机器学习2024
第5节

涉及知识点：
支持向量机简介、支持向量机优化、序列最小优化算法、支持向量机核方法

支持向量机

张伟楠 – 上海交通大学

课程安排

参数化有监督学习

1. 机器学习概述
2. 线性模型
3. 双线性模型
4. 神经网络

非参数化有监督学习

5. 支持向量机
6. 决策树
7. 集成学习与森林模型

无监督学习部分

8. 概率图模型
9. 无监督学习

学习理论部分

10. 学习理论与模型选择

前沿话题部分

11. 迁移、多任务、元学习
12. System 1&2 机器意识

支持向量机简介

张伟楠 – 上海交通大学

目录

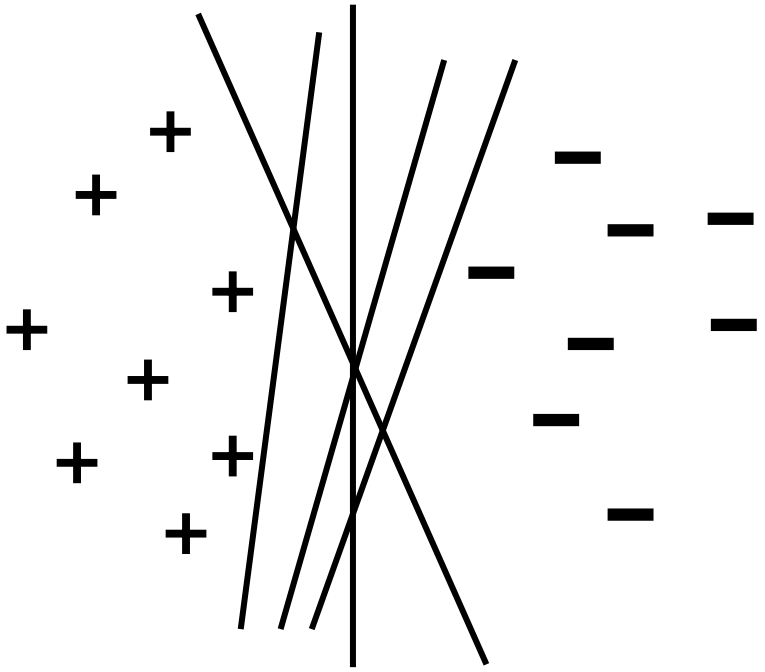
Contents


01
线性分类器

线性分类器

决策边界

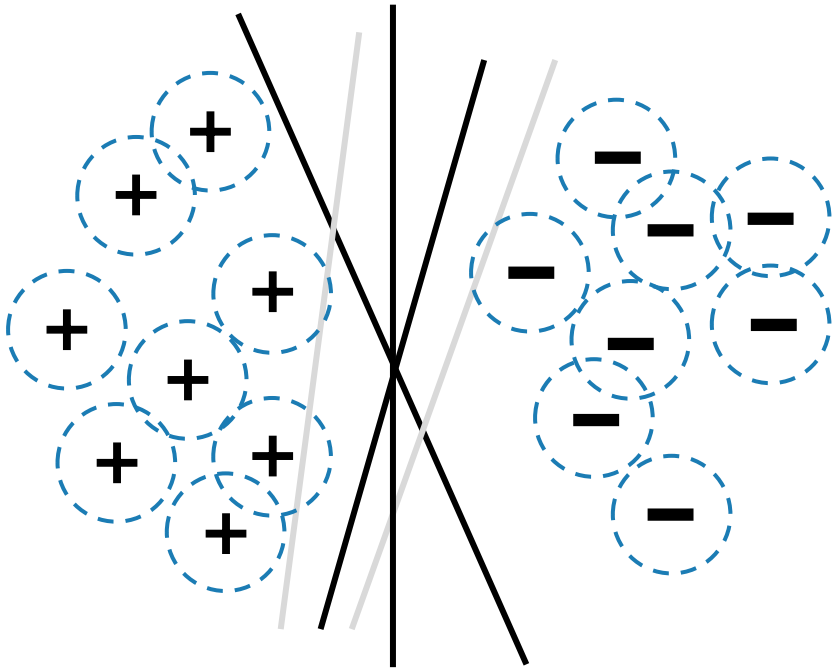
- 线性可分的情形下，决策边界可以是多样的



线性分类器

决策边界

- 线性可分的情形下，决策边界可以是多样的

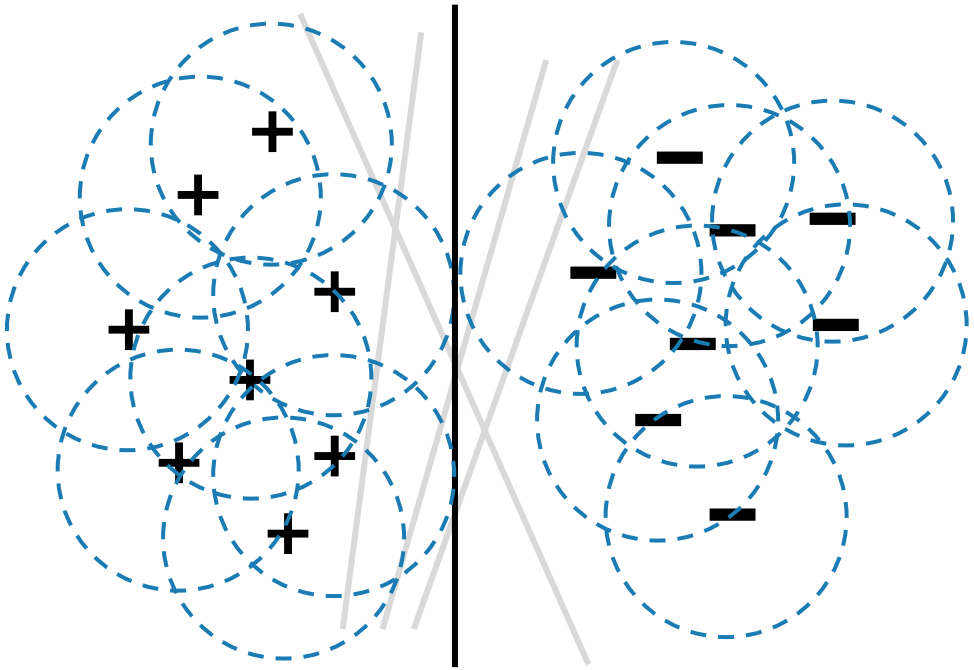


- 考虑数据噪声，可以去除一些划分

线性分类器

决策边界

- 线性可分的情形下，决策边界可以是多样的



- 一种直观的最优决策边界：最大间隔边界

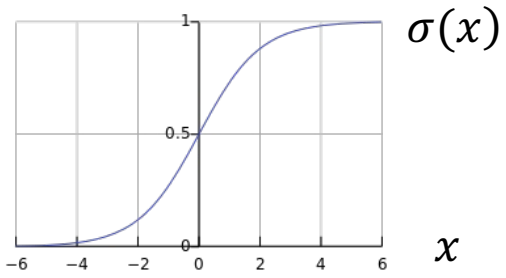
线性分类器

逻辑回归

- 逻辑回归是一种二分类模型

$$p_\theta(y=1|x)=\sigma(\theta^T x)=\frac{1}{1+e^{-\theta^T x}}$$

$$p_\theta(y=0|x)=\frac{e^{-\theta^T x}}{1+e^{-\theta^T x}}$$



- 交叉熵损失函数

$$\mathcal{L}(y,x,p_\theta)=-y\log\sigma(\theta^T x)-(1-y)\log\big(1-\sigma(\theta^T x)\big)$$

- 梯度函数

$$\frac{\partial\mathcal{L}(y,x,p_\theta)}{\partial\theta}=-y\frac{1}{\sigma(\theta^T x)}\sigma(z)(1-\sigma(z))x-(1-y)\frac{-1}{1-\sigma(\theta^T x)}\sigma(z)(1-\sigma(z))x$$

$$=(\sigma(\theta^T x)-y)x$$

$$\theta\leftarrow\theta+\eta\big(y-\sigma(\theta^T x)\big)x$$

线性分类器

标签决策

- 逻辑回归给出了每个类别的概率

$$p_\theta(y=1|x)=\sigma(\theta^T x)=\frac{1}{1+e^{-\theta^T x}}$$

$$p_\theta(y=0|x)=\frac{e^{-\theta^T x}}{1+e^{-\theta^T x}}$$

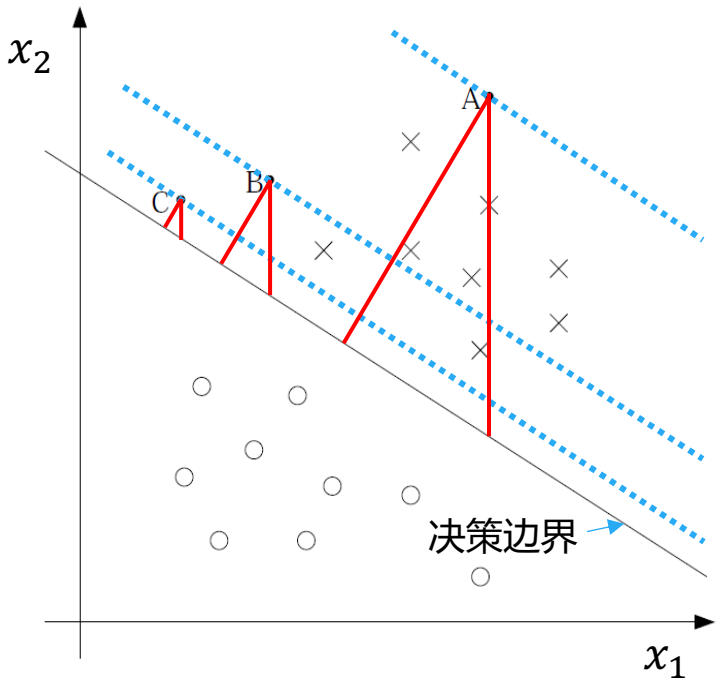
- 每个样例的最终标签由设定的阈值h决定

$$\hat{y}=\begin{cases}1, & p_\theta(y=1|x)>h\\ 0, & \text{otherwise}\end{cases}$$

线性分类器

打分函数

- 逻辑回归的打分函数 $s(x) = \theta_0 + \theta_1 x_1 + \theta_2 x_2$



$$p_\theta(y = 1|x) = \frac{1}{1 + e^{-s(x)}}$$

$$s(x) = \theta_0 + \theta_1 x_1^{(A)} + \theta_2 x_2^{(A)}$$

$$s(x) = \theta_0 + \theta_1 x_1^{(B)} + \theta_2 x_2^{(B)}$$

$$s(x) = \theta_0 + \theta_1 x_1^{(C)} + \theta_2 x_2^{(C)}$$

$$s(x) = 0$$

打分越高的样例越远离决策边界，具有更高的分类置信度

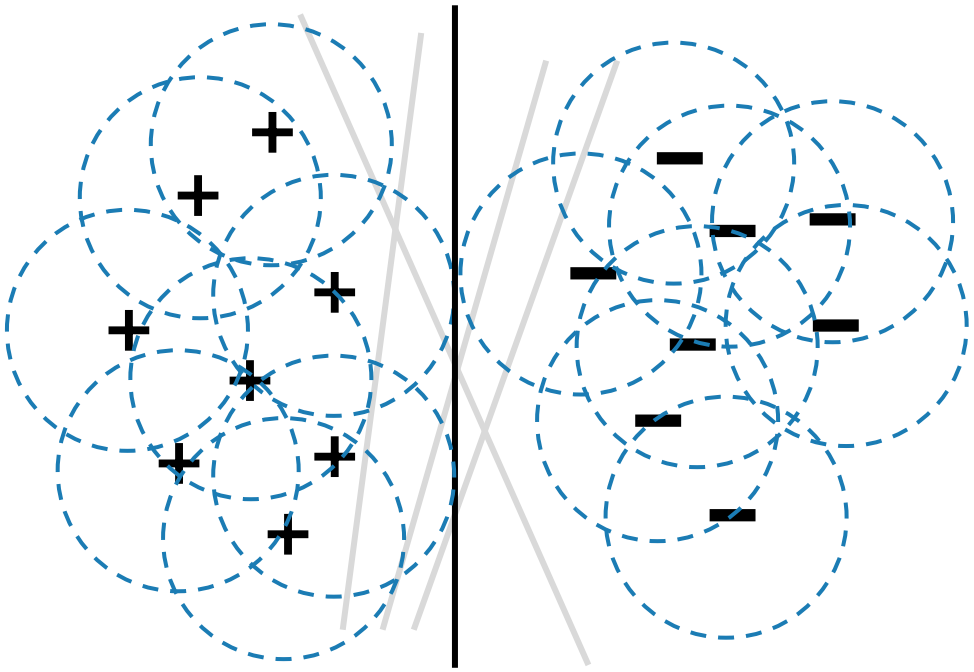
02

支持向量机

支持向量机

最优决策边界

- 直观的最优决策边界：最高的分类置信度



支持向量机

符号说明

- 特征向量 x
- 类别标签 $y \in \{-1, 1\}$
- 参数
  - 截距 b
  - 特征权重向量 w
- 标签预测

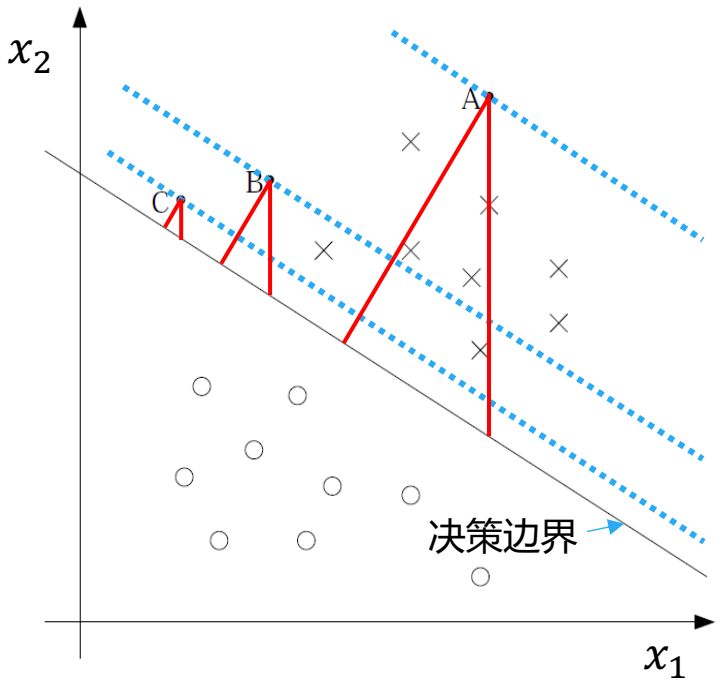
$$h_{w,b}(x) = g(w^{\top}x + b)$$

$$g(z) = \begin{cases} +1 & z \geq 0 \\ -1 & \text{otherwise} \end{cases}$$

支持向量机

打分函数

- 逻辑回归的打分函数 $s(x) = \theta_0 + \theta_1 x_1 + \theta_2 x_2$



$$p_\theta(y = 1|x) = \frac{1}{1 + e^{-s(x)}}$$

$$s(x) = \theta_0 + \theta_1 x_1^{(A)} + \theta_2 x_2^{(A)}$$

$$s(x) = \theta_0 + \theta_1 x_1^{(B)} + \theta_2 x_2^{(B)}$$

$$s(x) = \theta_0 + \theta_1 x_1^{(C)} + \theta_2 x_2^{(C)}$$

$$s(x) = 0$$

打分越高的样例越远离决策边界，具有更高的分类置信度

支持向量机

边界间隔

- 函数间隔

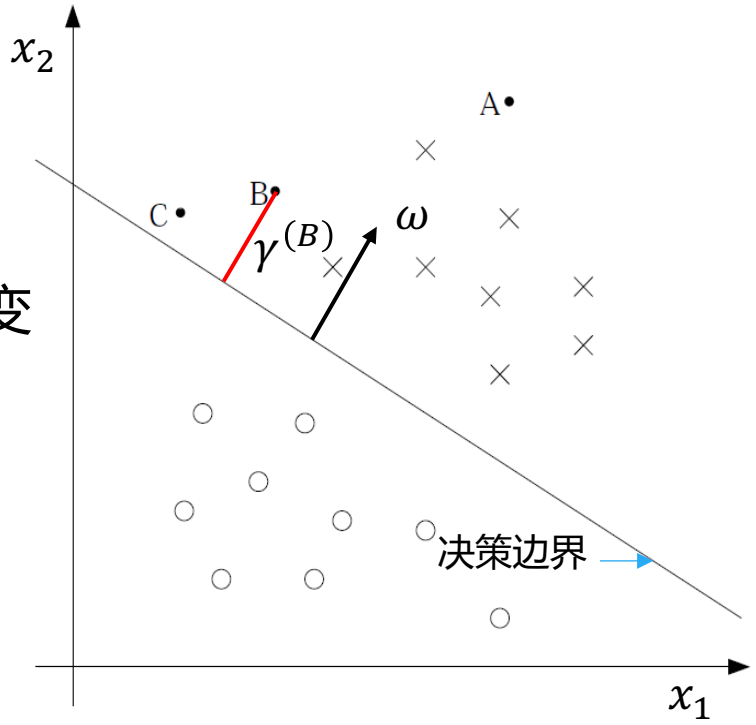
$$\hat{\gamma}^{(i)} = y^{(i)}\left(w^T x^{(i)} + b\right)$$

- 分割超平面不会随(ω, b)的幅值改变而改变

$$g(w^T x + b) = g(2w^T x + 2b)$$

- 几何间隔

$$\gamma^{(i)} = y^{(i)}\left(w^T x^{(i)} + b\right), \text{where } \|w\|^2 = 1$$



支持向量机

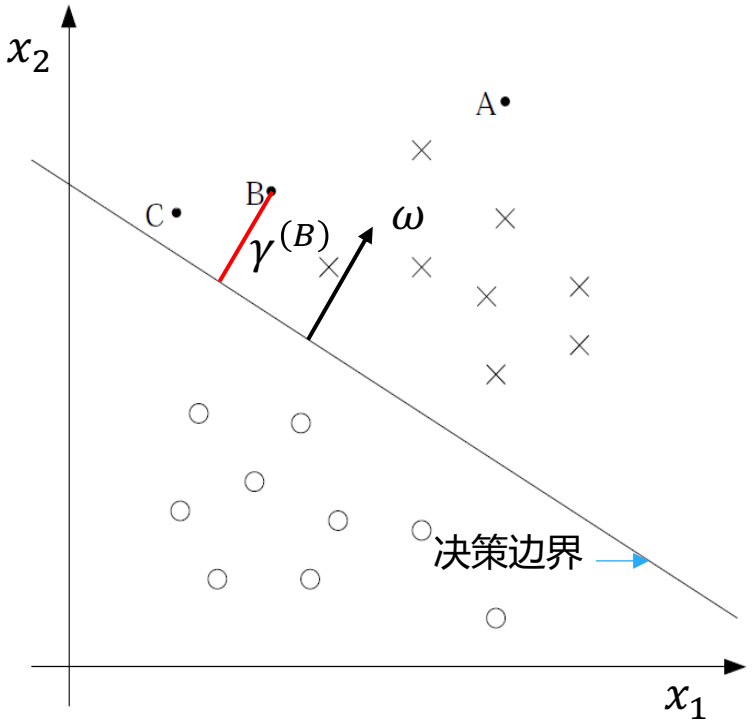
边界间隔

- 决策边界

$$w^T(x^{(i)} - \gamma^{(i)} y^{(i)} \frac{w}{\|w\|}) + b = 0$$

$$\Rightarrow \gamma^{(i)} = y^{(i)} \frac{w^T x^{(i)} + b}{\|w\|}$$

$$= y^{(i)} \left[\left(\frac{w}{\|w\|} \right)^T x^{(i)} + \frac{b}{\|w\|} \right]$$



- 给定训练集$S = \{(x_i, y_i)\}_{i=1,\ldots,m}$，最小几何间隔为

$$\gamma = \min_{i=1,\ldots,m} \gamma^{(i)}$$

支持向量机

目标函数

- 寻找一个使最小几何间隔达到最大值的分割超平面

$$\max_{\gamma,w,b} \quad \gamma$$

$$\text{s.t.} \quad y^{(i)}\left(w^T x^{(i)} + b\right) \geq \gamma, \qquad i = 1, \dots, m$$

$$\|w\| = 1 \qquad \text{(非凸约束)}$$

- 等同于归一化函数间隔

$$\max_{\hat{\gamma},w,b} \quad \frac{\hat{\gamma}}{\|w\|} \qquad \text{(非凸目标函数)}$$

$$\text{s.t.} \quad y^{(i)}\left(w^T x^{(i)} + b\right) \geq \hat{\gamma}, \qquad i = 1, \dots, m$$

支持向量机

目标函数

- 分类间隔的变化不会改变决策边界
  - 将函数间隔固定为1

$$\hat{\gamma} = 1$$

  - 目标函数重写成

$$\max_{w,b} \quad \frac{1}{\|w\|}$$
$$\text{s.t.} \quad y^{(i)}\left(w^T x^{(i)} + b\right) \geq 1, \qquad i = 1, \dots, m$$

  - 目标函数等同于

$$\min_{w,b} \quad \frac{1}{2}\|w\|^2$$
$$\text{s.t.} \quad y^{(i)}\left(w^T x^{(i)} + b\right) \geq 1, \qquad i = 1, \dots, m$$

- 此优化问题可以由二次规划算法有效求解

支持向量机优化

讲师：张伟楠 – 上海交通大学

目录

Contents

01
拉格朗日对偶问题

拉格朗日对偶问题

等式凸优化

- 对于凸优化问题

$$\min_{w} \quad f(w)$$
$$\text{s.t.} \quad h_i(w) = 0, \qquad i = 1, \dots, l$$

- 问题的拉格朗日函数定义为

$$\mathcal{L}(w, \beta) = f(w) + \sum_{i=1}^{l} \beta_i \, h_i(w)$$

拉格朗日乘子

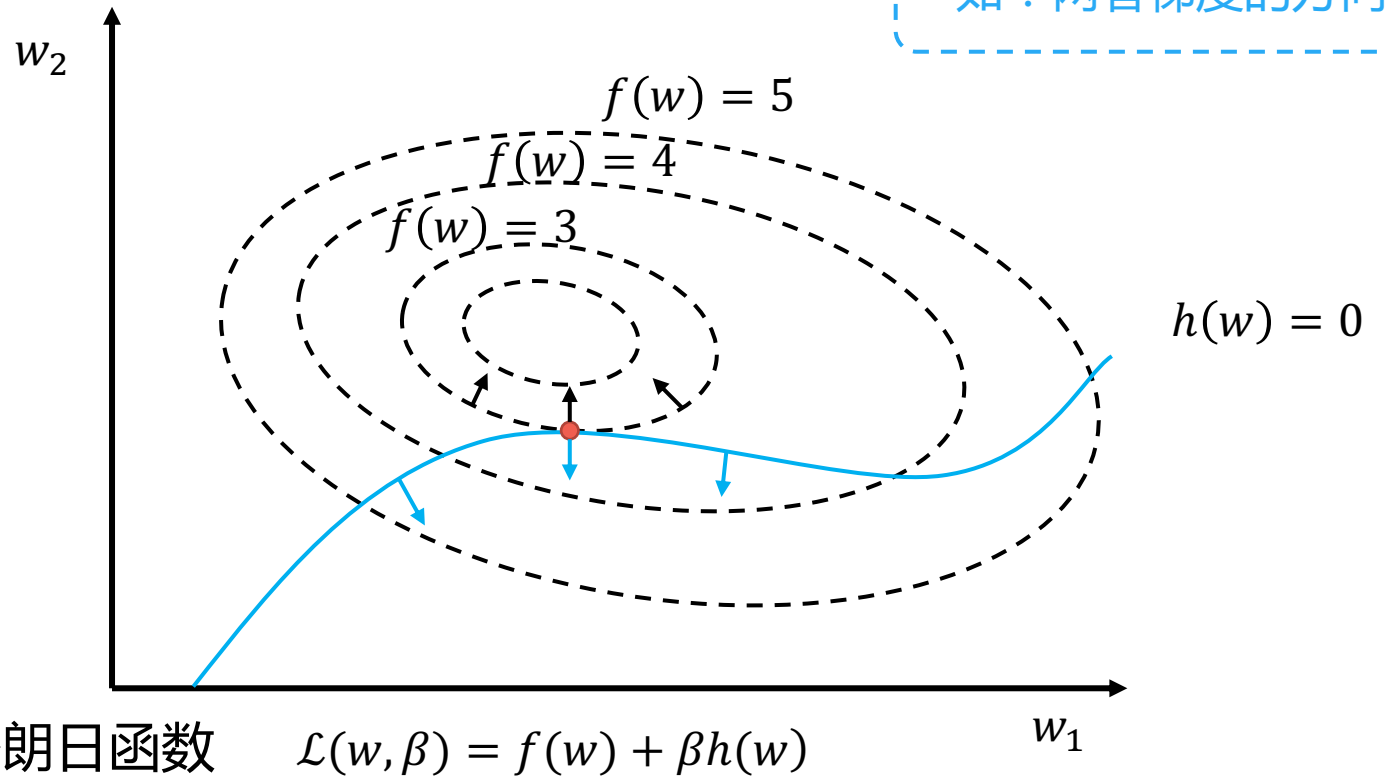
  - 求解 $\dfrac{\partial \mathcal{L}(w, \beta)}{\partial w} = 0$ $\dfrac{\partial \mathcal{L}(w, \beta)}{\partial \beta} = 0$

    可得原优化问题的解

拉格朗日对偶问题

拉格朗日函数解析

如：两者梯度的方向相同



- 拉格朗日函数 $\mathcal{L}(w, \beta) = f(w) + \beta h(w)$

$$\frac{\partial \mathcal{L}(w,\beta)}{\partial w} = \frac{\partial f(w)}{\partial w} + \beta \frac{\partial h(w)}{\partial w} = 0$$

拉格朗日对偶问题

不等式凸优化

- 对于凸优化问题

$$\begin{aligned} \min_{w} \quad & f(w) \\ s.t. \quad & g_i(w) \le 0, \qquad i = 1, \dots, k \\ & h_i(w) = 0, \qquad i = 1, \dots, l \end{aligned}$$

- 问题的拉格朗日函数定义为

$$\mathcal{L}(w, \alpha, \beta) = f(w) + \sum_{i=1}^{k} \alpha_i \, g_i(w) + \sum_{i=1}^{l} \beta_i \, h_i(w)$$

拉格朗日乘子

拉格朗日对偶问题

原始问题

- 凸优化问题

$$\begin{aligned} \min_{w} \quad & f(w) \\ s.t. \quad & g_i(w) \le 0, \qquad i = 1, \dots, k \\ & h_i(w) = 0, \qquad i = 1, \dots, l \end{aligned}$$

- 拉格朗日函数

$$\mathcal{L}(w, \alpha, \beta) = f(w) + \sum_{i=1}^{k} \alpha_i \, g_i(w) + \sum_{i=1}^{l} \beta_i \, h_i(w)$$

- 原问题

$$\theta_{\mathcal{P}}(w) = \max_{\alpha, \beta : \alpha_i \ge 0} \mathcal{L}(w, \alpha, \beta)$$

  - 对于不满足约束条件的w，例如

$$g_i(w) > 0 \text{ 或者} h_i(w) \neq 0$$

可得 $\theta_{\mathcal{P}}(w) = +\infty$

拉格朗日对偶问题

原始问题

- 凸优化问题

$$\begin{aligned} \min_{w} \quad & f(w) \\ s.t. \quad & g_i(w) \le 0, \qquad i = 1, \dots, k \\ & h_i(w) = 0, \qquad i = 1, \dots, l \end{aligned}$$

- 拉格朗日函数

$$\mathcal{L}(w, \alpha, \beta) = f(w) + \sum_{i=1}^{k} \alpha_i \, g_i(w) + \sum_{i=1}^{l} \beta_i \, h_i(w)$$

- 原问题

$$\theta_{\mathcal{P}}(w) = \max_{\alpha, \beta : \alpha_i \ge 0} \mathcal{L}(w, \alpha, \beta)$$

  - 相反，对于满足所有约束条件的w

可得 $\theta_{\mathcal{P}}(w) = f(w)$

$$\theta_{\mathcal{P}}(w) = \begin{cases} f(w) & w\text{满足原始问题约束} \\ +\infty & \text{其他} \end{cases}$$

拉格朗日对偶问题

原问题

$$\theta_{\mathcal{P}}(w) = \begin{cases} f(w) & w\text{满足原始问题约束} \\ +\infty & \text{其他} \end{cases}$$

- 函数最小化问题

$$\min_{w} \theta_{\mathcal{P}}(w) = \min_{w} \max_{\alpha,\beta:\alpha_i \geq 0} \mathcal{L}(w,\alpha,\beta)$$

  - 等同于原来的优化任务

$$\begin{aligned} \min_{w} \quad & f(w) \\ \text{s.t.} \quad & g_i(w) \leq 0, \qquad i = 1,\dots,k \\ & h_i(w) = 0, \qquad i = 1,\dots,l \end{aligned}$$

- 定义原始问题的解为

$$p^* = \min_{w} \theta_{\mathcal{P}}(w)$$

拉格朗日对偶问题

对偶问题

- 略不相同的问题

$$\theta_{\mathcal{D}}(\alpha,\beta)=\min_{w}\mathcal{L}(w,\alpha,\beta)$$

- 定义对偶优化问题

$$\max_{\alpha,\beta:\alpha_i\geq 0}\theta_{\mathcal{D}}(\alpha,\beta)=\max_{\alpha,\beta:\alpha_i\geq 0}\min_{w}\mathcal{L}(w,\alpha,\beta)$$

- 交换了原始问题中的 min 和 max

$$\min_{w}\theta_{\mathcal{P}}(w)=\min_{w}\max_{\alpha,\beta:\alpha_i\geq 0}\mathcal{L}(w,\alpha,\beta)$$

- 定义对偶问题的解为

$$d^*=\max_{\alpha,\beta:\alpha_i\geq 0}\min_{w}\mathcal{L}(w,\alpha,\beta)$$

拉格朗日对偶问题

问题对比

- d^*与p^*的大小关系

$$d^* = \max_{\alpha,\beta:\alpha_i \geq 0} \min_{w} \mathcal{L}(w,\alpha,\beta) \leq \min_{w} \max_{\alpha,\beta:\alpha_i \geq 0} \mathcal{L}(w,\alpha,\beta) = p^*$$

- 证明

$$\min_{w'} \mathcal{L}(w',\alpha,\beta) \leq \mathcal{L}(w,\alpha,\beta), \qquad \forall w,\alpha \geq 0,\beta$$

$$\Rightarrow \max_{\alpha,\beta:\alpha_i \geq 0} \min_{w'} \mathcal{L}(w',\alpha,\beta) \leq \max_{\alpha,\beta:\alpha_i \geq 0} \mathcal{L}(w,\alpha,\beta), \qquad \forall w$$

$$\Rightarrow \max_{\alpha,\beta:\alpha_i \geq 0} \min_{w'} \mathcal{L}(w',\alpha,\beta) \leq \min_{w} \max_{\alpha,\beta:\alpha_i \geq 0} \mathcal{L}(w,\alpha,\beta)$$

□

- 满足一定条件，可得 $d^* = p^*$

拉格朗日对偶问题

KKT条件

- 假设f以及g_i是凸函数，并且h_i为仿射函数，且g_i严格满足可行域
- 必然存在 (w^*, α^*, β^*)，满足
  - w^*是原始问题的解
  - α^*, β^*是对偶问题的解
  - 两个问题的解数值相等 $p^* = d^* = \mathcal{L}(w^*, \alpha^*, \beta^*)$
- 同时，(w^*, α^*, β^*) 满足KKT条件

拉格朗日对偶问题

KKT条件

- (w^*, α^*, β^*) 满足KKT条件
  - $\frac{\partial}{\partial w_i}\mathcal{L}(w^*, \alpha^*, \beta^*) = 0, i = 1, \dots, n$
  - $\frac{\partial}{\partial \beta_i}\mathcal{L}(w^*, \alpha^*, \beta^*) = 0, i = 1, \dots, l$
  - $\alpha_i^* g_i(w^*) = 0, i = 1, \dots, k$
  - $g_i(w^*) \leq 0, i = 1, \dots, k$
  - $\alpha^* \geq 0, i = 1, \dots, k$

KKT对偶互补条件

- 如果存在 (w^*, α^*, β^*)满足KKT条件，则这组参数同时也是原始问题以及对偶问题的解

Boyd, Stephen, and Lieven Vandenberghe. Convex optimization. Cambridge university press, 2004.
知乎KKT解释：https://zhuanlan.zhihu.com/p/26514613

02
支持向量机优化求解

REVIEW：支持向量机优化目标

目标函数

- 寻找一个使最小几何间隔达到最大值的分割超平面

$$\max_{\gamma,\omega,b} \quad \gamma$$

$$\text{s.t.} \quad y^{(i)}\left(w^T x^{(i)} + b\right) \geq \gamma, \quad i = 1, \dots, m$$

$$\|\omega\| = 1 \qquad \text{(非凸约束)}$$

$$\max_{\hat{\gamma},w,b} \quad \frac{\hat{\gamma}}{\|w\|} \qquad \text{(非凸目标函数)}$$

$$\text{s.t.} \quad y^{(i)}\left(w^T x^{(i)} + b\right) \geq \hat{\gamma}$$

$$i = 1, \dots, m$$

$$\text{set } \hat{\gamma} = 1$$

$$\max_{w,b} \quad \frac{1}{\|w\|}$$

$$\text{s.t.} \quad y^{(i)}\left(w^T x^{(i)} + b\right) \geq 1, \; i = 1, \dots, m$$

$$\min_{w,b} \quad \frac{1}{2}\|w\|^2$$

$$\text{s.t.} \quad y^{(i)}\left(w^T x^{(i)} + b\right) \geq 1,$$

$$i = 1, \dots, m$$

支持向量机优化求解

目标函数

- 支持向量机的目标函数：寻找最优间隔分类器

$$\min_{w,b} \ \frac{1}{2}\|w\|^2$$

$$\text{s.t.} \quad y^{(i)}\left(w^T x^{(i)} + b\right) \geq 1, \qquad i = 1, \dots, m$$

  - 重写约束条件

$$g_i(w) = -y^{(i)}\left(w^T x^{(i)} + b\right) + 1 \leq 0$$

  - 对应标准优化形式

$$\min_{w} \ f(w)$$

$$s.t. \ \ g_i(w) \leq 0, \qquad i = 1, \dots, k$$

$$h_i(w) = 0, \qquad i = 1, \dots, l$$

REVIEW: 拉格朗日对偶问题

原始问题

- 凸优化问题

$$\begin{aligned} \min_{w} \quad & f(w) \\ s.t. \quad & g_i(w) \le 0, \qquad i = 1, \dots, k \\ & h_i(w) = 0, \qquad i = 1, \dots, l \end{aligned}$$

- 拉格朗日函数

$$\mathcal{L}(w, \alpha, \beta) = f(w) + \sum_{i=1}^{k} \alpha_i \, g_i(w) + \sum_{i=1}^{l} \beta_i \, h_i(w)$$

- 原问题

$$\theta_{\mathcal{P}}(w) = \max_{\alpha, \beta : \alpha_i \ge 0} \mathcal{L}(w, \alpha, \beta)$$

  - 对于不满足约束条件的w，例如$g_i(w) > 0$ 或者$h_i(w) \neq 0$ ，可得 $\theta_{\mathcal{P}}(w) = +\infty$

- 定义原始问题的解为 $p^* = \min_{w} \theta_{\mathcal{P}}(w) = \min_{w} \max_{\alpha, \beta : \alpha_i \ge 0} \mathcal{L}(w, \alpha, \beta)$ ← 不好直接解

- 定义对偶问题的解为 $d^* = \max_{\alpha, \beta : \alpha_i \ge 0} \min_{w} \mathcal{L}(w, \alpha, \beta)$ ← 容易直接解

REVIEW: 拉格朗日对偶问题

- d^*与p^*的大小关系

$$d^* = \max_{\alpha,\beta:\alpha_i \geq 0} \min_{w} \mathcal{L}(w,\alpha,\beta) \leq \min_{w} \max_{\alpha,\beta:\alpha_i \geq 0} \mathcal{L}(w,\alpha,\beta) = p^*$$

- 满足KKT条件， $d^* = p^*$成立，这时解对偶问题就是解原问题

KKT条件

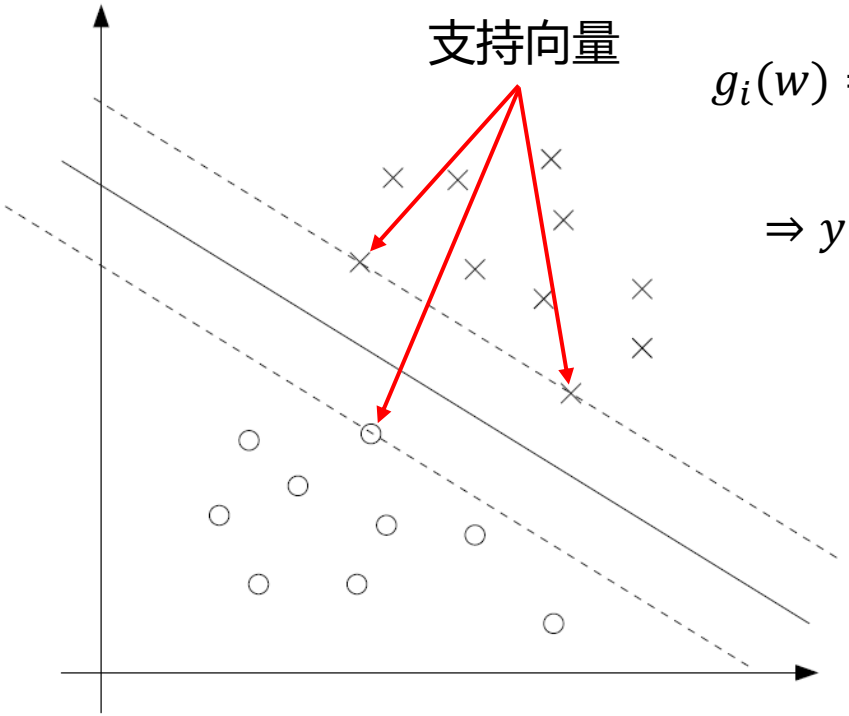
- $\frac{\partial}{\partial w_i}\mathcal{L}(w^*,\alpha^*,\beta^*) = 0, i = 1,\dots,n$
- $\frac{\partial}{\partial \beta_i}\mathcal{L}(w^*,\alpha^*,\beta^*) = 0, i = 1,\dots,l$
- $\alpha_i^* g_i(w^*) = 0, i = 1,\dots,k$ ← KKT对偶互补条件
- $g_i(w^*) \leq 0, i = 1,\dots,k$
- $\alpha^* \geq 0, i = 1,\dots,k$

Boyd, Stephen, and Lieven Vandenberghe. Convex optimization. Cambridge university press, 2004.
知乎KKT解释：https://zhuanlan.zhihu.com/p/26514613

支持向量机优化求解

等式情况

- 对于不等式约束条件，考虑等号成立的情况



$$g_i(w) = -y^{(i)}\left(w^T x^{(i)} + b\right) + 1 = 0$$

$$\Rightarrow y^{(i)}\left(\frac{w^T x^{(i)}}{\|w\|} + \frac{b}{\|w\|}\right) = \frac{1}{\|w\|}$$

几何间隔

当$g_i = 0$时，训练样本的函数间隔恰好等于1

支持向量机优化求解

目标函数

- 支持向量机的目标函数：寻找最优间隔分类器

$$\min_{w,b} \ \frac{1}{2}\|w\|^2$$
$$\text{s.t.} \quad -y^{(i)}\left(w^T x^{(i)} + b\right) + 1 \le 0, \qquad i = 1, \dots, m$$

- 拉格朗日函数

$$\mathcal{L}(w, b, \alpha) = \frac{1}{2}\|w\|^2 - \sum_{i=1}^{m} \alpha_i \left[y^{(i)}\left(w^T x^{(i)} + b\right) - 1\right]$$

  - 支持向量机中不存在β或者等式约束

支持向量机优化求解

问题求解

- 求解拉格朗日函数的极值点

$$\mathcal{L}(w,b,\alpha)=\frac{1}{2}\|w\|^2-\sum_{i=1}^{m}\alpha_i\left[y^{(i)}\left(w^Tx^{(i)}+b\right)-1\right]$$

  - 关于两个参数的偏导数

$$\frac{\partial}{\partial w}\mathcal{L}(w,b,\alpha)=w-\sum_{i=1}^{m}\alpha_i\,y^{(i)}x^{(i)}=0\Rightarrow w=\sum_{i=1}^{m}\alpha_i\,y^{(i)}x^{(i)}$$

$$\frac{\partial}{\partial b}\mathcal{L}(w,b,\alpha)=\sum_{i=1}^{m}\alpha_i\,y^{(i)}=0$$

  - 重写拉格朗日函数

$$\mathcal{L}(w,b,\alpha)=\frac{1}{2}\left\|\sum_{i=1}^{m}\alpha_i\,y^{(i)}x^{(i)}\right\|^2-\sum_{i=1}^{m}\alpha_i\left[y^{(i)}\left(\sum_{j=1}^{m}\alpha_j\,y^{(j)}x^{(j)^T}\cdot x^{(i)}+b\right)-1\right]$$

$$=\sum_{i=1}^{m}\alpha_i-\frac{1}{2}\sum_{i,j=1}^{m}y^{(i)}\,y^{(j)}\alpha_i\alpha_jx^{(i)^T}x^{(j)}-b\sum_{i=1}^{m}\alpha_i\,y^{(i)}=0$$

支持向量机优化求解

求解α^*

- 拉格朗日对偶问题

$$\max_{\alpha \geq 0} \theta_{\mathcal{D}}(\alpha) = \max_{\alpha \geq 0} \min_{w,b} \mathcal{L}(w, b, \alpha)$$

$$\max_{\alpha} \quad W(\alpha) = \sum_{i=1}^{m} \alpha_i - \frac{1}{2} \sum_{i,j=1}^{m} y^{(i)} y^{(j)} \alpha_i \alpha_j x^{(i)^T} x^{(j)}$$

$$\text{s.t.} \quad \alpha_i \geq 0, \qquad i = 1, \ldots, m$$

$$\sum_{i=1}^{m} \alpha_i y^{(i)} = 0$$

- 可以使用序列最小优化（SMO）算法对α^*进行求解

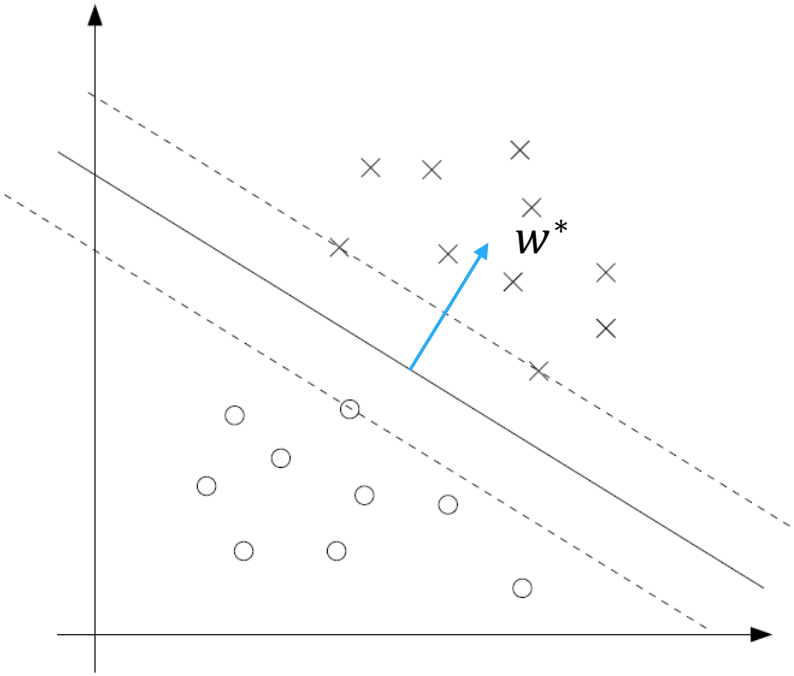
支持向量机优化求解

求解w^*和b^*

- 当求解得到α^*以后，w^*可以直接求解

$$w = \sum_{i=1}^{m} \alpha_i \, y^{(i)} x^{(i)}$$

  - 只有支持向量$\alpha > 0$



- 当求解得到w^*以后，b^*可以直接求解

$$b^* = -\frac{\max_{i:y^{(i)}=-1} w^{*T} x^{(i)} + \min_{i:y^{(i)}=1} w^{*T} x^{(i)}}{2}$$

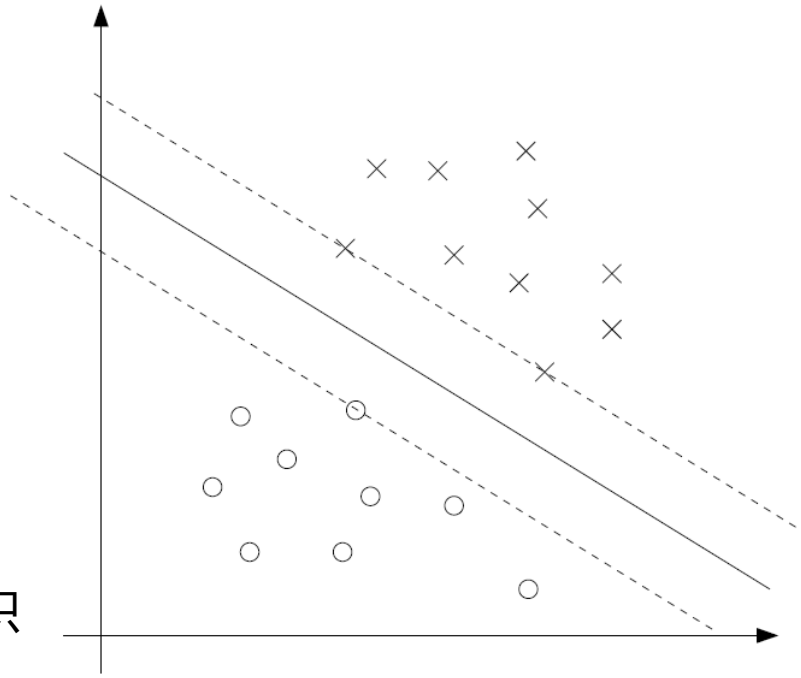
支持向量机优化求解

预测数值

- 当求解得到w^*和b^*以后，每个样例的预测数值（如：函数间隔）为

$$w^{*T}x + b^* = \left(\sum_{i=1}^{m} \alpha_i y^{(i)} x^{(i)}\right)^T x + b^*$$

$$= \sum_{i=1}^{m} \alpha_i y^{(i)} \langle x^{(i)}, x \rangle + b^*$$

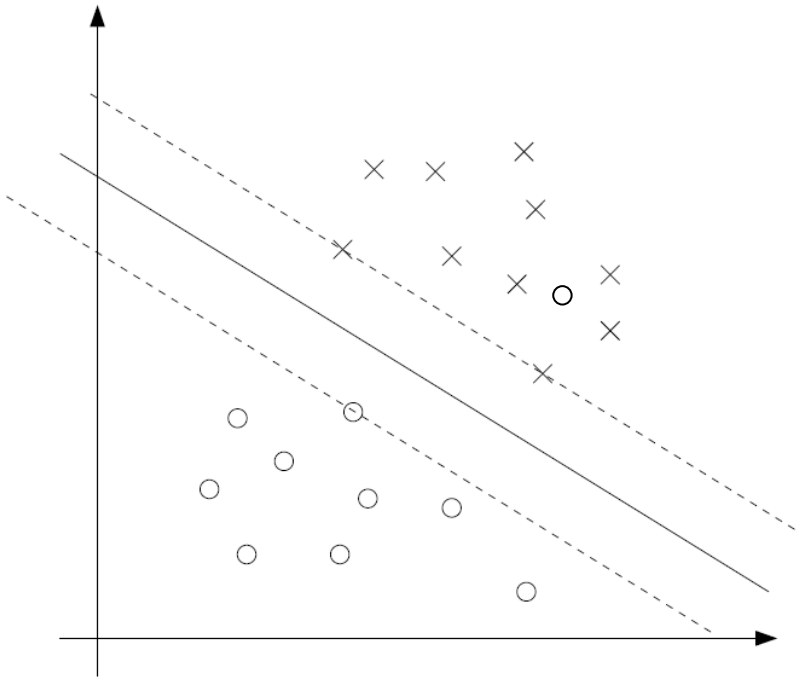


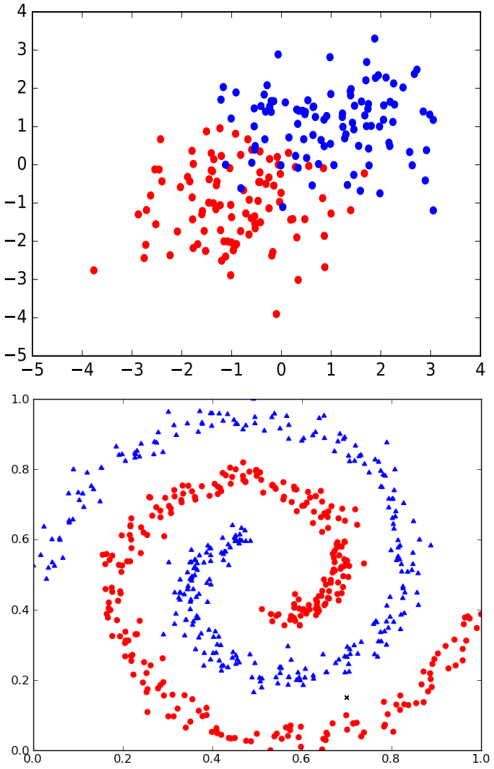
  - 只需要计算样例x与支持向量的内积

支持向量机优化求解

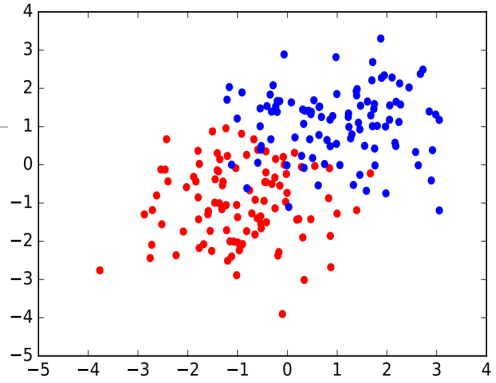
不可分情况

- 在之前支持向量机的推导过程中，数据被假定为线性可分的
- 应用场景中，数据往往是线性不可分的





支持向量机优化求解



处理不可分情况

- 增加松弛变量

$$\min_{w,b,\xi} \frac{1}{2}\|w\|^2 + C\sum_{i=1}^{m}\xi_i$$

$$\text{s.t. } y^{(i)}\left(w^T x^{(i)} + b\right) \geq 1 - \xi_i, \qquad i = 1, \dots, m$$

$$\xi_i \geq 0, \qquad i = 1, \dots, m$$

- 拉格朗日函数

$$\mathcal{L}(w, b, \xi, \alpha, r) = \frac{1}{2}w^T w + C\sum_{i=1}^{m}\xi_i - \sum_{i=1}^{m}\alpha_i\left[y^{(i)}(x^T w + b) - 1 + \xi_i\right] - \sum_{i=1}^{m} r_i\,\xi_i$$

- 对偶问题

$$\max_{\alpha}\ W(\alpha) = \sum_{i=1}^{m}\alpha_i - \frac{1}{2}\sum_{i,j=1}^{m} y^{(i)}\,y^{(j)}\alpha_i\alpha_j {x^{(i)}}^T x^{(j)}$$

$$\text{s.t. } 0 \leq \alpha_i \leq C, \qquad i = 1, \dots, m$$

$$\sum_{i=1}^{m}\alpha_i\,y^{(i)} = 0$$

支持向量机优化求解

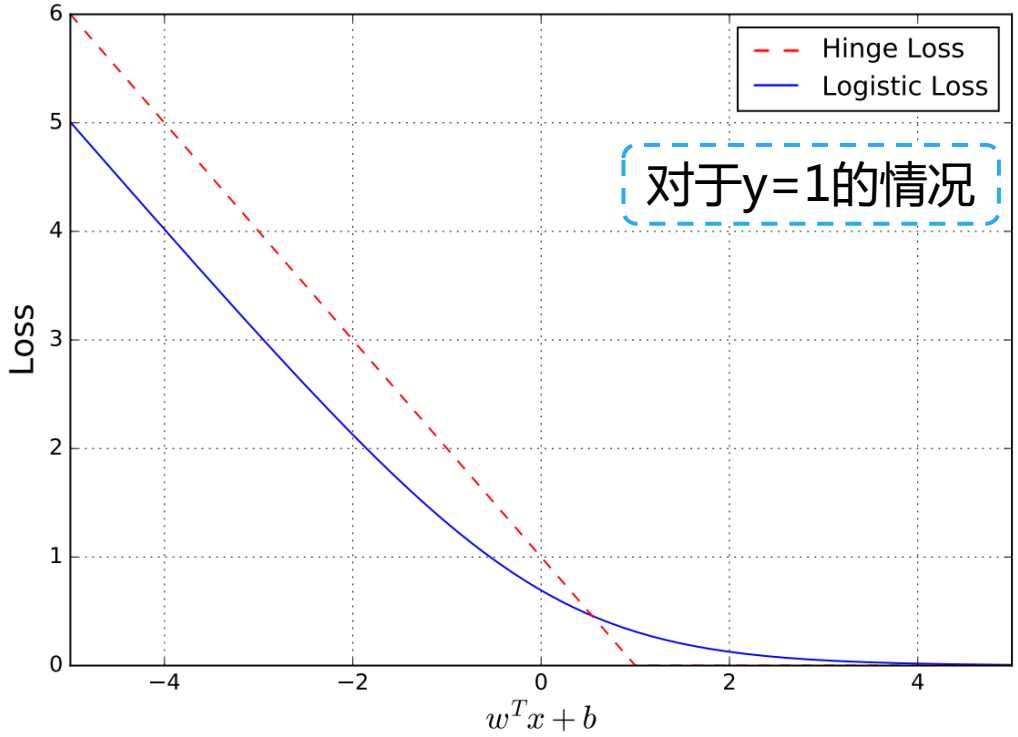
损失函数对比

支持向量机铰链损失（Hinge Loss）

$$\frac{1}{2}\|w\|^2 + C\sum_{i=1}^{m}\max\left(0,1-y_i(w^{\mathrm{T}}x_i+b)\right)$$

逻辑回归的对数损失

$$-y_i\log\sigma(w^Tx_i+b)-(1-y_i)\log\left(1-\sigma(w^Tx_i+b)\right)$$



序列最小优化算法

讲师：张伟楠 – 上海交通大学

序列最小优化算法

坐标上升法

- 对于优化问题

$$\max_{\alpha} \ W(\alpha_1, \alpha_2, \dots, \alpha_m)$$

- 坐标上升法

循环直到收敛：{

对于$i = 1, \dots, m${

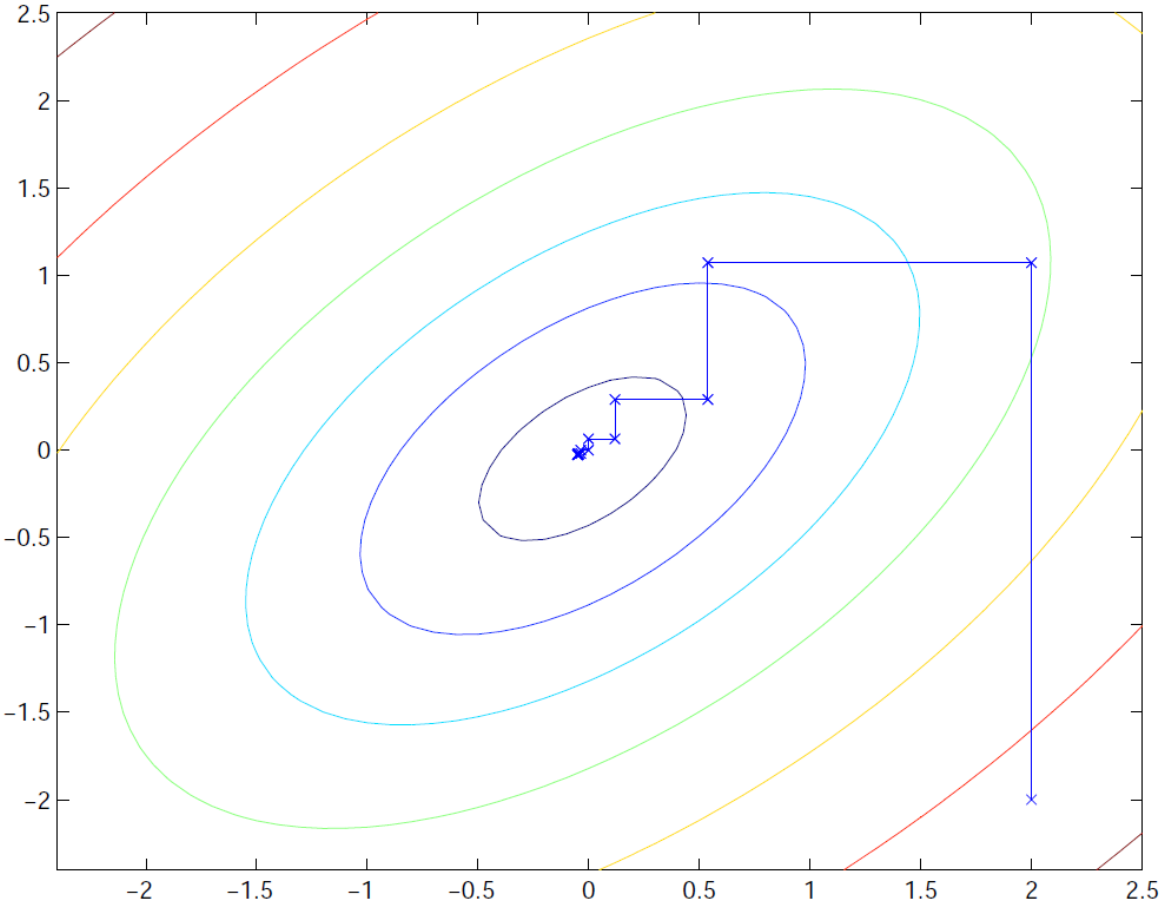
$$\alpha_i := \arg\max_{\hat{\alpha}_i} W(\alpha_1, \dots, \alpha_{i-1}, \hat{\alpha}_i, \alpha_{i+1}, \dots, \alpha_m)$$

}

}

序列最小优化算法

坐标上升法



二维坐标上升法样例

序列最小优化算法

序列最小优化（SMO）算法

- 支持向量机的优化问题

$$\max_{\alpha} \; W(\alpha) = \sum_{i=1}^{m} \alpha_i - \frac{1}{2} \sum_{i,j=1}^{m} y^{(i)} y^{(j)} \alpha_i \alpha_j x^{(i)^T} x^{(j)}$$

$$\text{s.t.} \quad 0 \le \alpha_i \le C, \qquad i = 1, \dots, m$$

$$\sum_{i=1}^{m} \alpha_i y^{(i)} = 0$$

- 无法直接使用坐标上升法

$$\sum_{i=1}^{m} \alpha_i y^{(i)} = 0 \;\Rightarrow\; \alpha_i y^{(i)} = -\sum_{j \neq i} \alpha_j y^{(j)}$$

序列最小优化算法

序列最小优化（SMO）算法

- 每次优化两个变量

  循环直到收敛：{

  1. 选取一组变量α_i和α_j进行更新
  2. 以α_i和α_j为变量，对$W(\alpha)$进行再次优化

  }

- 收敛判别：当$W(\alpha)$的变化小于一个预设值，如：0.01

- 序列最小优化算法核心优势：更新变量α_i和α_j（步骤2）十分高效

序列最小优化算法

序列最小优化（SMO）算法

$$\max_{\alpha} W(\alpha) = \sum_{i=1}^{m} \alpha_i - \frac{1}{2} \sum_{i,j=1}^{m} y^{(i)} y^{(j)} \alpha_i \alpha_j x^{(i)^T} x^{(j)}$$

支持向量机的优化问题

$$\text{s.t.} \quad 0 \le \alpha_i \le C, \qquad i = 1, \ldots, m$$

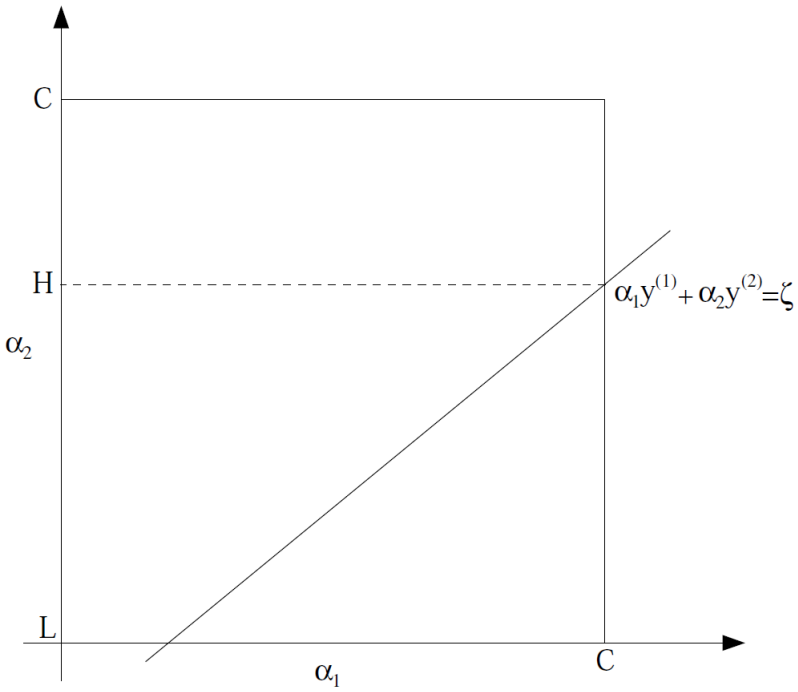
$$\sum_{i=1}^{m} \alpha_i y^{(i)} = 0$$

- 不失一般性，固定$\alpha_3, \ldots, \alpha_m$，以$\alpha_1$和$\alpha_2$为变量，对$W(\alpha)$进行再次优化

$$\alpha_1 y^{(1)} + \alpha_2 y^{(2)} = -\sum_{i=3}^{m} \alpha_i y^{(i)} = \zeta$$

$$\Rightarrow \alpha_2 = -\frac{y^{(1)}}{y^{(2)}} \alpha_1 + \frac{\zeta}{y^{(2)}}$$

$$\alpha_1 = \left(\zeta - \alpha_2 y^{(2)}\right) y^{(1)}$$



序列最小优化算法

序列最小优化（SMO）算法

- 由$\alpha_1 = \left(\zeta - \alpha_2 y^{(2)}\right) y^{(1)}$，优化目标函数可以重写为

$$W(\alpha_1, \alpha_2, \ldots, \alpha_m) = W\left(\left(\zeta - \alpha_2 y^{(2)}\right) y^{(1)}, \alpha_2, \ldots, \alpha_m\right)$$

- 原始的优化问题

$$\max_{\alpha} \; W(\alpha) = \sum_{i=1}^{m} \alpha_i - \frac{1}{2} \sum_{i,j=1}^{m} y^{(i)} y^{(j)} \alpha_i \alpha_j {x^{(i)}}^T x^{(j)}$$

$$\text{s.t.} \quad 0 \le \alpha_i \le C, \qquad i = 1, \ldots, m$$

$$\sum_{i=1}^{m} \alpha_i y^{(i)} = 0$$

  - 转化为以α_2为变量的二次优化问题

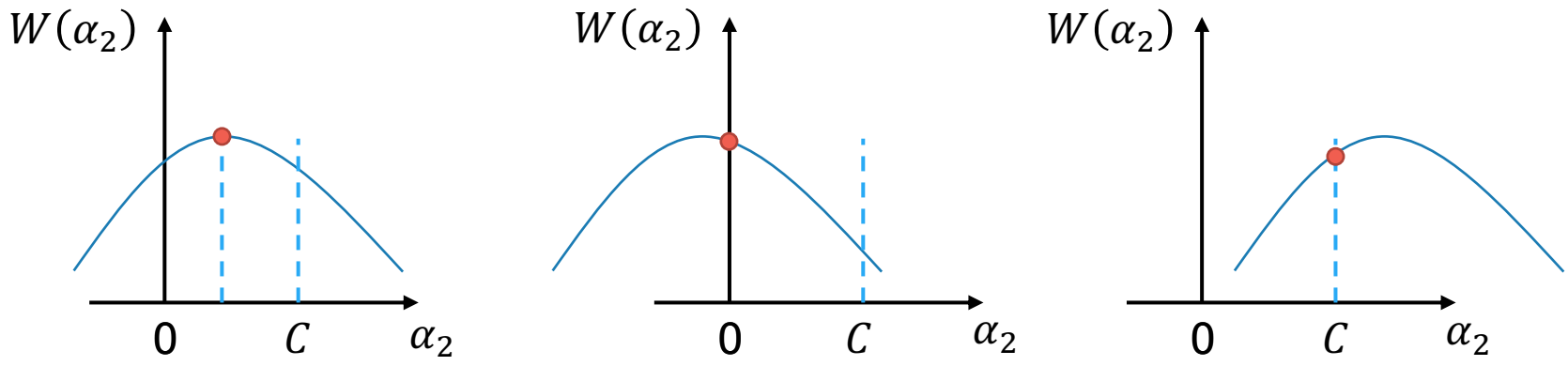
$$\max_{\alpha_2} \; W(\alpha_2) = a\alpha_2^2 + b\alpha_2 + c$$

$$\text{s.t.} \quad 0 \le \alpha_2 \le C$$

序列最小优化算法

序列最小优化（SMO）算法

- 二次函数的优化十分高效



$$\max_{\alpha_2} \ W(\alpha_2) = a\alpha_2^2 + b\alpha_2 + c$$

$$\text{s.t.} \ \ 0 \le \alpha_2 \le C$$

支持向量机核方法

讲师：张伟楠 – 上海交通大学

目录

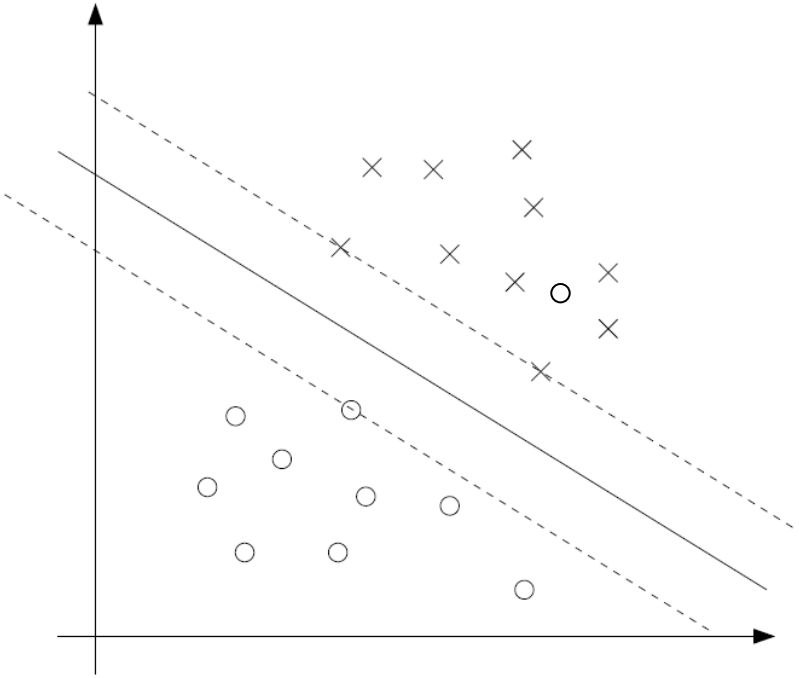
Contents

01
支持向量机核方法

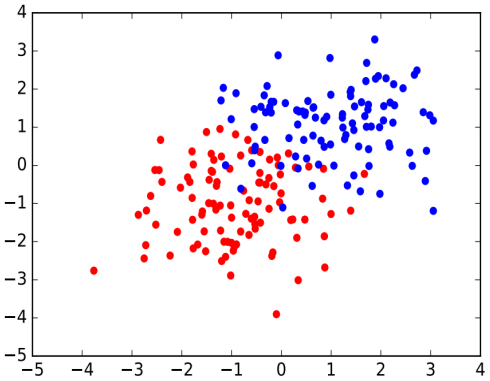
支持向量机核方法

不可分情况

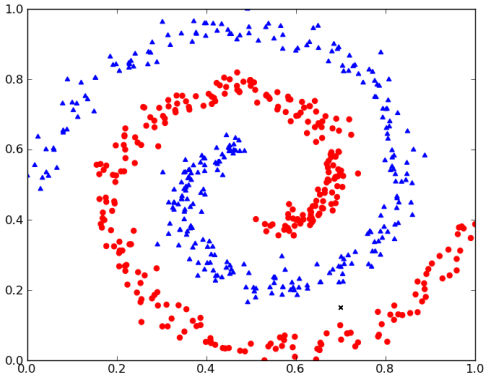
- 应用场景中，数据往往是线性不可分的



线性可分情况



通过松弛变量可解



无法通过松弛变量求解

支持向量机核方法

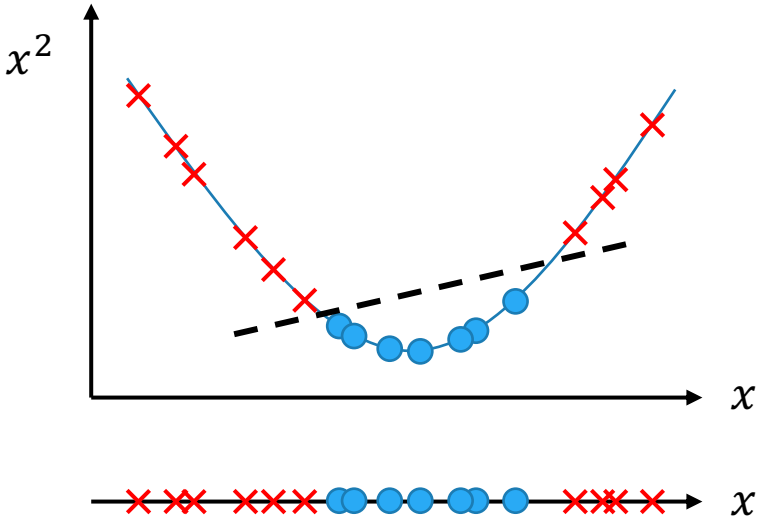
不可分情况

- 应用场景中，数据往往是线性不可分的
- 解决方案：将特征向量映射到高维空间中

$$\phi(x)$$

- 一个例子

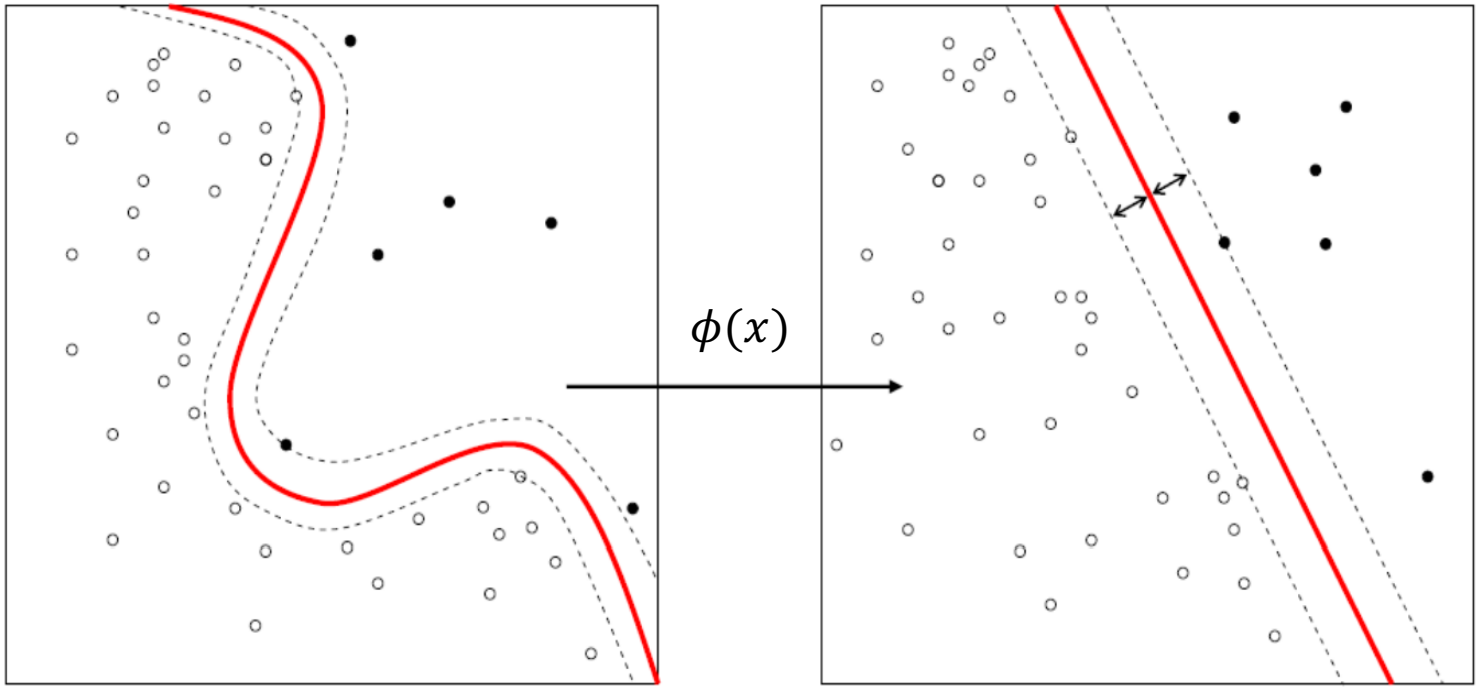
$$\phi(x) = (x, x^2)$$



支持向量机核方法

不可分情况

- 更广义地，将特征向量映射到不同空间中



支持向量机核方法

特征映射函数

- 基础的支持向量机只着眼于内积计算

$$W(\alpha) = \sum_{i=1}^{m} \alpha_i - \frac{1}{2} \sum_{i,j=1}^{m} y^{(i)} y^{(j)} \alpha_i \alpha_j x^{(i)^T} x^{(j)}$$

- 定义特征映射函数$\phi(x)$

$$W(\alpha) = \sum_{i=1}^{m} \alpha_i - \frac{1}{2} \sum_{i,j=1}^{m} y^{(i)} y^{(j)} \alpha_i \alpha_j K(x^{(i)}, x^{(j)})$$

- 核函数

$$K\left(x^{(i)}, x^{(j)}\right) = \phi\left(x^{(i)}\right)^T \phi(x^{(j)})$$

支持向量机核方法

核函数

- 对于特征映射函数

$$\phi(x) = \begin{bmatrix} x \\ x^2 \\ x^3 \end{bmatrix}$$

- 其对应核函数为

$$K\left(x^{(i)}, x^{(j)}\right) = \phi\left(x^{(i)}\right)^T \phi\left(x^{(j)}\right)$$
$$= x^{(i)}x^{(j)} + x^{(i)^2}x^{(j)^2} + x^{(i)^3}x^{(j)^3}$$

核技巧（Kernel Trick）

- 在多数情况下，可以直接定义$K\left(x^{(i)}, x^{(j)}\right)$，从而不需要显式定义$\phi\left(x^{(i)}\right)$
  - 例如，假定 $x^{(i)}, x^{(j)} \in \mathbb{R}^n$，$K\left(x^{(i)}, x^{(j)}\right) = \left(x^{(i)^T} x^{(j)}\right)^2$

支持向量机核方法

训练和预测

- 给定核函数，α可以通过序列最小优化算法(SMO)求得

$$W(\alpha) = \sum_{i=1}^{m} \alpha_i - \frac{1}{2} \sum_{i,j=1}^{m} y^{(i)} y^{(j)} \alpha_i \alpha_j K(x^{(i)}, x^{(j)})$$

- 当求解得到α 以后，w^*和b^*可以进行求解

$$w^* = \sum_{i=1}^{m} \alpha_i \, y^{(i)} \phi\left(x^{(i)}\right)$$

w^*不需要被求解

$$b^* = -\frac{\max_{i:y^{(i)}=-1} w^{*T} \phi\left(x^{(i)}\right) + \min_{i:y^{(i)}=1} w^{*T} \phi\left(x^{(i)}\right)}{2}$$

$$= -\frac{\max_{i:y^{(i)}=-1} \sum_{i=1}^{m} \alpha_i \, y^{(i)} K\left(x^{(i)}, x^{(j)}\right) + \min_{i:y^{(i)}=1} \sum_{i=1}^{m} \alpha_i \, y^{(i)} K\left(x^{(i)}, x^{(j)}\right)}{2}$$

支持向量机核方法

训练和预测

- 当求解得到w^*和b^*以后，每个样例的预测数值（如：函数间隔）为

$$w^{*T}x + b^* = \left(\sum_{i=1}^{m} \alpha_i y^{(i)} \phi\left(x^{(i)}\right)\right)^T \phi(x) + b^*$$

$$= \sum_{i=1}^{m} \alpha_i y^{(i)} K\left(x^{(i)}, x\right) + b^*$$

- 假如预测数值为正，样例被预测为正例，反之亦然

注意：整个过程没有真正引入特征映射函数$\phi(\cdot)$的计算

支持向量机核方法

根据核函数反算映射函数

- 假定 $x^{(i)}, x^{(j)} \in \mathbb{R}^n$

$$K\left(x^{(i)}, x^{(j)}\right) = \left(x^{(i)^T} x^{(j)}\right)^2$$

$$= \left(\sum_{k=1}^{n} x_k^{(i)} x_k^{(j)}\right)\left(\sum_{l=1}^{n} x_l^{(i)} x_l^{(j)}\right)$$

$$= \sum_{k=1}^{n} \sum_{l=1}^{n} x_k^{(i)} x_k^{(j)} x_l^{(i)} x_l^{(j)} \quad \Rightarrow \quad \phi(x) = \begin{bmatrix} x_1x_1 \\ x_1x_2 \\ x_1x_3 \\ x_2x_1 \\ x_2x_2 \\ x_2x_3 \\ x_3x_1 \\ x_3x_2 \\ x_3x_3 \end{bmatrix}$$

$$= \sum_{k,l=1}^{n} \left(x_k^{(i)} x_l^{(i)}\right)\left(x_k^{(j)} x_l^{(j)}\right)$$

注意：计算$\phi(x)$需要$O(n^2)$的时间复杂度

然而计算$K\left(x^{(i)}, x^{(j)}\right)$仅仅需要$O(n)$的时间复杂度

支持向量机核方法

相似性度量

- 直观上对于x和z两个样例，如果$\phi(x)$和$\phi(z)$足够接近，我们希望

$$K(x,z) = \phi(x)^T\phi(z)$$

更大，反之亦然

- 高斯核函数（十分常用）

$$K(x,z) = \exp\left(-\frac{\|x-z\|^2}{2\sigma^2}\right)$$

  - 也被称为径向基函数（RBF）核
  - 那么，该核函数的特征映射函数是什么？

知乎回答：https://www.zhihu.com/question/35602879

支持向量机核方法

核矩阵

- 对于有限样例集合$\{x^{(1)},\dots,x^{(m)}\}$，其对应的核矩阵$K$定义为$\{K_{i,j}\}_{i,j=1,\dots,m}$
- 核矩阵K必定是对称矩阵，由于

$$K_{i,j}=K\left(x^{(i)},x^{(j)}\right)=\phi\left(x^{(i)}\right)^T\phi\left(x^{(j)}\right)=\phi\left(x^{(j)}\right)^T\phi\left(x^{(i)}\right)=K\left(x^{(j)},x^{(i)}\right)=K_{j,i}$$

  - 定义$\phi_k(x)$为向量$\phi(x)$的第k维坐标值，那么对于任何向量$z\in\mathbb{R}^m$

$$\begin{aligned}z^TKz&=\sum_i\sum_j z_i\,K_{ij}z_j\\&=\sum_i\sum_j z_i\,\phi\left(x^{(i)}\right)^T\phi\left(x^{(j)}\right)z_j=\sum_i\sum_j z_i\sum_k\phi_k\left(x^{(i)}\right)\phi_k\left(x^{(j)}\right)z_j\\&=\sum_k\sum_i\sum_j z_i\,\phi_k\left(x^{(i)}\right)\phi_k\left(x^{(j)}\right)z_j=\sum_k\left(\sum_i z_i\,\phi_k\left(x^{(i)}\right)\right)^2\geq 0\end{aligned}$$

- 因此，K为半正定矩阵

支持向量机核方法

有效核

James Mercer
英国数学家
1883-1932

- Mercer定理
  - 给定$K:\mathbb{R}^n\times\mathbb{R}^n \mapsto \mathbb{R}$，如果$K$为一个有效（Mercer）核，对于任意集合$\{x^{(1)},\ldots,x^{(m)}\}, m<\infty$，其对应的核矩阵为对称半正定矩阵
- 有效核举例
  - RBF核 $K(x,z)=\exp\left(-\frac{\|x-z\|^2}{2\sigma^2}\right)$
  - 多项式核 $K(x,z)=(x^Tz)^d$
  - 余弦相似度核 $K(x,z)=\frac{x^Tz}{\|x\|\cdot\|z\|}$

支持向量机核方法

Sigmoid核

$$K(x, z) = \tanh(\alpha x^T z + c)$$

$$\tanh(b) = \frac{1 - e^{-2b}}{1 + \mathrm{e}^{-2b}}$$

- 神经网络使用Sigmoid函数作为激活函数
- 使用Sigmoid核的支持向量机相似于一个二层的感知机
  - 但二层感知机还可以学习

Lin, Hsuan-Tien, and Chih-Jen Lin. "A study on sigmoid kernels for SVM and the training of non-PSD kernels by SMO-type methods." 2003.

02

广义线性模型（复习）

广义线性模型

线性回归

$$\mathbf{X} = \begin{bmatrix} \mathbf{x}^{(1)} \\ \mathbf{x}^{(2)} \\ \vdots \\ \mathbf{x}^{(n)} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} x_1^{(1)} & x_2^{(1)} & x_3^{(1)} & \cdots & x_d^{(1)} \\ x_1^{(2)} & x_2^{(2)} & x_3^{(2)} & \cdots & x_d^{(2)} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ x_1^{(n)} & x_2^{(n)} & x_3^{(n)} & \cdots & x_d^{(n)} \end{bmatrix} \quad \boldsymbol{\theta} = \begin{bmatrix} \theta_1 \\ \theta_2 \\ \vdots \\ \theta_d \end{bmatrix} \mathbf{y} = \begin{bmatrix} y_1 \\ y_2 \\ \vdots \\ y_n \end{bmatrix}$$

- 预测

$$\hat{\mathbf{y}} = \mathbf{X}\boldsymbol{\theta} = \begin{bmatrix} \mathbf{x}^{(1)}\boldsymbol{\theta} \\ \mathbf{x}^{(2)}\boldsymbol{\theta} \\ \vdots \\ \mathbf{x}^{(n)}\boldsymbol{\theta} \end{bmatrix}$$

- 目标函数

$$J(\boldsymbol{\theta}) = \frac{1}{2}(\mathbf{y} - \hat{\mathbf{y}})^T(\mathbf{y} - \hat{\mathbf{y}}) = \frac{1}{2}(\mathbf{y} - \mathbf{X}\boldsymbol{\theta})^T(\mathbf{y} - \mathbf{X}\boldsymbol{\theta})$$

广义线性模型

线性回归矩阵形式

- 目标函数

$$J(\boldsymbol{\theta}) = \frac{1}{2}(\mathbf{y} - \mathbf{X}\boldsymbol{\theta})^T(\mathbf{y} - \mathbf{X}\boldsymbol{\theta}) \qquad \min_{\boldsymbol{\theta}} J(\boldsymbol{\theta})$$

- 梯度

$$\frac{\partial J(\boldsymbol{\theta})}{\partial \boldsymbol{\theta}} = -\mathbf{X}^{\top}(\mathbf{y} - \mathbf{X}\boldsymbol{\theta})$$

- 求解

$$\frac{\partial J(\boldsymbol{\theta})}{\partial \boldsymbol{\theta}} = 0 \rightarrow -\mathbf{X}^{\top}(\mathbf{y} - \mathbf{X}\boldsymbol{\theta}) = \mathbf{0}$$

$$\rightarrow \mathbf{X}^{\top}\mathbf{y} = \mathbf{X}^{\top}\mathbf{X}\boldsymbol{\theta}$$

$$\rightarrow \widehat{\boldsymbol{\theta}} = (\mathbf{X}^{\top}\mathbf{X})^{-1}\mathbf{X}^{\top}\mathbf{y}$$

广义线性模型

广义线性模型

- 映射关系

$$y = f(\theta^T \phi(x))$$

- 特征映射函数$\phi(x)$: $\mathbb{R}^d \mapsto \mathbb{R}^h$
- 映射后的特征矩阵$\mathbf{\Phi}_{n\times h}$

$$\mathbf{\Phi} = \begin{bmatrix} \phi(x^{(1)}) \\ \phi(x^{(2)}) \\ \vdots \\ \phi(x^{(i)}) \\ \vdots \\ \phi(x^{(n)}) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \phi_1(x^{(1)}) & \phi_2(x^{(1)}) & \cdots & \phi_h(x^{(1)}) \\ \phi_1(x^{(2)}) & \phi_2(x^{(2)}) & \cdots & \phi_h(x^{(2)}) \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \phi_1(x^{(i)}) & \phi_2(x^{(i)}) & \cdots & \phi_h(x^{(i)}) \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \phi_1(x^{(n)}) & \phi_2(x^{(n)}) & \cdots & \phi_h(x^{(n)}) \end{bmatrix}$$

广义线性模型

核线性回归矩阵形式

- 目标函数

$$J(\boldsymbol{\theta}) = \frac{1}{2}(\mathbf{y} - \boldsymbol{\Phi}\ \boldsymbol{\theta})^T(\mathbf{y} - \boldsymbol{\Phi}\ \boldsymbol{\theta}) \qquad \min_{\boldsymbol{\theta}} J(\boldsymbol{\theta})$$

- 梯度

$$\frac{\partial J(\boldsymbol{\theta})}{\partial \boldsymbol{\theta}} = -\boldsymbol{\Phi}^T(\mathbf{y} - \boldsymbol{\Phi}\boldsymbol{\theta})$$

- 求解

$$\frac{\partial J(\boldsymbol{\theta})}{\partial \boldsymbol{\theta}} = 0 \rightarrow -\boldsymbol{\Phi}^T(\mathbf{y} - \boldsymbol{\Phi}\boldsymbol{\theta}) = \mathbf{0}$$

$$\rightarrow\ \boldsymbol{\Phi}^T\mathbf{y} = \boldsymbol{\Phi}^T\boldsymbol{\Phi}\boldsymbol{\theta}$$

$$\rightarrow \widehat{\boldsymbol{\theta}} = (\boldsymbol{\Phi}^T\boldsymbol{\Phi})^{-1}\boldsymbol{\Phi}^T\mathbf{y}$$

广义线性模型

核线性回归矩阵形式

- 通过矩阵运算的代数技巧

$$(\mathbf{P}^{-1}+\mathbf{B}^T\mathbf{R}^{-1}\mathbf{B})^{-1}\mathbf{B}^T\mathbf{R}^{-1}=\mathbf{P}\mathbf{B}^T(\mathbf{B}\mathbf{P}\mathbf{B}^T+\mathbf{R})^{-1}$$

- 使用L2范数作为正则项，最优参数为

$$\boldsymbol{P}=\frac{1}{\lambda}\boldsymbol{I}_{h\times h}\quad \boldsymbol{R}=\boldsymbol{I}_{n\times n}\quad \boldsymbol{B}=\boldsymbol{\Phi}_{n\times h}$$

$$\begin{aligned}\widehat{\boldsymbol{\theta}} &= (\boldsymbol{\Phi}^T\boldsymbol{\Phi}+\lambda\mathbf{I}_h)^{-1}\boldsymbol{\Phi}^T\mathbf{y}\\ &= \boldsymbol{\Phi}^T(\boldsymbol{\Phi}\boldsymbol{\Phi}^T+\lambda\mathbf{I}_n)^{-1}\mathbf{y}\end{aligned}$$

- 在预测时，我们不需要真正求出$\boldsymbol{\Phi}$

$$\begin{aligned}\hat{\mathbf{y}}=\boldsymbol{\Phi}\widehat{\boldsymbol{\theta}} &= \boldsymbol{\Phi}\boldsymbol{\Phi}^T(\boldsymbol{\Phi}\boldsymbol{\Phi}^T+\lambda\mathbf{I}_n)^{-1}\mathbf{y}\\ &= \mathbf{K}(\mathbf{K}+\lambda\mathbf{I}_n)^{-1}\mathbf{y}\end{aligned}$$

  - 其中，核矩阵为$\mathbf{K}=\{K(\boldsymbol{x}^{(i)},\boldsymbol{x}^{(j)})\}$

总结支持向量机

原始优化问题

$$\min_{w,b} \ \frac{1}{2}\|w\|^2$$

$$\text{s.t.} \quad y^{(i)}\left(w^T x^{(i)} + b\right) \geq 1, \quad i = 1, \ldots, m$$

对偶优化问题

$$\max_{\alpha} \ W(\alpha) = \sum_{i=1}^{m} \alpha_i - \frac{1}{2} \sum_{i,j=1}^{m} y^{(i)} y^{(j)} \alpha_i \alpha_j x^{(i)^T} x^{(j)}$$

$$\text{s.t.} \quad 0 \leq \alpha_i \leq C, \quad i = 1, \ldots, m$$

$$\sum_{i=1}^{m} \alpha_i y^{(i)} = 0$$

- 原始问题本身求解很方便
- 带线性不等式约束的凸优化问题
- 方便用标准求解器求解
- 参数化方法

- 对偶问题通过SMO算法建模成α的二次函数，快速求解
- 更方便直接用代码手写完成
- 直接导出了核技巧
- 非参数化方法

总结支持向量机

- 支持向量机是一种线性模型，优化目标是最大化决策边界距离数据点的最小距离，由此获得更好的分类鲁棒性
- 支持向量机的原问题可转化为一个二次函数优化问题，最终由序列最小优化算法来高效求解
- 当对原始特征数据做了映射变换，支持向量机可以被看成一个泛线性模型，而使用核方法可以让研究者仅仅关注定义两个数据点之间的相似性
- 支持向量机和逻辑回归的本质区别是什么？
- 基于统计的机器学习的本质思维方式：相似的数据拥有相同的标签。那如何衡量数据间的相似性？

THANK YOU