Report

PB20111696 王琛

实验原理

支持向量机基本型

支持向量机使用超平面方程$w^{\mathrm{T}}x+b=0$来划分两类样本，为了最大化超平面和样本间的间隔，优化目标为

$$\begin{aligned} &\max_{w,b} \frac{2}{||w||} \\ &s.t.\, y_i(w^{\mathrm{T}}x_i+b) \geq 1 \qquad i=1,\cdots,m \end{aligned} \tag{1}$$

这等价于

$$\begin{aligned} &\min_{w,b} \frac{1}{2}||w||^2 \\ &s.t. y_i\left(w^{\mathrm{T}}x_i+b\right) \geq 1 \qquad i=1,\cdots,m \end{aligned} \tag{2}$$

软间隔支持向量机

为了解决数据集线性不可分的问题，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

目标函数视角

优化目标为

$$\min_{w,b} \frac{1}{2}||w||^2 + C\sum_{i=1}^{m} \ell_{0/1}(y_i(w^Tx_i+b)-1) \tag{3}$$

为便于求导，将0/1损失函数$\ell_{0/1}$替换为hinge损失函数$\ell_{hinge}(z)=\max(0,1-z)$

新的优化目标为

$$\min_{w,b} \frac{1}{2}||w||^2 + C\sum_{i=1}^{m} \max\left(0, 1-y_i\left(w^{\mathrm{T}}x_i+b\right)\right) \tag{4}$$

对损失函数求导得到

$$\triangledown f(w,b) = w - C\sum_{i=1}^{m} I\left(1-y_i\left(w^{\mathrm{T}}x_i+b\right)>0\right)y_ix_i \tag{5}$$

损失函数是凸函数，使用梯度下降法可以得到最优解

引入松弛变量

引入松弛变量$\xi_i\geq 0$，可以将上面的优化目标重写为

$$\begin{aligned} &\min_{w,b,\xi_i} \frac{1}{2}||w||^2 + C\sum_{i=1}^{m}\xi_i \\ &\text{s.t.} \quad y_i(w^{\mathrm{T}}x_i+b) \geq 1-\xi_i \\ &\xi_i \geq 0 \quad i=1,2,\cdots,m \end{aligned} \tag{6}$$

使用拉格朗日乘子法得到拉格朗日函数

$$\mathcal{L}(w,b,\xi,\alpha,\beta)=\frac{1}{2}\|w\|^2+C\sum_{i=1}^{m}\xi_i-\sum_{i=1}^{m}\alpha_i(y_i(w^T\phi(x_i)+b)-1+\xi_i)-\sum_{i}^{m}\mu_i\xi(x_i) \tag{7}$$
$$\alpha_i,\mu_i\geq 0$$

令$\mathcal{L}(w,b,\xi,\alpha,\beta)$对$w$，$b$，$\xi_i$的偏导为0，可以得到对偶问题

$$\begin{aligned}&\max_{\alpha}\sum_{i=1}^{m}\alpha_i-\frac{1}{2}\sum_{i=1}^{m}\sum_{j=1}^{m}\alpha_i\alpha_jy_iy_jx_i^{\mathrm{T}}x_j\\ &\text{s.t.}\ \sum_{i=1}^{m}\alpha_iy_i=0\,,0\leqslant\alpha_i\leqslant C\,,\quad i=1,2,\dots,m\end{aligned} \tag{8}$$

KKT条件为

$$\begin{cases}\alpha_i\geq 0\,,\ \mu_i\geq 0\,,\\ y_if(x_i)-1+\xi_i\geq 0\,,\\ \alpha_i(y_if(x_i)-1+\xi_i)=0\,,\\ \xi_i\geq 0\,,\ \mu_i\xi_i=0\end{cases} \tag{9}$$

对偶问题受 $\sum_{i=1}^{m}\alpha_iy_i=0\,,0\leqslant\alpha_i\leqslant C\,,\quad i=1,2,\dots,m$约束

因此通过序列通过序列最小优化（ SMO ）求解最优的α，每次调整两个变量，不破坏约束条件

序列最小优化（ 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

记$K_{ii}=x_i^Tx_j$，$f(\mathbf{x}_\mathrm{i})=\sum_{j=1}^{n}y_j\alpha_jK_{ij}+b$，$v_i=f(\mathbf{x}_i)-\sum_{j=1}^{2}y_j\alpha_jK_{ij}-b$

在仅考虑α_i和α_j时，优化目标可以写作

$$g(\alpha_i,\alpha_j)=\alpha_i+\alpha_j-\frac{1}{2}\left(\alpha_i^2K_{ii}+\alpha_j^2K_{jj}+2\alpha_i\alpha_jy_iy_jK_{ij}+a_iy_i\sum_{k\neq i,j}a_ky_kK_{ik}+\alpha_jy_j\sum_{k\neq i,j}a_ky_kK_{jk}\right) \tag{10}$$

约束变为

$$\alpha_iy_i+\alpha_jy_j=-\sum_{k\neq i,j}^{m}\alpha_iy_i=constant \tag{11}$$

因此α_i可以用α_j表示，$\alpha_i=y_iconstant-y_iy_j\alpha_j=\gamma-s\alpha_j$，取$\alpha_j$为变量，则优化目标写作

$$\begin{aligned}W(\alpha_j)\quad&=\quad\gamma-s\alpha_j+\alpha_j-\tfrac{1}{2}K_{ii}(\gamma-s\alpha_j)^2-\tfrac{1}{2}K_{jj}\alpha_j^2\\ &\quad\ -sK_{ij}(\gamma-s\alpha_j)\alpha_j-y_i(\gamma-s\alpha_j)v_i-y_j\alpha_jv_j+\text{constant}\end{aligned} \tag{12}$$

对α_j求偏导有

$$\frac{\partial W(\alpha_j)}{\partial\alpha_j}=-s+1+sK_{ii}\gamma-K_{ii}\alpha_j-K_{jj}\alpha_j+2K_{ij}\alpha_j-sK_{ij}\gamma+y_jv_i-y_jv_j=0$$

得到

$$\alpha_j^{new}=\frac{y_j(y_j-y_i+y_i\gamma(K_{ii}-K_{ij})+v_i-v_j)}{K_{ii}+K_{jj}-2K_{ij}} \tag{13}$$

令$E_i=f(\mathbf{x}_i)-y_i$，$K=K_{ii}+K_{jj}-2K_{ij}$，上述结果化简为

$$\alpha_j^{new}=\alpha_j^{old}+\frac{y_j(E_i-E_j)}{K} \tag{14}$$

再考虑限制条件$0\leqslant\alpha_j\leqslant C$，得到其下界和上界分别为

$$L=\begin{cases}\max\left\{0,\alpha_j^{\text{old}}-\alpha_i^{\text{old}}\right\} & y_iy_j=-1\\ \max\left\{0,\alpha_i^{\text{old}}+\alpha_j^{\text{old}}-C\right\} & y_iy_j=1\end{cases},H=\begin{cases}\min\left\{C,C+\alpha_j^{\text{old}}-\alpha_i^{\text{old}}\right\} & y_iy_j=-1\\ \min\left\{C,\alpha_j^{\text{old}}+\alpha_i^{\text{old}}\right\} & y_iy_j=1\end{cases} \tag{15}$$

用这个区间截断得到最终的α_j^{new}

另一个变量α_i可以由α_j^{new}得到

$$\begin{gathered}\alpha_i^{old}y_i+\alpha_j^{old}y_j=constant\rightarrow\alpha_i^{old}+\alpha_j^{old}y_jy_i=\gamma\\ \alpha_i^{new}+\alpha_j^{new}y_jy_i=\gamma\\ \alpha_i^{new}-\alpha_i^{old}+(\alpha_j^{new}-\alpha_j^{old})y_jy_i=0\rightarrow\alpha_i^{new}-\alpha_i^{old}=y_iy_j(\alpha_j^{old}-\alpha_j^{new})\\ \alpha_i^{new}=\alpha_i^{old}+y_iy_j(\alpha_j^{old}-\alpha_j^{new})\end{gathered} \tag{16}$$

之后再更新b

$$\begin{gathered}b_i^{new}=-E(x_i)-y_ik_{ii}(\alpha_i^{new}-\alpha_i^{odd})-y_jk_{ji}(\alpha_j^{new}-\alpha_j^{odd})+b^{odd}\\ b_j^{new}=-E(x_i)-y_ik_{ii}(\alpha_i^{new}-\alpha_i^{old})-y_jk_{ji}(\alpha_j^{new}-\alpha_j^{old})+b^{odd}\\ b^{new}=\frac{b_i^{new}+b_j^{new}}{2}\end{gathered} \tag{17}$$

启发式选择

若α_i和α_j有一个违反了KKT条件，目标函数就会在迭代后增大，当KKT条件违背的程度越大，则变量更新后可能导致的目标函数值增幅越大，因此采用启发式的方法选择两个变量

- 第一个变量：选取违背KKT条件程度最大的变量第二个变量：与第一个变量的间隔最大的变量
- 第二个变量：与第一个变量的间隔最大的变量

根据式9中的KKT条件，违反KKT条件的情形可以总结如下

- $\alpha_i<C$ 且 $y_if(x_i)<1$
- $\alpha_i>0$ 且 $y_if(x_i)>1$

实验步骤

- 数据拆分（随机抽样/四次四折交叉验证）

训练模型一（软间隔支持向量机 梯度下降法）

- 初始化参数w
- 计算梯度
- 根据梯度更新参数w
- 更新损失函数
- 判断是否结束训练

训练模型二（软间隔支持向量机 SMO）

1.初始化参数α

2.遍历所有的α，对不满足KKT条件的α_j，启发式的寻找另一个α_i试图更新

3.遍历所有边界上的α，对不满足KKT条件的α_j，启发式的寻找另一个α_i试图更新

4.如果上一步没有成功更新的α，结束训练，否则返回第二步

对α_i的启发式寻找：

1.找与α_j的误差相差最大的α_i

2.在边界上随机选择

3.在剩余的α中随机选择

实现代码

数据拆分

- 随机抽样

```
train_index = set(np.random.choice(num, int(num / 4 * 3), replace=False))
test_index = set(range(num)) - train_index
(train, test) = (np.array(list(train_index)), np.array(list(test_index)))
(X_train, y_train) = (X_data[train], y_data[train])
(X_test, y_test) = (X_data[test], y_data[test])
```

- 四次四折交叉验证

```
positive = data[(y_data == 1.0).flatten(), :]
negative = data[(~(y_data == 1.0)).flatten(), :]
pn = positive.shape[0]
nn = negative.shape[0]
modelSVM_acc = []
model1_acc = []
model2_acc = []
modelSVM = LinearSVC(fit_intercept=0, dual=False)
model1 = SVM1(dim, plot=False)
model2 = SVM2(dim, plot=False)
for i in range(4):
      np.random.shuffle(positive)
      np.random.shuffle(negative)
      for i in range(4):
            test_index_p = set(range(i * int(pn / 4), (i + 1) * int(pn / 4)))
            train_index_p = set(range(pn)) - test_index_p
           (train_p, test_p) = (positive[np.array(
                  list(train_index_p)), :], positive[np.array(list(test_index_p)), :])
            test_index_n = set(range(i * int(nn / 4), (i + 1) * int(nn / 4)))
            train_index_n = set(range(nn)) - test_index_n
           (train_n, test_n) = (negative[np.array(
                  list(train_index_n)), :], negative[np.array(list(test_index_n)), :])
           (train, test) = (np.r_[train_p, train_n], np.r_[test_p, test_n])
           (X_train, y_train) = (train[:, :-1], train[:, -1:])
           (X_test, y_test) = (test[:, :-1], test[:, -1:])
            modelSVM.fit(X_train, y_train.flatten())
            model1.fit(X_train, y_train)
            model2.fit(X_train, y_train)
            modelSVM_acc.append(modelSVM.score(X_test, y_test.flatten()))
            model1_acc.append(model1.score(X_test, y_test))
            model2_acc.append(model2.score(X_test, y_test))
print('sklearn accuracy:{:.4f}'.format(sum(modelSVM_acc) / len(modelSVM_acc)))
print('model1 accuracy:{:.4f}'.format(sum(model1_acc) / len(model1_acc)))
print('model2 accuracy:{:.4f}'.format(sum(model2_acc)/len(model2_acc)))
```

训练模型一（软间隔支持向量机 梯度下降法）

grad（式5）

```
      def grad(self, X, y):
            temp = 1 - (X @ self.w) * y
            # 在max内部的值大于0时，才计算对应项的导数
            flag = np.array(np.frompyfunc(lambda x: 1.0 if x >
                                    0 else 0.0, 1, 1)(temp), np.float64)
            return self.w - (self.C * (y.T @ (flag * X))).T
```

loss（式4）

```python
    def loss(self, X, y):
        temp = 1 - (X @ self.w) * y
        flag = np.array(np.frompyfunc(lambda x: 1.0 if x >
                                      0 else 0.0, 1, 1)(temp), np.float64)
        return (0.5 * (self.w.T @ self.w) + self.C * np.sum((flag * temp).flatten()))[0][0]
```

iteration(利用梯度下降法更新权值)

```python
    def iteration(self, X, y):
        # 步长较大时会反复震荡，因此将步长设为0.00001
        return 0.00001 * self.grad(X, y)
```

fit(训练并绘制损失函数曲线)

```python
    def fit(self, X, y, tol=1e-2, max_iter=1e2):
        """
       Fit the coefficients via your methods
       """
        self.w = np.zeros((self.dim, 1))
        loss_table = []
        before = after = 0
        iter = 0
        # 通过前后两次迭代的损失函数值的差值来判断是否收敛
        while iter == 0 or (iter < max_iter and np.absolute(before - after) > tol):
            before = after
            self.w -= self.iteration(X, y)
            after = self.loss(X, y)
            iter += 1
            loss_table.append(after)
        if self.plot:
            from matplotlib import pyplot as plt
            plt.title('loss curve of training')
            plt.xlabel('iteration')
            plt.ylabel('loss')
            plt.plot(np.arange(1, iter + 1), np.array(loss_table).flatten())
            plt.show()
```

predict & score（在测试集上计算结果）

```python
    def predict(self, X):
        """
       Use the trained model to generate prediction probabilities on a new
       collection of data points.
       """
        # 计算预测值，并映射到±1
        return np.array(np.frompyfunc(lambda x: 1.0 if x > 0 else -1.0, 1, 1)(X @ self.w), np.float64)

    def score(self, X, y):
        result = self.predict(X)
        delta = np.array(np.frompyfunc(lambda x: 1.0 if x ==
                                       0 else 0.0, 1, 1)(result-y), np.float64)
        num = np.sum(delta)
        return num / delta.shape[0]
```

训练模型二（软间隔支持向量机 SMO）

update（更新当前结果与实际值的差异，式14中E）

```
    def update(self, X, y):
        self.w = np.sum(y * self.alpha * X, axis=0).reshape(self.dim, 1)
        self.E = X @ self.w - y # 计算预测值与理论值的误差，用于计算alpha
        if self.fit_intercept:
            self.E += self.b
        self.r = self.E * y # 计算误差与标签的乘积，用于计算alpha，在此处全部计算，而不是在计算alpha时再计算，是为了减少计算量
```

select（启发式选择变量）

```
    def select(self, X, y, j):
        self.delta = self.E - self.E[j][0] # 计算误差的差值
        self.delta = np.maximum(self.delta, - self.delta) # 计算差值的绝对值
        return np.argmax(self.delta, axis=0)[0] # 返回最大差值对应的下标
```

error

```
    def error(self, X, y):
        # 用训练集上的错误率计算代替计算损失函数，计算损失函数所需计算量较大，而错误率可以用每次迭代的结果self.w来计算
        result = self.score(X, y)
        # 在迭代时发现会过拟合，因此在迭代时记录最大的score，并记录当时的self.w
        if result > self.score_max:
            self.score_max = result
            self.w_max = self.w
        return result
```

takestep(对两个变量更新)

```
    def takestep(self, X, y, i, j, tol=1e-3):
        if i == j:
            return False
        # 计算alpha的上下界
        if y[i][0] != y[j][0]:
            L = max(0, self.alpha[j][0] - self.alpha[i][0])
            H = min(self.C, self.C + self.alpha[j][0] - self.alpha[i][0])
        else:
            L = max(0, self.alpha[i][0] + self.alpha[j][0] - self.C)
            H = min(self.C, self.alpha[i][0] + self.alpha[j][0])
        if L == H:
            return False
        newj = self.alpha[j][0] + y[j][0] * (self.E[i][0] - self.E[j][0]) / (
            X[i] @ X[i].T + X[j] @ X[j].T - 2 * (X[i] @ X[j].T))
        if newj < L:
            newj = L
        if newj > H:
            newj = H
        # 当alpha的变化量小于阈值时，不更新，加快迭代速度
        if abs(newj - self.alpha[j][0]) < tol:
            return False
        newi = self.alpha[i][0] + y[i][0] * \
            y[j][0] * (self.alpha[j][0] - newj)
        if self.fit_intercept:
            newbi = -self.E[i][0] - y[i][0] * (newi - self.alpha[i][0]) * (X[i] @ X[i].T) - y[j][0] * (
                newj - self.alpha[j][0]) * (X[i] @ X[j].T) + self.b
            newbj = -self.E[j][0] - y[i][0] * (newi - self.alpha[i][0]) * (X[i] @ X[j].T) - y[j][0] * (
                newj - self.alpha[j][0]) * (X[j] @ X[j].T) + self.b
            self.b = (newbi + newbj) / 2
        (self.alpha[i][0], self.alpha[j][0]) = (newi, newj)
        self.update(X, y)
        return True
```

examine（选定了一个变量后尝试选择第二个变量）

```
def examine(self, X, y, j, tol=1e-1):
    # 当alpha[j]满足KKT条件时，不更新，在这里引入阈值tol，允许alpha[j]与KKT条件不完全符合，以加快迭代速度
    if (self.r[j] < -tol and self.alpha[j] < self.C) or (self.r[j] > tol and self.alpha[j] > 0):
        if self.alpha[j] > 1:
            # 选择与alpha[j]误差最大的alpha[i]进行更新
            i = self.select(X, y, j)
            if self.takestep(X, y, i, j):
                return 1
        temp = list(range(y.shape[0]))
        random.shuffle(temp)
        # 前面更新失败时选择的alpha[i]可能不是最优的，因此随机选择在边界上的alpha[i]进行更新
        for i in temp:
            if self.alpha[i] != 0 or self.alpha[i] != self.C:
                if self.takestep(X, y, i, j):
                    return 1
        random.shuffle(temp)
        # 仍然失败时，随机选择alpha[i]进行更新
        for i in temp:
            if self.takestep(X, y, i, j):
                return 1
    return 0
```

fit(训练并绘制错误率函数曲线)

```
def fit(self, X, y, max_iter=1e3):
    """
   Fit the coefficients via your methods
   """
    random.seed(0)
    self.alpha = np.zeros(y.shape)
    self.update(X, y)
    error_table = []
    iter = 0
    numChanged = 0
    examineAll = 1
    # 没有可更新的alpha时，迭代结束
    while iter < max_iter and (numChanged > 0 or examineAll == 1):
        numChanged = 0
        if examineAll == 1:
            # 遍历所有样本，对每个样本进行检查
            for j in range(y.shape[0]):
                numChanged += self.examine(X, y, j)
                iter += 1
                error_table.append(self.error(X, y))
                if iter == max_iter:
                    break
        else:
            # 遍历所有在边界上的样本，对每个样本进行检查
            for j in range(y.shape[0]):
                if self.alpha[j] != 0 or self.alpha[j] != self.C:
                    numChanged += self.examine(X, y, j)
                    iter += 1
                    error_table.append(self.error(X, y))
                    if iter == max_iter:
                        break
        if examineAll == 1:
            examineAll = 0
        elif numChanged == 0:
            examineAll = 1
    self.w = self.w_max
    if self.plot:
```

```
            from matplotlib import pyplot as plt
            plt.title('error ratio of training')
            plt.xlabel('iteration')
            plt.ylabel('error ratio')
            plt.plot(np.arange(1, iter + 1), np.array(error_table).flatten())
            plt.show()
```

predict & score（在测试集上计算结果）

```
    def predict(self, X):
        """
        Use the trained model to generate prediction probabilities on a new
        collection of data points.
        """
        # 计算预测值，并映射到±1
        return np.array(np.frompyfunc(lambda x: 1.0 if x > 0 else -1.0, 1, 1)(X @ self.w + (self.b if
self.fit_intercept else 0)), np.float64)

    def score(self, X, y):
        result = self.predict(X)
        delta = np.array(np.frompyfunc(lambda x: 1.0 if x ==
                                              0 else 0.0, 1, 1)(result-y), np.float64)
        num = np.sum(delta)
        return num / delta.shape[0]
```

实验结果

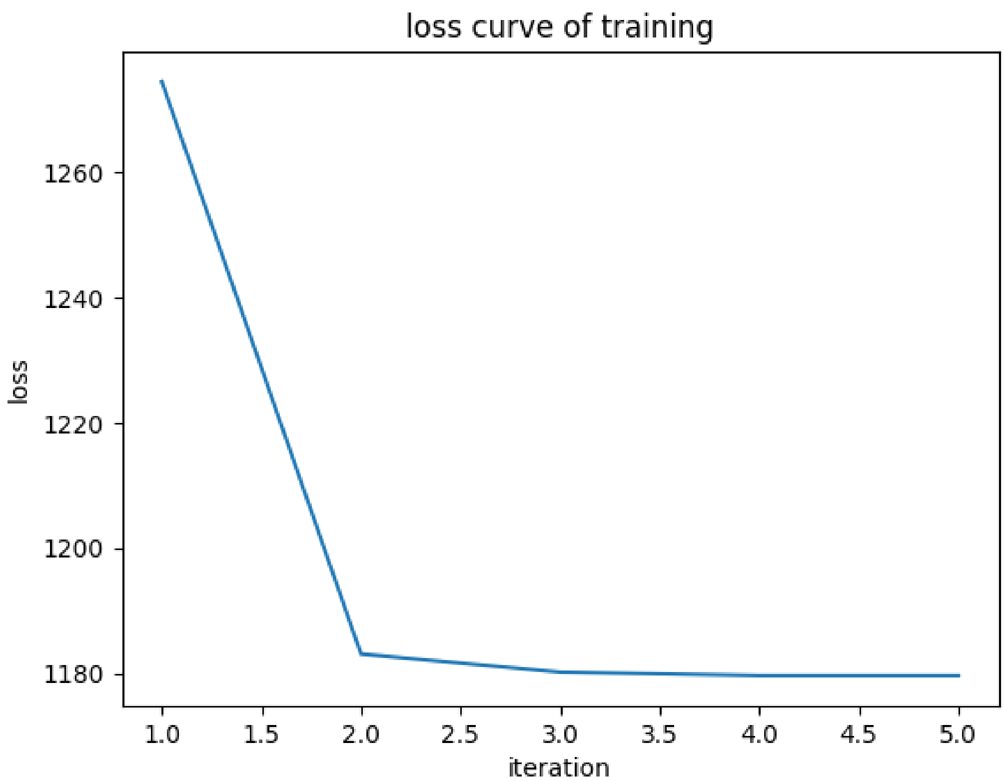
20维 10000样本数据集(75%训练集，25%测试集)

训练模型一（软间隔支持向量机 梯度下降法）

mislabel:0.0349

accuracy:0.9592

时长:0.2s

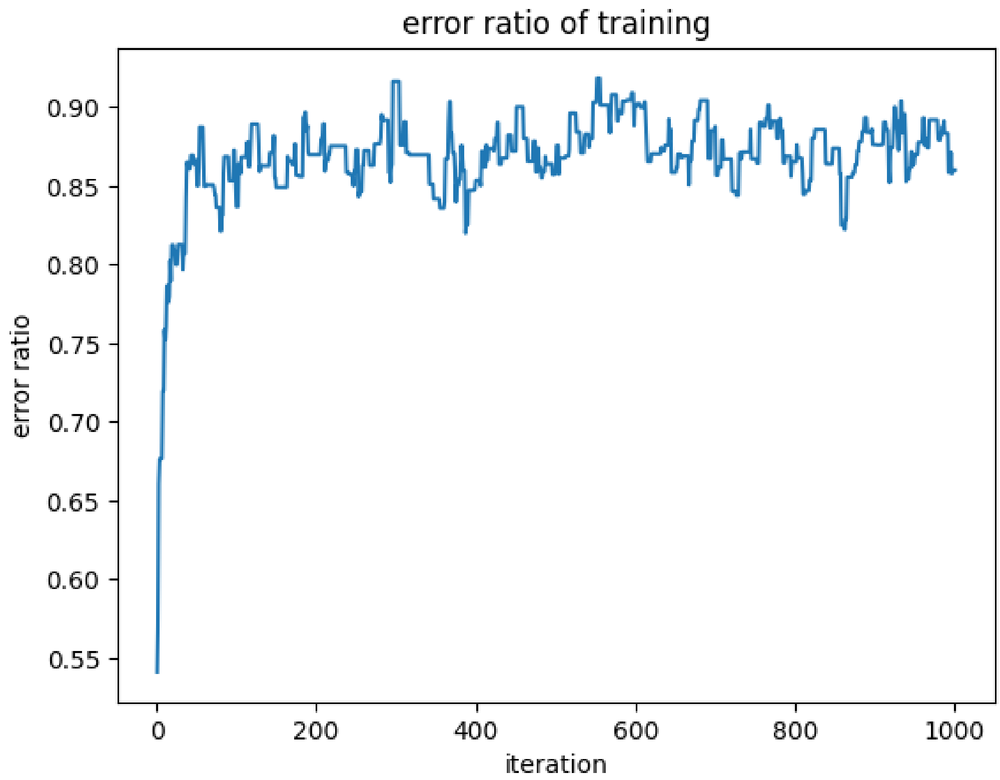


训练模型二（软间隔支持向量机 SMO）

mislabel:0.0349

accuracy:0.9216

时长:4.9s



方法比较

[大数据集]20维 10000样本数据集(75%训练集，25%测试集)

（软间隔支持向量机 梯度下降法）和（软间隔支持向量机 SMO）的结果参照上面的结果

mislabel:0.0349

模型	时间	准确率
sklearn（参考）	0.1s	0.9588
软间隔支持向量机 梯度下降法	0.2s	0.9592
软间隔支持向量机 SMO	4.9s	0.9216

[超大数据集] 20维 100000样本数据集(75%训练集，25%测试集)

mislabel:0.03621

模型	时间	准确率
sklearn（参考）	0.9s	0.9612
软间隔支持向量机 梯度下降法	2.4s	0.9504
软间隔支持向量机 SMO	38.7s	0.9200

[四折交叉验证]20维 10000样本数据集(75%训练集，25%测试集)

mislabel:0.0349

模型	准确率
sklearn（参考）	0.9592
软间隔支持向量机 梯度下降法	0.9590
软间隔支持向量机 SMO	0.9216

结果分析

梯度下降法在时间与准确率上均优于SMO法，但两者均与sklearn有差距，在大数据集较为明显

- 梯度下降法的参数w的维数与样本数目无关，在维度较小时梯度易于计算
- SMO算法的参数α的维数和样本数量相同，在样本数很大时，每次只能更新两个变量导致更新所有变量需要很多迭代次数，因此SMO算法不能迅速收敛，受电脑性能限制，只迭代了1000次，因此准确率不高
- KKT条件仅是最优解的必要条件，SMO法只能求得近似最优解而不能保证是全局最优解