中国科学技术大学
University of Science and Technology of China

人工智能讲义

线性分类

March 27, 2018

Outline

1. 从例子开始
2. 分类的几何意义
3. 线性 SVM

电子邮件地址识别：问题描述

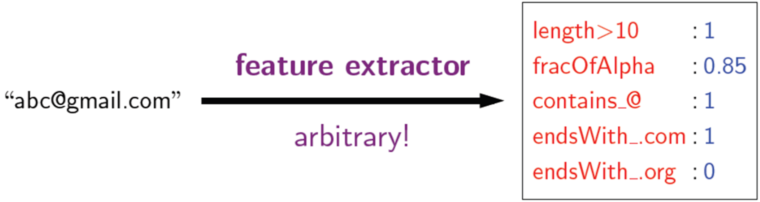
- 输入 x: 表示给定的一个字符串，
- 输出：判断 x 是不是电子邮件地址。
  - 输入是字符串 x
  - 输出是-1 或 $+1$，$+1$ 表示是电子邮件地址，-1 表示否

例子

- $x =$"zhangsan@gmail.com" $\longrightarrow y = +1$ 是电子邮件地址
- $x =$"abcd.efgh.ijk" $\longrightarrow y = -1$ 不是电子邮件地址

电子邮件地址识别：问题分析

- 输入字符串 x 的“预处理”：特征提取函数
- x 变化范围太大，非结构化的，处理不方便，先预处理，提取描述 x 的特征向量，即 $x \Longrightarrow \phi(x) = (\phi_1(x), \phi_2(x), \ldots, \phi_d(x))$
- 特征提取函数输出一个长度为 d 的向量，描述输入 x 的特征
- 在图像和语音识别研究中常用，且是其基本研究内容之一
- 例子如图所示，$x \Longrightarrow \phi(x) = (length > 10, \ fracOfAlpha, contains\_@, endsWith\_.com, endsWith\_.org)$



h 如何获得

length>10	:1
fracOfAlpha	:0.85
contains_@	:1
endsWith_.com	:1
endsWith_.org	:0

$$\longrightarrow \begin{bmatrix} 1 \\ 0.85 \\ 1 \\ 1 \\ 0 \end{bmatrix}$$

电子邮件地址识别：特征提取函数

- 如上图所示，任意一个字符串 x，经过特征提取函数的处理获得一个长度为 5 的实数向量
- 特征向量可以视为 5-维空间中的一个点

问题：存在很多特征提取函数，特征提取函数有优劣之分

- 评价标准?
- 评价方法?

手写体数字识别问题分析 1: f 是什么?

- 人眼看到输入，人脑对输出做出判决;
- 函数 f 涉及复杂的知识背景，心理活动等；难以用数学函数完美定义。

手写体数字识别问题分析 2: h 是什么?

- 用最简的线性函数 $h(x) = \mathbf{W} \cdot \phi(x)$ 来近似 f
- 注意到 $\mathbf{W}$ 是一个一维向量，x 变成了特征提取函数 $\phi(x)$，同时线性表达式的常数项 b 丢掉了 (为什么可以丢掉常数项？)

length>10	:-1.2
fracOfAlpha	:0.6
contains_@	:3
endsWith_.com	:2.2
endsWith_.org	:1.4
…	

权向量 W 的解释

- 权向量描述每一个特征的在判决是否是电子邮件地址时的贡献
- 如图所示例子，字符串长度大于 10 时，对是电子邮件地址的判决作用是负面的，权值为-1.2
- 字符串中包含 @ 字符，对判决是电子邮件的作用是正面的，权值为 3
- 权值绝对值越大，表明对应特征对最终判决的影响越大

h 如何获得

Weight vector $\mathbf{w} \in \mathbb{R}^d$

length>10	:-1.2
fracOfAlpha	:0.6
contains_@	:3
endsWith_.com	:2.2
endsWith_.org	:1.4

Feature vector $\phi(x) \in \mathbb{R}^d$

length>10	:1
fracOfAlpha	:0.85
contains_@	:1
endsWith_.com	:1
endsWith_.org	:0

分数:$score$

- $h(x) = \mathbf{W} \cdot \phi(x)$
- 图中两个向量 $\mathbf{W}, \phi(x)$ 的点积/内积, 是核心计算过程:
  - 两个实数向量的内积，输出是实数，并不能作为真实 f 的输出 $y \in \{0, 1\}$ 的近似，因为 y 是离散的-1 和 $+1$
  - 重新定义两个向量的内积为 $score$/分数，不是真实 f 的输出 y，而是给 y 打出的一个 “分数”，即：$score \triangleq W \cdot \phi(x)$

h 如何获得

从分数 $score$ 到输出 y

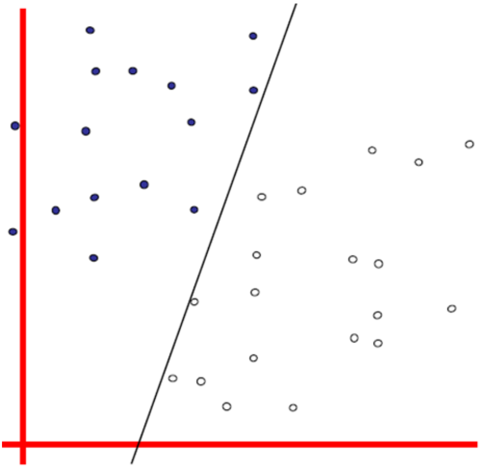
- 将“分数”离散化为 $\{-1 \quad +1\}$
- 如下给出一种可选方法：

$$h(x) = sign(W \cdot \phi(x)) = \begin{cases} +1 & , \text{if } W \cdot \phi(x) > 0 \\ -1 & , \text{if } W \cdot \phi(x) < 0 \\ * & , \text{if } W \cdot \phi(x) = 0 \end{cases}$$

电子邮件地址识别：总结

- 问题描述
- 问题分析：特征提取，h 选择线性函数
- 问题求解：最优 $\mathbf{W}$ 的确定、及其意义的说明、分数定义及其到输出响应 y 的变换等。

与回归问题的区别?



解释说明

- 考虑图示二维的情形：$\mathbf{x} = (x_1, x_2)$ $y \in \{$实心点，空心点$\}$
- 直线方程 $ax_1 + bx_2 + c = 0$，可扩展到 d 维空间 $\mathbf{W} \cdot \mathbf{x} + b = w_1x_1 + w_2x_2 + \ldots + w_dx_d + b$
- 三维时，是平面，$d(> 0)$ 维时称为"超平面"
- 直线上的点满足 $ax_1 + bx_2 + c = 0$，实心点满足 $ax_1 + bx_2 + c > 0$，空心点满足 $ax_1 + bx_2 + c < 0$
- h 的线性表达式为 0 时，就是该超平面，也称"决策边界/分类器"：$h(x) = sign(W \cdot \phi(x)) = \begin{cases} +1 & \text{, if } W \cdot \phi(x) > 0 \\ -1 & \text{, if } W \cdot \phi(x) < 0 \\ * & \text{, if } W \cdot \phi(x) = 0 \end{cases}$

以二分类问题为例：$y = \{+1, -1\}$

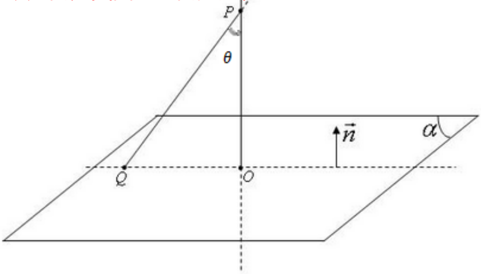
- 分数 $score \triangleq W \cdot \phi(x)$，描述了对 f 的输出 y 进行预测时，对预测结果有多大程度的“信任”，是个打分，正得越大表示越相信 y 是 $+1$，负得越多表示越相信 y 是-1
- 间隔 $margin \triangleq W \cdot \phi(x)y$，表示对 f 的输出 y 进行预测时，对预测结果的正确性有多大把握，数值越大，把握越大；
  - 间隔为负，表示预测错误
  - 间隔的定义和符号函数 $sign(\cdot)$ 定义的的离散化方法相比，保留了更多的信息。
  - “将简单粗暴的 $\{+1, -1\}$ 的硬判决搞得温柔一些”，用间隔来实现，间隔的大小具有一定的“物理意义/几何意义”

符号函数：

$$h(x) = sign(W \cdot \phi(x)) = \begin{cases} +1 & , \text{if } W \cdot \phi(x) > 0 \\ -1 & , \text{if } W \cdot \phi(x) < 0 \\ * & , \text{if } W \cdot \phi(x) = 0 \end{cases}$$

间隔的几何学意义

间隔若为负，表示“距离错误”/“分类错误”，越小表示“错误犯得越厉害”
间隔越大，直观概念就是离分类面的距离越远；

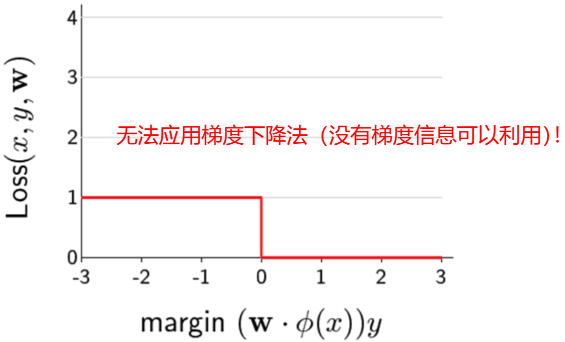


间隔：平面外点 P 到平面的距离的 $\|\mathbf{W}\|$ 倍

- 平面 α 方程：$\vec{W}\cdot\vec{X}+b=0$
- 平面外一点 P 到 α 的垂足为点 O，平面的单位法向量为 $\vec{n}=\vec{W}/\|\vec{W}\|$
- Q 为平面内任意一点；辅助计算 $dist(P,\alpha)$

$$dist(P,\alpha)=\|\overrightarrow{PO}\|=\|\overrightarrow{PQ}\|cos\theta=\overrightarrow{PQ}\cdot\vec{n}=\overrightarrow{PQ}\cdot\vec{W}/\|\vec{W}\|=(\vec{P}-\vec{Q})\cdot\vec{W}/\|\vec{W}\|=\vec{P}\cdot\vec{W}/\|\vec{W}\|-\vec{Q}\cdot\vec{W}/\|\vec{W}\|=\vec{P}\cdot\vec{W}/\|\vec{W}\|+b/\|\vec{W}\|=(\vec{P}\cdot\vec{W}+b)/\|\vec{W}\|$$

基于间隔定义损失函数



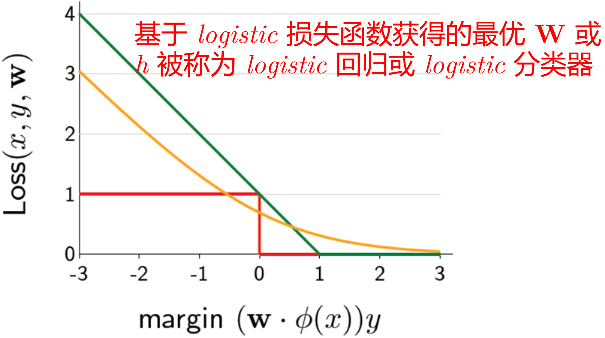
简单粗暴的方法：符号函数 $sign(\ \cdot\ )$

- $\mathbf{W} \cdot \phi(x)y < 0,\ loss(x, y, \mathbf{W}) = 1$
- $\mathbf{W} \cdot \phi(x)y = 0,\ loss(x, y, \mathbf{W}) = 1$
- $\mathbf{W} \cdot \phi(x)y > 0,\ loss(x, y, \mathbf{W}) = 0$

硬判决!

基于间隔定义损失函数

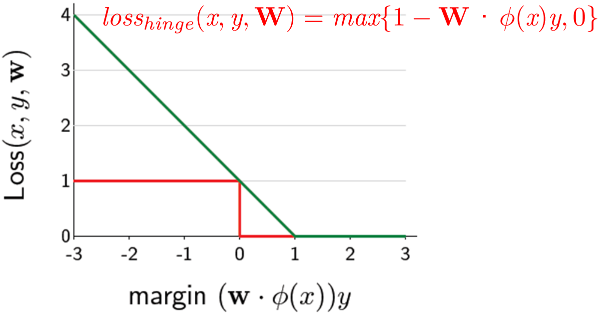
可用梯度下降法求最优 $\mathbf{W}$



改进方法：软判决，使得梯度信息存在且有意义

- 如图中的黄色曲线，连续的，大于 0 的，光滑曲线。
- 基本趋势：间隔越大，损失越小。
- *logistic* 回归：用该损失函数作为计算训练损失的核心。
- 虽然名为“回归”实际干的活却是“分类”。
- 黄色曲线的方程：$loss_{logistic}(x, y, \mathbf{W}) = \log(1 + e^{-\mathbf{W} \cdot \phi(x)y})$。

可用梯度下降
法求最优 $\mathbf{W}$



改进方法：把关键部分的梯度信息变成非 0

- 如上图所示绿色曲线，称之为 $hinge$ 损失函数，如同门的“转轴/$hinge$”
- 梯度信息不再是处处为 0
- 任意一个绿点定义的损失值都大于相同间隔的红点定义的损失值，也就是说相对于“简单粗暴法”的损失函数定义，我们把损失“夸大”了（上界），我们更激烈地反对“严重错误”
- 注意到间隔在 (0,1) 之间的时候，我们也定义了非 0 的损失，这迫使我们优化的时候要考虑间隔要大于等于 1，即正确的分类判断要足够有说服力（间隔大于 1）
- $hinge$ 损失函数，可以让我们用梯度下降法来求线性表达式的参数 $\mathbf{W}$

$hinge$ 损失函数不仅仅是为了可以使用梯度下降法

- 推导出另一种求解最优 $\mathbf{W}$ 的方法
- 从几何结构入手，重新定义最优化问题，然后求解最优 $\mathbf{W}$

代数间隔

- $a - margin \triangleq \mathbf{W} \cdot \phi(x)y$，或
- $a - margin \triangleq (\mathbf{W} \cdot x + b)y$

几何间隔：数据点到分类平面的距离

- $g - margin \triangleq \frac{\mathbf{W} \cdot \phi(x)y}{\|\mathbf{W}\|}$
- $g - margin \triangleq \frac{(\mathbf{W} \cdot x+b)y}{\|\mathbf{W}\|}$

从几何结构上来看，追求代数间隔大于等于 1

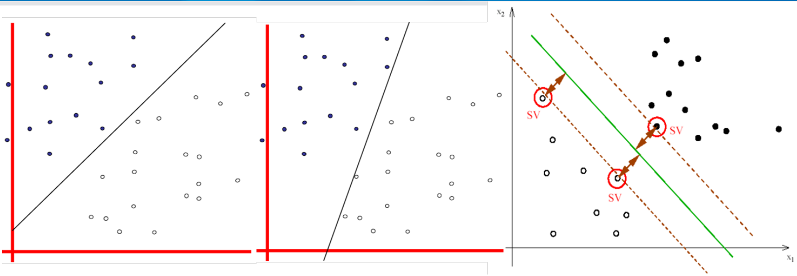
- 从 $hinge$ 损失函数的定义看，我们需要让代数间隔大于等于 1，使得 $hinge$ 损失为最小值 0；
- 即 $loss_{hinge}(x, y, \mathbf{W}) = max\{1 - \mathbf{W} \cdot \phi(x)y, 0\} = 0, \Rightarrow \mathbf{W} \cdot \phi(x)y \geq 1$
- 用几何间隔来描述，即 $\frac{\mathbf{W} \cdot \phi(x)y}{\|\mathbf{W}\|} \geq \frac{1}{\|\mathbf{W}\|}$，即任何一个数据点，它到分类面的距离都大于等 $\frac{1}{\|\mathbf{W}\|}$

新优化问题描述

- 约束条件：找到一个分类面 $h(x) = \mathbf{W} \cdot \phi(x)$，使得它能分开所有的训练数据，且使得任意一个数据点到分类界面的距离（几何间隔）大于等于 $\frac{1}{\|\mathbf{W}\|}$
- 优化目标：$\frac{1}{\|\mathbf{W}\|}$ 越大越好，因为 $\frac{1}{\|\mathbf{W}\|}$ 是训练数据到分类面的距离的下界，下界越大，说明分类器分类带来的置信程度越高。最大化 $\frac{1}{\|\mathbf{W}\|}$ 可等价于最小化 $\|\mathbf{W}\|$
- 该优化问题来自对分类问题几何意义的理解和形式化。我们称该优化问题是追求“结构风险最小化”，不同于定义在训练集上的损失最小的“经验风险最小化”问题。

如何求得最优 $\mathbf{W}$?

不同分类面的例子



如图所示，不同的分类面

- **W** 定义的超平面很多，每个数据点离不同超平面的距离会有所不同
- 这些点中有些点离决策边界/超平面很关键，即距离最短，是离超平面最近的点。超平面可以由这些点来完全确定（计算出来），这些点称为“支持向量” $/sv$
- 非支持向量有什么用？当你选择的 W 发生改变的时候，有些非支持向量就会变成支持向量，原来的支持向量可能就不是支持向量了
- 因此，这些非支持向量就是一种“约束”，它约束你选择的 **W** 确定的决策面及对应的支持向量间的距离达到“最大”

线性 SVM 优化问题：适用于线性可分的数据集/问题

$$\min \|\mathbf{W}\| \Longleftrightarrow \min \frac{1}{2}\mathbf{W} \cdot \mathbf{W}$$

$s.t.$

$$1-(\mathbf{W} \cdot \mathbf{x}+b)y \leq 0, \forall(\mathbf{x}, y) \in D_{train}$$

解释说明

- 每个样本/训练数据带来一个约束条件
- 约束条件表明所有的训练数据都被正确分开 $(\mathbf{W} \cdot \mathbf{x}+b)y \geq 1>0$
- 且分开得足够远，即代数间隔 >1

如何求解？带有约束条件，梯度下降？

对约束条件的处理

- 每个样本/训练数据，对应一个非负乘法因子 $\alpha_i \geq 0$，并带入对应的约束条件中，使得
  $[1-(\mathbf{W} \cdot \mathbf{x}_i + b)y_i]\alpha_i = 0, \forall(\mathbf{x}_i, y_i) \in D_{train}$
- 意义：离分类界面最近的训练数据，因为 $1-(\mathbf{W} \cdot \mathbf{x}_i + b)y_i = 0$，所以 α_i 取值可以随意变化；而非最近的数据，必须要让 $\alpha_i = 0$，来确保 $[1-(\mathbf{W} \cdot \mathbf{x}_i + b)y_i]\alpha_i = 0$
- 然后，把所有的约束条件加起来：
  $\sum_{(\mathbf{x}_i, y_i)\in D_{train}}[1-(\mathbf{W} \cdot \mathbf{x}_i + b)y_i] \leq \sum_{(\mathbf{x}_i, y_i)\in D_{train}}[1-(\mathbf{W} \cdot \mathbf{x}_i + b)y_i]\alpha_i = 0$
- 其实就是把 SVM 优化问题的原始约束条件右端的 0，设计了一个等于 0 的计算公式（利用引入的参数 α_i）

对目标函数的处理

- $\mathcal{L}(\mathbf{W}, b, \alpha) \triangleq \frac{1}{2}\mathbf{W} \cdot \mathbf{W} + \sum_{(\mathbf{x}_i, y_i) \in D_{train}} [1 - (\mathbf{W} \cdot \mathbf{x}_i + b) y_i] \alpha_i$
- 把原问题的目标函数加上等于 0 的约束条件，并写成自由参数 $\mathbf{W}, b, \alpha$ 的函数式 $\mathcal{L}(\mathbf{W}, b, \alpha)$
- 原问题（带约束）的最小值，就等于 $\mathcal{L}(\mathbf{W}, b, \alpha)$（无约束）的最小值。

拉格朗日乘子法的核心在于把约束条件去掉（加到目标函数中去）

有没有更好一点的方法来求 $\mathcal{L}(\mathbf{W}, b, \alpha)$ 的最小值?

- 由问题满足 KKT 条件，以及对偶性等，可以将对 $\mathcal{L}(\mathbf{W}, b, \alpha)$ 最小化问题转化为：

$$\max_\alpha \sum_i \alpha_i - \frac{1}{2}\sum_{i,j}\alpha_i\alpha_j y_i y_j \mathbf{x}_i \cdot \mathbf{x}_j \qquad (1)$$

$s.t.$

$$\sum_i \alpha_i y_i = 0, \forall \alpha_i \geq 0 \qquad (2)$$

解释说明

- 因为非支持向量的 α_i 为 0，所以目标函数公式 (1) 中仅仅包含非零 α_i 的支持向量间的内积运算，并求最大值；
- 也就是说，若知道支持向量是哪些训练样本，那么直接带入公式 (1)，然后求最大值对应的 α_i 值即可。然而我们并不知道谁是 “支持向量”！
- 另有两组隐含的等式：$\mathbf{W} = \sum_i \alpha_i y_i \mathbf{x}_i, b = y_i - \mathbf{W} \cdot \mathbf{x}_i, \forall(\mathbf{x}_i, y_i)$ is a SV

有兴趣看推导过程的请去查阅相关材料。(极值点导数为 0)

SMO：序贯最小化算法/Sequential Minimal Optimization 算法思想：(假设数据集有 m 个样本/训练数据)

- 每次固定 $m-2$ 个乘法因子 α_i，让其余两个任意变化，寻找这两个任意变化乘法因子的最佳值；循环迭代调整固定不同的 $m-2$ 个乘法因子 α，直到收敛。
- 局部搜索的思想，寻找最佳的自由变量 α_i，也就是对应的支持向量及其非零的 α_i
- 训练过程中（解优化问题时），尽量避免每次循环迭代都扫描一遍训练数据（这类算法不适用于海量数据/样本的学习问题）

SMO：关键点之一

- 每次固定 $m-2$ 个乘法因子 α_i，让其余两个任意变化，寻找这两个任意变化乘法因子的最佳值；此时为含等式约束的二元二次函数的优化；
- 可以通过约束等式，把可变参数变成一个，即获得一元二次函数，其最大值计算有简单的公式和方法，可快速计算；

SMO：关键点之二

- 如何确定可变的两个乘法因子 α_i, α_j，使得整个循环迭代的次数最少，实现最快收敛?
  - 随机次序
  - 固定次序
  - $heuristics$/启发式函数确定次序

时空复杂性

- 线性空间需求，参照数据集大小 m
- 时间代价：数据集大小的若干倍，视情况而定，看哪个大，如：数据特征维数，sv 的个数的平方等等，有 $heuristics$，很难获得精确估计。

进一步思考

- 计算过程要多次扫描数据集，大数据量时，如何优化？可能大部分数据都非支持向量，可能没太多用处，能否缩小数据集大小？
- 非线性可分的情况如何处理？