机器学习算法系列（12）：SVM（2）—线性支持向量机

当训练数据近似线性可分时，通过软间隔最大化学习一个线性的分类器，即线性支持向量机，又称为软间隔支持向量机。

二、线性支持向量机与软间隔最大化

2.1 线性支持向量机

通常情况是，训练数据中有一些特异点`outlier`，将这些特异点除去后，剩下大部分的样本点组成的集合是线性可分的。

线性不可分意味着某些样本点不能满足函数间隔大于等于1的约束条件。为了解决这个问题，可以对每个样本点引进一个松弛变量$\xi \geqslant 0$，使函数间隔加上松弛变量大于等于1.这样，约束条件变成

$$y_i\left(w \cdot x_i + b\right) \geqslant 1 - \xi_i$$

同时，对每个松弛变量$\xi \geqslant 0$，支付一个代价$\xi \geqslant 0$。当然，如果我们允许$\xi \geqslant 0$任意大的话，那任意的超平面都是符合条件的了。所以，我们在原来的目标函数后面加上一项，使得这些 $\xi \geqslant 0$的总和也要最小：目标函数由原来的$\frac{1}{2}||w||^2$变成

$$\frac{1}{2}||w||^2 + C\sum_{i=1}^{N}\xi_i$$

这里，$C > 0$称为惩罚参数，一般事先由应用问题决定，控制目标函数中两项（“寻找 $margin$ 最大的超平面”和“保证数据点偏差量最小”）之间的权重，C越大时对误分类的惩罚增大，C值小时对误分类的惩罚减小。最小化目标函数包含两层含义：使$\frac{1}{2}||w||^2$尽量小即间隔尽量大，同时使误分类点的个数尽量小，C是调和二者的系数。
则有以下优化问题：

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

$$s.t.\ \ y_i\left(w \cdot x_i + b\right) \geqslant 1 - \xi_i\,,\ i = 1, 2, \cdot\cdot\cdot, N$$

$$\xi_i \geqslant 0,\ i = 1, 2, \cdot\cdot\cdot\ ,\ \ N$$

可证明w的解是唯一的，但b的解不唯一，b的解存在于一个区间。

用之前的方法将限制加入到目标函数中，得到如下原始最优化问题的拉格朗日函数：

$$L(w, b, \xi, a, u) = \frac{1}{2}||w||^2 + C\sum_{i=1}^{N}\xi_i - \sum_{i=1}^{N}a_i\left(y_i\left(w \cdot x_i + b\right) - 1 + \xi_i\right) - \sum_{i=1}^{N}u_i\xi_i$$

首先求拉格朗日函数针对w, b, ξ的极小。

$$\frac{\partial L}{\partial w} = 0 \Rightarrow w = \sum_{i=1}^{N}a_i y_i x_i$$

$$\frac{\partial L}{\partial b} = 0 \Rightarrow \sum_{i=1}^{N}a_i y_i = 0$$

$$\frac{\partial L}{\partial \xi_i} = 0 \Rightarrow C - a_i - u_i = 0\ ,\ \ i = 1, 2, 3 \cdot\cdot\cdot, N$$

将它们代入拉格朗日函数，得到和原来一样的目标函数。

$$\max_a\ \ -\frac{1}{2}\sum_{i=1}^{N}\sum_{j=1}^{N}a_i a_j y_i y_j\left(x_i \cdot x_j\right) + \sum_{i=1}^{N}a_i$$

$$s.t.\ \sum_{i=1}^{N}a_i y_i = 0$$

$$C - a_i - u_i = 0$$

$$a_i \geqslant 0$$

$$u_i \geqslant 0$$

不过，由于我们得到$C - a_i - u_i = 0$，而又有$u_i > 0$（作为拉格朗日乘子的条件）,因此有$a_i \leq C$,所以整个`dual`问题现在写作：

$$\max_a \quad -\frac{1}{2}\sum_{i=1}^{N}\sum_{j=1}^{N}a_i a_j y_i y_j \langle x_i \cdot x_j\rangle + \sum_{i=1}^{N} a_i$$

$$s.t. \quad \sum_{i=1}^{N} a_i y_i = 0$$

$$0 \le a_i \le C\,, \quad i = 1, 2, \cdot\cdot\cdot, N$$

和之前的结果对比一下，可以看到唯一的区别就是现在拉格朗日乘子a多了一个上限C。而 Kernel 化的非线性形式也是一样的，只要把$\langle x_i, x_j\rangle$ 换成 $\kappa(x_i, x_j)$ 即可。

构造并求解上述二次规划问题后求得最优解

$$a^* = \left(a_1^*, a_2^*, \cdot\cdot\cdot, a_N^*\right)^T$$

然后计算

$$w^* = \sum_{i=1}^{N} a_i^* y_i x_i$$

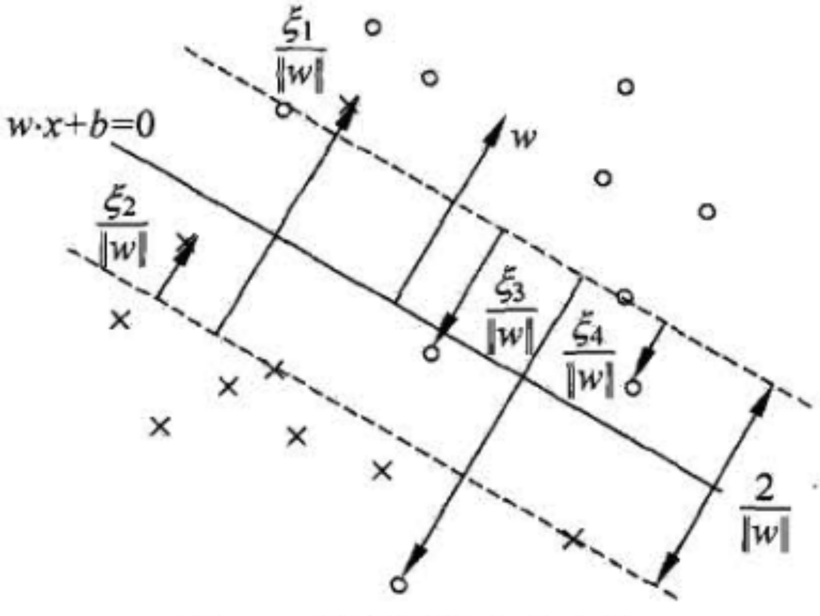
选择a^*的一个分量a_i^*适合约束条件$0 < a_i < C$,计算

$$b^* = y_j - \sum_{i=1}^{N} a_i^* y_i \langle x_i \cdot x_j\rangle$$

对任一适合条件都可求得一个b^*，但是由于原始问题对b的求解并不唯一，所以实际计算时可以取在所有符合条件的样本点上的平均值。

2.2 支持向量

再现性不可分的情况下，将对偶问题的解中对应于$a_i^* > 0$的样本点(x_i, y_i)的实例x_i称为支持向量（软间隔的支持向量）。如图所示，这时的支持向量要比线性可分时的情况复杂一些。



图中，分离超平面由实线表示，间隔边界由虚线表示。正例点由 。 表示，负例点由 × 表示。图中还标出了实例x_i到间隔边界的距离 $\frac{\xi_i}{||w||}$。

软间隔的支持向量x_i要么在间隔边界上，要么在间隔边界与分离超平面之间，要么在分离超平面误分类一侧。

若$a_i^* < C$，则$\xi_i = 0$，支持向量恰好落在间隔边界上；

若$a_i^* = C, 0 < \xi_i < 1$，则分类正确，x_i在间隔边界与分离超平面之间；

若$a_i^* = C$ ， $\xi_i = 1$则x_i在分隔超平面上；

若$a_i^* = C, \xi_i > 1$，则x_i位于分离超平面误分一侧。

2.3 Hinge损失函数

线性支持向量机学习除了原始最优化问题，还有另外一种解释，就是最优化以下目标函数：

$$\sum_i^N [1 - y_i(w \cdot x_i + b)]_+ + \lambda ||w||^2$$

目标函数的第一项是经验损失或经验风险，函数

$$L(y \cdot (w \cdot x + b)) = [1 - y(w \cdot x + b)]_+$$

称为合页损失函数（hinge loss function）。下标"+"表示以下取正值的函数：

$$[z]_+ = \begin{cases} z\,,\ z > 0 \\ 0\,,\ z \le 0 \end{cases}$$

这就是说，当样本点(x_i, y_i)被正确分类且函数间隔（确信度）$y_i(w \cdot x_i + b)$大于1时，损失是0，否则损失是$1 - y_i(w \cdot x_i + b)$。目标函数的第二项是系数为λ的w的L_2范数，是正则化项。

接下来证明线性支持向量机原始最优化问题：

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

$$s.t.\ \ y_i\left(w \cdot x_i + b\right) \geqslant 1 - \xi_i\,,\ i = 1, 2, \cdot\cdot\cdot, N$$

$$\xi_i \geqslant 0,\ i = 1, 2, \cdot\cdot\cdot\ ,\ \ N$$

等价于最优化问题

$$min_{w,b}\sum_{i}^{N}[1 - y_i(w \cdot x_i + b)]_+ + \lambda||w||^2$$

先令$[1 - y_i(w \cdot x_i + b)]_+ = \xi_i$，则$\xi_i \ge 0$，第二个约束条件成立；由$[1 - y_i(w \cdot x_i + b)]_+ = \xi_i$，当$1 - y_i(w \cdot x_i + b) > 0$时，有$y_i(w \cdot x_i + b) = 1 - \xi_i$;当$1 - y_i(w \cdot x_i + b) \le 0$时，$\xi_i = 0$，有$y_i(w \cdot x_i + b) \ge 1 - \xi_i$，所以第一个约束条件成立。所以两个约束条件都满足，最优化问题可以写作

$$min_{w,b}\sum_{i=1}^{N}\xi_i + \lambda||w||^2$$

若取$\lambda = \frac{1}{2C}$则

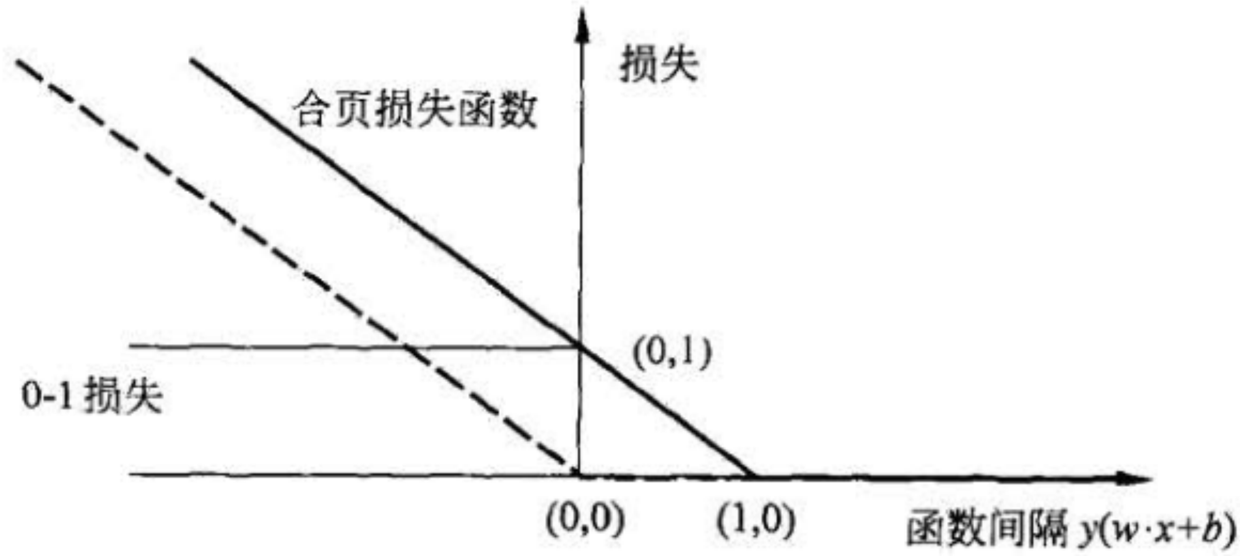
$$min_{w,b}\frac{1}{C}(\frac{1}{2}||w||^2 + C\sum_{i=1}^{N}\xi_i)$$

与原始最优化问题等价。

合页损失函数图像如图所示，横轴是函数间隔$y(w \cdot x + b)$，纵轴是损失。由于函数形状像一个合页，故名合页损失函数。

图中还画出了0-1损失函数，可以认为它是一个二类分类问题的真正的损失函数，而合页损失函数是0-1损失函数的上界。由于0-1损失函数不是连续可导的，直接优化其构成的目标函数比较困难，可以认为线性支持向量机是优化由0-1损失函数的上界（合页损失函数）构成的目标函数。

这时的上界损失函数又称为代理损失函数（surrogate function）。



图中虚线显示的是感知机的损失函数$[-y_i(w \cdot x_i + b)]_+$。这时当样本点$(x_i, y_i)$被正确分类时，损失是0，否则损失是$-y_i(w \cdot x_i + b)$，相比之下，合页损失函数不仅要分类正确，而且确信度足够高时损失才是0，也就是说，合页损失函数对学习有更高的要求