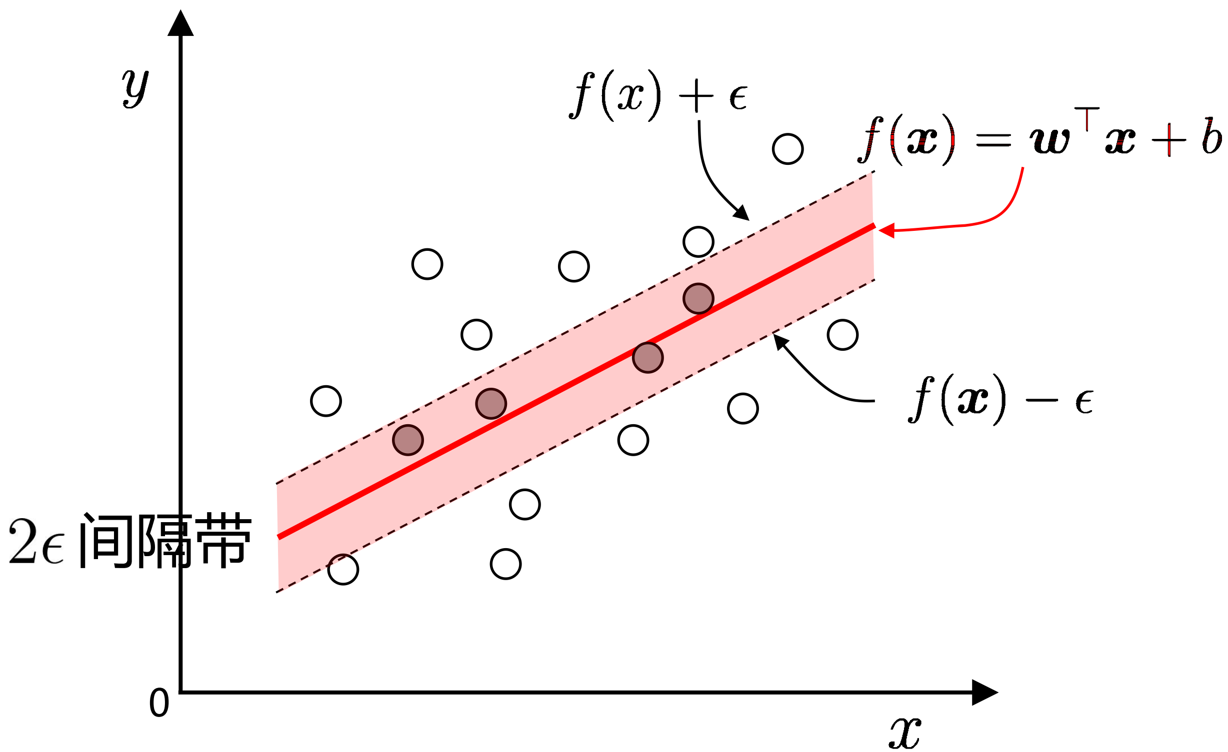
经验风险，描述模型与训练数据的契合程度

- 通过替换上面两个部分，可以得到许多其他学习模型
  - 对数几率回归(Logistic Regression)
  - 最小绝对收缩选择算子(LASSO)
  - ……

支持向量回归

支持向量回归

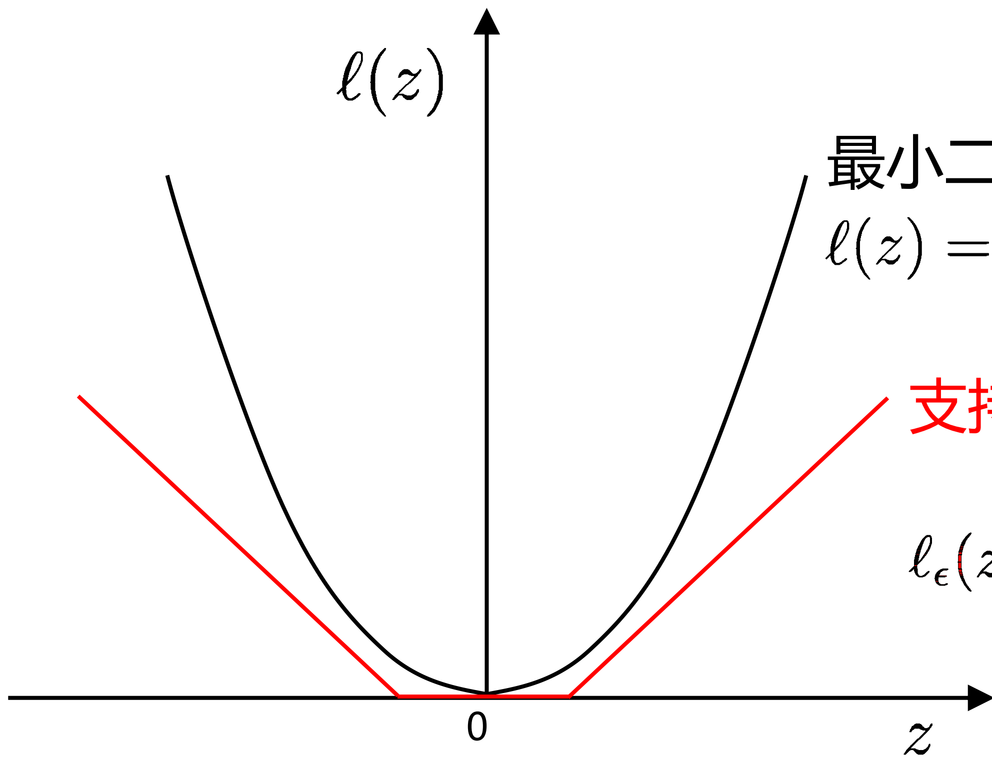
特点: 允许模型输出和实际输出间存在 2ϵ的偏差.



支持向量回归

损失函数

落入中间 2ϵ 间隔带的样本不计算损失, 从而使得模型获得稀疏性.



最小二乘损失函数

$\ell(z) = z^2$

支持向量回归损失函数

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

支持向量回归

形式化

原始问题

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

对偶问题

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

预测

$$
f(\boldsymbol{x}) = \boldsymbol{w}^\top\phi(\boldsymbol{x}) + b = \sum_{i=1}^{m}(\hat{\alpha}_i - \alpha_i)y_i\kappa(\boldsymbol{x}_i, \boldsymbol{x}) + b
$$

核方法

表示定理

支持向量机 $$f(\boldsymbol{x})=\boldsymbol{w}^{\top}\phi(\boldsymbol{x})+b=\sum_{i=1}^{m}\alpha_i y_i \kappa(\boldsymbol{x}_i,\boldsymbol{x})+b$$

支持向量回归 $$f(\boldsymbol{x})=\boldsymbol{w}^{\top}\phi(\boldsymbol{x})+b=\sum_{i=1}^{m}(\hat{\alpha}_i-\alpha_i) y_i \kappa(\boldsymbol{x}_i,\boldsymbol{x})+b$$

结论: 无论是支持向量机还是支持向量回归, 学得的模型总可以表示成核函数的线性组合.

更一般的结论(表示定理): 对于任意单调增函数 Ω 和任意非负损失函数 l, 优化问题

$$\min_{h\in\mathbb{H}} \quad F(h)=\Omega(\|h\|_{\mathbb{H}})+l(h(\boldsymbol{x}_1),\ldots,h(\boldsymbol{x}_m))$$

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