PRML学习笔记——第七章

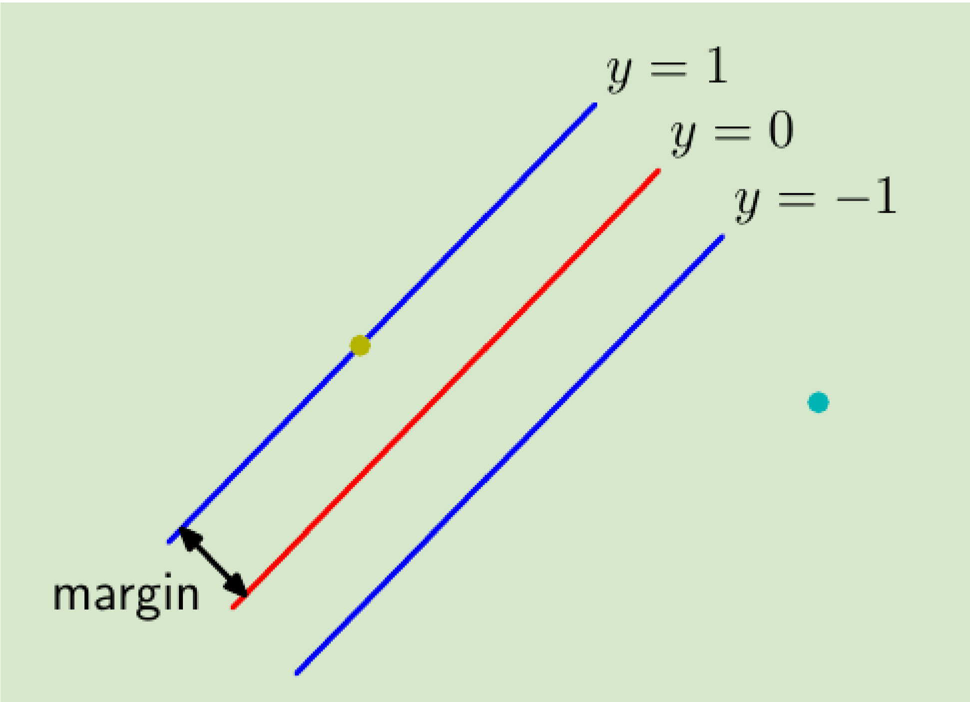
Sparse Kernel Machines

Maximum Margin Classifiers

首先以一个二分类为例,考虑一个在feature space上的linearly separable problem,定义一个linear model:

$$y(\mathbf{x}) = \mathbf{w}^{\mathrm{T}}\phi(\mathbf{x}) + b$$

在SVM中将target定义为$t_n \in \{0, 1\}$,优化目标为最大化*margin*.



margin示意图,表示离超平面最近vector到超平面的距离

空间中点到平面距离定义为$|y(\mathbf{x})|/\|\mathbf{w}\|$.在这里我们只关心那些能正确分类所有类别的model solution,所以有:

$$\frac{t_n y\left(\mathbf{x}_n\right)}{\|\mathbf{w}\|}=\frac{t_n\left(\mathbf{w}^{\mathrm{T}} \boldsymbol{\phi}\left(\mathbf{x}_n\right)+b\right)}{\|\mathbf{w}\|}$$

有个这个距离表示,我们就可以形式化的写出最大化margin的目标表示:

$$\underset{\mathbf{w}, b}{\arg \max }\left\{\frac{1}{\|\mathbf{w}\|} \min _n\left[t_n\left(\mathbf{w}^{\mathrm{T}} \boldsymbol{\phi}\left(\mathbf{x}_n\right)+b\right)\right]\right\}$$

考虑到$\mathbf{w} \rightarrow k\mathbf{w}, b \rightarrow kb$并不影响目标函数值,我们可以简单设置一个约束(保证只有唯一的解):

$$t_n\left(\mathbf{w}^{\mathrm{T}} \boldsymbol{\phi}\left(\mathbf{x}_n\right)+b\right)=1$$

其中n是计算margin用到的point.然后自然就另一个约束:

$$t_n\left(\mathbf{w}^{\mathrm{T}} \boldsymbol{\phi}\left(\mathbf{x}_n\right)+b\right) \geqslant 1, \quad n=1, \ldots, N$$

现在,优化目标就可以表示为:

$$\underset{\mathbf{w}, b}{\arg \min } \frac{1}{2}\|\mathbf{w}\|^2$$

这是个带约束的优化问题.利用lagrange multipliers $a_n \geq 0$:

$$L(\mathbf{w}, b, \mathbf{a})=\frac{1}{2}\|\mathbf{w}\|^2-\sum_{n=1}^N a_n\left\{t_n\left(\mathbf{w}^{\mathrm{T}} \boldsymbol{\phi}\left(\mathbf{x}_n\right)+b\right)-1\right\}$$

求偏导令为0:

$$\mathbf{w}=\sum_{n=1}^N a_n t_n \boldsymbol{\phi}\left(\mathbf{x}_n\right)$$
$$0=\sum_{n=1}^N a_n t_n$$

结果回带到L:

$$\widetilde{L}(\mathbf{a})=\sum_{n=1}^{N} a_{n}-\frac{1}{2} \sum_{n=1}^{N} \sum_{m=1}^{N} a_{n} a_{m} t_{n} t_{m} k\left(\mathbf{x}_{n}, \mathbf{x}_{m}\right)$$

constrains:

$$\begin{aligned} a_{n} \geqslant 0, & n=1, \ldots, N, \\ \sum_{n=1}^{N} a_{n} t_{n} &=0 . \end{aligned}$$

其中$k\left(\mathbf{x}, \mathbf{x}^{\prime}\right)=\boldsymbol{\phi}(\mathbf{x})^{\mathrm{T}} \boldsymbol{\phi}\left(\mathbf{x}^{\prime}\right)$.至此我们就只需要解这个优化问题即可.由优化理论,这个问题的解满足KKT条件:

$$\begin{aligned} a_{n} & \geqslant 0 \\ t_{n} y\left(\mathbf{x}_{n}\right)-1 & \geqslant 0 \\ a_{n}\left\{t_{n} y\left(\mathbf{x}_{n}\right)-1\right\} &=0 . \end{aligned}$$

现在假设我们已经求出了上面的解(二次规划).我们的model可以这样表示:

$$y(\mathbf{x})=\sum_{n=1}^{N} a_{n} t_{n} k\left(\mathbf{x}, \mathbf{x}_{n}\right)+b$$

可以看到由于KKT条件中的互补松弛条件$a_{n}\left\{t_{n} y\left(\mathbf{x}_{n}\right)-1\right\}=0$,可以用这个公式解b:

$$b=\frac{1}{N_{\mathcal{S}}} \sum_{n \in \mathcal{S}}\left(t_{n}-\sum_{m \in \mathcal{S}} a_{m} t_{m} k\left(\mathbf{x}_{n}, \mathbf{x}_{m}\right)\right)$$

其中的$\mathcal{S}$是所有support vectors set.这就是硬间隔的SVM.

7.1.1 Overlapping class distributions

很多时候classify problem并不是separable,比如两个类别的distribution有部分overlap.这时就算变换到高维的特征空间也无法做的完全可分.

为了解决这个问题,引入一个slake variable ξ.当data在这正确的margin上或以外时,$\xi_n=0$;反之$\xi_n=|t_n-y(\mathbf{x_n})|$.即原本hard margin的约束变成了:

$$t_{n} y\left(\mathbf{x}_{n}\right) \geqslant 1-\xi_{n}, \quad n=1, \ldots, N$$

这就被称为*soft margin*.我们的目标是maximize margin同时也要给那些分到wrong side(包括分类正确但在margin以内的)一些penalize:

$$C \sum_{n=1}^{N} \xi_n + \frac{1}{2}\|\mathbf{w}\|^2$$

其中$C > 0$类似于正则项的倒数.当$C \to \infty$时,就是hard margin的svm.

同样继续使用Lagrange multipliers:

$$L(\mathbf{w}, b, \mathbf{a}) = \frac{1}{2}\|\mathbf{w}\|^2 + C\sum_{n=1}^{N} \xi_n - \sum_{n=1}^{N} a_n \left\{t_n y\left(\mathbf{x}_n\right) - 1 + \xi_n\right\} - \sum_{n=1}^{N} \mu_n \xi_n$$

对应有KKT约束:

$$\begin{aligned} a_n &\geqslant 0 \\ t_n y\left(\mathbf{x}_n\right) - 1 + \xi_n &\geqslant 0 \\ a_n\left(t_n y\left(\mathbf{x}_n\right) - 1 + \xi_n\right) &= 0 \\ \mu_n &\geqslant 0 \\ \xi_n &\geqslant 0 \\ \mu_n \xi_n &= 0 \end{aligned}$$

求偏导为0,回带掉$\mathbf{w}$和b有:

$$\widetilde{L}(\mathbf{a}) = \sum_{n=1}^{N} a_n - \frac{1}{2} \sum_{n=1}^{N} \sum_{m=1}^{N} a_n a_m t_n t_m k\left(\mathbf{x}_n, \mathbf{x}_m\right)$$

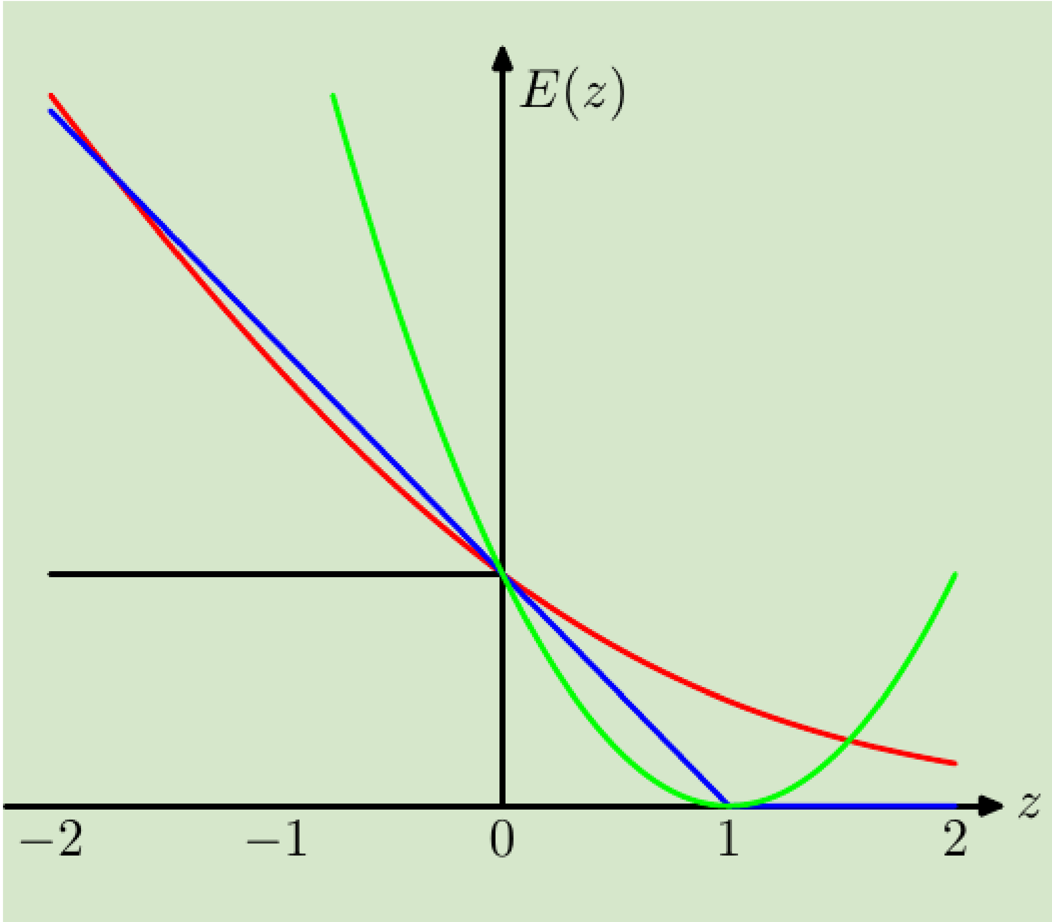
subject to

$$\begin{aligned} 0 \leqslant a_n &\leqslant C \\ \textstyle\sum_{n=1}^{N} a_n t_n &= 0 \end{aligned}$$

这仍然是个二次规划问题,并且和hard margin在形式上只差在多个$a_n \leqslant C$的约束.如果$0 < a_n < C$那么此时的data在margin上,标记这些data的集合为$\mathcal{M}$,可求:

$$b = \frac{1}{N_{\mathcal{M}}} \sum_{n \in \mathcal{M}} \left(t_n - \sum_{m \in \mathcal{S}} a_m t_m k\left(\mathbf{x}_n, \mathbf{x}_m\right)\right)$$

7.1.2 Relation to logistic regression



红:logistic regression的error curve;绿:least squares的error curve;蓝:svm的error curve.

可以看到对于最小化误分类任务,一个单调递减的误分类误差函数是比较好的选择.

7.1.3 Multiclass SVMs

使用最广的还是one-versus-the-rest方法,训练$k-1$个classifiers.尽管存在两个问题:

1. 可能存在ambiguous的region
2. 可能导致训练样本不均衡的问题

svm进一步扩展能用来做single-class problem(unsupervised learning).目标是找一个smooth boundary使得包围一个high density region.

7.1.4 SVMs for regression

回忆之前的regularization linear regression的error function:

$$\frac{1}{2}\sum_{n=1}^{N}\{y_n-t_n\}^2+\frac{\lambda}{2}\|\mathbf{w}\|^2$$

为了获得*sparse solutions*,将quadratic term替换为ϵ*-insensitive error function*:

$$E_\epsilon(y(\mathbf{x})-t)=\begin{cases}0, & \text{if } |y(\mathbf{x})-t|<\epsilon \\ |y(\mathbf{x})-t|-\epsilon, & \text{otherwise}\end{cases}$$

$$C\sum_{n=1}^{N} E_\epsilon\left(y\left(\mathbf{x}_n\right)-t_n\right)+\frac{1}{2}\|\mathbf{w}\|^2$$

这里的C类似于$1/\lambda$的作用.仍然引入slack variable $\xi_n \geqslant 0, \hat{\xi}_n \geqslant 0$分别代表above和below的error:

$$\begin{aligned} t_n &\leqslant y\left(\mathbf{x}_n\right)+\epsilon+\xi_n \\ t_n &\geqslant y\left(\mathbf{x}_n\right)-\epsilon-\hat{\xi}_n . \end{aligned}$$

现在的error function就可表示为:

$$C\sum_{n=1}^{N}\left(\xi_n+\hat{\xi}_n\right)+\frac{1}{2}\|\mathbf{w}\|^2$$

同样使用lagrange multipliers:

$$\begin{aligned} L= & C\sum_{n=1}^{N}\left(\xi_n+\hat{\xi}_n\right)+\frac{1}{2}\|\mathbf{w}\|^2-\sum_{n=1}^{N}\left(\mu_n\xi_n+\widehat{\mu}_n\hat{\xi}_n\right) \\ & -\sum_{n=1}^{N} a_n\left(\epsilon+\xi_n+y_n-t_n\right)-\sum_{n=1}^{N}\widehat{a}_n\left(\epsilon+\hat{\xi}_n-y_n+t_n\right) . \end{aligned}$$

令偏导为0:

$$\begin{aligned} & \frac{\partial L}{\partial \mathbf{w}}=0 \Rightarrow \mathbf{w}=\textstyle\sum_{n=1}^{N}\left(a_n-\widehat{a}_n\right)\phi\left(\mathbf{x}_n\right) \\ & \frac{\partial L}{\partial b}=0 \Rightarrow \textstyle\sum_{n=1}^{N}\left(a_n-\widehat{a}_n\right)=0 \\ & \frac{\partial L}{\partial \xi_n}=0 \Rightarrow a_n+\mu_n=C \\ & \frac{\partial L}{\partial \hat{\xi}_n}=0 \Rightarrow \widehat{a}_n+\widehat{\mu}_n=C \end{aligned}$$

回带到L,得到dual形式:

$$\begin{aligned}\widetilde{L}(\mathbf{a},\widehat{\mathbf{a}})=&-\frac{1}{2}\sum_{n=1}^{N}\sum_{m=1}^{N}\left(a_n-\widehat{a}_n\right)\left(a_m-\widehat{a}_m\right)k\left(\mathbf{x}_n,\mathbf{x}_m\right)\\&-\epsilon\sum_{n=1}^{N}\left(a_n+\widehat{a}_n\right)+\sum_{n=1}^{N}\left(a_n-\widehat{a}_n\right)t_n\\&0\leqslant a_n\leqslant C\\&0\leqslant\widehat{a}_n\leqslant C\end{aligned}$$

用KKT条件:

$$\begin{aligned}a_n\left(\epsilon+\xi_n+y_n-t_n\right)&=0\\\widehat{a}_n\left(\epsilon+\hat{\xi}_n-y_n+t_n\right)&=0\\\left(C-a_n\right)\xi_n&=0\\\left(C-\widehat{a}_n\right)\hat{\xi}_n&=0.\end{aligned}$$

support vector只包含那些$0<a_n$或$0<\widehat{a}_n$的point.

7.2. Relevance Vector Machines

7.2.1 RVM for regression

假设target t服从Gaussian:$p(t\mid\mathbf{x},\mathbf{w},\beta)=\mathcal{N}\left(t\mid y(\mathbf{x}),\beta^{-1}\right)$.其中 $y(\mathbf{x})=\sum_{i=1}^{M}w_i\phi_i(\mathbf{x})=\mathbf{w}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{\phi}(\mathbf{x})$.

由此likelihood:

$$p(\mathbf{t}\mid\mathbf{X},\mathbf{w},\beta)=\prod_{n=1}^{N}p\left(t_n\mid\mathbf{x}_n,\mathbf{w},\beta^{-1}\right)$$

给出weight的prior:$p(\mathbf{w}\mid\boldsymbol{\alpha})=\prod_{i=1}^{M}\mathcal{N}\left(w_i\mid 0,\alpha_i^{-1}\right)$.值得注意的是这里的precision是一个diagonal matrix,每个对角元素不一定相等.

有了prior和likelihood,利用bayes' theorem得出posterior:

$$\begin{aligned}p(\mathbf{w}\mid\mathbf{t},\mathbf{X},\boldsymbol{\alpha},\beta)&=\mathcal{N}(\mathbf{w}\mid\mathbf{m},\boldsymbol{\Sigma})\\\mathbf{m}&=\beta\boldsymbol{\Sigma}\boldsymbol{\Phi}^{\mathrm{T}}\mathbf{t}\\\boldsymbol{\Sigma}&=\left(\mathbf{A}+\beta\boldsymbol{\Phi}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{\Phi}\right)^{-1}\end{aligned}$$

接下来让marginal likelihood最大:

$$p(\mathbf{t} \mid \mathbf{X}, \boldsymbol{\alpha}, \beta)=\int p(\mathbf{t} \mid \mathbf{X}, \mathbf{w}, \beta) p(\mathbf{w} \mid \boldsymbol{\alpha}) \mathrm{d} \mathbf{w}$$

通过迭代可以解出α^*, β^*.最后带入predict function:

$$\begin{aligned} p\left(t \mid \mathbf{x}, \mathbf{X}, \mathbf{t}, \boldsymbol{\alpha}^{\star}, \beta^{\star}\right) &=\int p\left(t \mid \mathbf{x}, \mathbf{w}, \beta^{\star}\right) p\left(\mathbf{w} \mid \mathbf{X}, \mathbf{t}, \boldsymbol{\alpha}^{\star}, \beta^{\star}\right) \mathrm{d} \mathbf{w} \\ &=\mathcal{N}\left(t \mid \mathbf{m}^{\mathrm{T}} \boldsymbol{\phi}(\mathbf{x}), \sigma^{2}(\mathbf{x})\right) \\ \sigma^{2}(\mathbf{x}) &=\left(\beta^{\star}\right)^{-1}+\phi(\mathbf{x})^{\mathrm{T}} \mathbf{\Sigma} \phi(\mathbf{x}) \end{aligned}$$

最后的结果中$\alpha_j \to \infty$说明$\mathbf{w}_j$是0,所以只有部分$\mathbf{w}$其作用,也就对应着sparse solution.

7.2.3 RVM for classification

对于classify problem,只需要再套一个sigmoid function:

$$y(\mathbf{x}, \mathbf{w})=\sigma\left(\mathbf{w}^{\mathrm{T}} \boldsymbol{\phi}(\mathbf{x})\right)$$

由于无法得出解析形式的posterior,使用laplace approximate.求mode of posterior:

$$\begin{aligned} &\ln p(\mathbf{w} \mid \mathbf{t}, \boldsymbol{\alpha})=\ln \{p(\mathbf{t} \mid \mathbf{w}) p(\mathbf{w} \mid \boldsymbol{\alpha})\}-\ln p(\mathbf{t} \mid \boldsymbol{\alpha}) \\ &\quad=\sum_{n=1}^{N}\left\{t_{n} \ln y_{n}+\left(1-t_{n}\right) \ln \left(1-y_{n}\right)\right\}-\frac{1}{2} \mathbf{w}^{\mathrm{T}} \mathbf{A} \mathbf{w}+\text { const } \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \nabla \ln p(\mathbf{w} \mid \mathbf{t}, \boldsymbol{\alpha}) &=\boldsymbol{\Phi}^{\mathrm{T}}(\mathbf{t}-\mathbf{y})-\mathbf{A} \mathbf{w} \\ \nabla \nabla \ln p(\mathbf{w} \mid \mathbf{t}, \boldsymbol{\alpha}) &=-\left(\boldsymbol{\Phi}^{\mathrm{T}} \mathbf{B} \Phi+\mathbf{A}\right) \end{aligned}$$

利用gradient形式解出mode,然后用Gaussian去approximate posterior(mean i.e. mode),可以得到approximate result:

$$\begin{aligned} \mathbf{w}^{\star} &=\mathbf{A}^{-1} \boldsymbol{\Phi}^{\mathrm{T}}(\mathbf{t}-\mathbf{y}) \\ \boldsymbol{\Sigma} &=\left(\boldsymbol{\Phi}^{\mathrm{T}} \mathbf{B} \boldsymbol{\Phi}+\mathbf{A}\right)^{-1} . \end{aligned}$$

然后再用laplace approximate to evaluate marginal likelihood:

$$\begin{aligned} p(\mathbf{t} \mid \boldsymbol{\alpha}) &=\int p(\mathbf{t} \mid \mathbf{w}) p(\mathbf{w} \mid \boldsymbol{\alpha}) \mathrm{d} \mathbf{w} \\ & \simeq p\left(\mathbf{t} \mid \mathbf{w}^{\star}\right) p\left(\mathbf{w}^{\star} \mid \boldsymbol{\alpha}\right)(2 \pi)^{M / 2}|\mathbf{\Sigma}|^{1 / 2} \end{aligned}$$

然后可以解出maximum marginal likelihood的hyper parameter α^*

多分类只需要将sigmoid换成softmax即可.