

无偏置 ν -SVM 分类优化问题研究

丁晓剑* 赵银亮

(西安交通大学电子与信息工程学院 西安 710049)

摘要: 在高维空间中, 分类超平面倾向于通过原点, 即不需要偏置(b)。为了研究在 ν -SVM 分类问题中是否需要 b, 该文提出了无(b)的 ν -SVM 的对偶优化问题并给出了其优化问题求解方法。该方法通过有效集策略将对偶优化问题转化为等式约束子优化问题, 然后通过拉格朗日乘法将子优化问题转化为线性方程组来求解。实验表明偏置(b)的存在会降低 ν -SVM 的泛化性能, ν -SVM 只能得到无(b) ν -SVM 的次优解。

关键词: ν -支持向量机; 偏置; 泛化性能; 有效集

中图分类号: TP181

文献标识码: A

文章编号: 1009-5896(2011)08-1998-05

DOI: 10.3724/SP.J.1146.2010.01286

Study on ν -SVM for Classification Optimization Problem without Bias

Ding Xiao-jian Zhao Yin-liang

(School of Electrical and Information Engineering, Xi'an Jiaotong University, Xi'an 710049, China)

Abstract: In the high-dimensional space, the classification hyperplane tends to pass through the origin and bias (b) is not need. To study whether ν -SVM for classification needs (b), dual optimization formulation of ν -SVM without (b) is proposed and the corresponding method of solving the optimization formulation is presented. The dual optimization formulation is transformed into equality constraint sub-optimization formulation by the active set strategy in this method, then the sub-optimization formulation is transformed into the linear equation by lagrange multiplier method. The experimental results show that the existence of (b) would reduce the generalization ability of ν -SVM and ν -SVM can only obtain the sub-optimal solution of ν -SVM without b.

Key words: ν -Support Vector Machine (SVM); Bias; Generalization ability; Active set

1 引言

C -SVM(Support Vector Machine)起源于文献[1]提出的支持向量网络(support vector networks)。在一般的神经网络结构中, 只需调节输出向量和隐藏层连接的权重向量 \mathbf{w} 就可以较好地拟合训练样本, 而文献[1]指出需要调节向量 \mathbf{w} 和(b)才能得到最优分类超平面, 但在文中并没有提到(b)存在的意义。Poggio 等人^[2]从核函数的正定理论分析得出如果核函数是正定的(positive definite), 在 SVM 优化问题中是不需要(b)的, 文献[3]指出使用高斯核(gaussian kernel)等常用核函数的 SVM 优化问题不需要(b)。Huang 等人^[4]提出了优化极限学习机(Extreme Learning Machine, ELM)的分类方法, 指出优化极限学习机的模型和 C -SVM 是等价的, 决策函数倾向于通过原点, 即不需要(b)的存在。文献[5]研究了(b)对 C -SVM 分类优化问题泛化性能的影响, 在实验中验证得到无(b) C -SVM 优化问题的泛

化性能更好, 对参数 C 不太敏感, 计算代价更小等一系列性质。虽然 ν -SVM^[6, 7]与 C -SVM 的目标优化问题不同, 约束条件也不同, 但两者得到的最优分类超平面是等价的, 即文献[5]的结论应该适用于 ν -SVM。本文首先给出无(b) ν -SVM 优化问题的描述, 然后给出了利用有效集方法求解无(b) ν -SVM 优化问题的子优化问题求解方法, 在标准数据集上的多个指标的性能分析得到了理想的效果。

2 无(b) ν -SVM 优化问题

给定一个含有 m 个样本的训练样本集 $\{\mathbf{x}_i, y_i\}_{i=1}^m$, 其中输入为 d 维向量 $\mathbf{x}_i \in \mathbf{R}^d$, 输出为 $y_i \in \mathbf{R}$ 。通常训练样本集在输入空间中是线性不可分的, 需要引入映射函数 $\phi(\mathbf{x})$ 将 \mathbf{x}_i 映射到高维空间 $\phi(\mathbf{x}_i)$ 中。训练无(b) ν -SVM 分类问题等价于求解如下优化问题:

$$\left. \begin{aligned} \text{Minimize: } \tau_2(\mathbf{w}, \xi, \rho) &= \frac{1}{2} \|\mathbf{w}\|^2 - \nu\rho + \frac{1}{m} \sum_{i=1}^m \xi_i \\ \text{s.t. } y_i \mathbf{w} \cdot \phi(\mathbf{x}_i) &\geq \rho - \xi_i, \xi_i \geq 0, i=1, \dots, m, \rho \geq 0 \end{aligned} \right\} (1)$$

引入拉格朗日函数:

2010-11-22 收到, 2011-04-18 改回

国家 863 计划项目(2008AA01Z136)资助课题

*通信作者: 丁晓剑 xjdj@stu.xjtu.edu.cn

$$L(\mathbf{w}, \xi, \rho, \alpha, \beta, \delta) = \frac{1}{2} \|\mathbf{w}\|^2 - \nu\rho + \frac{1}{m} \sum_{i=1}^m \xi_i - \sum_{i=1}^m (\alpha_i (y_i \mathbf{w} \cdot \phi(\mathbf{x}_i) - \rho + \xi_i) + \beta_i \xi_i) - \delta\rho \quad (2)$$

其中 $\alpha_i, \beta_i, \delta$ 为非负拉格朗日乘子。

对 L 关于变量 \mathbf{w}, ξ, ρ 求偏导数, 下列条件都满足时得到式(1)的最优解:

$$\partial L / \partial \mathbf{w} = 0 \Rightarrow \mathbf{w} = \sum_{i=1}^m \alpha_i y_i \phi(\mathbf{x}_i) \quad (3)$$

$$\partial L / \partial \xi = 0 \Rightarrow \alpha_i + \beta_i = 1/m \quad (4)$$

$$\partial L / \partial \rho = 0 \Rightarrow \sum_{i=1}^m \alpha_i - \delta = \nu \quad (5)$$

将式(3)和式(4)代入拉格朗日函数 L , 可得无 (b) ν -SVM 的对偶优化问题:

$$\left. \begin{aligned} & \text{Minimize: } \frac{1}{2} \sum_{i,j=1}^m \alpha_i \alpha_j y_i y_j \phi(\mathbf{x}_i) \cdot \phi(\mathbf{x}_j) \\ & \text{s.t. } 0 \leq \alpha_i \leq 1/m, \sum_{i=1}^m \alpha_i \geq \nu \end{aligned} \right\} \quad (6)$$

其中式(6)的不等式约束 $\sum_{i=1}^m \alpha_i \geq \nu$ 同样可以转化为等式约束 $\sum_{i=1}^m \alpha_i = \nu$ 求解。根据式(6), 无 b ν -SVM 决策函数为

$$f(\mathbf{x}) = \sum_{i=1}^m \alpha_i y_i K(\mathbf{x}, \mathbf{x}_i) \quad (7)$$

2.1 Karush-Kuhn-Tucker 条件

为了得到原始优化问题式(1)的最优解, 需要推导出它的完整 Karush-Kuhn-Tucker(KKT)条件:

初始可行性:

$$\xi_i \geq 0, \rho \geq 0, y_i \mathbf{w} \cdot \phi(\mathbf{x}_i) \geq \rho - \xi_i, \forall i \quad (8)$$

对偶可行性:

$$\alpha_i \geq 0, \beta_i \geq 0, \delta \geq 0, \forall i \quad (9)$$

对偶与原问题的补条件:

$$\alpha_i (y_i \mathbf{w} \cdot \phi(\mathbf{x}_i) - \rho + \xi_i) = 0, \beta_i \xi_i = 0, \delta \rho = 0, \forall i \quad (10)$$

由于 $f(\mathbf{x})$ 为无 (b) ν -SVM 的决策函数, 令 f_i 为无 (b) ν -SVM 分类器对样本 \mathbf{x}_i 预测的值, 并有 $f_i = y_i \mathbf{w} \cdot \phi(\mathbf{x}_i)$ 。由最优解条件 $\alpha_i + \beta_i = 1/m$ 和补条件 $\beta_i \xi_i = 0$ 可得

$$(1/m - \alpha_i) \xi_i = 0 \quad (11)$$

如果 $\alpha_i = 0$, 由式(11)可知 $\xi_i = 0$, 由最优解条件 $\sum_{i=1}^m \alpha_i - \delta = \nu$ 和 $\delta \rho = 0$ 可知 $\rho = 0$, 再由式(8)可知 $f_i \geq \rho$, 进而有 $f_i \geq 0$ 。如果 $\alpha_i = 1/m$, 由式(10)可知 $f_i - \rho + \xi_i = 0$, 由最优解条件 $\sum_{i=1}^m \alpha_i - \delta = \nu$ 和补条件 $\delta \rho = 0$ 可知 $\rho = 0$, 又由式(8)可知 $f_i = -\xi_i \leq 0$ 。如果 $0 < \alpha_i < 1/m$, 由补条件式(10)可知

$f_i - \rho + \xi_i = 0$, 由式(11)可知 $\xi_i = 0$, 再由式(8)可知 $f_i = \rho \geq 0$ 。综上, 式(3)的最优解满足下列条件:

$$\left. \begin{aligned} 0 \leq \alpha_i < 1/m & \Leftrightarrow f_i \geq 0 \\ \alpha_i = 1/m & \Leftrightarrow f_i \leq 0 \end{aligned} \right\} \quad (12)$$

3 优化问题求解方法

文献[8]利用有效集算法来求解 C -SVM 优化问题, 该有效集算法将 C -SVM 对偶优化问题分解为一系列子优化问题来求解, 其主要计算代价是每次迭代过程中求解子优化问题, 是一种高效简便的算法。由于无 (b) ν -SVM 的对偶优化问题都与 C -SVM 对偶优化问题不同, 文献[8]中的有效集算法无法直接应用, 在本节将推导无 (b) ν -SVM 子优化问题的求解方法。

在此先定义一些需要用到的向量和集合。定义 3 个集合: $S_0 := \{i \mid \alpha_i = 0\}$, $S_m := \{i \mid \alpha_i = 1/m\}$ 和 $S_{\text{work}} := \{i \mid \alpha_i \in (0, 1/m)\}$, 有 $S_0 \cup S_{\text{work}} \cup S_m = [1 : m]$, 同理可定义向量 α_0 , α_m 和 α_{work} 。

式(8)为无 (b) ν -SVM 的对偶优化问题, 为方便推导求解, 将式(8)写成下面紧凑的形式:

$$\left. \begin{aligned} & \text{Minimize: } \frac{1}{2} \alpha^T \mathbf{H} \alpha \\ & \text{s.t. } 0 \leq \alpha_i \leq 1/m \text{ and } \sum \alpha = \nu, i = 1, \dots, m \end{aligned} \right\} \quad (13)$$

其中 $\mathbf{H} = \mathbf{K} \mathbf{Y} \mathbf{Y}^T \in \mathbf{R}^{N \times N}$, \mathbf{K} 为式(7)中对应的核矩阵, $\alpha = [\alpha_1, \dots, \alpha_N]^T \in \mathbf{R}^N$, $\mathbf{Y} = [y_1, \dots, y_N]^T \in \mathbf{R}^N$ 。

同样由向量 α_0 , α_m 的定义可知 α_0 , α_m 元素的值是固定的, 求解式(13)等价于求解下式:

$$\left. \begin{aligned} & \text{Minimize: } \frac{1}{2} \alpha_{\text{work}}^T \mathbf{H}_{\text{ww}} \alpha_{\text{work}} + \alpha_m^T \mathbf{H}_{\text{wm}} \alpha_{\text{work}} \\ & \text{s.t. } 0 \leq \alpha_i \leq 1/m, \sum \alpha_{\text{work}} = \nu - \sum \alpha_m \end{aligned} \right\} \quad (14)$$

其中 \mathbf{H}_{ww} 和 \mathbf{H}_{wm} 为 \mathbf{H} 的子矩阵, 行和列相应的集合 S_m 和 S_{work} 标识。同理由式(14)是对 α_{work} 求最小值, 由 α_{work} 的定义可知 α_{work} 中分量的值都在区间 $(0, 1/m)$ 中, 即约束 $0 \leq \alpha_i \leq 1/m$ 必然满足, 这样式(14)就变为等式约束优化问题:

$$\left. \begin{aligned} & \text{Minimize: } \frac{1}{2} \delta^T \mathbf{Q} \delta + \mathbf{c}^T \delta \\ & \text{s.t. } \mathbf{A} \delta = t \end{aligned} \right\} \quad (15)$$

其中 $\delta = \alpha_{\text{work}}$, $\mathbf{Q} = \mathbf{H}_{\text{ww}}$, $\mathbf{c} = \mathbf{H}_{\text{wm}} \alpha_m$, $\mathbf{A} = [1, \dots, 1]^T \in \mathbf{R}^n$, n 为 α_{work} 中元素的个数, $t = \nu - \sum \alpha_m$ 。

式(13)可以通过解条件问题的乘子法来求解, 构造拉格朗日函数:

$$L_1(\delta, \lambda) = \frac{1}{2} \delta^T \mathbf{Q} \delta + \mathbf{c}^T \delta + \lambda^T (\mathbf{A} \delta - t), \lambda \in \mathbf{R}^n \quad (16)$$

令 $L_1(\delta, \lambda)$ 对 δ 和 λ 的导数为零, 得到线性方程

组:

$$\begin{bmatrix} \mathbf{Q} & \mathbf{A}^T \\ \mathbf{A} & \mathbf{0} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \boldsymbol{\delta} \\ \boldsymbol{\lambda} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -\mathbf{c} \\ t \end{bmatrix} \quad (17)$$

其中 $\mathbf{0} = [0, \dots, 0] \in \mathbf{R}^n$, $\boldsymbol{\delta}$ 和 $\boldsymbol{\lambda}$ 可通过求解式(17)得到。

现已将无 (b) ν -SVM 子优化问题转化为与 C-SVM 子优化问题相同的形式。有效集算法利用 2 层循环来求解目标优化问题式(13): 外循环判断 $\boldsymbol{\alpha}$ 中边界约束元素是否都满足 KKT 条件式(12), 如果都满足, 算法终止。如果不满足, 则选取违反 KKT 条件的变量进入内循环求解; 而内循环目标是求解子优化问题式(15), 使得最优解 $\boldsymbol{\alpha}_{\text{work}}$ 满足上下界约束。

4 实验与结果分析

为了研究 (b) 对 ν -SVM 分类性能的影响(本文仅讨论两类分类问题), 本文将用有效集算法对 ν -SVM (nu-AS) 和无 (b) ν -SVM (nbnu-AS) 进行多个指标的比较, 算法是在 Pentium 4, 2.53 GHz, CPU, MATLAB 2007 环境下实现, 实验数据集分别来自 UCI 数据库^[9], Statlog 数据库^[10], 所有样本的输入都归一化到[0,1]之间。

4.1 参数设定

对于 nu-AS 算法和 nbnu-AS 算法性能比较使用高斯核 ($K(\mathbf{u}, \mathbf{v}) = \exp(-\|\mathbf{u} - \mathbf{v}\|^2 / 2\gamma^2)$) (注: 此处公式已作改动) 作为核函数, 需要合适的核参数和代价参数 ν 才能得到尽量好的分类性能。代价参数 ν 的选择按照文献[6]的选择方法, 10 个参数 ν 值分别取:

0.1, 0.2, 0.3, 0.4, 0.5, 0.6, 0.7, 0.8, 0.9, 1.0。对高斯核, 对于每个数据集选取 15 个 γ 值和 10 个 ν 值, 共有 150 种参数对, 并选择性能最好的组合 (ν, γ) , 参照文献[11]中的参数选择方法, 15 个 γ 值分别取: 0.001, 0.01, 0.1, 0.2, 0.4, 0.8, 1, 2, 5, 10, 20, 50, 100, 1000, 10000。对于每个数据集采用 50 次测试, 每次测试随机训练样本数目和测试样本数目。实验指标包括平均训练时间(ATT), 平均测试精度(ATA), 标准方差(DEV)和平均的支持向量数目(ASV)。

4.2 实验性能比较

表 1 是 nu-AS 和 nbnu-AS 算法的性能指标比较。在 13 个数据集中, nbnu-AS 算法在其中 10 个数据集上的平均测试精度要好, nu-AS 算法在 Monk's Problem 1 数据集上的平均测试精度要好, 在另外两个数据集上两个算法的平均测试精度一致。两个算法在所有数据集上的平均训练时间相差都不大。

ν -SVM 和无 (b) ν -SVM 的求解是将原始优化问题转化为对偶优化问题来求解, 由于对偶间隙的存在, 对偶优化问题的最优解并非一定为原始优化问题的最优解。尽管无 (b) ν -SVM 在 Monk's Problem 1 数据集上得到更小的函数值(见表 2), 但是无 (b) ν -SVM 得测试精度仍然低于 ν -SVM。

4.3 ν -SVM 和无 (b) ν -SVM 优化问题最优解比较

由于 ν -SVM 优化问题与无 (b) ν -SVM 优化问题多出一个约束条件: $\boldsymbol{\alpha}^T \mathbf{Y} = 0$, 从优化问题的解空间上分析后者应该能得到比前者更优的解。本节从

表 1 标准数据集上的性能比较

数据集	nu-AS			nbnu-AS		
	ATT (s)	ATA (%)	DEV (%)	ATT (s)	ATA (%)	DEV (%)
Heart	0.0340	75.67	2.82	0.0374	75.97	2.87
Pwlinear	0.0367	82.76	3.31	0.0409	83.28	3.51
Sonar	0.1052	82.87	3.65	0.0669	83.69	3.32
Monk's Problem 1	0.0797	95.37	0	0.0853	95.14	0
Liver-disorders	0.1104	70.99	4.54	0.1216	71.38	3.93
Ionosphere	0.2381	89.67	1.96	0.1480	90.56	2.10
Breast-cancer	0.3867	94.34	1.47	0.2977	95.28	0.94
Australian	0.3251	67.76	1.28	0.3355	67.87	1.28
Pimadata	0.7569	76.08	2.31	0.6946	76.51	1.15
Creat	0.4176	79.76	2.82	0.4297	81.42	1.92
A1a	32.12	84.00	0	30.75	84.01	0
A2a	173.8	84.21	0	170.5	84.21	0
A3a	395.2	84.36	0	390.1	84.36	0

表 2 nu-AS 和 nbnu-AS 算法的最优函数值比较

数据集	nu-AS	nbnu-AS
Heart	1.1322e-008	1.1301e-008
Pwlinear	9.5643e-002	9.5043e-002
Sonar	1.7109e-004	1.6980e-004
Monk's Problem 1	3.2614e-005	3.2589e-005
Liver-disorders	2.8910e-007	2.6988e-007
Ionosphere	6.5368e-005	4.7175e-005
Breast-cancer	1.9366e-003	1.9353e-003
Australian	6.1230e-003	5.3609e-003
Pimadata	1.1662e-005	1.1485e-005
Creat	4.1906e-004	2.5338e-010
A1a	1.8590e-004	1.8590e-004
A2a	2.3716e-004	2.3716e-004
A3a	3.5295e-004	3.5295e-004

实验上分析该约束条件对优化问题最优解影响, 利用有效集算法和最优函数值指标对两个优化问题进行比较。为了使两个目标优化问题相同(约束条件不同), nu-AS 和 nbnu-AS 的参数须设置一致(从而优化问题中的核矩阵也相同), 在此将两个算法的参数对都设为 nu-AS 的最优参数对, 表 2 为比较结果。在前 10 个数据集上, nu-AS 算法在两个核函数上都取得了更优的解, 而在后 3 个数据集上, 两个算法在两个核函数上的最优解都相同。设 nu-AS 算法的

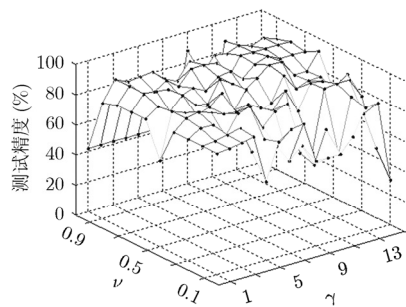


图 1 nu-AS 在高斯核上的测试精度

解空间为 S_1 , nbnu-AS 算法的解空间为 S_2 , 则有 $S_1 \subseteq S_2$ 。

4.4 参数敏感性分析

本节比较核参数和代价参数 ν 对算法测试精度的影响, 实验数据选取 Pwlinear 数据集, 高斯核的参数值按照 4.1 节选取。

从图 1 和图 2 可以看出, nu-AS 在高斯核上的不同参数选取对于测试精度影响很大, 而且没有规律。nbnu-AS 算法则对参数 ν 不太敏感, 曲面比较光滑。在实际参数选取中, 对于参数 ν 可以扩大参数选取值的间隔, 利用较少的参数值对就可以找到最优测试精度。

5 结束语

由于 ν -SVM 引入了有实际意义的参数 ν , 在机器学习的各个领域中有广泛的应用和实际的指导意义。本文研究对比了 ν -SVM 和无(b)的 ν -SVM 优化问题, 从多个性能指标的实验上分析得出无(b)的 ν -SVM 的泛化性能要好于 ν -SVM, 在同等目标优化问题上 ν -SVM 只能得到无(b)的 ν -SVM 的次优解, 无(b)的 ν -SVM 对参数 ν 不太敏感, 在较少的参数值对中就可以找到最佳的测试精度。

本文的工作适用于 ν -SVM 的改进算法, 可以将无(b)的 ν -SVM 应用于现有的对 ν -SVM 进行改进的算法。在以后的研究工作中将无(b)的 ν -SVM 应用于文本挖掘, 图像识别等实际领域中, 进一步验证无(b)的 ν -SVM 的有效性。

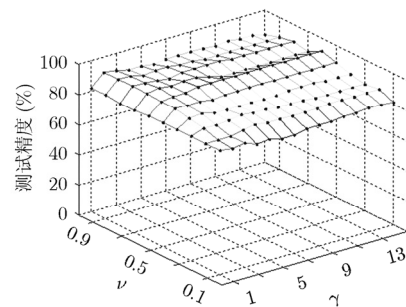


图 2 nbnu-AS 在高斯核上的测试精度

参考文献

- [1] Cortes C and Vapnik V. Support vector networks. *Machine Learning*, 1995, 20(3): 273-297.
- [2] Poggio T, Mukherjee S, Rifkin R, et al. "b". (A.I. Memo No. 2001-011, CBCL Memo 198, Artificial Intelligence Laboratory, Massachusetts Institute of Technology), 2001.
- [3] Evgeniou T, Pontil M, and Poggio T. Regularization networks and support vector machines. *Advances in Computational Mathematics*, 2000, 13(1): 1-50.
- [4] Huang G B, Ding X J, and Zhou H M. Optimization method based extreme learning machine for classification. *Neurocomputing*, 2010, 74(1/3): 155-163.
- [5] 丁晓剑, 赵银亮. b 对支持向量机分类问题泛化性能的影响. *自动化学报*, 待发表.
- [6] Schölkopf B, Smola A J, Williamson R, and Bartlett P L. New support vector algorithms. *Neural Computation*, 2000, 12(5): 1207-1245.
- [7] 王娜, 李霞. 基于类加权的双 ν 支持向量机. *电子与信息学报*,

- 2007, 29(4): 859–862.
- Wang Na and Li Xia. A new dual ν support vector machine based on class-weighted. *Journal of Electronics and Information Technology*, 2007, 29(4): 859–862.
- [8] Scheinberg K. An efficient implementation of an active set method for SVMs. *Journal of Machine Learning Research*, 2006, 7(10): 2237–2257.
- [9] Blake C L and Merz C J. UCI repository of machine learning databases. <http://www.ics.uci.edu/~mllearn/MLRepository.html>, Department of Information and Computer Sciences, University of California, Irvine, USA, 2010.
- [10] Michie D, Spiegelhalter D J, and Taylor C C. UCI Machine Learning Repository: Statlog Data Set, available: [http://archive.ics.uci.edu/ml/datasets/Statlog+\(Landsat+Satellite\)](http://archive.ics.uci.edu/ml/datasets/Statlog+(Landsat+Satellite)), 2010.
- [11] Ghanty P, Paul S, and Pal N R. NEUROSVM: an architecture to reduce the effect of the choice of kernel on the performance of SVM. *Journal of Machine Learning Research*, 2009, 10(3): 591–622.
- 丁晓剑: 男, 1982 年生, 博士生, 研究方向为神经网络和机器学习.
- 赵银亮: 男, 1960 年生, 教授, 研究方向为并行计算、数据挖掘和新一代变成模型.