自然语言处理

第5讲：支持向量机

刘洋

内容提要

分类问题

支持向量机

松弛变量

核函数

一维分类问题

数据	类别
0	负
1	负
3	正
4	正

表1：一维分类数据集。

表1给出了一个一维分类数据集。输入数据点是一个实数。对于每个数据点x，可以标上类别y。表1中共有两个类别：正（$y = +1$）和负（$y = -1$）。

给定一个新的数据点5，其类别应该是正还是负?

我们可以建立一个分类器:

$$f(x) = \mathrm{sign}(x - 2)$$

其中，x表示输入数据。当$x \geq 0$时，$\mathrm{sign}(x) = +1$。当$x < 0$时，$\mathrm{sign}(x) = -1$。

显然，该分类器可以拟合训练集。由于$f(5) = +1$，因此数据点5的类别应该为正。

一维分类问题的图形化表示

数据	类别
0	负
1	负
3	正
4	正

表1：一维分类数据集。

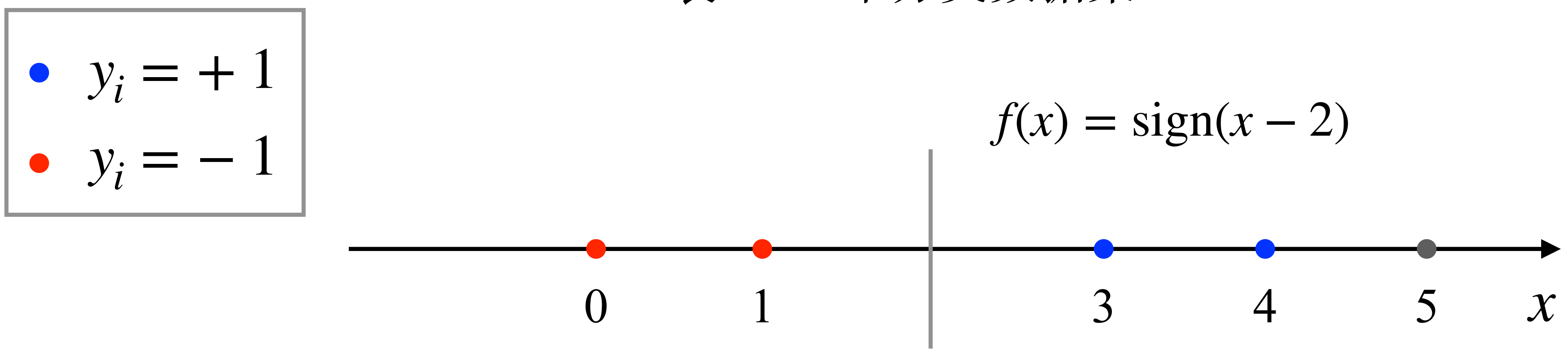


图1：一维特征空间中的数据点。

二维分类问题

- 在二维空间中将属于不同类别的数据点进行分隔

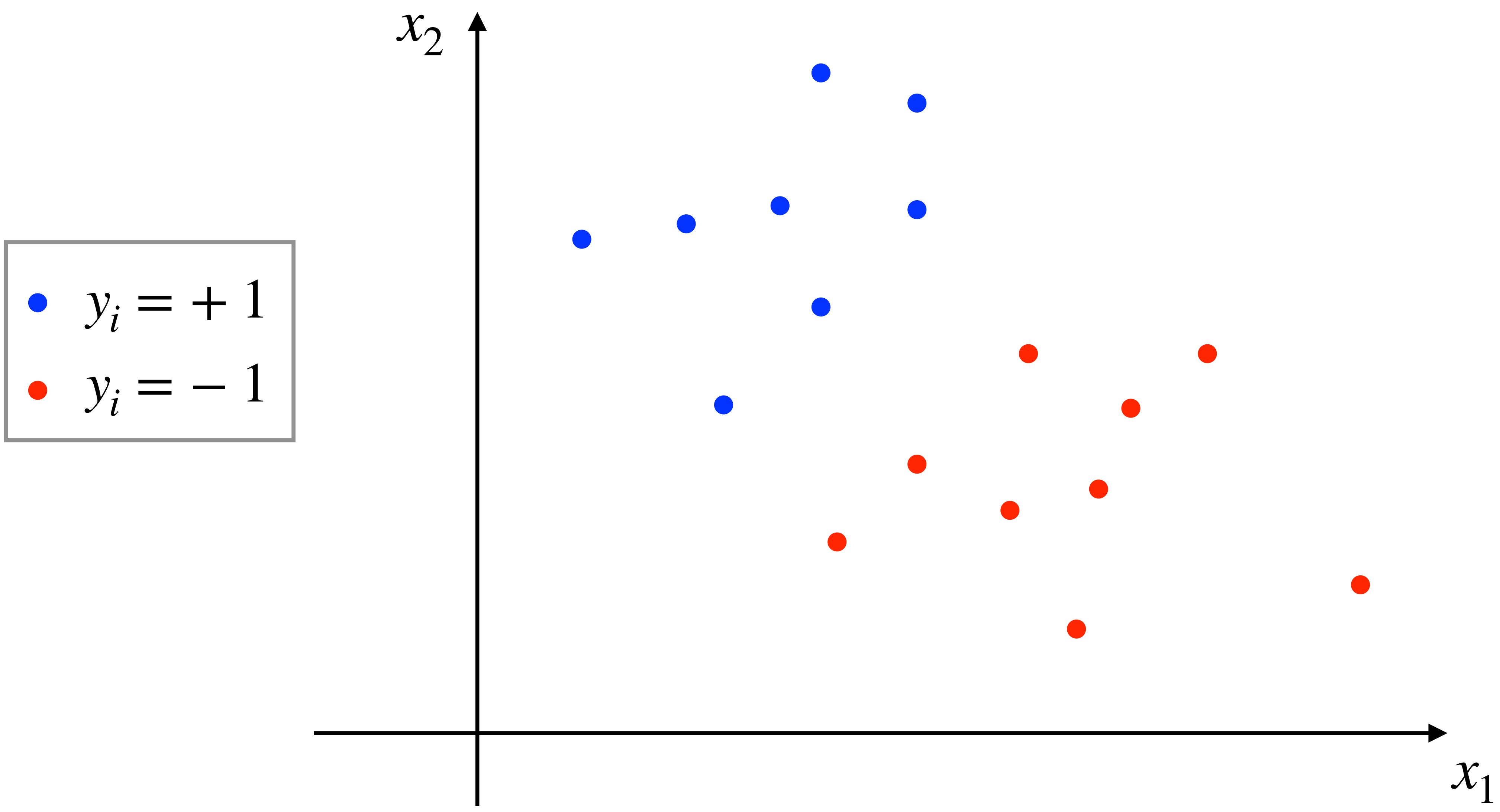


图2：二维空间中的数据点。

分类平面

- 分类平面是指分类器的决策边界，能够将不同类别的数据点分开。

$$f(\mathbf{x}) = \text{sign}\left(\mathbf{w}^\top \mathbf{x} + b\right)$$

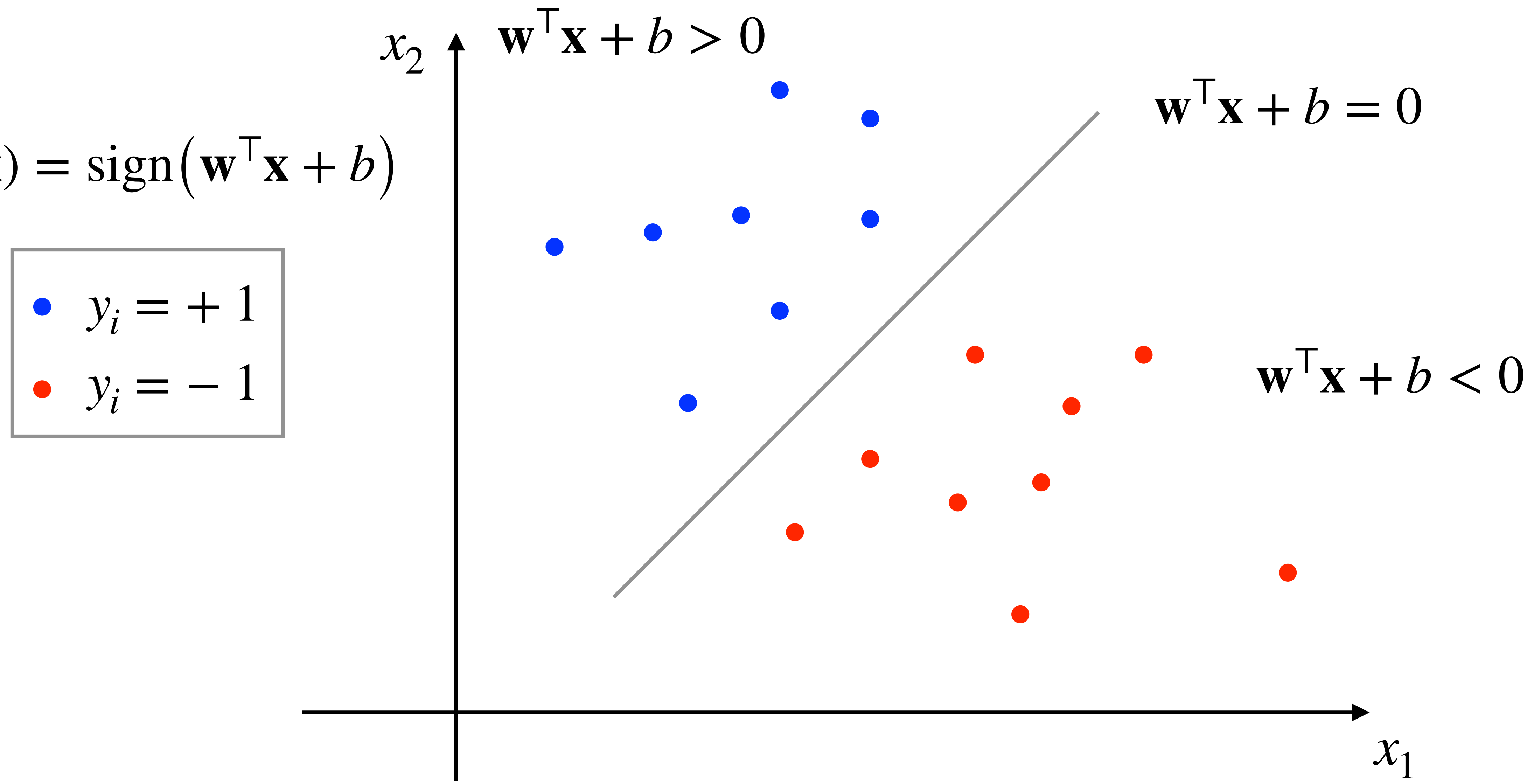


图3：二维空间中的分类平面。

分类平面的选择

- 对于一个数据集，存在着多种不同的分类平面，如何选择？

$$f(\mathbf{x}) = \mathrm{sign}\left(\mathbf{w}^\top \mathbf{x} + b\right)$$

- $y_i = +1$
- $y_i = -1$

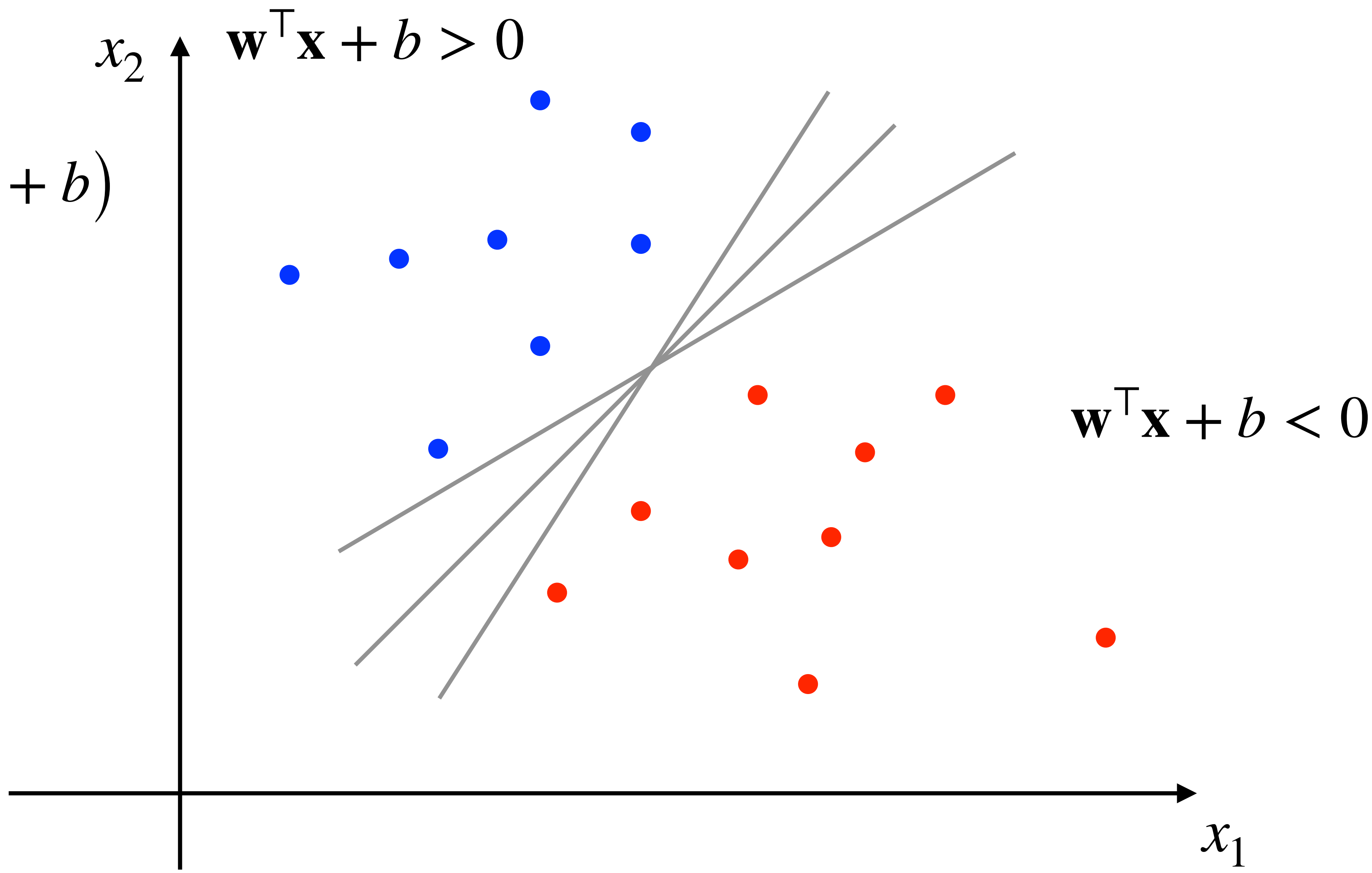


图4：多种分类平面。

分类距离：函数距离

- 函数距离$y_i(\mathbf{w}^\top\mathbf{x}+b)$的正负可以表示分类的正确性和信心。

$$f(\mathbf{x}) = \mathrm{sign}\left(\mathbf{w}^\top\mathbf{x}+b\right)$$

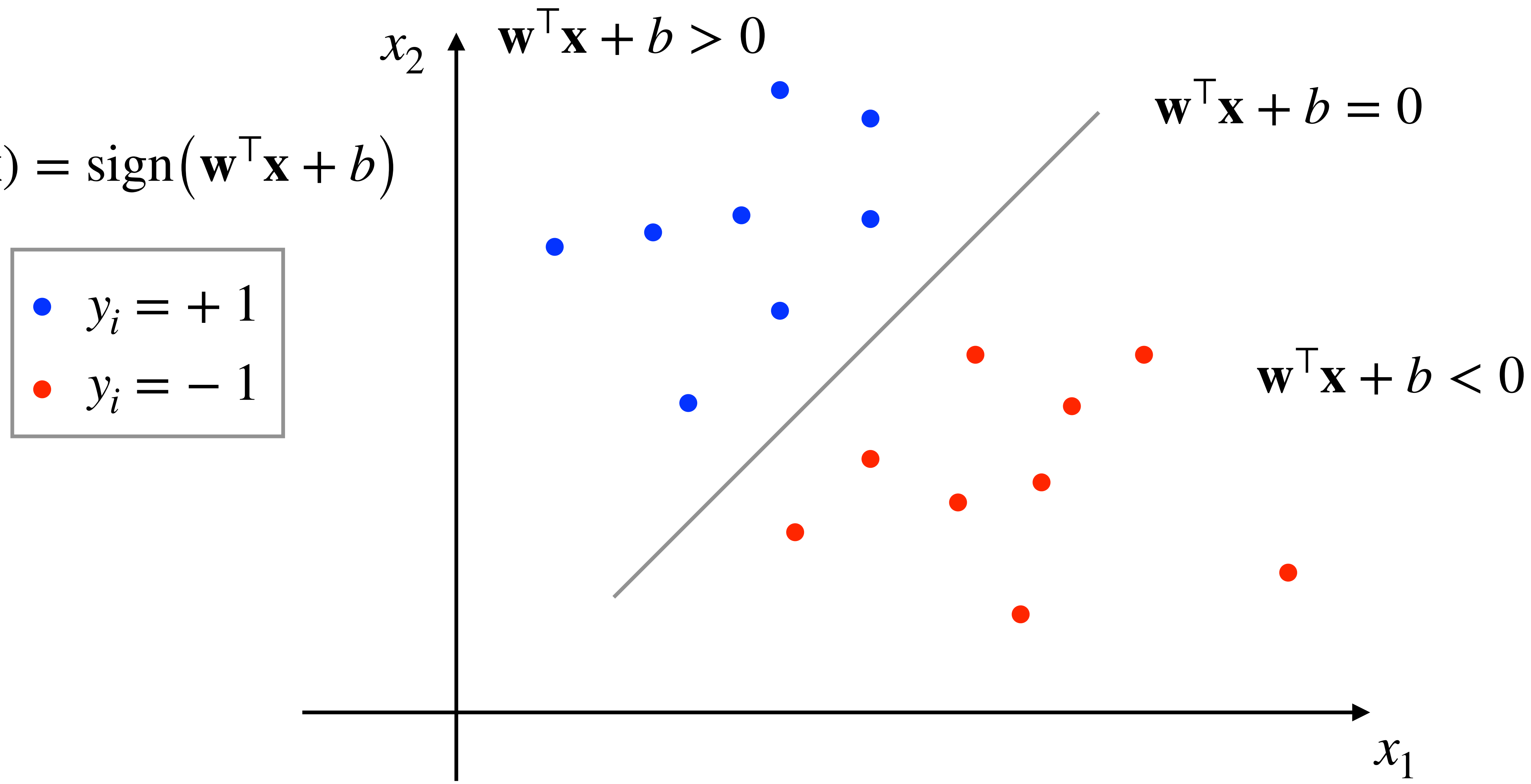


图5：函数距离。

分类距离：几何距离

- 几何距离$|\mathbf{w}^\top\mathbf{x}_i + b| / ||\mathbf{w}||^2$表示样本点$\mathbf{x}_i$到分类平面的距离。

$$f(\mathbf{x}) = \mathrm{sign}\left(\mathbf{w}^\top\mathbf{x} + b\right)$$

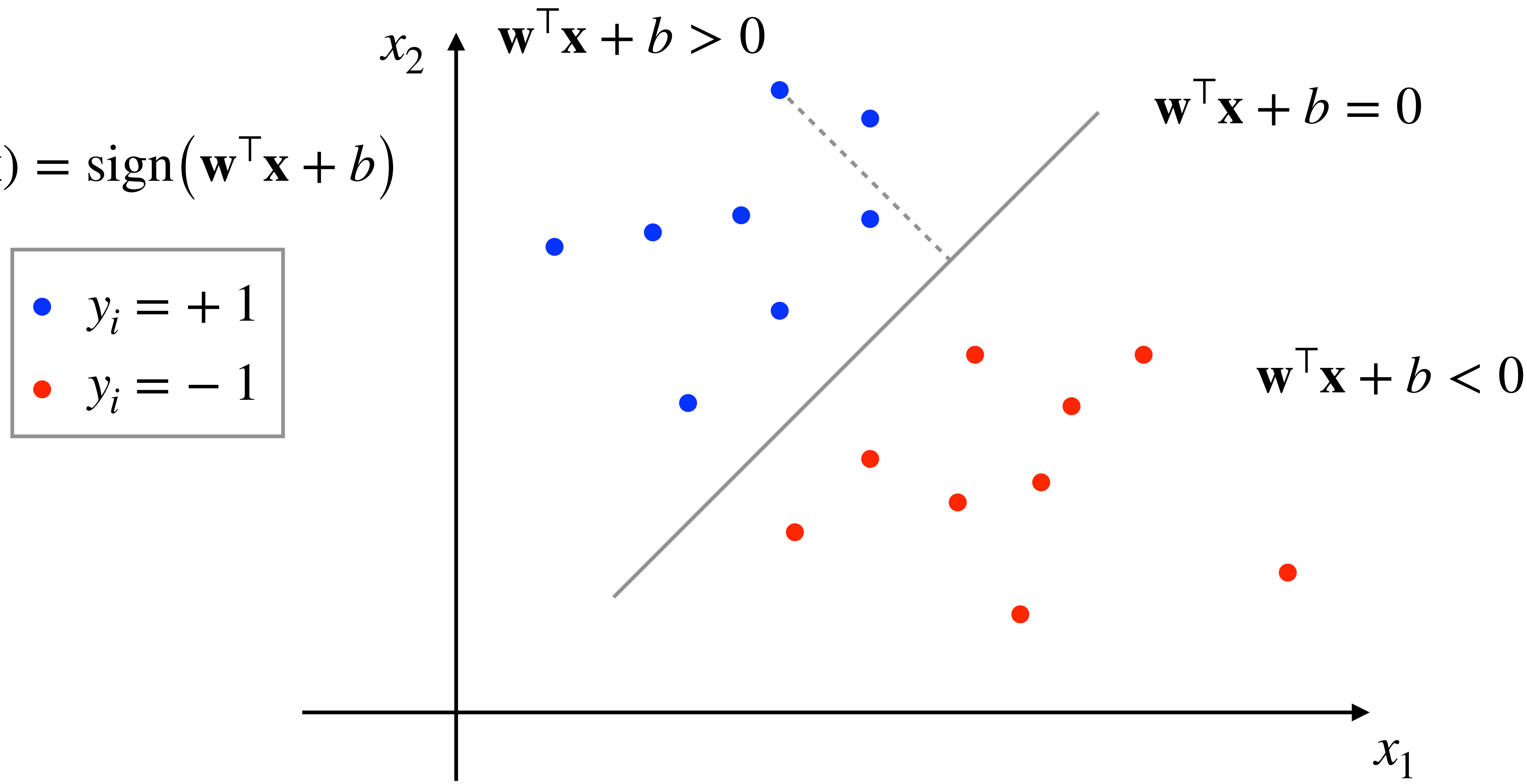


图6：几何距离。

支持向量

- 与分类平面距离最近的样本点称为支持向量，进而构成支持平面。

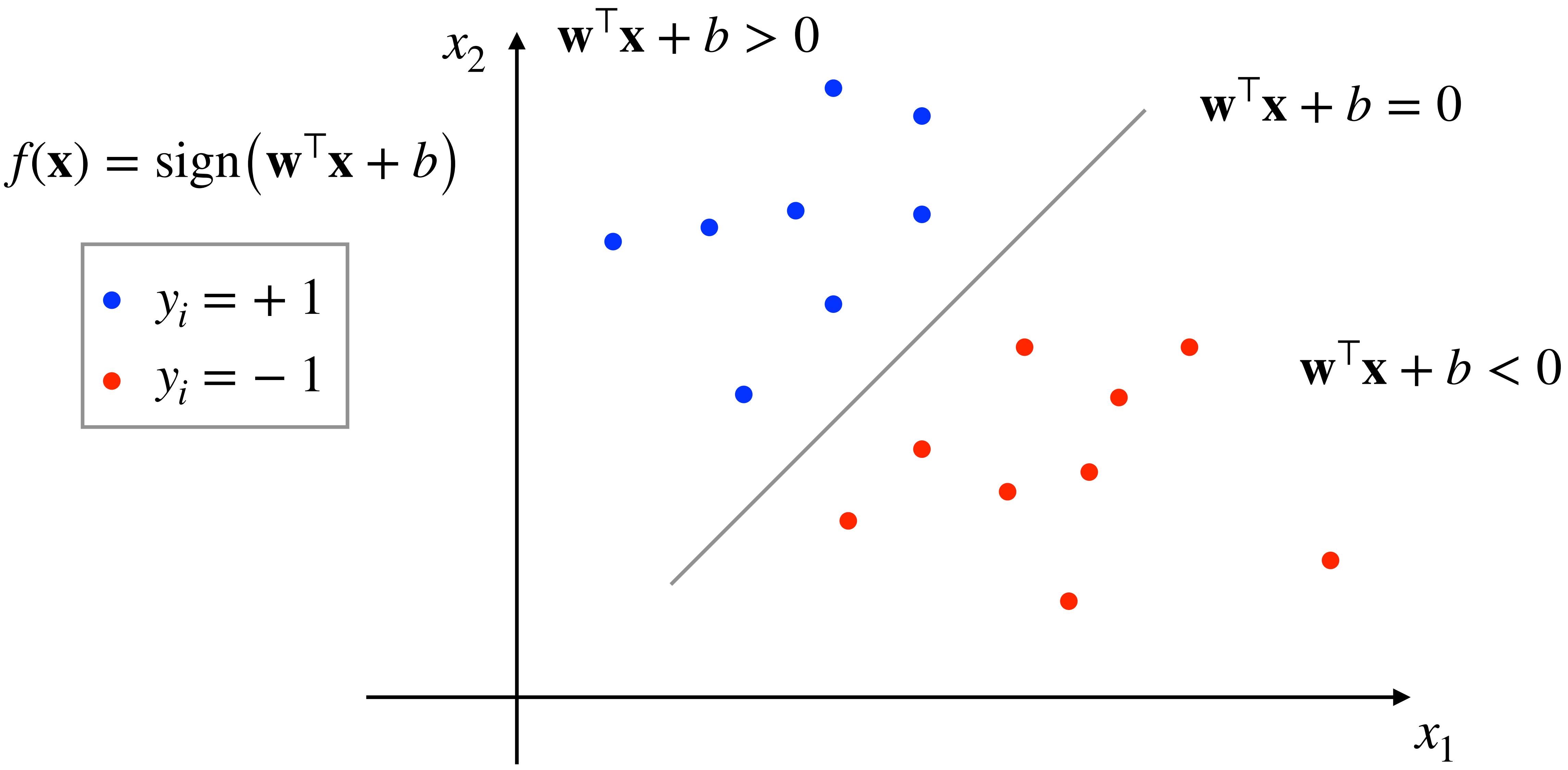


图7：支持向量与支持平面。

支持向量

- 与分类平面距离最近的样本点称为支持向量，进而构成支持平面。

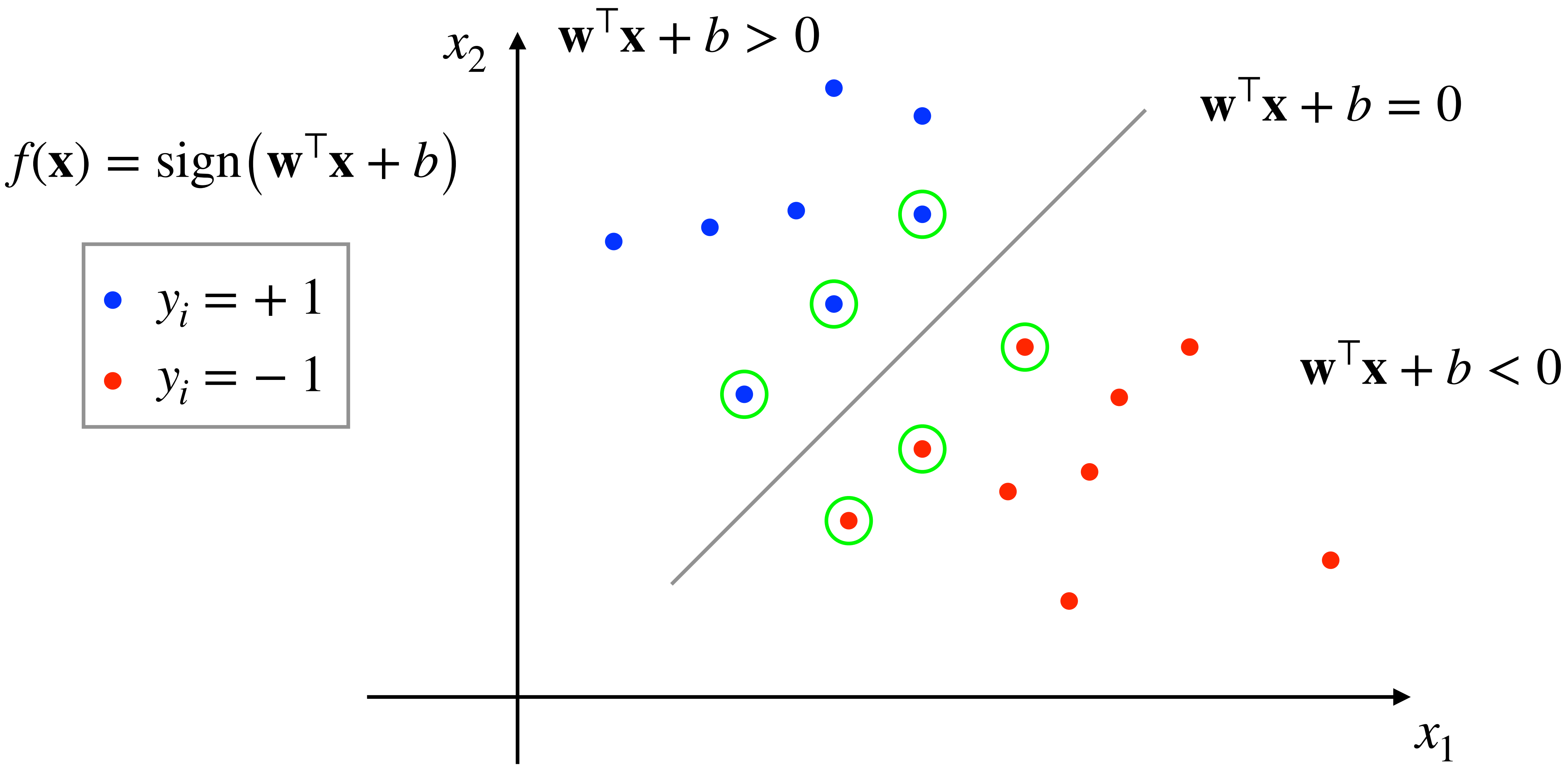


图7：支持向量与支持平面。

支持向量

- 与分类平面距离最近的样本点称为支持向量，进而构成支持平面。

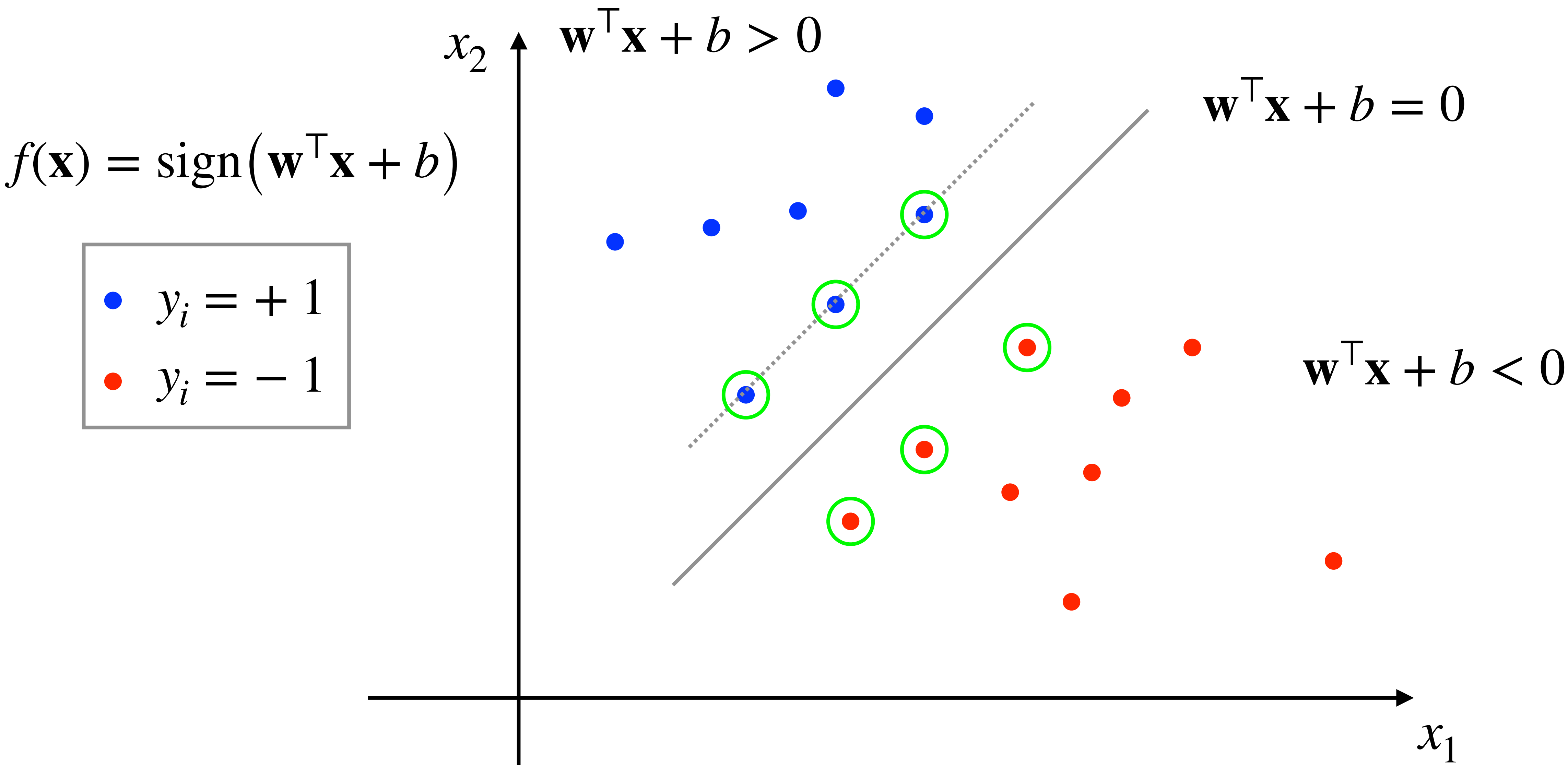


图7：支持向量与支持平面。

支持向量

- 与分类平面距离最近的样本点称为支持向量，进而构成支持平面。

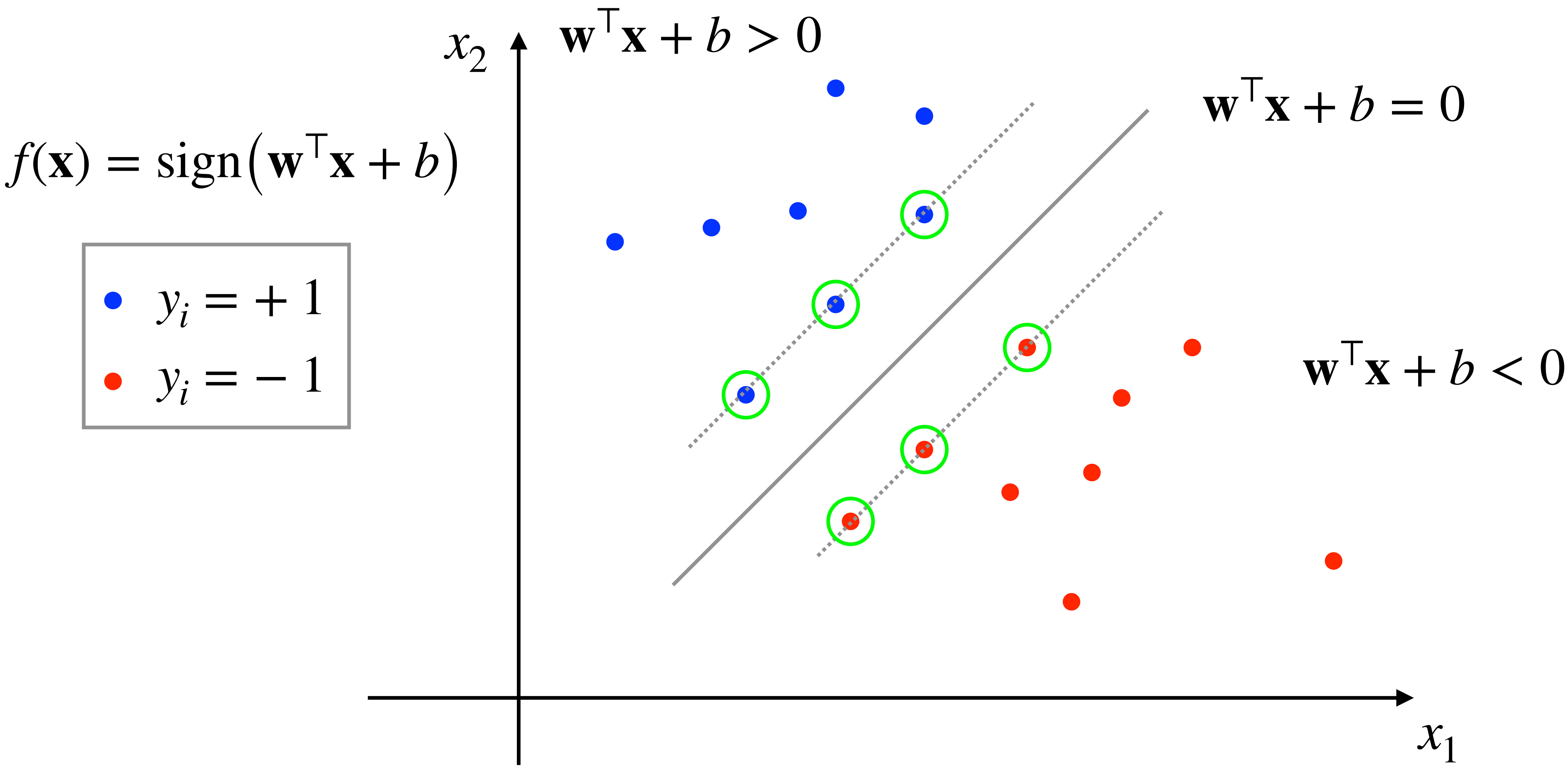


图7：支持向量与支持平面。

分类间距

- 分类器的分类间距ρ指的是支持平面之间的距离

$$f(\mathbf{x}) = \mathrm{sign}\left(\mathbf{w}^\top \mathbf{x} + b\right)$$

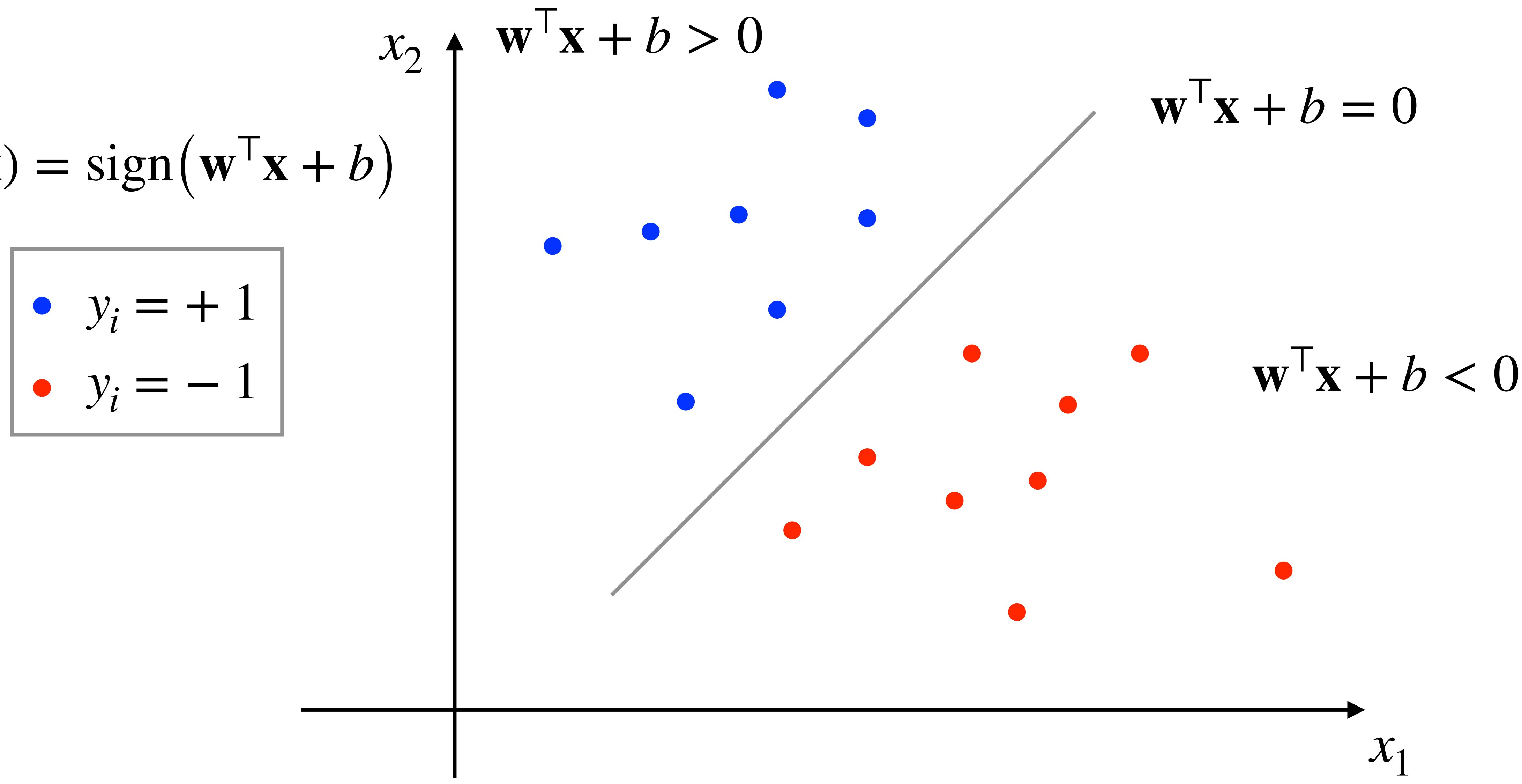


图8：分类间距。

分类间距

- 分类器的分类间距ρ指的是支持平面之间的距离

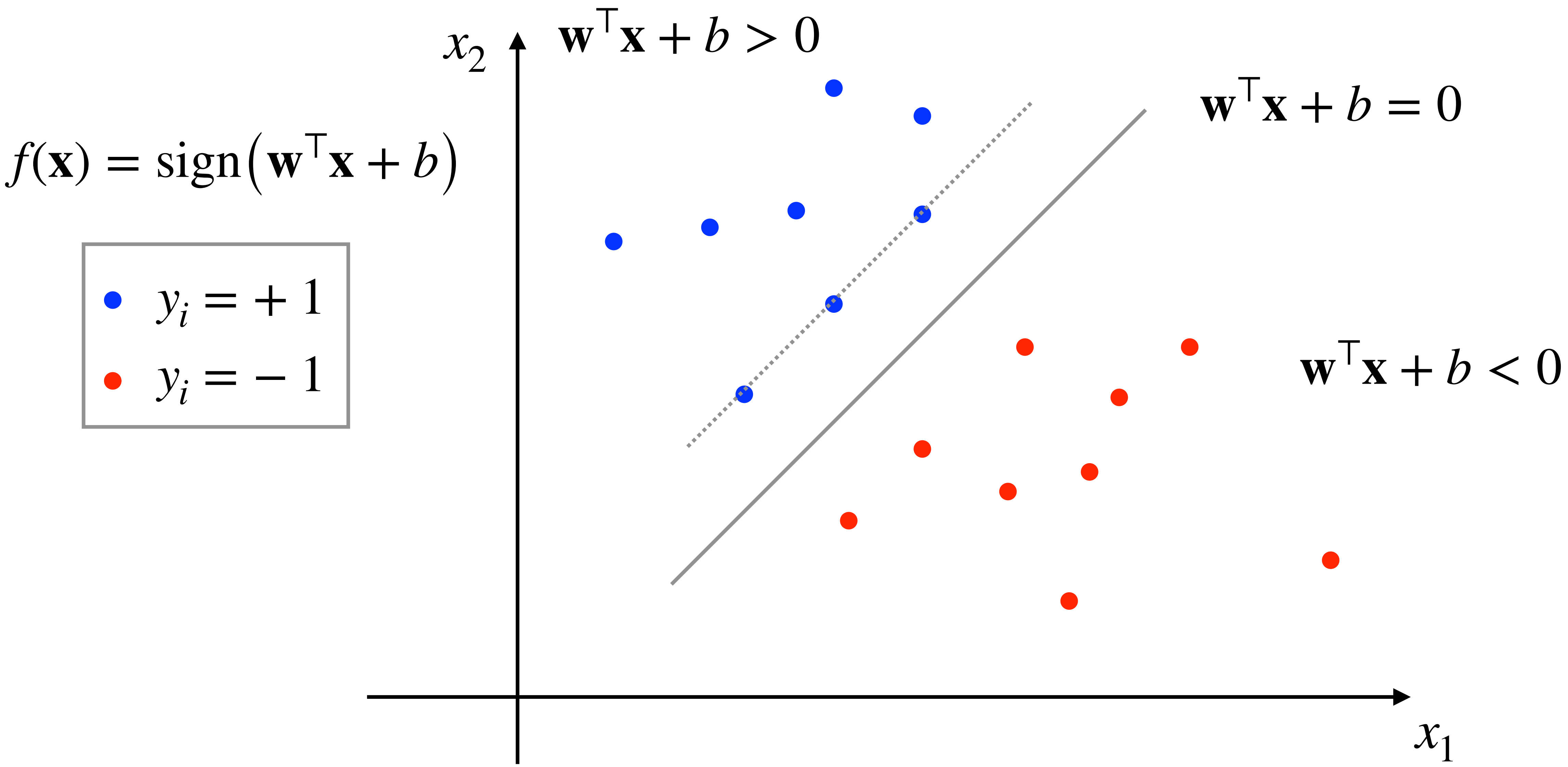


图8：分类间距。

分类间距

- 分类器的分类间距ρ指的是支持平面之间的距离

$$f(\mathbf{x}) = \mathrm{sign}\left(\mathbf{w}^\top \mathbf{x} + b\right)$$

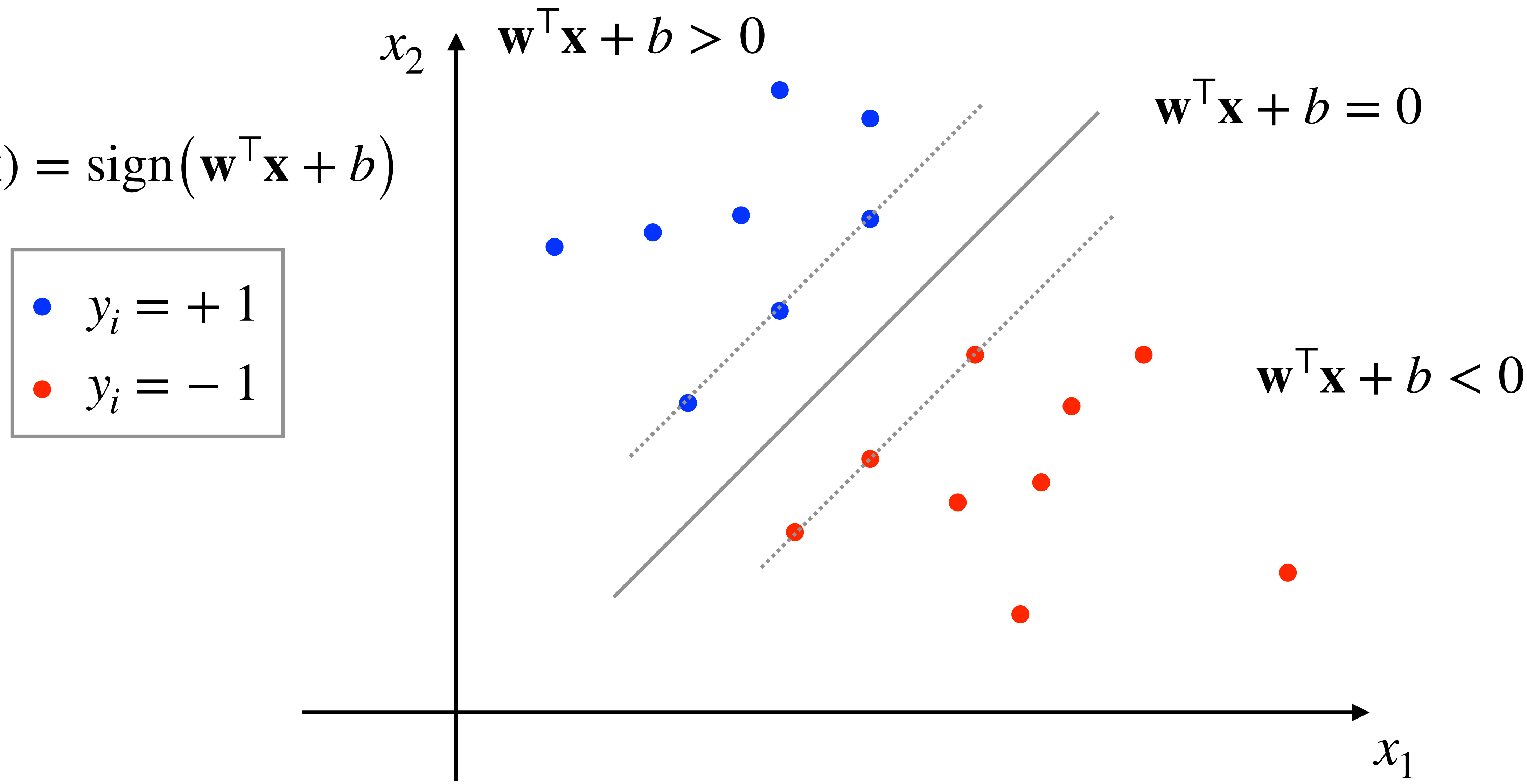


图8：分类间距。

分类间距

- 分类器的分类间距ρ指的是支持平面之间的距离

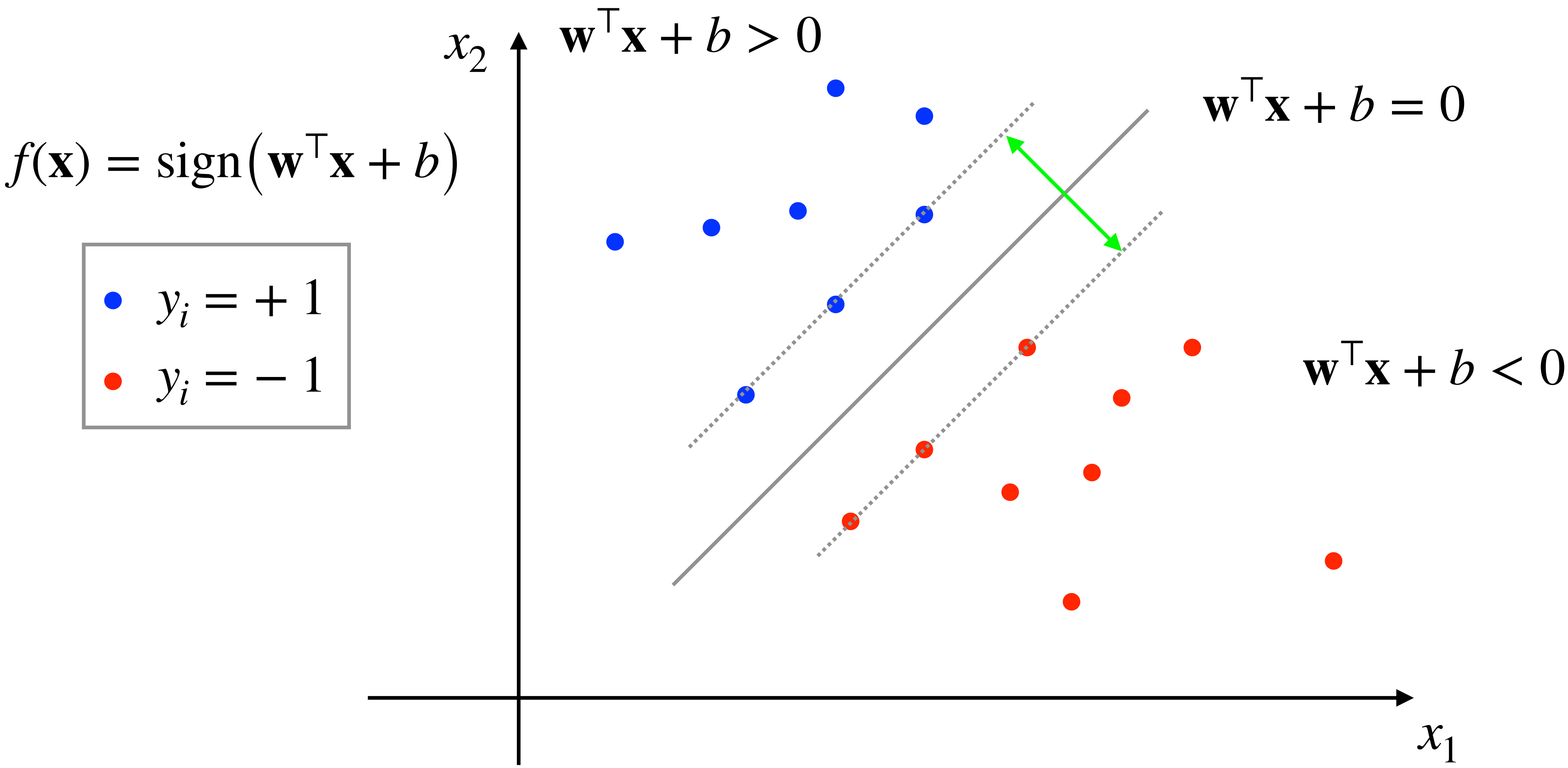


图8：分类间距。

分类间距

- 分类器的分类间距ρ指的是支持平面之间的距离

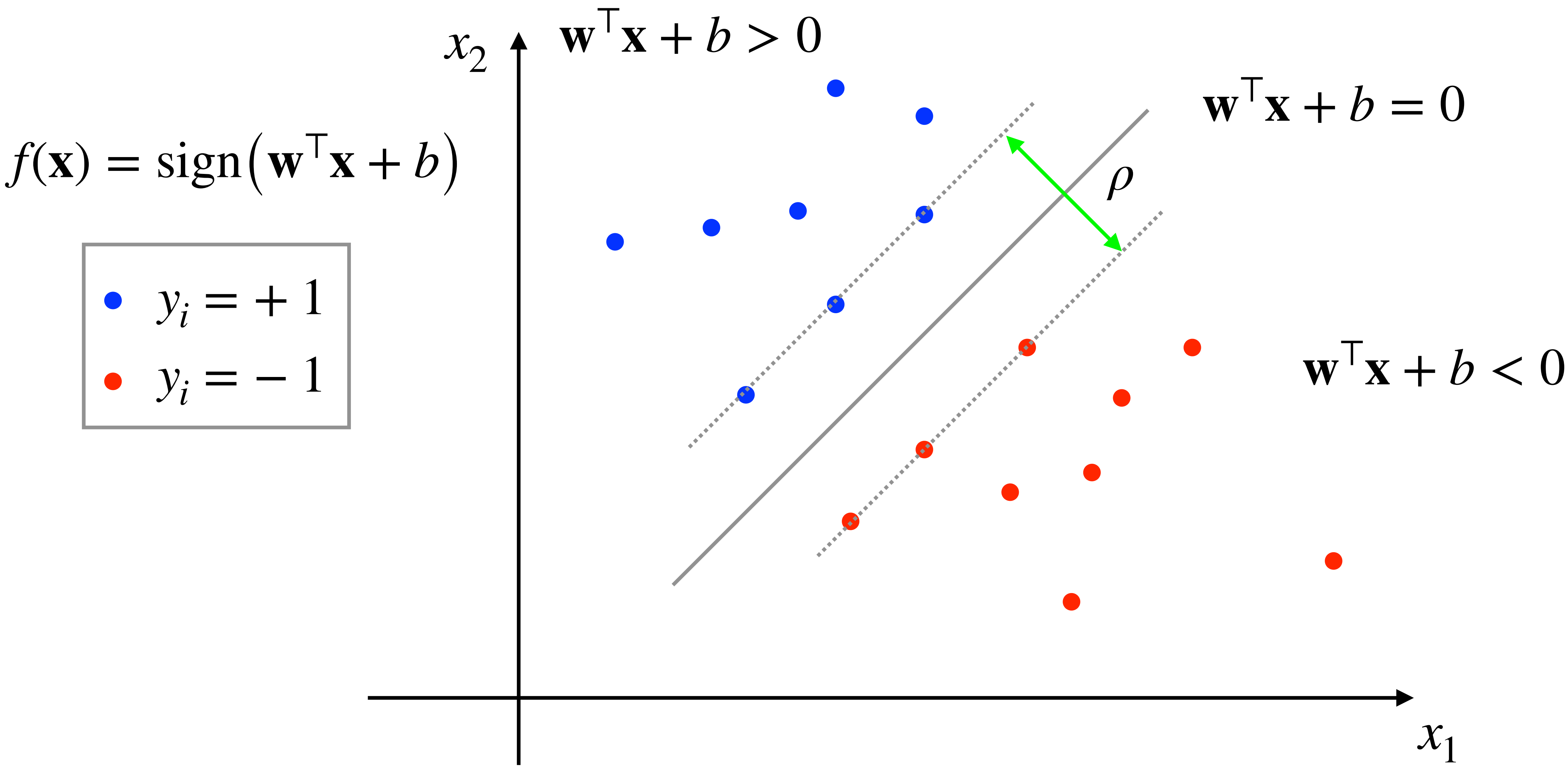


图8：分类间距。

内容提要

分类问题

支持向量机

松弛变量

核函数

支持向量机

- 支持向量机的核心思想：最大化分类间距ρ。

$$f(\mathbf{x}) = \mathrm{sign}\left(\mathbf{w}^\top \mathbf{x} + b\right)$$

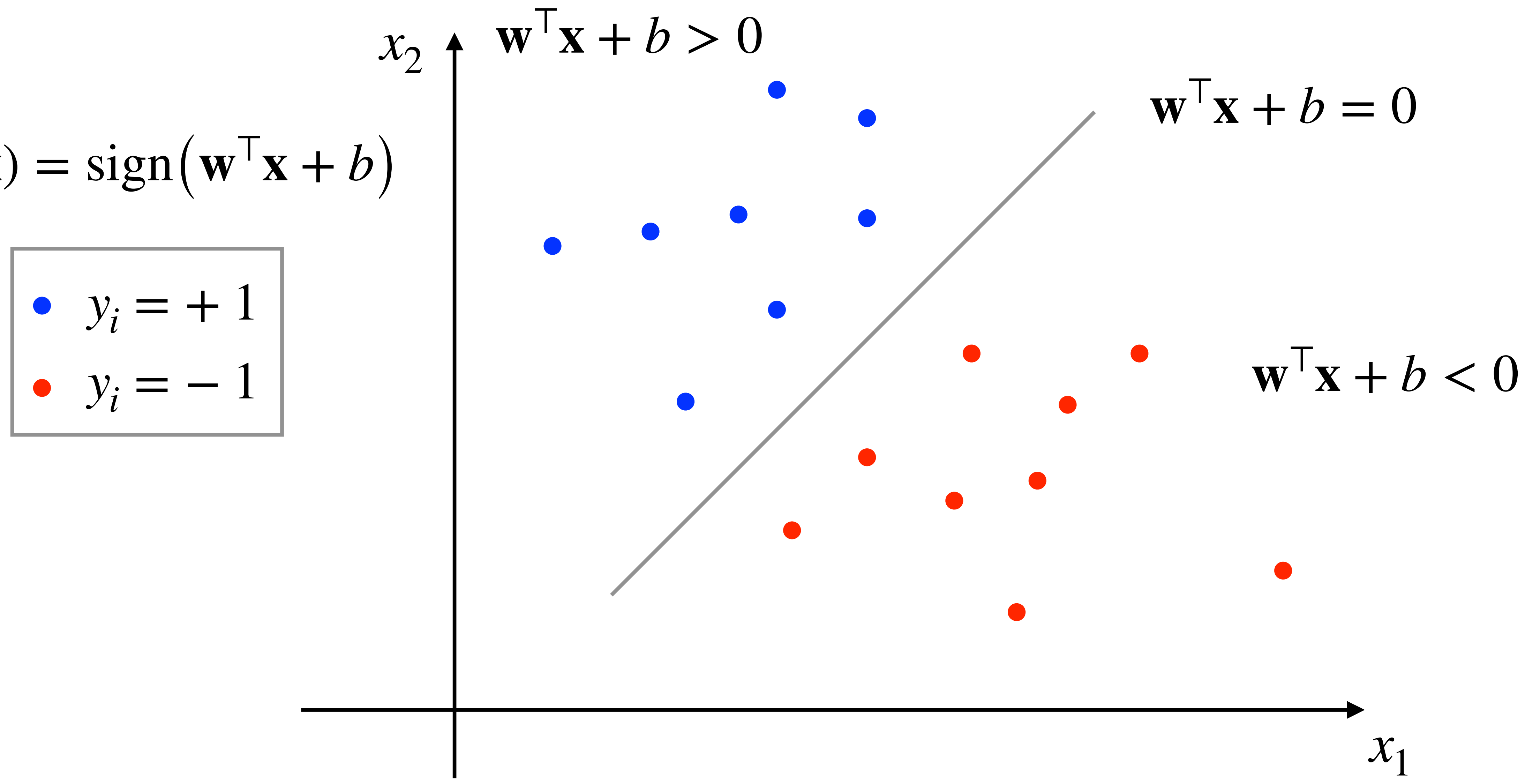


图8：分类间距。

支持向量机

- 支持向量机的核心思想：最大化分类间距ρ。

$$f(\mathbf{x}) = \mathrm{sign}\left(\mathbf{w}^\top \mathbf{x} + b\right)$$

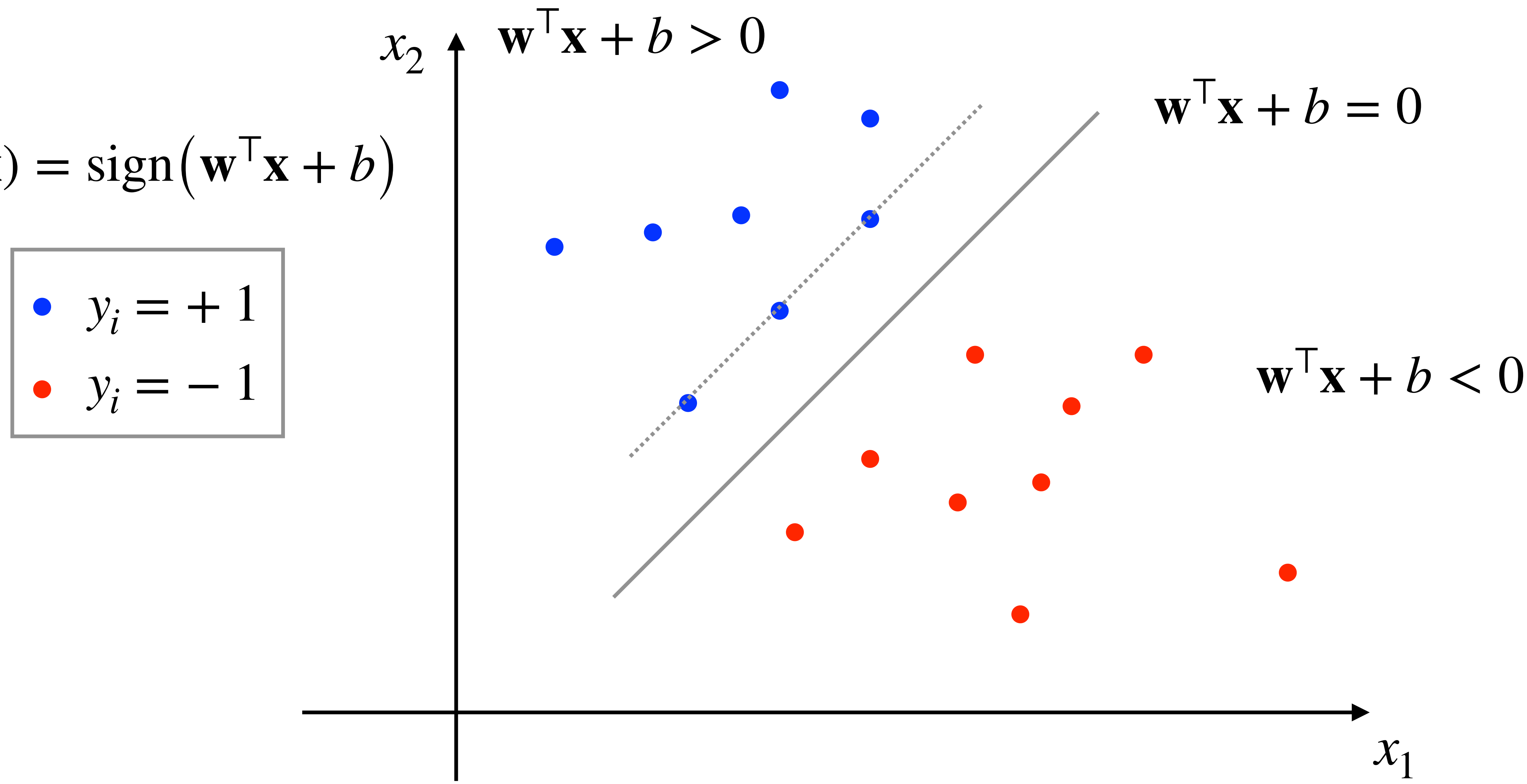


图8：分类间距。

支持向量机

- 支持向量机的核心思想：最大化分类间距ρ。

$$f(\mathbf{x}) = \text{sign}\left(\mathbf{w}^\top\mathbf{x} + b\right)$$

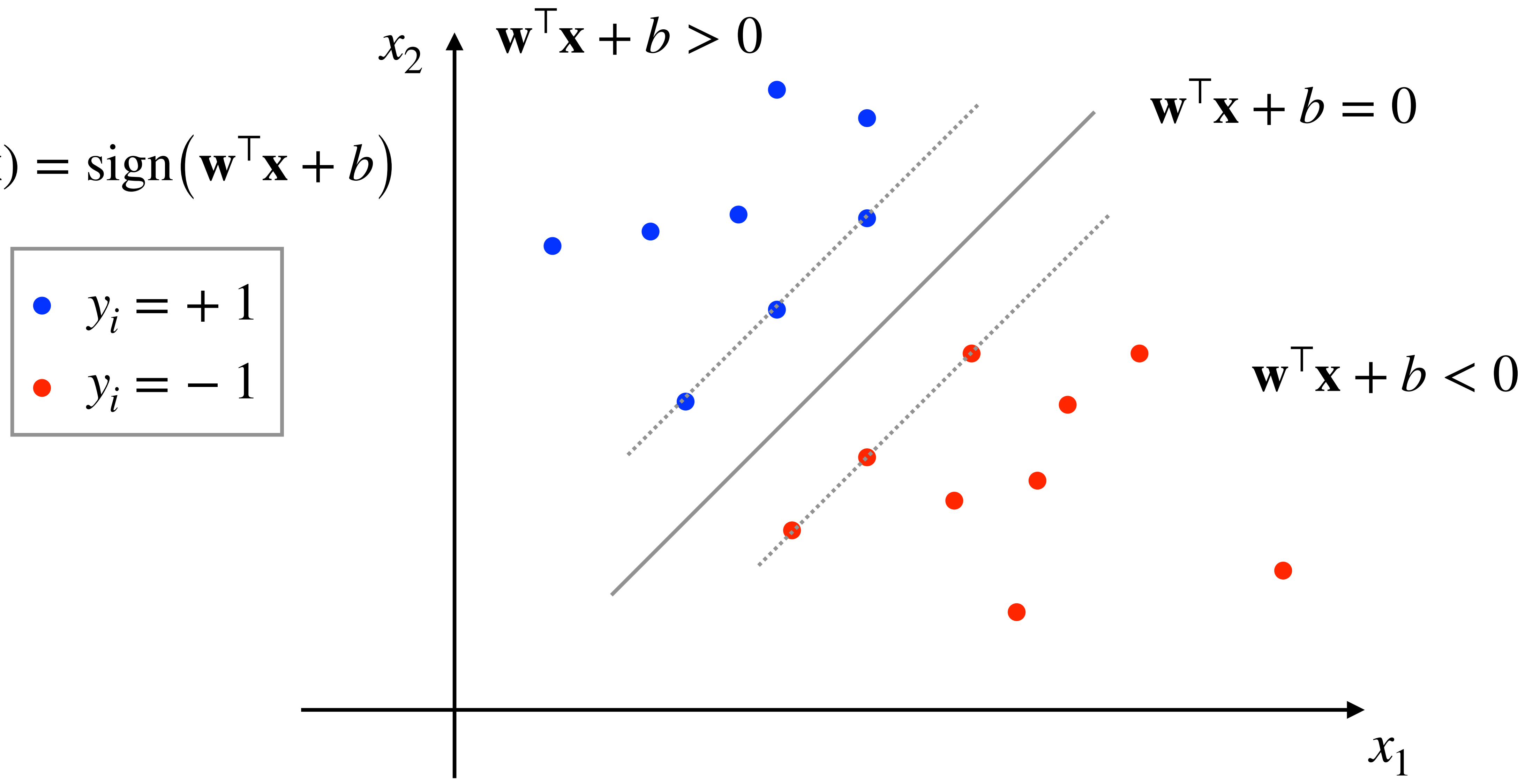


图8：分类间距。

支持向量机

- 支持向量机的核心思想：最大化分类间距ρ。

$$f(\mathbf{x}) = \mathrm{sign}\left(\mathbf{w}^\top \mathbf{x} + b\right)$$

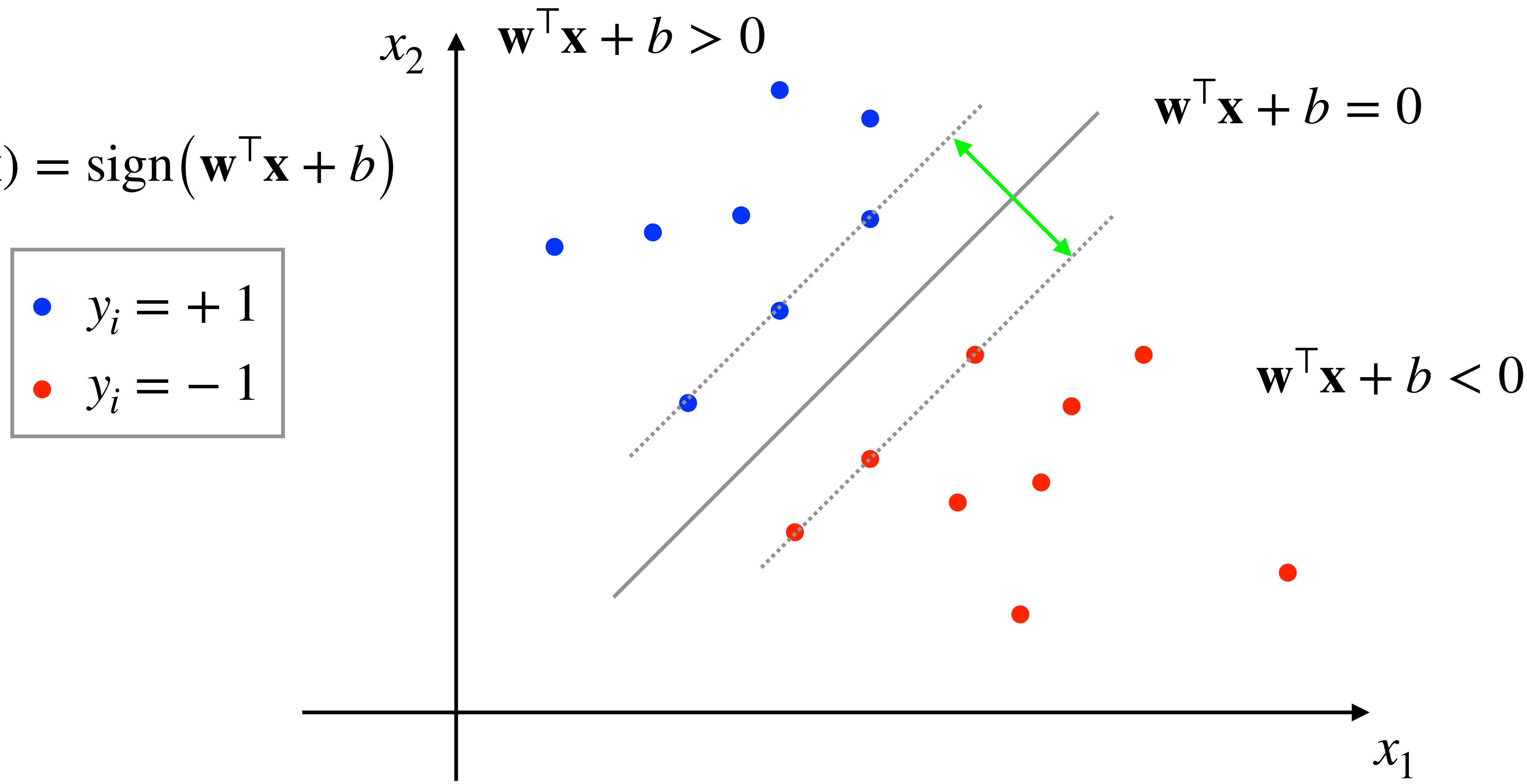


图8：分类间距。

支持向量机

- 支持向量机的核心思想：最大化分类间距ρ。

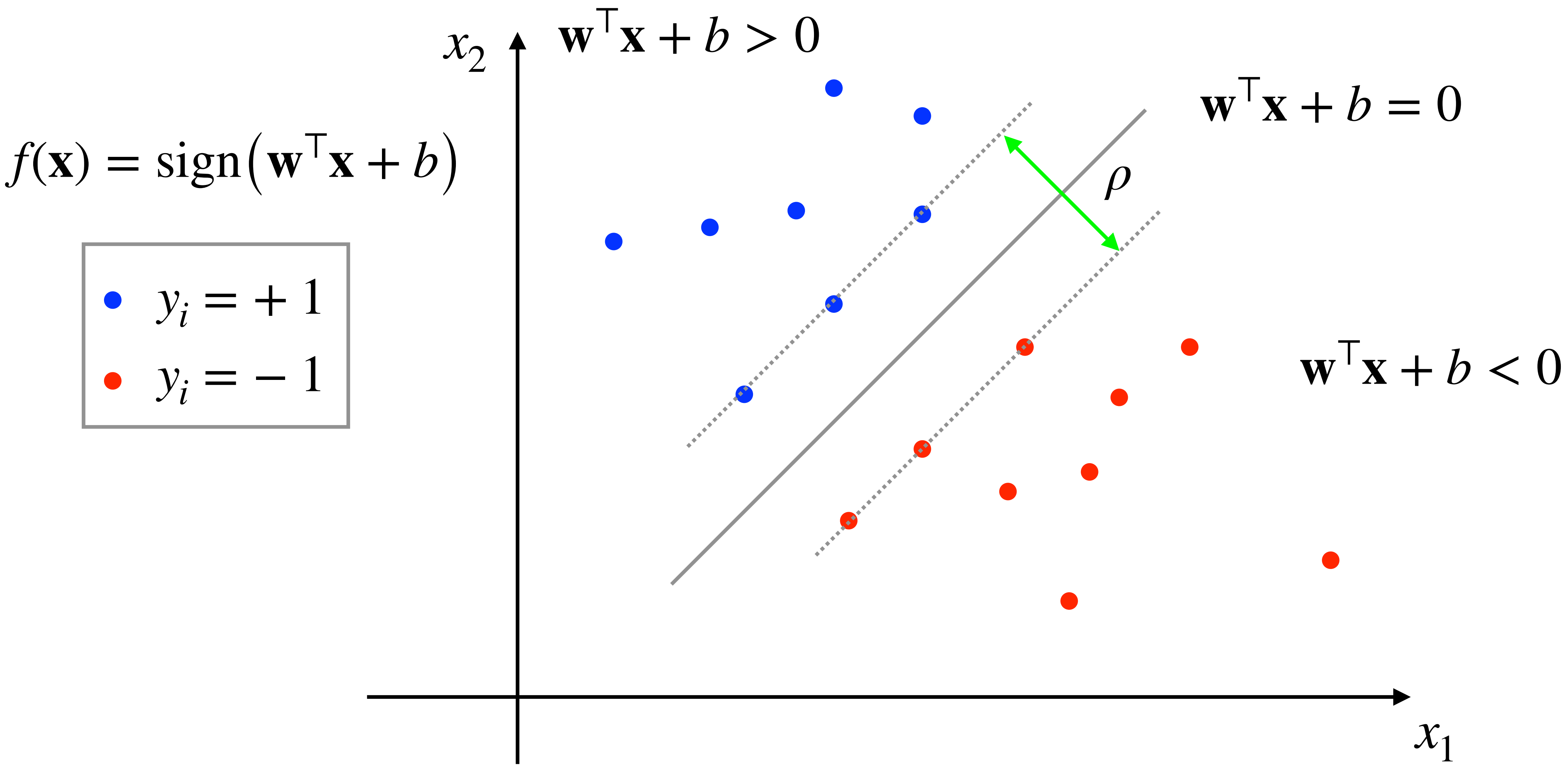


图8：分类间距。

支持向量机的形式化表示

令$\{(\mathbf{x}_i, y_i)\}_{i=1}^N$表示训练集，其中$\mathbf{x}_i \in \mathbb{R}^d$是一个$d$维实数向量的输入数据点，$y_i \in \{-1, +1\}$是输出的类别。如果训练集可以被一个分类平面分开，根据分类间隔ρ的定义，对于任意样本$(\mathbf{x}_i, y_i)$都满足：

① 如果$y_i = -1$，则$\mathbf{w}^\top \mathbf{x}_i + b \leq -\rho/2$

② 如果$y_i = +1$，则$\mathbf{w}^\top \mathbf{x}_i + b \geq +\rho/2$

换句话说，函数距离满足以下不等式：

$$y_i(\mathbf{w}^\top \mathbf{x}_i + b) \geq \rho/2$$

由于参数除以一个常数不影响结果（如$\mathrm{sign}(2x-2) \equiv \mathrm{sign}(x-1)$），可以进一步简化为

$$y_i(\mathbf{w}^\top \mathbf{x}_i + b) \geq 1$$

支持向量机的形式化表示

根据支持向量的定义，作为支持向量的样本点满足分类距离最小，因此可以对上述不等式取等：

$$y_s(\mathbf{w}^\top \mathbf{x}_s + b) = 1$$

其中，$\mathbf{x}_s$表示支持向量，y_s表示对应的类别。

由于$|y_s| = 1$，必然有$|\mathbf{w}^\top \mathbf{x}_s + b| = 1$，因此支持向量到分类平面的几何距离为

$$\frac{\rho}{2} = \frac{|\mathbf{w}^\top \mathbf{x}_s + b|}{||\mathbf{w}||^2} = \frac{1}{||\mathbf{w}||^2}$$

因此，最大化分类间隔ρ的问题转化为最小化$||\mathbf{w}||^2$的问题，消除了非参数变量ρ。

约束条件

支持向量机的目标是最大化分类间隔（即几何距离），但一个重要的前提条件是必须保证分类正确（即函数距离）：

$$y_i(\mathbf{w}^\top \mathbf{x}_i + b) \geq 1$$

可以做一个变换消除掉偏置项b

$$\mathbf{x}_i = [\mathbf{x}_i^\top, 1]^\top$$

$$\mathbf{w} = [\mathbf{w}^\top, -b]^\top$$

因此，约束条件可以简化为对于所有的$i \in [1, N]$，满足

$$y_i \mathbf{w}^\top \mathbf{x}_i \geq 1$$

支持向量机的训练是一个受限条件下的求函数极值问题。

优化与推断

综上所述，支持向量机的优化目标是在保持分类正确的条件下最大化分类间隔，形式化表述为：

$$\hat{\mathbf{w}} = \mathrm{argmin}_{\mathbf{w}} \left\{ \frac{1}{2} ||\mathbf{w}||^2 \right\}$$

$$\mathrm{s.\,t.}\ y_i \mathbf{w}^\top \mathbf{x}_i \geq 1, \forall i = 1, \ldots, N$$

参数$\mathbf{w}$可以理解为数据点$\mathbf{x}_i$的权重，对于d维中的每一维分量都有权重。

在获得最优参数$\hat{\mathbf{w}}$后，可以使用下面的推断公式对未知数据点$\mathbf{x}$的类别进行预测：

$$f(\mathbf{x}) = \mathrm{sign}(\hat{\mathbf{w}}^\top \mathbf{x})$$

关键问题在于，如何在受限条件下获得支持向量机的最优参数？

拉格朗日乘子法

受限条件下的优化通常使用拉格朗日乘子法来解决。需要注意的是，这里的约束条件是不等式，而不是等式。因此，优化目标可定义为：

$$L(\mathbf{w}, \boldsymbol{\alpha}) = \frac{1}{2}||\mathbf{w}||^2 - \sum_{i=1}^{N} \alpha_i (y_i \mathbf{w}^\top \mathbf{x}_i - 1) \qquad \text{（公式1）}$$

$$\text{s.t. } \alpha_i \geq 0, \forall i \in [1, N]$$

其中，$\boldsymbol{\alpha} = (\alpha_1, \ldots, \alpha_N)^\top$是拉格朗日乘子向量。

由于$y_i \mathbf{w}^\top \mathbf{x}_i \geq 1$并且$\alpha_i \geq 0$，则有

$$-\sum_{i=1}^{N} \alpha_i (y_i \mathbf{w}^\top \mathbf{x}_i - 1) \leq 0 \qquad \text{（公式2）}$$

拉格朗日乘子法

根据公式1和公式2，可以得到：

$$\max_{\boldsymbol{\alpha}} L(\mathbf{w}, \boldsymbol{\alpha}) = \frac{1}{2} ||\mathbf{w}||^2$$

因此，优化问题等价于求解：

$$(\hat{\mathbf{w}}, \hat{\boldsymbol{\alpha}}) = \arg\min_{\mathbf{w}} \max_{\boldsymbol{\alpha}} L(\mathbf{w}, \boldsymbol{\alpha}) \qquad \text{（公式3）}$$

公式3可理解如下：首先以$\boldsymbol{\alpha}$为变量，计算$L(\mathbf{w}, \boldsymbol{\alpha})$的最大值，然后再以$\mathbf{w}$为变量，进一步计算最小值。

相对于传统的直接求最大值或者最小值，支持向量机的优化问题要更加困难。这是因为在第一步中无法得到$\boldsymbol{\alpha}$与$\mathbf{w}$之间的转换关系（本质原因是$\boldsymbol{\alpha}$只是附在等式上的乘子），从而在第二步中无法消去$\boldsymbol{\alpha}$变成只有单个变量$\mathbf{w}$的求极值问题。

原始问题与对偶问题

为此，支持向量机采用了一种巧妙的方法，将原始问题的min-max求解

$$(\hat{\mathbf{w}}, \hat{\boldsymbol{\alpha}}) = \arg\min_{\mathbf{w}} \max_{\boldsymbol{\alpha}} L(\mathbf{w}, \boldsymbol{\alpha}) \qquad \text{（公式3）}$$

转换为对偶问题的max-min求解

$$(\hat{\mathbf{w}}, \hat{\boldsymbol{\alpha}}) = \arg\max_{\boldsymbol{\alpha}} \min_{\mathbf{w}} L(\mathbf{w}, \boldsymbol{\alpha}) \qquad \text{（公式4）}$$

这样做的好处在于，可以在第一步（即令$L(\mathbf{w}, \boldsymbol{\alpha})$对$\mathbf{w}$的偏导为0）就得到$\boldsymbol{\alpha}$与$\mathbf{w}$之间的转换关系，从而在第二步（即令$L(\mathbf{w}, \boldsymbol{\alpha})$对$\boldsymbol{\alpha}$的偏导为0）中消去$\mathbf{w}$得到单变量$\boldsymbol{\alpha}$的函数。在求出最优拉格朗日乘子$\hat{\boldsymbol{\alpha}}$之后，可以通过$\boldsymbol{\alpha}$与$\mathbf{w}$之间的转换关系得到最优参数$\hat{\mathbf{w}}$。

因此，我们可以改为求解对偶问题，将对偶问题的解作为原始问题的解。

支持向量机的对偶问题求解

对偶问题求解目标为：

$$(\hat{\mathbf{w}}, \hat{\boldsymbol{\alpha}}) = \arg\max_{\boldsymbol{\alpha}} \min_{\mathbf{w}} L(\mathbf{w}, \boldsymbol{\alpha}) \qquad \text{（公式4）}$$

首先考虑内层的计算最小值问题：$\min_{\mathbf{w}} L(\mathbf{w}, \boldsymbol{\alpha})$。计算目标函数$L(\mathbf{w}, \boldsymbol{\alpha})$关于$\mathbf{w}$的偏导，可以得到

$$\frac{\partial L(\mathbf{w}, \boldsymbol{\alpha})}{\partial \mathbf{w}} = \mathbf{w} - \sum_{i=1}^{N} \alpha_i y_i \mathbf{x}_i \qquad \text{（公式5）}$$

令公式5中的偏导为0，可以得到$\mathbf{w}$的极值点：

$$\hat{\mathbf{w}} = \sum_{i=1}^{N} \alpha_i y_i \mathbf{x}_i \qquad \text{（公式6）}$$

支持向量机的对偶问题求解

将公式4代入公式1，得到

$$L(\hat{\mathbf{w}}, \boldsymbol{\alpha}) = \frac{1}{2}||\hat{\mathbf{w}}||^2 - \sum_{i=1}^{N} \alpha_i (y_i \hat{\mathbf{w}}^\top \mathbf{x}_i - 1)$$

$$= \boldsymbol{\alpha}^\top \mathbf{1} - \frac{1}{2} \boldsymbol{\alpha}^\top \mathbf{YGY} \boldsymbol{\alpha} \qquad \text{（公式7）}$$

其中，$\mathbf{1} \in \mathbb{R}^{N \times 1}$是一个元素均为1的$N$维列向量，$\mathbf{Y} \in \mathbb{R}^{N \times N}$是一个对角矩阵diag$(y_1, \ldots, y_N)$，$\mathbf{G} \in \mathbb{R}^{N \times N}$是一个方阵，其元素$G_{ij} = \mathbf{x}_i^\top \mathbf{x}_j$。

可以使用SMO算法来求解$\hat{\boldsymbol{\alpha}}$：

$$\hat{\boldsymbol{\alpha}} = \mathrm{argmax}_{\boldsymbol{\alpha}} \left\{ \boldsymbol{\alpha}^\top \mathbf{1} - \frac{1}{2} \boldsymbol{\alpha}^\top \mathbf{YGY} \boldsymbol{\alpha} \right\} \qquad \text{（公式8）}$$

KKT条件

原始问题与对偶问题同时取得最优解需要满足一定条件，这个条件就是Karush-Kuhn-Tucker条件，简称KKT条件。

考虑一个通用的约束优化问题：$\min f(\mathbf{x})$ s.t. $g(\mathbf{x}) \leq 0$，KKT条件主要包括以下四个子条件：

① 定常方程式：$\dfrac{\partial f}{\partial \mathbf{x}} + \lambda \dfrac{\partial g}{\partial \mathbf{x}} = 0$

② 原始可行性：$g(\mathbf{x}) \leq 0$

③ 对偶可行性：$\lambda \geq 0$

④ 互补松弛性：$\lambda g(\mathbf{x}) = 0$

支持向量机中的KKT条件

$$L(\mathbf{w}, \boldsymbol{\alpha}) = \frac{1}{2}||\mathbf{w}||^2 - \sum_{i=1}^{N} \alpha_i (y_i \mathbf{w}^\top \mathbf{x}_i - 1)$$

$$\text{s.t. } \alpha_i \geq 0, \forall i \in [1, N]$$

① 定常方程式：$\dfrac{\partial L}{\partial \mathbf{w}} = 0$

② 原始可行性：$y_i \mathbf{w}^\top \mathbf{x}_i \geq 1, \ \forall i = 1, \ldots, N$

③ 对偶可行性：$\alpha_i \geq 0, \forall i = 1, \ldots, N$

④ 互补松弛性：$\alpha_i (y_i \mathbf{w}^\top \mathbf{x}_i - 1) = 0, \ \forall i = 1, \ldots, N$

第4点的含义是，支持向量的样本点满足$y_i \mathbf{w}^\top x_i = 1$而且其对应的$\alpha_i > 0$，而非支持向量的样本点对应的$\alpha_i = 0$。

预测只与支持向量相关

- 支持向量机的预测只与支持向量相关，非支持向量的样本点并不起作用

$$f(\mathbf{x}) = \mathrm{sign}\left(\hat{\mathbf{w}}^\top \mathbf{x}\right) = \mathrm{sign}\left(\sum_{i=1}^{N} \hat{\alpha}_i y_i \mathbf{x}_i^\top \mathbf{x}\right)$$

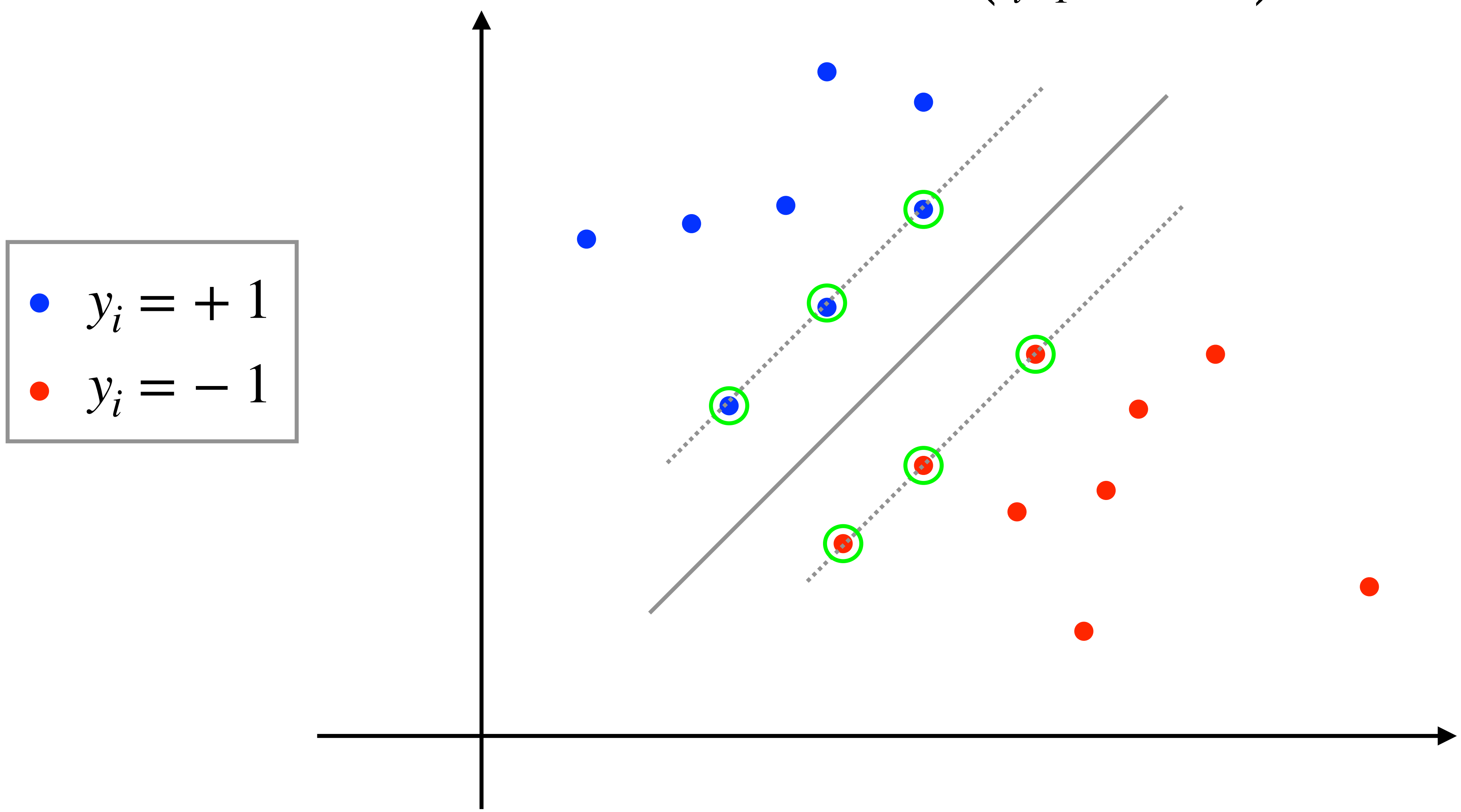


图9：支持向量机的预测只与支持向量相关。

内容提要

- 分类问题
- 支持向量机
- **松弛变量**
- 核函数

线性不可分

- 上面讨论的都是线性可分数据。在实际应用中，存在着大量线性不可分的数据。该如何处理？

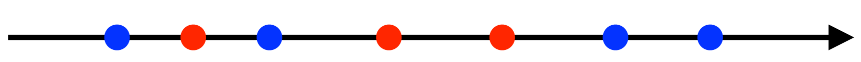


图10：一维线性不可分数据。

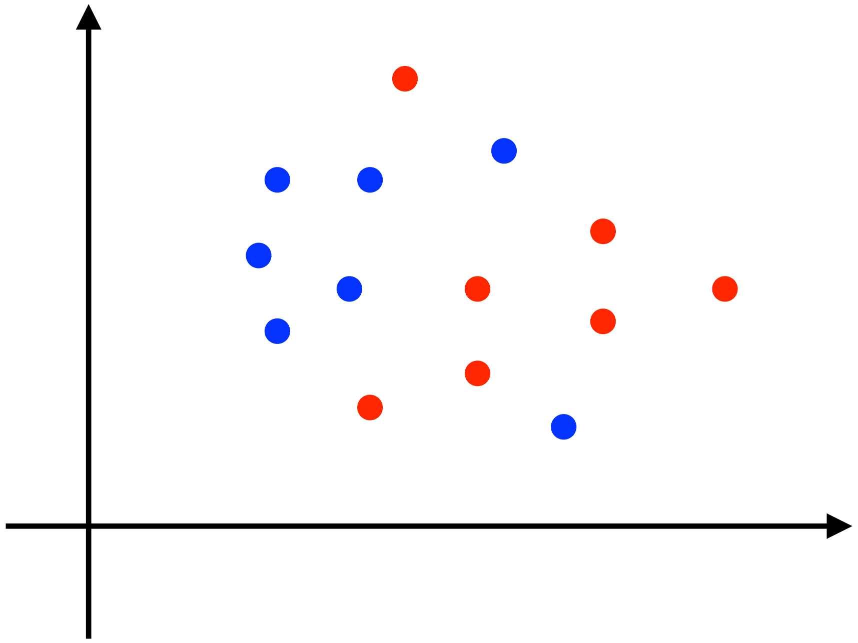


图11：二维线性不可分数据。

松弛变量

- 引入松弛变量，容忍部分不可分数据。

$$y_i \mathbf{w}^\top \mathbf{x}_i \geq 1 - \xi_i$$

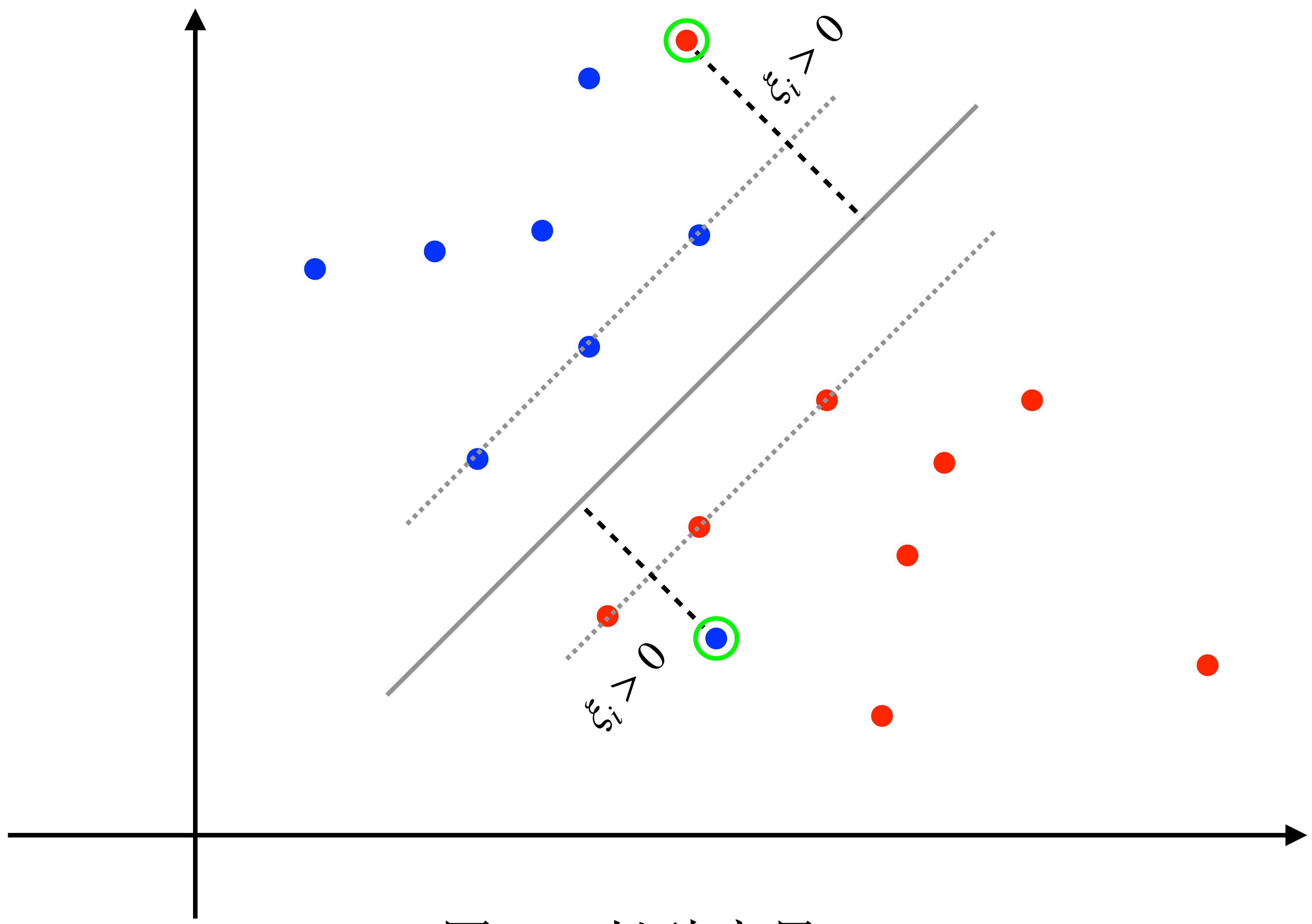


图12：松弛变量。

引入松弛变量的支持向量机

引入松弛变量后，支持向量机的优化目标可以扩展为

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

$$\text{s.t. } y_i\mathbf{w}^\top\mathbf{x}_i \geq 1 - \xi_i, \ \forall i = 1,\ldots,N$$

$$\xi_i \geq 0, \ \forall i = 1,\ldots,N$$

我们将远离群体的样本点称为离群点。例如，图8中左上方蓝色样本点群中的红色样本点是一个离群点，因为它远离了右下方红色样本点群。

每个离群点$\mathbf{x}_i$都有一个$\xi_i > 0$，表示其远离的程度，而非离群点对应的$\xi_i = 0$。C是一个超参数，其取值越大，表示越重视离群点，不希望舍弃这些样本点。

因此，新的优化的标是最大化分类间隔，同时最小化离群距离。

拉格朗日乘子法

使用拉格朗日乘子法，可以得到目标函数如下：

$$L(\mathbf{w}, \boldsymbol{\xi}, \boldsymbol{\alpha}, \boldsymbol{\beta}) = \frac{1}{2}||\mathbf{w}||^2 + C\sum_{i=1}^{N}\xi_i - \sum_{i=1}^{N}\alpha_i(y_i\mathbf{w}^\top\mathbf{x}_i - 1 + \xi_i) - \sum_{i=1}^{N}\beta_i\xi_i$$

原始问题可以表述为

$$\min_{\mathbf{w},\boldsymbol{\xi}}\max_{\boldsymbol{\alpha},\boldsymbol{\beta}} L(\mathbf{w}, \boldsymbol{\xi}, \boldsymbol{\alpha}, \boldsymbol{\beta})$$

对偶问题可以表述为

$$\max_{\boldsymbol{\alpha},\boldsymbol{\beta}}\min_{\mathbf{w},\boldsymbol{\xi}} L(\mathbf{w}, \boldsymbol{\xi}, \boldsymbol{\alpha}, \boldsymbol{\beta})$$

接下来，我们可以求解对偶问题获得原始问题的解。

对偶问题求解

首先计算目标函数关于**w**和**ξ**的极值点，可以得到

$$0 = \frac{\partial L}{\partial \mathbf{w}}\bigg|_{\hat{\mathbf{w}}} \quad \Rightarrow \quad \hat{\mathbf{w}} = \sum_{i=1}^{N} \alpha_i y_i \mathbf{x}_i$$

$$0 = \frac{\partial L}{\partial \boldsymbol{\xi}}\bigg|_{\hat{\boldsymbol{\xi}}} \quad \Rightarrow \quad \mathbf{0} \leq \boldsymbol{\alpha} \leq C\mathbf{1}$$

代入目标函数，可以得到以下优化公式：

$$\hat{\boldsymbol{\alpha}} = \mathrm{argmax}_{\mathbf{0} \leq \boldsymbol{\alpha} \leq C\mathbf{1}} \left\{ \boldsymbol{\alpha}^\top \mathbf{1} - \frac{1}{2} \boldsymbol{\alpha}^\top \mathbf{GYG} \boldsymbol{\alpha} \right\}$$

仍然可以使用SMO算法进行求解。与之前相比，主要是加入了新的约束条件。

内容提要

分类问题

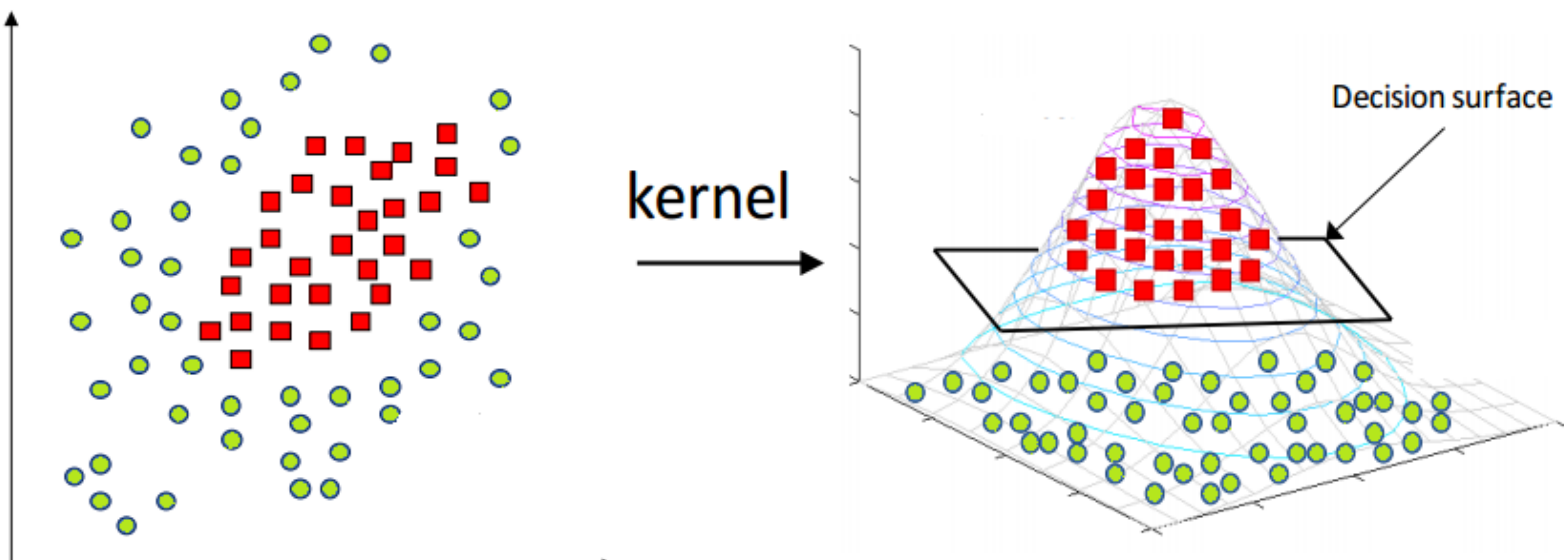
支持向量机

松弛变量

核函数

空间映射

虽然松弛变量能够允许一定的离群点，但是只适合线性不可分情况不严重的情况。如果线性不可分情况非常严重，需要进一步进行空间映射，将低维空间的线性不可分问题转为高维空间的线性可分问题。



图片来源：https://medium.com/analytics-vidhya

图13：空间映射。

核函数

将所有样本点从原来的不可分空间装换到一个新的可分的特征空间，我们需要定义一个映射：

$$\Phi : \mathbf{x} \rightarrow \Phi(\mathbf{x})$$

核函数是一个函数，定义如下：

$$K(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2) = \langle \Phi(\mathbf{x}_1), \Phi(\mathbf{x}_2) \rangle$$

其中，$\langle \cdot, \cdot \rangle$表示两个向量的内积。注意到支持向量机的预测其实是有支持向量的内积所决定的：

$$f(\mathbf{x}) = \mathrm{sign}\left(\sum_{i=1}^{N} \hat{\alpha}_i y_i \mathbf{x}_i^\top \mathbf{x} \right) = \mathrm{sign}\left(\sum_{i=1}^{N} \hat{\alpha}_i y_i \langle \mathbf{x}_i, \mathbf{x} \rangle \right)$$

核函数的优点

核函数与在映射后的特征空间计算内积是等价的。好处在于可以直接在低维空间计算内积，不需要显式地进行空间映射，计算效率更高。

$$
\begin{aligned}
f(\mathbf{x}) &= \mathrm{sign}\left(\sum_{i=1}^{N} \hat{\alpha}_i y_i \left\langle \Phi(\mathbf{x}_i), \Phi(\mathbf{x}) \right\rangle \right) \\
&= \mathrm{sign}\left(\sum_{i=1}^{N} \hat{\alpha}_i y_i K(\mathbf{x}_i, \mathbf{x}) \right)
\end{aligned}
$$

常见的核函数：

① 线性核函数：$K(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2) = \langle \mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2 \rangle$

② 多项式核函数：$K(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2) = \left(\langle \mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2 \rangle + R \right)^d$

③ 高斯核函数：$K(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2) = \exp\left(-\frac{||\mathbf{x}_1 - \mathbf{x}_2||^2}{2\sigma^2} \right)$

总结

- 分类是人工智能中的常见为题，是在特征空间中将属于不同类别的数据点进行分隔的任务。
- 支持向量机是一种最大化分类间隔的分类器。
- 由于满足KKT条件，支持向量机的优化问题通常可以转换为对偶问题求解。
- 通过引入松弛变量，我们可以训练得到软约束的支持向量机。
- 可以通过使用核函数让支持向量机处理线性不可分数据。

谢谢