支持向量机

7.4 序列最小最优化算法

- 当训练样本量很大时，支持向量机学习算法非常低效；
- 面对凸二次规划的对偶问题：

$$
\begin{aligned}
\min_{\alpha} \quad & \frac{1}{2}\sum_{i=1}^{N}\sum_{j=1}^{N}\alpha_i\alpha_j y_i y_j K(x_i,x_j)-\sum_{i=1}^{N}\alpha_i \\
\text{s.t.} \quad & \textstyle\sum_{i=1}^{N}\alpha_i y_i=0 \\
& 0\le\alpha_i\le C,\qquad i=1,2,\ldots,N
\end{aligned}
$$

变量是拉格朗日乘子，一个变量α_i对于一个样本点，变量总数等于训练样本容量N；

- **序列最小最优化**（sequential minimal optimization，SMO）算法是一种启发式算法，思路是：如果所有变量的解都满足此最优化问题的KKT条件，那么这个最优化问题的解就得到了；
  - KKT条件是该最优化问题的充要条件，否则；
  - 选择两个变量，固定其他变量，针对这两个变量构造一个二次规划问题，其解应该更接近原始二次规划问题的解，因为会使得原始二次规划问题的目标函数值变小；
  - 此时子问题可以通过解析方法求解，提高算法速度；

- 子问题有两个变量，一个是违反KKT条件最严重的一个，另一个由约束条件自动确定，SMO将原问题不断分解为子问题求解；
- 子问题的两个变量中只有一个是自由变量，假设α_1,α_2为两个变量，其他固定，由等式约束可知$\alpha_1=-y_1\sum_{i=2}^{N}\alpha_i y_i$，如果$\alpha_2$确定，那么$\alpha_1$也随之确定；

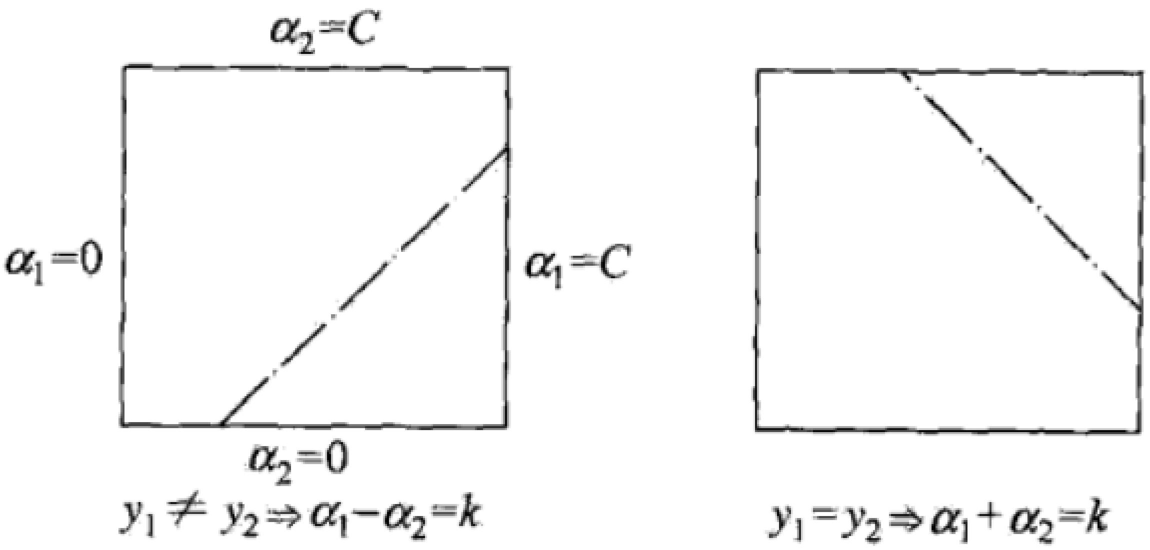
7.4.1 两个变量二次规划的求解方法

- 假设选择的两个变量是α_1,α_2，其他变量固定，于是SMO的最优化问题的**子问题**写成：

$$
\begin{aligned}
\min_{\alpha_1,\alpha_2} \quad & W(\alpha_1,\alpha_2)=\frac{1}{2}K_{11}\alpha_1^2+\frac{1}{2}K_{22}\alpha_2^2+y_1y_2K_{12}\alpha_1\alpha_2-(\alpha_1+\alpha_2) \\
& +y_1\alpha_1\sum_{i=3}^{N}\alpha_i y_i K_{i1}+y_2\alpha_2\sum_{i=3}^{N}\alpha_i y_i K_{i2} \\
\text{s.t.} \quad & \alpha_1y_1+\alpha_2y_2=-\sum_{i=3}^{N}\alpha_i y_i=\varsigma \\
& 0\le\alpha_i\le C, \qquad\qquad\qquad i=1,2
\end{aligned}
$$

其中$K_{ij}=K(x_i,x_j)$，ς是常数，目标函数中省略了不含α_1,α_2的常数项；

- 由于只有两个变量(α_1,α_2)，约束可以用二维空间中的图像表示：
  - 不等式约束使得(α_1,α_2)在盒子$[0,C]\times[0,C]$内；
  - 等式约束使(α_1,α_2)在平行于盒子的对角线的直线上；
  - 因此要求的目标函数在一条平行于对角线的线段上的最优值，实质上是*单变量的最优化问题*，不妨设为变量α_2的最优化问题；



- 假设初始可行解是$\alpha_1^{old}, \alpha_2^{old}$，最优化为$\alpha_1^{new}, \alpha_2^{new}$，并且假设在沿着约束方向未经剪辑时，$\alpha_2$的最优解为$\alpha_2^{new,unc}$；
- 由于α_2^{new}需要满足不等式约束，所以其取值范围必须满足：$L \leq \alpha_2^{new} \leq H$，其中$L, H$分别是$\alpha_2^{new}$所在的对角线段断点的届，如果：
  1. $y_1 \neq y_2$，则$L = max(0, \alpha_2^{old} - \alpha_1^{old}), H = min(C, C + \alpha_2^{old} - \alpha_1^{old})$;
  2. $y_1 = y_2$，则$L = max(0, \alpha_2^{old} + \alpha_1^{old} - C), H = min(C, \alpha_2^{old} + \alpha_1^{old})$;
- 首先求沿着约束方向未经剪辑，即未考虑不等式约束时，α_2的最优解$\alpha_2^{new,unc}$；然后再求剪辑后的解α_2^{new}，记

$$g(x) = \sum_{i=1}^{N} \alpha_i y_i K(x_i, x) + b \tag{1}$$

令

$$E_i = g(x_i) - y_i = \left(\sum_{j=1}^{N} \alpha_j y_j K(x_j, x_i) + b \right) - y_i, i = 1, 2 \tag{2}$$

当$i = 1, 2$时，E_i为函数$g(x)$对输入x_i的预测值与真实值之差；

- **定理**（可以通过单变量优化问题一阶导条件证明）：最优化问题（上述子问题）沿着约束方向未经剪辑时的解是

$$\alpha_2^{new,unc} = \alpha_2^{old} + \frac{y_2(E_1 - E_2)}{\eta} \tag{3}$$

其中$\eta = K_{11} + K_{22} - 2K_{12} = \|\phi(x_1) - \phi(x_2)\|^2$，$\phi(x)$是输入空间到特征空间的映射；经剪辑后的解是

$$\alpha_2^{new} = \begin{cases} H, & \alpha_2^{new,unc} > H \\ \alpha_2^{new,unc}, & L \leq \alpha_2^{new,unc} \leq H \\ L, & \alpha_2^{new,unc} < L \end{cases} \tag{4}$$

由α_2^{new}求得α_1^{new}是

$$\alpha_1^{new} = \alpha_1^{old} + y_1 y_2 (\alpha_2^{old} - \alpha_2^{new}) \tag{5}$$

7.4.2 变量的选择方法

> SMO算法在每个子问题中选择两个变量优化，其中至少一个变量违反KKT条件

1. 第一个变量选择

- 选择过程称为**外层循环**：在训练集中选取违反KKT条件最严重的样本点，对应的变量作为第一个变量；
- 检验样本点(x_i, y_i)是否满足KKT条件：

$$\begin{aligned}\alpha_i = 0 &\Leftrightarrow y_i g(x_i) \geq 1 \\ 0 < \alpha_i < C &\Leftrightarrow y_i g(x_i) = 1 \\ \alpha_i = C &\Leftrightarrow y_i g(x_i) \leq 1\end{aligned}$$

其中$g(x_i) = \sum_{j=1}^{N} \alpha_j y_j K(x_j, x_i) + b$;

- 检验是在ϵ范围内进行的，首先遍历所有满足$0 < \alpha_i < C$的样本点（间隔边界上的支持向量点），检验是否满足KKT条件，如果都满足就变量整个训练集，检验他们是否满足KKT条件；

2. 第二个变量选择

- 选择过程称为**内层循环**：选择标准是希望能使α_2有足够大的变化；
- 由于α_2^{new}是依赖于$|E_1 - E_2|$的，为了加快计算速度，简单的做法是选择使得$|E_1 - E_2|$最大的α_2，因为α_1已定，E_1也确定，如果：
  1. E_1为正，选择最小的E_i作为E_2;
  2. E_1为负，选择最大的E_i作为E_2;
  - 为了节省时间，可以将所有E_i值预先保存好；
- 特殊情况下如果上述方法选择的α_2不能使目标函数有*足够下降*，采用以下启发式规则继续选择：
  1. 遍历间隔边界上的支持向量点，依次将其对应的变量作为α_2试用，直到目标函数由足够的下降；
  2. 如果找不到合适的α_2，遍历训练数据集；
  3. 如果找不到合适的α_2，放弃第一个变量，通过外层循环寻求新的α_1;

3. 计算阈值b和差值E_i

- 在每次完成两个变量的优化后，需要重新计算阈值b（可通过KKT条件计算）：

- $0 < \alpha_1^{new} < C$时，
  $b_1^{new} = -E_1 - y_1 K_{11}(\alpha_1^{new} - \alpha_1^{old}) - y_2 K_{21}(\alpha_2^{new} - \alpha_2^{old}) + b^{old}$；
- $0 < \alpha_2^{new} < C$时，
  $b_2^{new} = -E_2 - y_1 K_{12}(\alpha_1^{new} - \alpha_1^{old}) - y_2 K_{22}(\alpha_2^{new} - \alpha_2^{old}) + b^{old}$；

- 当$\alpha_1^{new}, \alpha_2^{new}$满足$0 < \alpha_i^{new} < C$，$b_1^{new} = b_2^{new}$；
- 当$\alpha_1^{new}, \alpha_2^{new}$为0或者$C$，那么$b_1^{new}, b_2^{new}$以及它们之间的数都是符合KKT条件的阈值，选择它们的终点作为b^{new}；
- E_i值的更新要用到b^{new}，以及所有支持向量对应的α_j：

$$E_i^{new} = \sum_S y_j \alpha_j K(x_i, x_j) + b^{new} - y_i \tag{6}$$

其中S是所有支持向量x_j的集合；

7.4.3 SMO算法

- **SMO算法**：
  1. **输入**训练集T，精度ϵ；
  2. 取初值$\alpha^{(0)} = 0$，令$k = 0$；
  3. 选取优化变量$\alpha_1^{(k)}, \alpha_2^{(k)}$，解析求解两个变量的最优化问题，得到最优解$\alpha_1^{(k+1)}, \alpha_2^{(k+1)}$，更新$\alpha$为$\alpha^{(k+1)}$；
  4. 若在精度范围内满足KKT条件：

$$\begin{aligned} & \sum_{i=1}^N \alpha_i y_i = 0 \\ & 0 \le \alpha_i \le C, i = 1, 2, \dots, N \\ & y_i g(x_i) = \begin{cases} \ge 1, & \{x_i | \alpha_i = 0\} \\ = 1, & \{x_i | 0 < \alpha_i < C\} \\ \le 1, & \{x_i | \alpha_i = C\} \end{cases} \end{aligned}$$

     则进入下一步；否则令$k = k + 1$，重复步骤（3）；
  5. **输出**近似解$\hat{\alpha} = \alpha^{(k+1)}$；