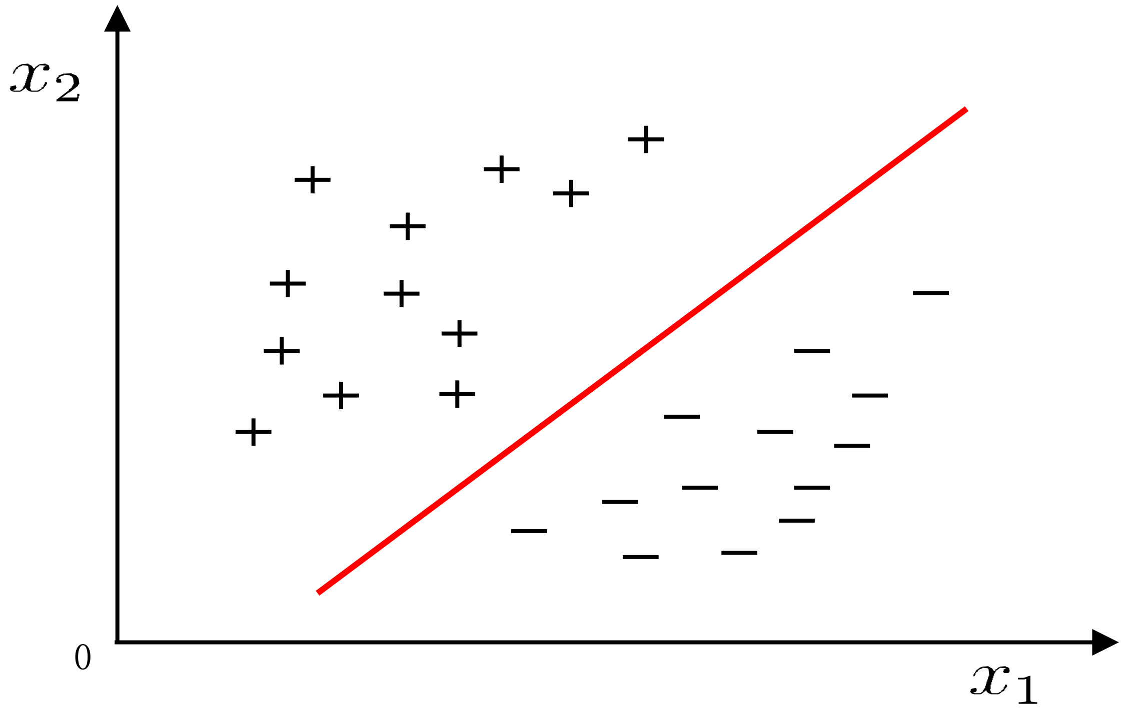
支持向量机

大纲

- 间隔与支持向量
- 对偶问题
- 核函数
- 软间隔与正则化
- 支持向量回归
- 核方法

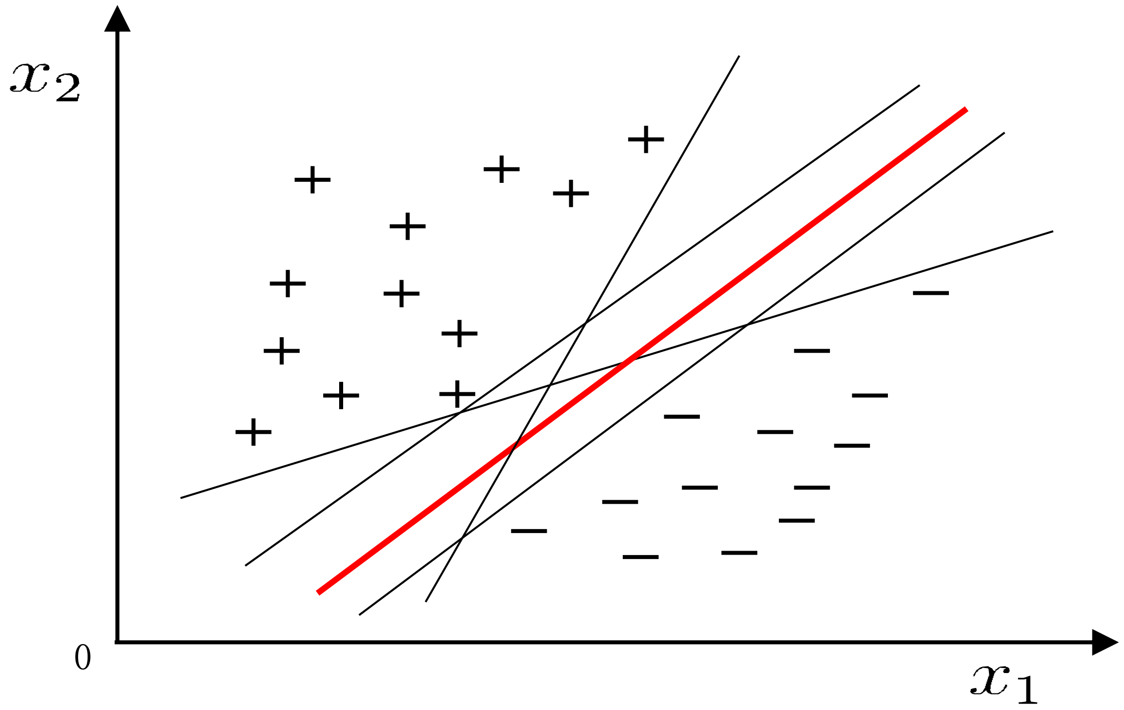
引子

线性模型：在样本空间中寻找一个超平面，将不同类别的样本分开.



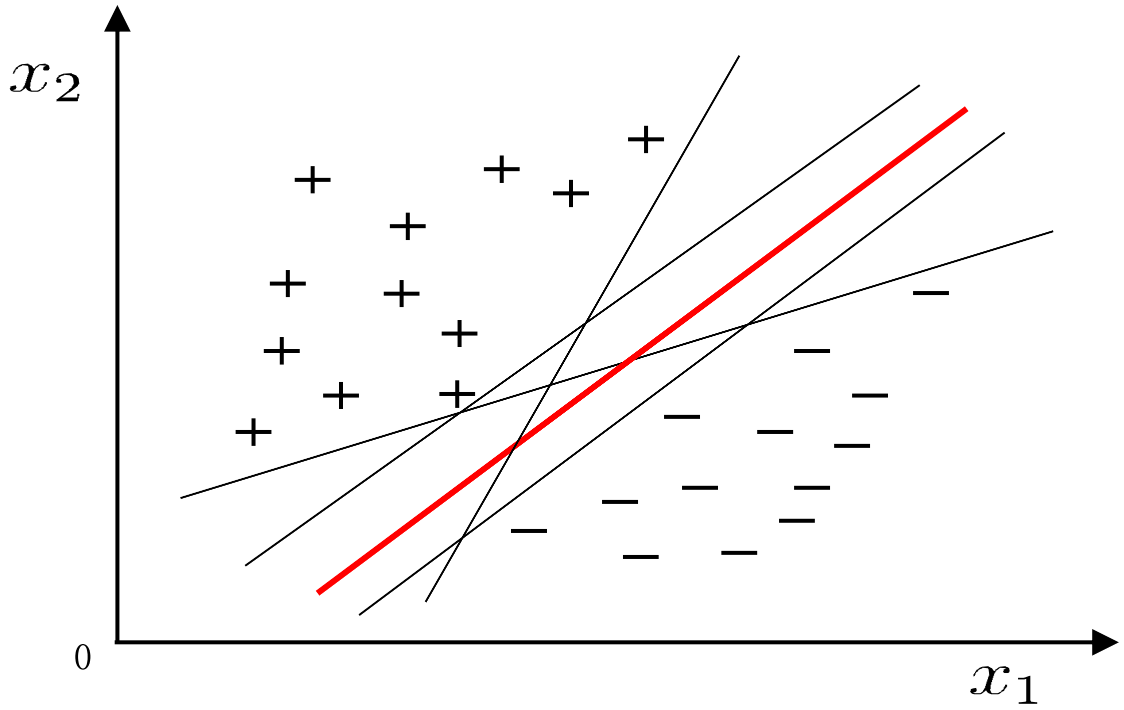
引子

-Q:将训练样本分开的超平面可能有很多，哪一个好呢?



引子

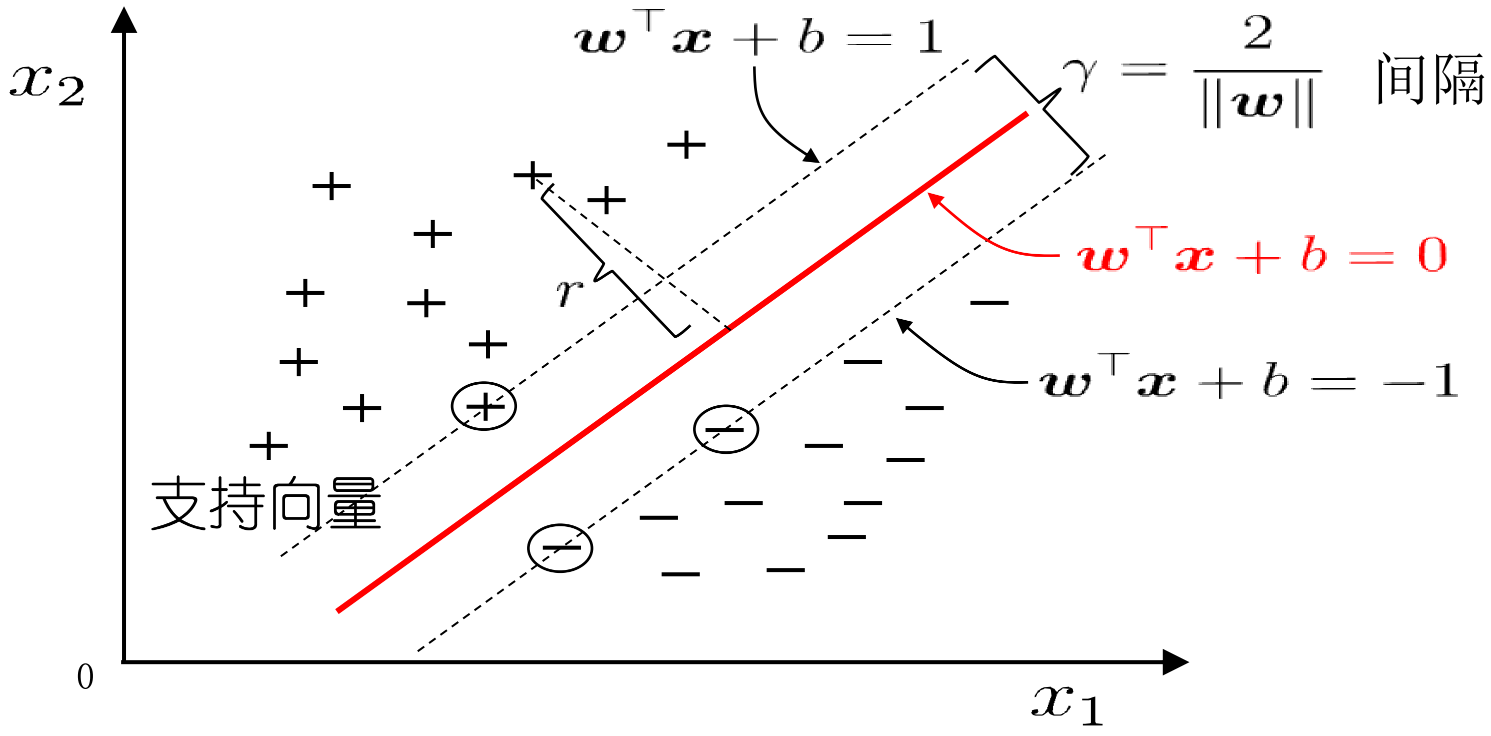
-Q:将训练样本分开的超平面可能有很多，哪一个好呢?



-A:应选择”正中间”，容忍性好，鲁棒性高，泛化能力最强.

间隔与支持向量

超平面方程：$\boldsymbol{w}^\top \boldsymbol{x} + b = 0$



支持向量机基本型

- 最大间隔：寻找参数$\boldsymbol{w}$和b，使得γ最大.

$$\underset{\boldsymbol{w},b}{\arg\max} \quad \frac{2}{\|\boldsymbol{w}\|}$$
$$\text{s.t.} \quad y_i(\boldsymbol{w}^\top \boldsymbol{x}_i + b) \geq 1, \; i = 1, 2, \ldots, m.$$

$$\underset{\boldsymbol{w},b}{\arg\min} \quad \frac{1}{2}\|\boldsymbol{w}\|^2$$
$$\text{s.t.} \quad y_i(\boldsymbol{w}^\top \boldsymbol{x}_i + b) \geq 1, \; i = 1, 2, \ldots, m.$$

对偶问题

- **拉格朗日乘子法**
  - 第一步：引入拉格朗日乘子 $\alpha_i \geq 0$ 得到拉格朗日函数

$$L(\boldsymbol{w}, b, \boldsymbol{\alpha}) = \frac{1}{2}\|\boldsymbol{w}\|^2 - \sum_{i=1}^{m} \alpha_i \left(y_i(\boldsymbol{w}^\top \boldsymbol{x}_i + b) - 1 \right)$$

  - 第二步：令 $L(\boldsymbol{w}, b, \boldsymbol{\alpha})$ 对 $\boldsymbol{w}$ 和 b 的偏导为零可得

$$\boldsymbol{w} = \sum_{i=1}^{m} \alpha_i y_i \boldsymbol{x}_i, \quad \sum_{i=1}^{m} \alpha_i y_i = 0.$$

  - 第三步：回代

$$\min_{\boldsymbol{\alpha}} \quad \frac{1}{2}\sum_{i=1}^{m}\sum_{j=1}^{m} \alpha_i \alpha_j y_i y_j \boldsymbol{x}_i^\top \boldsymbol{x}_j - \sum_{i=1}^{m} \alpha_i$$

$$\text{s.t.} \quad \sum_{i=1}^{m} \alpha_i y_i = 0, \ \ \alpha_i \geq 0, \ \ i = 1, 2, \ldots, m.$$

解的稀疏性

- **最终模型：**

$$f(\boldsymbol{x}) = \boldsymbol{w}^\top \boldsymbol{x} + b = \sum_{i=1}^{m} \alpha_i y_i \boldsymbol{x}_i^\top \boldsymbol{x} + b$$

- **KKT条件：**

$$\begin{cases} \alpha_i \geq 0, \\ y_i f(\boldsymbol{x}_i) \geq 1, \\ \alpha_i (y_i f(\boldsymbol{x}_i) - 1) = 0. \end{cases}$$

$$y_i f(\boldsymbol{x}_i) > 1 \Rightarrow \alpha_i = 0$$

支持向量机解的稀疏性：训练完成后，大部分的训练样本都不需保留，最终模型仅与支持向量有关.

求解方法 - SMO

- **基本思路：不断执行如下两个步骤直至收敛.**
  - 第一步：选取一对需更新的变量 α_i 和 α_j .
  - 第二步：固定 α_i 和 α_j 以外的参数, 求解对偶问题更新后的α_i 和 α_j .
- **仅考虑 α_i 和 α_j 时，对偶问题的约束变为**

$$\alpha_i y_i + \alpha_j y_j = -\sum_{k \neq i,j} \alpha_k y_k, \quad \alpha_i \geq 0, \quad \alpha_j \geq 0.$$

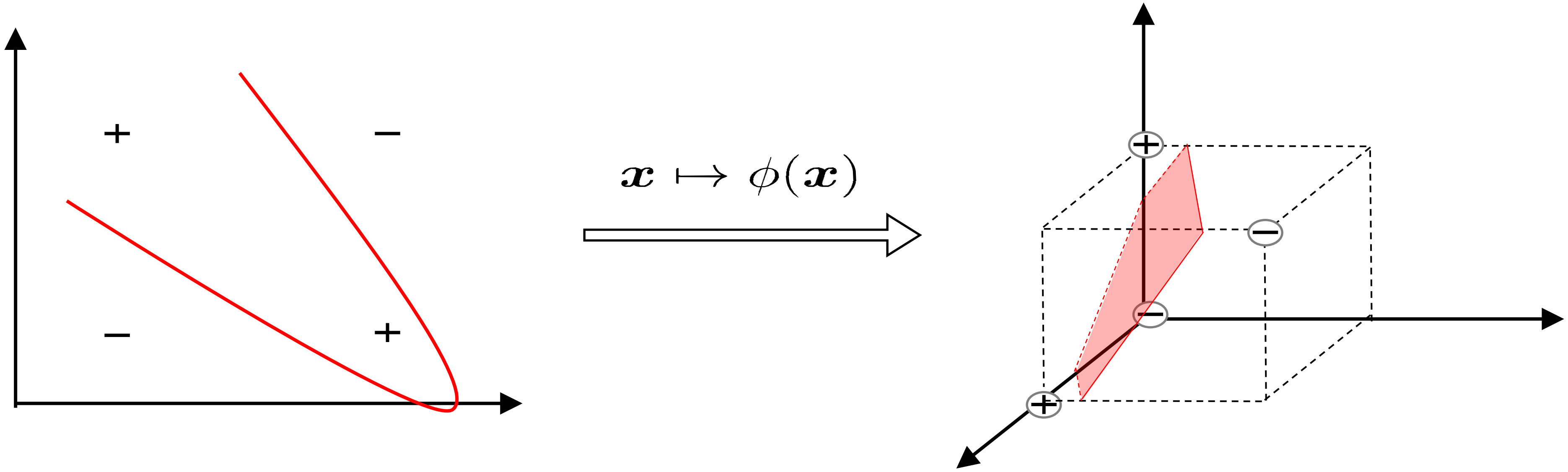
用一个变量表示另一个变量，回代入对偶问题可得一个单变量的二次规划，该问题具有闭式解.

- **偏移项 b ：通过支持向量来确定.**

线性不可分

-Q:若不存在一个能正确划分两类样本的超平面，怎么办?

-A:将样本从原始空间映射到一个更高维的特征空间，使得样本在这个特征空间内线性可分.



核支持向量机

- 设样本 $\boldsymbol{x}$映射后的向量为 $\phi(\boldsymbol{x})$, 划分超平面为 $f(\boldsymbol{x}) = \boldsymbol{w}^\top\phi(\boldsymbol{x}) + b$

原始问题
$$\min_{\boldsymbol{w},b} \frac{1}{2}\|\boldsymbol{w}\|^2$$
$$\text{s.t.} \quad y_i(\boldsymbol{w}^\top\phi(\boldsymbol{x}_i) + b) \geq 1, \ i = 1, 2, \ldots, m.$$

对偶问题
$$\min_{\boldsymbol{\alpha}} \frac{1}{2}\sum_{i=1}^{m}\sum_{j=1}^{m}\alpha_i\alpha_j y_i y_j \boxed{\phi(\boldsymbol{x}_i)^\top\phi(\boldsymbol{x}_j)} - \sum_{i=1}^{m}\alpha_i$$
$$\text{s.t.} \quad \sum_{i=1}^{m}\alpha_i y_i = 0, \ \alpha_i \geq 0, \ i = 1, 2, \ldots, m.$$

只以内积的形式出现

预测
$$f(\boldsymbol{x}) = \boldsymbol{w}^\top\phi(\boldsymbol{x}) + b = \sum_{i=1}^{m}\alpha_i y_i \boxed{\phi(\boldsymbol{x}_i)^\top\phi(\boldsymbol{x})} + b$$

核函数

- 基本想法：不显式地设计核映射，而是设计核函数.

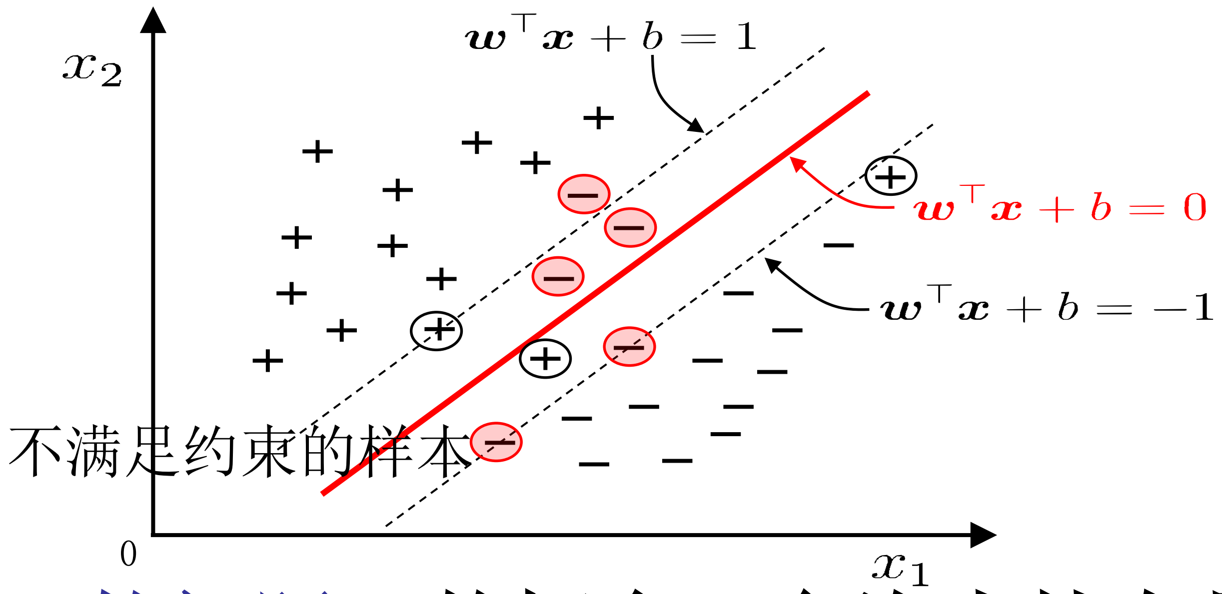
$$\kappa(\boldsymbol{x}_i, \boldsymbol{x}_j) = \phi(\boldsymbol{x}_i)^\top \phi(\boldsymbol{x}_j)$$

- Mercer定理(充分非必要)：只要一个对称函数所对应的核矩阵半正定，则它就能作为核函数来使用.

名称	表达式	参数
线性核	$\kappa(\boldsymbol{x}_i, \boldsymbol{x}_j) = \boldsymbol{x}_i^\top \boldsymbol{x}_j$	
多项式核	$\kappa(\boldsymbol{x}_i, \boldsymbol{x}_j) = (\boldsymbol{x}_i^\top \boldsymbol{x}_j)^d$	$d \geq 1$为多项式的次数
高斯核	$\kappa(\boldsymbol{x}_i, \boldsymbol{x}_j) = \exp\left(-\frac{\lVert \boldsymbol{x}_i - \boldsymbol{x}_j \rVert^2}{2\delta^2}\right)$	$\delta > 0$为高斯核的带宽(width)
拉普拉斯核	$\kappa(\boldsymbol{x}_i, \boldsymbol{x}_j) = \exp\left(-\frac{\lVert \boldsymbol{x}_i - \boldsymbol{x}_j \rVert}{\delta}\right)$	$\delta > 0$
Sigmoid核	$\kappa(\boldsymbol{x}_i, \boldsymbol{x}_j) = \tanh(\beta \boldsymbol{x}_i^\top \boldsymbol{x}_j + \theta)$	tanh为双曲正切函数，$\beta > 0$, $\theta < 0$

软间隔

-Q:现实中，很难确定合适的核函数使得训练样本在特征空间中线性可分；同时一个线性可分的结果也很难断定是否是有过拟合造成的.



-A:引入”**软间隔**”的概念，允许支持向量机在一些样本上不满足约束.

0/1损失函数

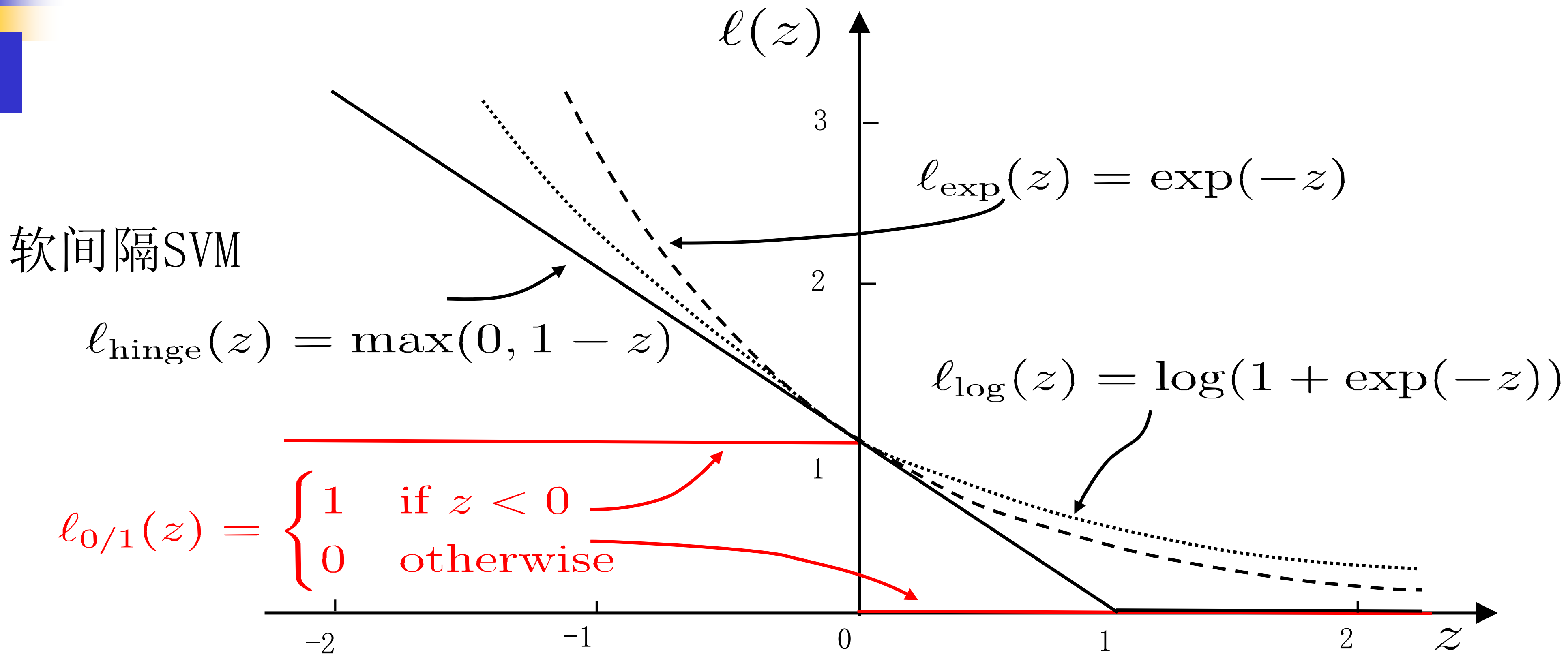
- 基本想法：最大化间隔的同时，让不满足约束的样本应尽可能少.

$$\min_{\boldsymbol{w},b} \quad \frac{1}{2}\|\boldsymbol{w}\|^2 + C\sum_{i=1}^{m} l_{0/1}\left(y_i(\boldsymbol{w}^\top\phi(\boldsymbol{x}_i)+b)-1\right)$$

$$l_{0/1} = \begin{cases} 1 & z < 0 \\ 0 & otherwise \end{cases}$$

其中 $l_{0/1}$ 是” 0/1损失函数”

替代损失



替代损失函数数学性质较好，一般是0/1损失函数的上界

软间隔支持向量机

原始问题 $$\min_{\boldsymbol{w},b} \quad \frac{1}{2}\|\boldsymbol{w}\|^2 + C\sum_{i=1}^{m}\max\left(0, 1 - y_i(\boldsymbol{w}^\top\phi(\boldsymbol{x}_i) + b)\right)$$

对偶问题 $$\begin{aligned}\min_{\boldsymbol{\alpha}} \quad & \frac{1}{2}\sum_{i=1}^{m}\sum_{j=1}^{m}\alpha_i\alpha_j y_i y_j \phi(\boldsymbol{x}_i)^\top\phi(\boldsymbol{x}_j) - \sum_{i=1}^{m}\alpha_i \\ \text{s.t.} \quad & \sum_{i=1}^{m}\alpha_i y_i = 0, \ \ 0 \leq \alpha_i \leq C, \ \ i = 1, 2, \ldots, m.\end{aligned}$$

根据KKT条件可推得最终模型仅与支持向量有关，也即hinge损失函数依然保持了支持向量机解的稀疏性.

正则化

- 支持向量机学习模型的更一般形式

$$\min_{f} \quad \Omega(f) + C\sum_{i=1}^{m} l(f(\boldsymbol{x}_i), y_i)$$

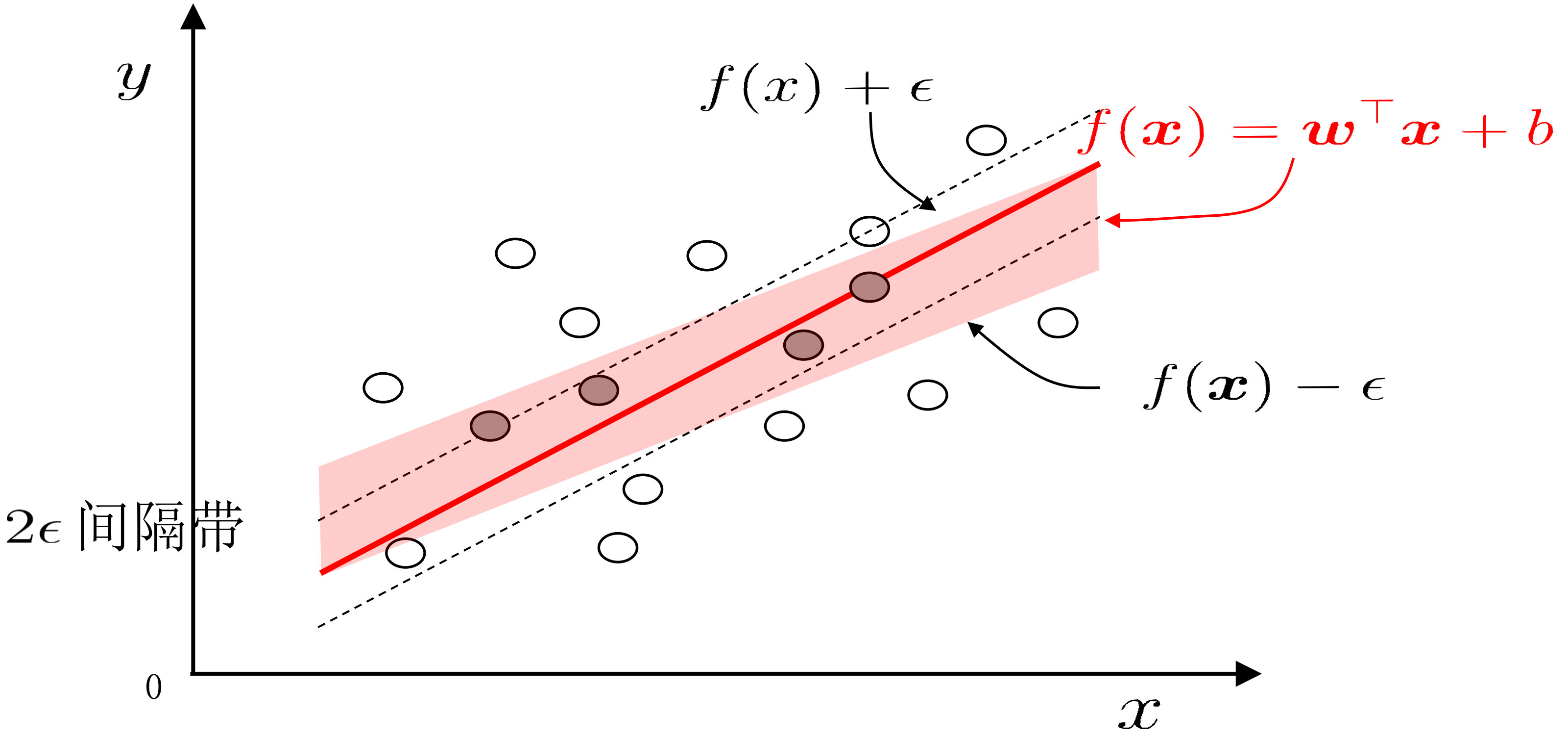
结构风险，描述模型的某些性质

经验风险，描述模型与训练数据的契合程度

- 通过替换上面两个部分，可以得到许多其他学习模型
  - 对数几率回归(Logistic Regression)
  - 最小绝对收缩选择算子(LASSO)
  - ……

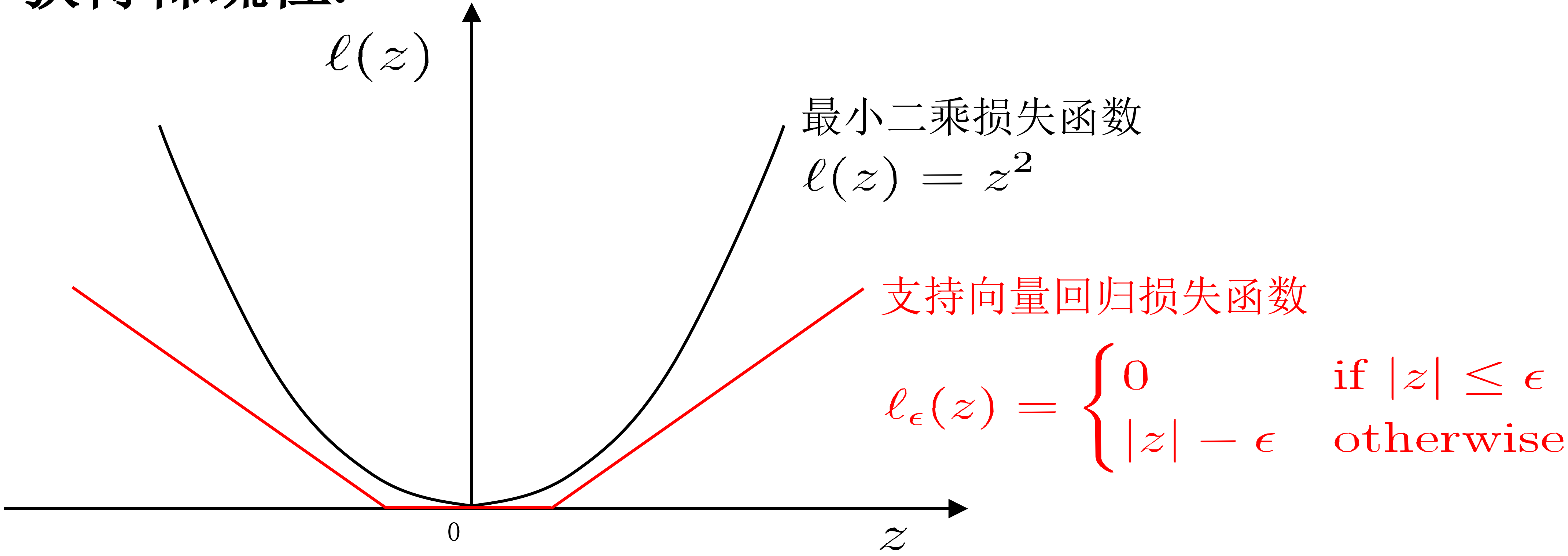
支持向量回归

特点：允许模型输出和实际输出间存在2ϵ的偏差.



损失函数

落入中间 2ϵ 间隔带的样本不计算损失，从而使得模型获得稀疏性.



形式化

原始问题

$$\begin{aligned}\min_{\boldsymbol{w},b,\xi_i,\hat{\xi}_i} \quad & \frac{1}{2}\|\boldsymbol{w}\|^2 + C\sum_{i=1}^{m}(\xi_i + \hat{\xi}_i) \\ \text{s.t.} \quad & y_i - \boldsymbol{w}^\top \phi(\boldsymbol{x}_i) - b \le \epsilon + \xi_i, \\ & y_i - \boldsymbol{w}^\top \phi(\boldsymbol{x}_i) - b \ge -\epsilon - \hat{\xi}_i, \\ & \xi_i \ge 0,\ \hat{\xi}_i \ge 0,\ i = 1, 2, \ldots, m.\end{aligned}$$

对偶问题

$$\begin{aligned}\min_{\boldsymbol{\alpha},\hat{\boldsymbol{\alpha}}} \quad & \frac{1}{2}\sum_{i=1}^{m}\sum_{j=1}^{m}(\alpha_i - \hat{\alpha}_i)(\alpha_j - \hat{\alpha}_j)\kappa(\boldsymbol{x}_i, \boldsymbol{x}_j) + \sum_{i=1}^{m}(\alpha_i(\epsilon - y_i) + \hat{\alpha}_i(\epsilon + y_i)) \\ \text{s.t.} \quad & \sum_{i=1}^{m}(\alpha_i - \hat{\alpha}_i) = 0, \\ & 0 \le \alpha_i \le C,\ 0 \le \hat{\alpha}_i \le C.\end{aligned}$$

预测

$$f(\boldsymbol{x}) = \boldsymbol{w}^\top \phi(\boldsymbol{x}) + b = \sum_{i=1}^{m}(\hat{\alpha}_i - \alpha_i)y_i\kappa(\boldsymbol{x}_i, \boldsymbol{x}) + b$$

表示定理

支持向量机 $f(\boldsymbol{x}) = \boldsymbol{w}^\top \phi(\boldsymbol{x}) + b = \sum_{i=1}^{m} \alpha_i y_i \kappa(\boldsymbol{x}_i, \boldsymbol{x}) + b$

支持向量回归 $f(\boldsymbol{x}) = \boldsymbol{w}^\top \phi(\boldsymbol{x}) + b = \sum_{i=1}^{m} (\hat{\alpha}_i - \alpha_i) y_i \kappa(\boldsymbol{x}_i, \boldsymbol{x}) + b$

结论：无论是支持向量机还是支持向量回归，学得的模型总可以表示成核函数的线性组合.

更一般的结论(表示定理)：对于任意单调增函数 Ω 和任意非负损失函数 l，优化问题

$$\min_{h \in \mathbb{H}} \quad F(h) = \Omega(\|h\|_{\mathbb{H}}) + l(h(\boldsymbol{x}_1), \ldots, h(\boldsymbol{x}_m))$$

的解总可以写为 $$h^* = \sum_{i=1}^{m} \alpha_i \kappa(\cdot, \boldsymbol{x}_i)$$

核线性判别分析

- 通过表示定理可以得到很多线性模型的”核化”版本
  - 核SVM
  - 核LDA
  - 核PCA
  - ……
- 核LDA：先将样本映射到高维特征空间，然后在此特征空间中做线性判别分析 $\max_{\boldsymbol{w}} J(\boldsymbol{w}) = \frac{\boldsymbol{w}^\top \mathbf{S}_b^\phi \boldsymbol{w}}{\boldsymbol{w}^\top \mathbf{S}_w^\phi \boldsymbol{w}}$

$$h(\boldsymbol{x}) = \boldsymbol{w}^\top \phi(\boldsymbol{x}) = \sum_{i=1}^{m} \alpha_i \kappa(\boldsymbol{x}_i, \boldsymbol{x})$$

成熟的SVM软件包

- LIBSVM
  http://www.csie.ntu.edu.tw/~cjlin/libsvm/
- LIBLINEAR
  http://www.csie.ntu.edu.tw/~cjlin/liblinear/
- SVM^{light}、SVM^{perf}、SVM^{struct}
  http://svmlight.joachims.org/svm_struct.html
- Pegasos
  http://www.cs.huji.ac.il/~shais/code/index.html