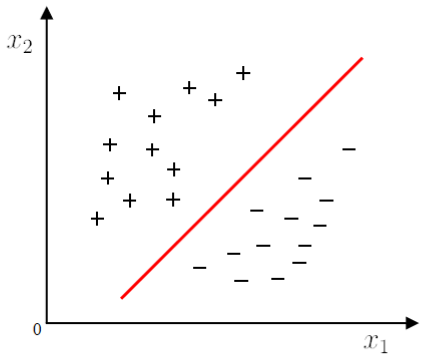
机器学习概论实验报告

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)
```

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 α_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。

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 $0 \le \alpha_i \le \gamma$ 的存在，我们应有 $low \le \alpha_2^{uncut-new} \le high$。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

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

为常数。

经过剪辑后的解为

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

再代回约束式可得

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

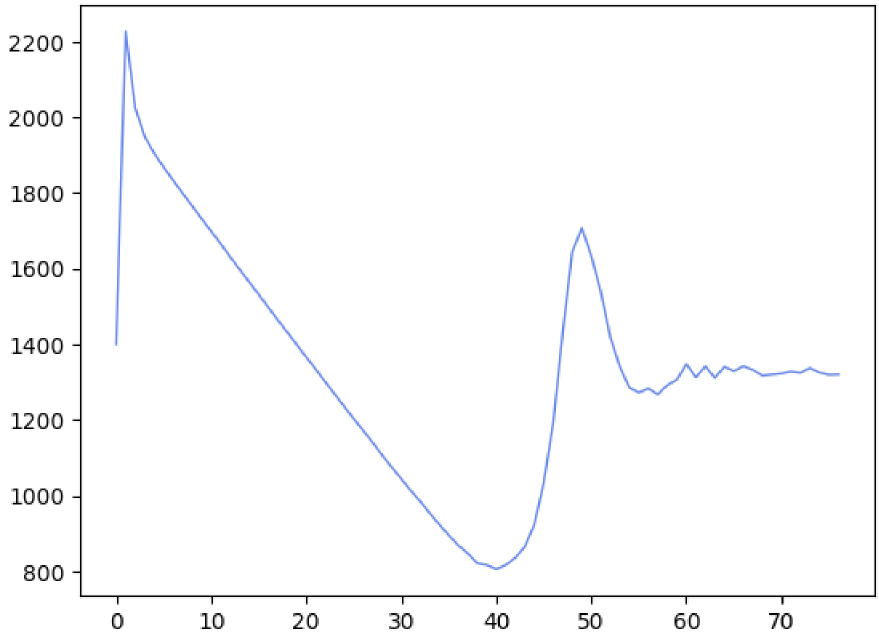
模型评价

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。

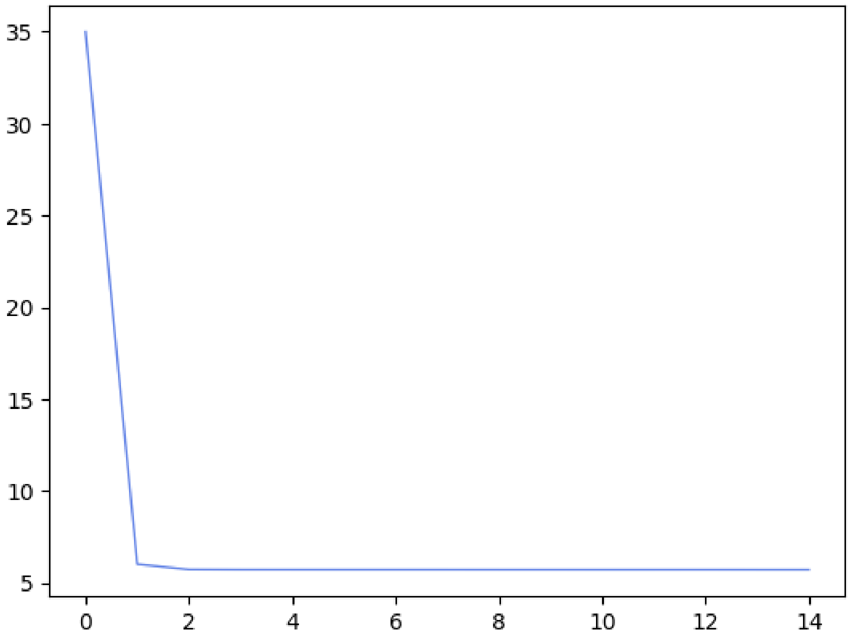
极端大样本单次验证

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



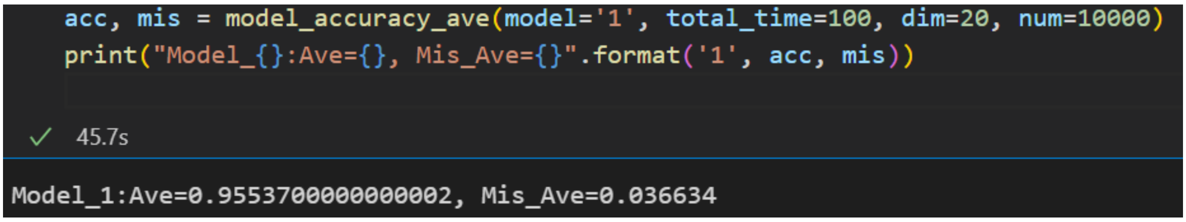
大样本单次验证

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。



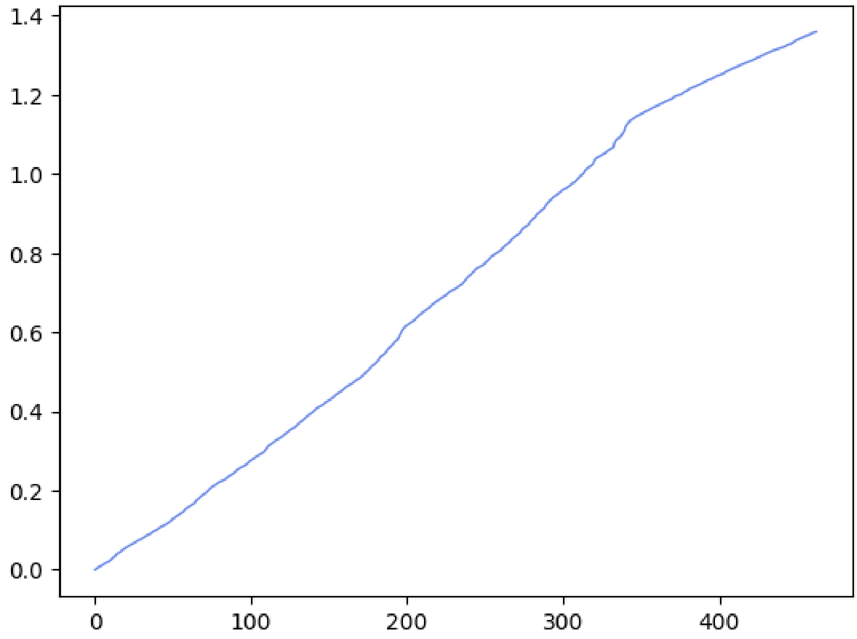
```
acc, mis = model_accuracy_ave(model='1', total_time=100, dim=20, num=10000)
print("Model_{}:Ave={}, Mis_Ave={}".format('1', acc, mis))

✓ 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函数调用与循环实现，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: 5.1s； 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 0.0372，模型平均准确率为 0.8926666666666664，用时 4min28s。

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

[566] ✓ 4m 28.8s

```
Output exceeds the size limit. Open the full output data in a text editor
0.8333333333333334
0.8333333333333334
0.8833333333333333
0.9166666666666666
0.9166666666666666
0.9166666666666666
0.85
0.85
0.8333333333333334
0.9166666666666666
0.9166666666666666
0.9
0.8833333333333333
0.9333333333333333
0.9333333333333333
0.9833333333333333
0.9
0.85
0.8833333333333333
0.9666666666666667
0.9333333333333333
0.9
0.7666666666666667
0.85
0.9
...
0.8666666666666667
0.9166666666666666
0.95
Model_2:Ave=0.8926666666666664, Mis_Ave=0.0372
```

模型比较

随机生成 50 组小样本，对梯度下降、SMO、sklearn.svm 三个模型进行准确率、计算时间的综合比较，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	0.04680	0.90667	0.00093	0.89733	0.0725	0.90133	0.0
100×10	0.04020	0.89533	0.00107	0.88067	0.62594	0.89333	0.00125
200×10	0.03275	0.90667	0.00090	0.89667	2.065	0.92917	0.00547