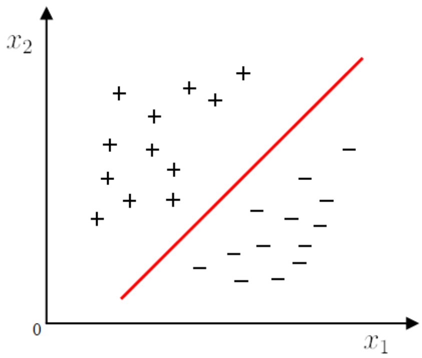
机器学习概论实验报告

PB20111699 吴骏东

原理分析

支持向量机

支持向量机（support vector machines, SVM）所解决的是二分类目标中确定最大间隔超平面的问题。



对于二分类样本集合 $D \in (R^n \times \{-1,1\})^m$ ，假设超平面能够将所有训练样本正确分类，即对于 $(x_i,\ y_i) \in D$，有 $y_i(w^T x_i + b) > 0$。我们定义超平面关于样本点 $(x_i,\ y_i)$ 的几何间隔为

$$\gamma_i = y_i \left(\frac{w}{|w|} \cdot x_i + \frac{b}{|w|} \right)$$

则支持向量机的优化问题为

$$\max_{w,b} \gamma$$
$$\text{s.t. } \gamma_i \geq 1, i = 1, 2, \cdots, m$$

不失一般性，令 $w = \frac{w}{|w|\gamma}$，$b = \frac{b}{|w|\gamma}$， 则上面的问题等价于

$$\min_{w,b} \frac{1}{2} ||w||^2$$
$$\text{s.t. } y_i(wx_i + b) \geq 1,\ i = 1, 2, \cdots, m$$

这是一个含有不等式约束的凸二次规划问题。

软间隔 SVM

软间隔支持向量机是为了解决线性不可分问题而设计的，它允许支持向量机在一些样本上不满足约束条件（被错误分类）。之所以如此定义，是因为在样本集中总是存在一些噪音点或者离群点，如果强制要求所有的样本点都满足硬间隔，可能会导致出现过拟合的问题，甚至会使决策边界发生变化。

我们引入如下的优化目标：

$$\min_{w,b} \frac{1}{2} ||w||^2 + \gamma \sum_{i=1}^{m} \ell_{0/1}(y_i(w^T x_i + b) - 1)$$

其中 γ 为正则化参数， $\ell_{0/1}$ 是 0/1 损失函数

$$l_{0/1}(z)\begin{cases}1, & if\ z<0;\\ 0, & otherwise.\end{cases}$$

由于 $\ell_{0/1}$ 非凸、不连续，我们采用 Hinge 损失函数进行替代

$$\ell_{Hinge}(z)=max(0,1-z)$$

于是得到了最终的优化目标

$$\min_{w,b}\frac{1}{2}||w||^2+\gamma\sum_{i=1}^{m}\ell_{Hinge}(y_i(w^Tx_i+b)-1)$$

基于梯度下降的软间隔 SVM 求解

引入 $\hat{w}=\begin{pmatrix}w\\b\end{pmatrix}$ ，$\hat{X}=\begin{pmatrix}X & 1\end{pmatrix}$，$\xi_i=\max(0,1-y_i\hat{w}^T\hat{x}_i)$。同时，我们记

$$\hat{y}=(\hat{y}_i),\ where\ \hat{y}_i=\begin{cases}0,\ \text{if}\ \xi_i=0\\ y_i,\ \text{if}\ \xi_i\neq 0\end{cases}$$

于是目标问题可化为

$$\begin{aligned}L=\frac{1}{2}w^Tw+\gamma\sum_{i=1}^{m}\xi_i\\ \Rightarrow\nabla L=w-\gamma\hat{X}^T\hat{y}\\ w_{new}=w_{old}-lr\times\nabla L\end{aligned}$$

核心代码如下

```
m, n = X.shape
self.w = np.zeros((n + 1, 1))

temp_1 = np.ones((m, 1))
X_hat:np.ndarray = np.c_[X, temp_1]

temp_0 = np.zeros((m, 1))
loss_list = []
y_diag = np.diag(y.reshape(-1))

for times in range(max_times):
    xi = array_max(temp_0, 1 - (y_diag @ X_hat @ self.w))
    loss = 0.5 * (self.w.T @ self.w)[0][0] + gamma * (xi.sum())

    y_bar = array_find0(xi , y)

    delta_1 = self.w - gamma * (X_hat.T @ y_bar)

    if times >= 2 and abs(loss_list[-1] - loss) < tol:
        loss_list.append(loss)
        break

    self.w = self.w - lr * delta_1
    loss_list.append(loss)
```

其中，`array_find0` 函数为向量函数，采用如下的实现

```
def find_zero(a, b):
    return 0 if a == 0 else b

def array_find0(a:np.ndarray, b:np.ndarray) -> np.ndarray:
    func_ = np.frompyfunc(find_zero, 2, 1)
    return(func_(a, b))
```

基于 SMO 的软间隔 SVM 对偶问题求解

SMO 算法的基本思想是：如果所有变量的解都满足最优化问题的 KKT 条件，则已经得到该最优化问题的解。否则，我们可以选择两个变量，同时固定其他变量，仅针对这两个变量构建一个二次规划问题。这样，我们通过求解两个变量的二次规划问题，能让结果不断靠近原有凸二次规划问题的解，并且双变量二次规划问题有着对应的解析方法。

启发式变量选择法

SMO 算法在每个子问题中需要选择两个变量进行优化，并且其中至少一个变量是违反 KKT 条件的。为此我们可以先找出违反 KKT 条件最为 “严重” 的一系列变量，按照一定顺序存入 `index_1_list`。随后，对于 `index_1_list` 中的每个变量 α_i，遍历所有 $\alpha_j, j \neq i$ 使得 $|E_1 - E_2|$ 达到最大。如果不存在这样的 α_j ，则顺延至下一个 α_i。直到 $\Delta\ell < tol$ 或所有 α_i 均满足 KKT 条件为止。

以下是寻找第一个变量的代码实现。我们优先寻找满足 $0 < \alpha_i < \gamma$ 的违反 KKT 变量，为此将其违反程度 x10 之后存入暂存列表。这样一轮遍历之后，我们即可得到一个有序列表，对应着违反程度最为严重的一系列变量。

```
for i in range(m):
    alpha_i = self.alpha[i, :][0]
    err_i = self.err[i, :][0]
    if (0 < alpha_i < gamma and abs(err_i - 1) > epslion):
        val = (abs(err_i) - epslion) * 10
        i_list.append((val, i))
    elif alpha_i == 0 and err_i < 1 - epslion:
        val = - err_i + 1 - epslion
        i_list.append((val, i))
    elif alpha_i >= gamma and err_i > 1 + epslion:
        val = err_i - 1 - epslion
        i_list.append((val, i))
```

对于第二个变量 α_j，我们只需要根据 E_i 的正负进行判断。若 $E_i < 0$，则选择最大的 E_j，否则选择最小的 E_j 即可。

```
 err_dict = []
 err_list = []

for i in self.err.tolist():
    err_list.append(i[0])
    # print(err_list)
    for index, value in enumerate(err_list):
```

```
        err_dict.append((value, index))
        err_dict.sort(key=takefirst)

        k = 0
        if e1 > 0:
            while k < m:
                a2 = err_dict[k][1]
                if a1 != a2 and self._update_alpha(a1, a2, gamma, min_delta):
                    break
                 k += 1
        else:
            while k < m:
                a2 = err_dict[-1 - k][1]
                if a1 != a2 and self._update_alpha(a1, a2, gamma, min_delta):
                    break
                k += 1
```

双变量二次规划问题求解

不妨假定 α_1，α_2 为目标变量，其余变量保持固定。并设问题的原始可行解为 α_1^{old}，α_2^{old}， 双变量二次规划问题的最优解为 α_1^{new}，α_2^{new}，且沿着约束方向未裁剪的 α_2 最优解为 $\alpha_2^{uncut-new}$。由于约束条件 $\sum_{i=1}^{m}\alpha_i y_i = 0$ 以及 $0 \leq \alpha_i \leq \gamma$ 的存在，我们应有 $low \leq \alpha_2^{uncut-new} \leq high$。其中

$$low = \begin{cases} \max(0,\ \alpha_2^{old} - \alpha_1^{old}), & y_1 = y_2 \\ \max(0,\ \alpha_1^{old} + \alpha_2^{old} - \gamma), & y_1 \neq y_2 \end{cases}$$
$$high = \begin{cases} \min(\gamma,\ \gamma + \alpha_2^{old} - \alpha_1^{old}), & y_1 = y_2 \\ \min(\gamma,\ \alpha_1^{old} + \alpha_2^{old}), & y_1 \neq y_2 \end{cases}$$

可以证明，双变量二次规划问题沿着约束方向未经剪辑的解为

$$\alpha_2^{uncut-new} = \alpha_2^{old} + \frac{y_2(E_1 - E_2)}{\eta}$$

其中

$$E_i = \sum_{i=1}^{m}\alpha_i y_i x_i x^T + b - y_i$$

代表第 i 个样本的预测误差；而

$$\eta = x_1 x_1^T + x_2 x_2^T - 2x_1 x_2^T = ||x_1 - x_2||^2$$

为常数。

经过剪辑后的解为

$$\alpha_2^{new} = \begin{cases} H, & \alpha_2^{uncut-new} > H \\ \alpha_2^{uncut-new}, & L \leq \alpha_2^{uncut-new} \leq H \\ L, & \alpha_2^{uncut-new} < L \end{cases}$$

再代回约束式可得

$$\alpha_1^{new} = \alpha_1^{old} + y_1 y_2(\alpha_2^{old} - \alpha_2^{new})$$

为了提升效率所做的优化

SVM2 类中引入了如下内容作为类的成员

```
def __init__(self, X:np.ndarray, y:np.ndarray):
    m, _ = X.shape
    self.X = X
    self.y = y
    self.K = self.X @ self.X.T

    self.alpha = np.zeros((m, 1))
    self.b = np.random.uniform(low=0.0, high=1.0, size=1)
    self.err = np.zeros((m, 1))
    self._update_e()
```

为了便于计算，我同时引入了如下的私有方法

```
def _cut(self, low, high, a2_uncut)
# 将得到的 alpha2_new 进行裁剪

def _update_alpha(self, a1_index, a2_index, gamma, min_delta)
# 更新 alpha 的值，若成功更新则返回 True；如果不满足设定的条件则不会更新，并返回 False

def _update_b(self, a1_index, a2_index, a1_new, a2_new, gamma)
# 根据 alpha_new, alpha_old 更新 b 的值

def _update_e(self):
# 更新误差 E 的值
    alpha_y = self.alpha * self.y
    self.err = self.K @ alpha_y + self.b - self.y
```

在更新 α 时，若 $|\alpha_{old} - \alpha_{new}| < \mathrm{min\_delta}$ 则不进行更新。在裁剪过程中，若 L > H 则不进行更新。这样可以保证了迭代的质量。

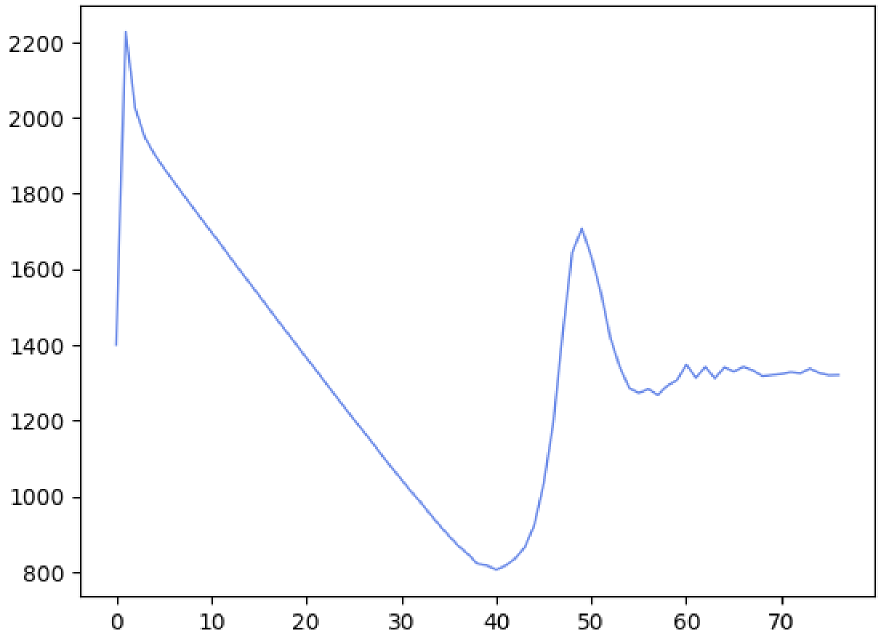
模型评价

模型 1：基于梯度下降的软间隔 SVM 求解

由于该模型大部分的计算过程均为矩阵运算，所以计算效率会很高。我们采用大样本数据集进行验证。

极端大样本单次验证

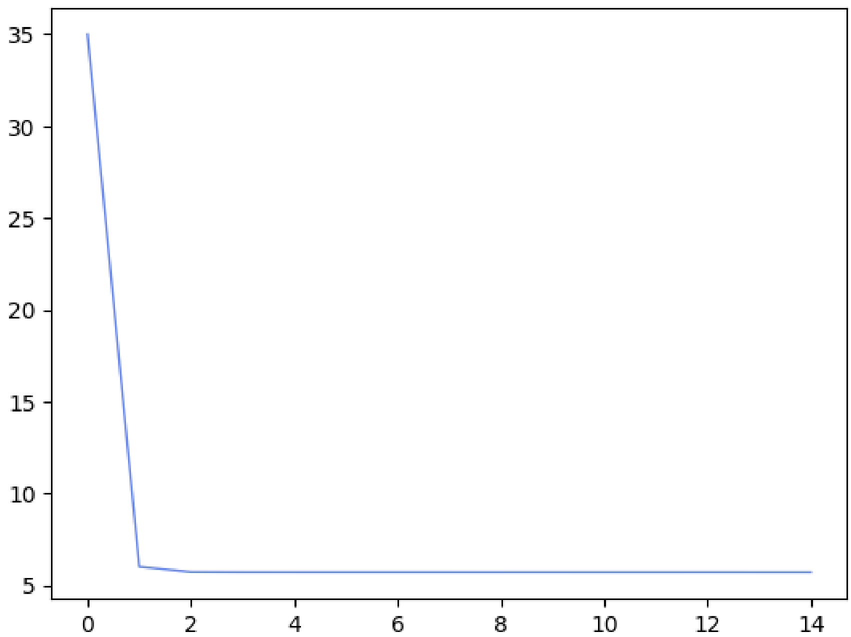
数据大小: 20000×50，错标率 0.06。训练时间: 2min35s；模型准确率： 90.7%



大样本单次验证

数据大小： 10000×20，错标率 0.036。训练时间: 2.1s； 模型准确率： 95.1%。

参数：gamma = 0.005, lr = 0.002, tol=1e-4, max_times=100



大样本平均验证

数据大小： 10000×20，重复次数： 100次。样本平均错标率为 0.036634，模型平均准确率为 0.9553700000000002，用时 45.7s。

```
acc, mis = model_accuracy_ave(model='1', total_time=100, dim=20, num=10000)
print("Model_{}:Ave={}, Mis_Ave={}".format('1', acc, mis))

✓ 45.7s

Model_1:Ave=0.9553700000000002, Mis_Ave=0.036634
```

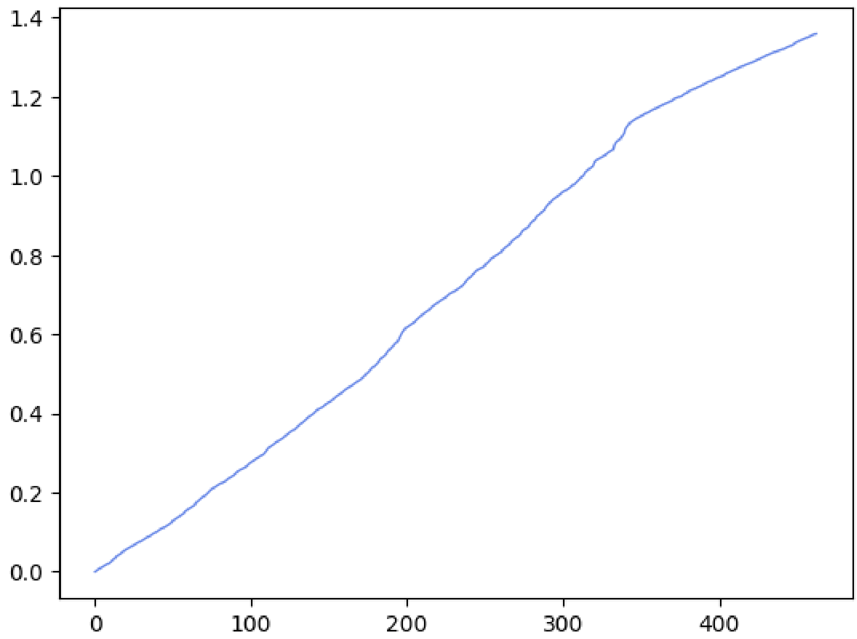
模型 2：基于 SMO 的软间隔 SVM 对偶问题求解

由于该模型的计算大部分为循环实现，且涉及启发式搜索部分，所以运算速度相对较低。我们采用小样本数据集进行验证。此外， SMO 对参数敏感，**针对不同大小的数据需要更改相应的参数，否则准确率与耗时水平都会下降。**

小样本单次验证

数据大小： 200×10，错标率 0.02。训练时间: 0.5s； 模型准确率： 95%。

参数：gamma = 0.1, tol = 1e-3, max_times=800, epslion=0.2



小样本平均验证

数据大小： 200×10，重复次数： 50次。样本平均错标率为 0.0364，模型平均准确率为 0.91333，总用时 1min13s。

```
acc, mis = model_accuracy_ave(model='2', total_time=50, dim=10, num=200)
print("Model_{}:Ave={}, Mis_Ave={}".format('2', acc, mis))

✓ 1m 13.8s

Model_2:Ave=0.9133333333333331, Mis_Ave=0.03640000000000001
```

模型比较

每次随机生成 50 组小样本，分别对梯度下降、SMO、sklearn.svm 三个模型进行准确率、计算时间（仅考虑模型训练与预测时间）的综合比较，结果如下

样本大小	错标率	梯度下降准确率	梯度下降用时	SMO 准确率	SMO 用时	sklearn 准确率	sklearn 用时
50×5	0.05560	0.91066	0.00146	0.90666	0.01875	0.90266	0.00062
100×10	0.04140	0.89199	0.00187	0.89199	0.04968	0.89399	0.00062
200×10	0.03930	0.91866	0.00343	0.91066	0.23750	0.91766	0.00156
500×10	0.02062	0.92720	0.02593	0.93600	6.37437	0.94013	0.02062
1000×10	0.03630	0.92919	0.06968	0.94120	49.47437	0.94660	0.05406

可以发现，梯度下降的速度与 sklearn 基本差不多，而 SMO 算法在数据规模增大的时候会急速变慢，这是大量循环与判断导致的。在准确率方面，梯度下降的准确率相对弱于 SMO 和 sklearn，且随着样本规模增大，三者准确率都有所上升。

附录

SMO 算法的一些参考参数

数据大小	γ	tol	max_times	ϵ
50×5	0.04	1e-4	500	0.45
100×10	0.04	1e-4	500	0.45
200×10	0.05	1e-4	2000	0.45
500×10	0.05	1e-4	5000	0.25
1000×10	0.05	1e-4	5000	0.25

一些辅助功能函数

```
def random_Split_data(X: np.ndarray, y:np.ndarray, rate = 0.7, random_seed: int
= -1)
# 根据设定的比例进行数据集随机划分

def show(times, loss, color = '#4169E1', start=0, end=2000)
# 画图函数，范围[start, end]
# 需要 import matplotlib.pyplot as plt

def model_cmp(y_pre:np.ndarray, y_test:np.ndarray)
# 准确率比较函数

def model_accuracy_ave(model:str = '1', dim = 20, num = 10000, devide_rate =
0.7, total_time = 50)
# 单模型多次训练平均效果评价函数
```

```python
def model_accuracy_cmp(dim = 20, num = 10000, devide_rate = 0.7, total_time = 
50)
# 多模型多次训练效果横向评价函数
```