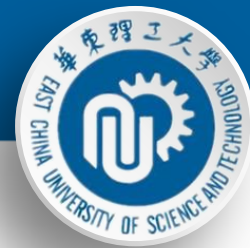


课时内容

第6章 机器学习



6 粗糙集的基本理论



◆ 信息系统

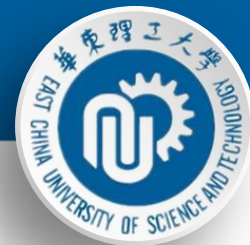
信息系统: 信息系统是RS理论研究的主体，它被抽象为一个数据集，即一张数据表
信息系统是一个四元组

$$IS=(U, A, V, f)$$

其中， U 是对象的有限非空集，亦称域； A 为属性的有限非空集； V 是属性的值域； f 是映射函数，即 $f: U \times A \rightarrow V$ 。属性集 A 又可分为条件属性 C 和决策属性 D 两部分，即 $A=C \cup D$ ，且 $C \cap D = \Phi$ 。上述数据表也称为决策表。

U \ A	C			D
	a_1	a_2	a_3	a_4
u_1	2	2	2	2
u_2	2	1	1	2
u_3	2	1	1	2
u_4	1	2	2	1
u_5	2	2	2	1
u_6	1	1	2	1

表中： $U=\{u_1, u_2, u_3, u_4, u_5, u_6\}$ ； $A=\{a_1, a_2, a_3, a_4\}$ ； $V=\{2, 1\}$ ；函数实现映射，例 $f_{a_1}(u_1)=2$ ；并且 $C=\{a_1, a_2, a_3\}$ ， $D=\{a_4\}$



◆ 不分明关系

不分明关系作为RS理论的基础，亦称为等价关系

定义6.1 对信息系统 $IS=\{U, A, V, f\}$ ，设 $B \subseteq A$ ，不分明关系定义为

$$IND(B)=\{(x, y) \in U \times U \mid f_b(x) = f_b(y), \text{ for } b \in B\}$$

显然，若 $(x, y) \in IND(B)$ ，则对象 x, y 在属性集 B 上是等价的，即不可区分的。

◆ 等价类和等价划分

1. 等价类

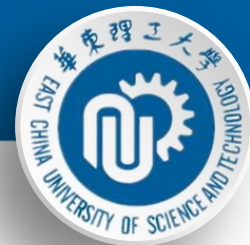
依据 $IND(B)$ ，能将 U 划成不同类，可建立任意对象 x 关于 B 的**等价类** $[x]_B$

定义6.2 设 $B \subseteq A$ ，对所有 $x \in U$ ，关于 B 的等价类 $[x]_B$ 定义为

$$[x]_B = \{y \in U \mid (x, y) \in IND(B)\}$$

2. 等价划分

依据 $IND(B)$ ，可将 U 划分为若干个等价类，这些等价类的集合又被称为**等价划分**，记为 $U/IND(B)$ ，或简记为 U/B 。



◆ 等价类和等价划分

例6.4 如下决策表所述信息系统，求其等价类和等价划分。

解：由其条件属性集 $C = \{a_1, a_2, a_3\}$ 的 $IND(C)$ ，可导出以下4个等价类：

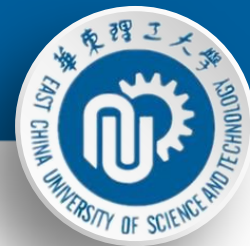
$[u_1]C = \{u_1, u_5\}$, $[u_2]C = \{u_2, u_3\}$, $[u_4]C = \{u_4\}$, $[u_6]C = \{u_6\}$

从而有如下等价划分：

$U/C = \{ \{u_1, u_5\}, \{u_2, u_3\}, \{u_4\}, \{u_6\} \}$

U \ A	C			D
	a_1	a_2	a_3	a_4
u_1	2	2	2	2
u_2	2	1	1	2
u_3	2	1	1	2
u_4	1	2	2	1
u_5	2	2	2	1
u_6	1	1	2	1

6 粗糙集的基本理论



◆ 上近似和下近似

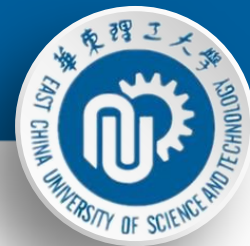
粗糙集的概念是通过上近似和下近似所确定的边界区域进行定义的。

定义6.3 设 $X \subseteq U, B \subseteq A$, X 对 B 的**下近似** $B_-(X)$ 可定义为 X 所包含的关于 B 的所有等价类的并集:

$$B_-(X) = \bigcup \{ [x]_B \mid [x]_B \subseteq X \}, \text{ 也即 } B_-(X) = \{ x \in U \mid [x]_B \subseteq X \}$$

定义6.4 设 $X \subseteq U, B \subseteq A$, X 对 B 的**上近似** $B^+(X)$ 可定义为与 X 交集非空的关于 B 的所有等价类的并集:

$$B^+(X) = \bigcup \{ [x]_B \mid [x]_B \cap X \neq \emptyset \}, \text{ 也即 } B^+(X) = \{ x \in U \mid [x]_B \cap X \neq \emptyset \}$$



◆ 上近似和下近似

例6.5 对例6.4所述信息系统, 令 $X = \{u_1, u_2, u_3\}$, 求关于条件属性集 C 的上近似和下近似。

解: 由例6.4已求出其条件属性集 $C = \{a_1, a_2, a_3\}$ 的不分明关系 $IND(C)$, 可导出以下4个等价类: $\{u_1, u_5\}, \{u_2, u_3\}, \{u_4\}, \{u_6\}$

及其等价划分: $U/C = \{\{u_1, u_5\}, \{u_2, u_3\}, \{u_4\}, \{u_6\}\}$

由于可为 X 包含的等价类 $[u]_C$ 仅有 $\{u_2, u_3\}$, 即下近似为 $C_-(X) = \{u_2, u_3\}$

又由于 $\{u_1, u_5\} \cap \{u_1, u_2, u_3\} \neq \Phi$, $\{u_2, u_3\} \cap \{u_1, u_2, u_3\} \neq \Phi$, 即上近似为

$C^+(X) = \{u_1, u_2, u_3, u_5\}$



◆ 边界区域和粗糙集

定义6.5 设 $X \subseteq U, B \subseteq A$, 对象集 X 关于属性集 B 的**边界区域**定义为

$$BN_B(X) = B^+(X) - B_-(X)$$

定义6.6 设 $X \subseteq U, B \subseteq A$, 由对象集 X 关于属性集 B 的边界区域的定义,

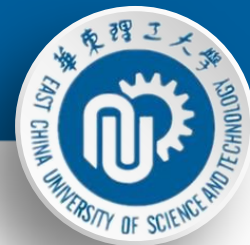
若 $BN_B(X) \neq \emptyset$, 则称 $BN_B(X)$ 是对象集 X 关于属性集 B 的**粗糙集**。

例6.6 对例6.5述信息系统, 令 $X=\{u1, u2, u3\}$, 求关于条件属性集 C 的边界区域及其粗糙集。

解: 由上例可得到 X 关于 C 的边界区域为:

$$\begin{aligned} BN_C &= C^+(X) - C_-(X) \\ &= \{u1, u2, u3, u5\} - \{u2, u3\} \\ &= \{u1, u5\} \end{aligned}$$

由于 BN_C 非空, 因此得到对象集 X 关于属性集 C 的粗糙集为 $\{u1, u5\}$



◆ 回归的含义

回归指研究一组随机变量 (Y_1, Y_2, \dots, Y_i) 和另一组 (X_1, X_2, \dots, X_k) 变量之间关系的统计分析方法，又称多重回归分析。通常 Y_1, Y_2, \dots, Y_i 是因变量， X_1, X_2, \dots, X_k 是自变量。

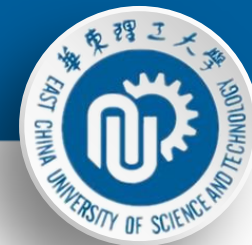
英国统计学家Galton和其学生Pearson研究父母身高与其子女身高的遗传问题，观察了1078对父母，以每对父母身高为 X ，取他们一个成年儿子的身高为 Y ，将结果绘成散点图，发现趋势近乎一条直线(父母平均身高68时，成年儿子平均身高69时)：

$$Y = 33.73 + 0.516X$$

可以发现：

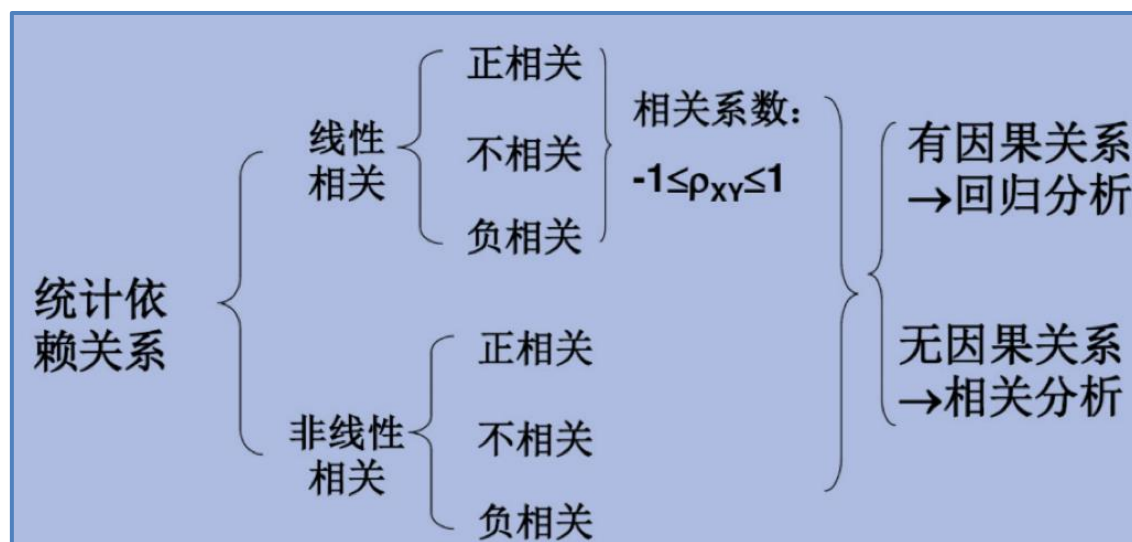
$$X = 72; Y = 70.89;$$

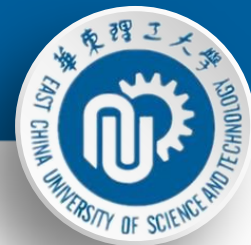
$$X = 64; Y = 66.75$$



◆ 回归的思想

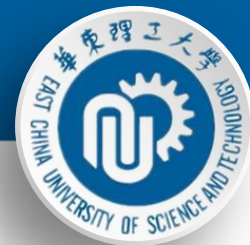
对变量间统计依赖关系的考察主要是通过相关分析 (correlation analysis) 或回归分析 (regression analysis) 来完成的。





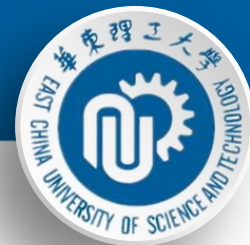
◆ 相关、回归与因果关系

- 非线性相关并不意味着不相关。
- 有相关关系并不意味着一定有因果关系
- **回归分析/相关分析**研究一个变量对另一个 (些)变量的统计依赖关系，但它们并不意味着一定有因果关系。
- **相关分析**对称地对待任何 (两个)变量，两个变量都被看作是随机的。**回归分析**对变量的处理方法存在不对称性，即区分应变量 (被解释变量)和自变量(解释变量)：前者是随机变量，后者不是。



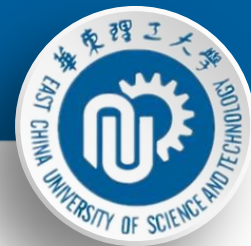
◆ 回归分析的基本概念

- **回归分析**(regression analysis)是研究一个变量关于另一个(些)变量的具体依赖关系的计算方法和理论。
- 在于通过后者的已知或设定值, 去估计和 (或)预测前者的 (总体) 均值。
- 被解释变量 (Explained Variable)或应(因)量(Dependent Variable) **(前者)** 。
- 解 释 变 量 (Explanatory Variable) 或 自 变 量 (Independent Variable) **(后者)** 。



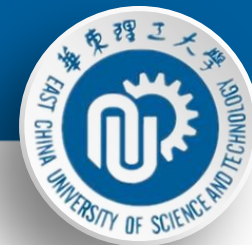
◆ 回归分析的目的

- 根据样本观察值对经济计量模型参数进行**估计**，求得回归方程；
- 对回归方程、参数估计值进行显著性检验
- 利用回归方程进行**分析、评价及预测**。



◆ 总体回归函数(PRF)

- **回归分析**关心的是根据解释变量的已知或给定值，考察**被解释变量的总体均值**，即当解释变量取某个确定值时，与之统计相关的被解释变量所有可能出现的对应值的平均值。



◆ 总体回归线及函数

- 在给定解释变量 X_i 条件下被解释变量 Y_i 的期望轨迹称为**总体回归线** (population regression line), 或更一般地称为**总体回归曲线**(population regression curve)
- 相应的函数:

$$E(Y|X_i) = f(X_i)$$

- 称为(双变量)**总体回归函数** (population regression function, **PRF**)。

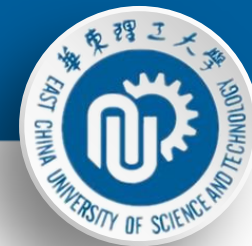


◆ PRF含义与形式

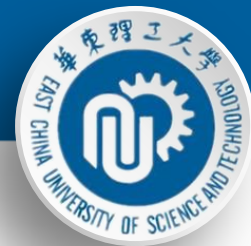
- **含义:** 回归函数 (PRF) 说明被解释变量Y的平均状态 (总体条件期望) 随解释变量X变化的规律。
- **函数形式:** 可以是线性或非线性的。
- 示例1中, 将每周博彩支出看成是其可支配收入的线性函数时:

$$E(Y|X_i) = B_0 + B_1 X_i$$

为**线性函数**, 其中, B_0 , B_1 是未知参数, 称为**回归系数** (regression coefficients)。



- 机器学习概述
- 记忆学习
- 示例学习
- 决策树学习
- 统计学习
- 集成学习
- 粗糙集知识发现
- 线性回归
 - a. 回归分析的思想
 - b. 总体回归函数 (PRF) 的概念
 - c. 样本回归函数 (SRF) 的概念
 - d. 普通最小二乘 (OLS) 方法介绍



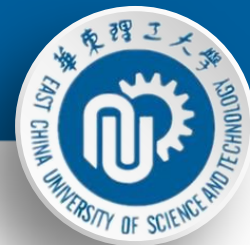
◆ 样本回归函数

- **问题：**能从一次抽样中获得总体的近似的信息吗？如果可以，如何从抽样中获得总体的近似信息？
- **示例2：**假设总体中有如下一个样本，能否从该样本估计**总体回归函数**PRF？

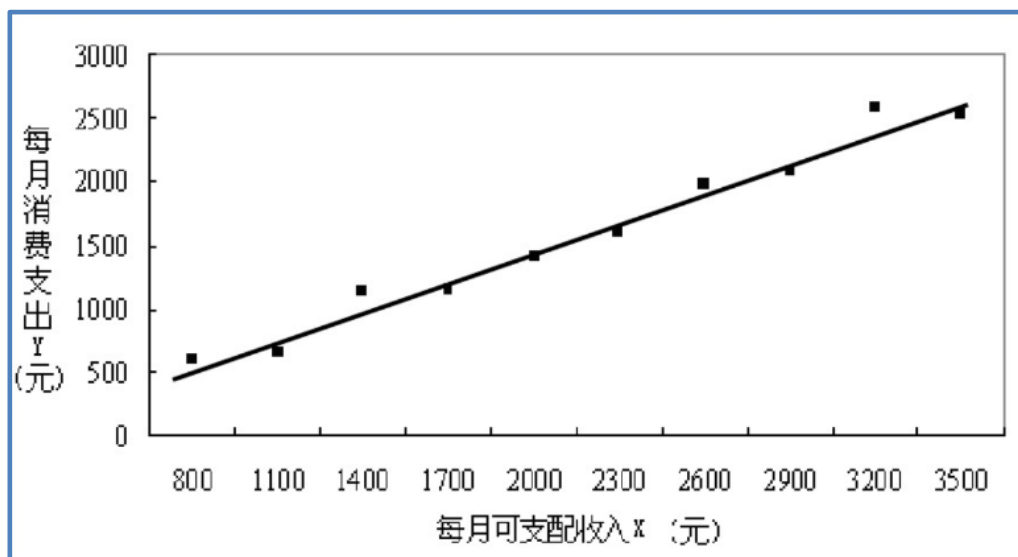
表：家庭消费支出与可支配收入的一个随机样本										
Y	800	1100	1400	1700	2000	2300	2600	2900	3200	3500
X	594	638	1122	1155	1408	1595	1969	2078	2585	2530

- **回答：**

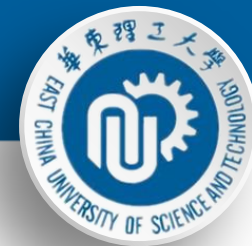
■ -----能



该样本的散点图 (scatter diagram)



画一条直线以尽好地拟合该散点图，由于样本取自总体，可以该直线近似地代表总体回归线。该直线称为**样本回归线** (sample regression lines)。



◆ 样本回归函数形式

- 记样本回归线的函数形式为:

$$\hat{Y}_i = f(X_i) = b_0 + b_1 X_i$$

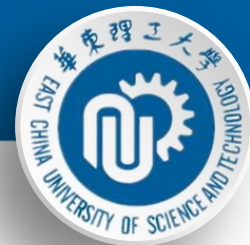
- 称为**样本回归函数**(sample regression function, SRF)。
- 注意:这里将样本回归线看成总体回归线的近似替代;

$$\hat{Y}_i = f(X_i) = b_0 + b_1 X_i$$



$$Y_i = E(Y|X_i) + u_i = B_0 + B_1 X_i + u_i$$

- 则: \hat{Y}_i 是 $E(Y|X_i)$ 的估计量;
- b_i 是 B_i 的估计量, $i=0, 1$



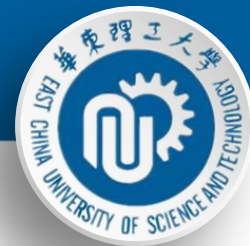
◆ 样本回归函数的随机形式/样本回归模型

■ 同样地，样本回归函数也有如下的随机形式：

$$Y_i = \hat{Y}_i + \hat{u}_i = b_0 + b_1 X_i + e_i$$

式中， e_i 称为样本残差 (或剩余项, Residual)，代表了其他影响 Y_i 的随机因素的集合可看成是 \hat{u}_i 的估计量 u_i 。

由于方程中引入了随机项，成为计量经济模型，因此也称为样本回归模型 (sample regression model)。



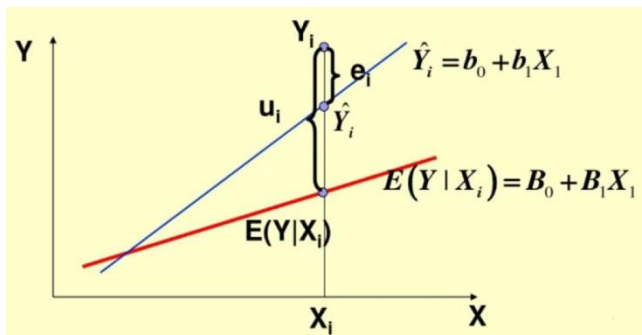
◆ 回归分析的目的

- 根据样本回归函数SRF，估计总体回归函数PRF：

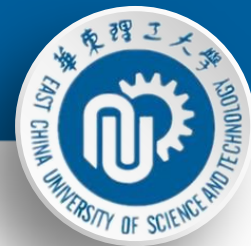
即，根据 $Y_i = \hat{Y}_i + e_i = b_0 + b_1 X_i + e_i$

估计 $Y_i = E(Y|X_i) + u_i = B_0 + B_1 X_i + u_i$

- **要求：**设计适当“方法”构造SRF，以使SRF尽可能“接近”PRF，或者说使 $b_i (i=0,1)$ 尽可能接近 $B_i (i=0,1)$ 。
- **注意：**这里PRF可能永远无法知道



总体回归线和样本回归线的关系



◆ 参数估计—OLS

说明

■ 单方程模型分为两大类: **线性模型**和**非线性模型**

1. 线性模型中, 变量之间的关系呈线性关系
2. 非线性模型中, 变量之间的关系呈非线性关系

■ 一元线性回归模型: 只有一个解释变量

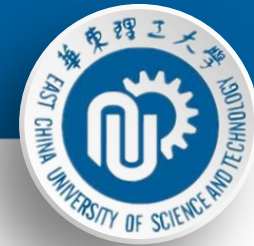
$$Y_i = B_0 + B_1 X_i + u_i, i = 1, 2, \dots, N$$

Y为被解释变量, **X**为解释变量, **B₀**与**B₁**为待估参数,
u为随机干扰项。



◆ 参数估计—OLS

- **回归分析的主要目的**是要通过样本回归函数(模型)SRF尽可能准确地估计总体回归函数(模型) PRF。
- **估计方法**有多种，其中最广泛使用的是**普通最小二乘法** (ordinary least squares, OLS)。
- 为保证参数估计量具有良好的性质，通常对模型提出若干基本假设。
- 实际这些假设与所采用的估计方法紧密相关。



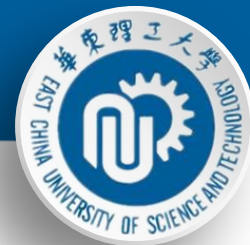
◆ 最小二乘原理

■ 对于双变量的PRF

$$Y_i = B_0 + B_1 X_i + u_i, i = 1, 2, \dots, N$$

■ 由于PRF不能直接观察到，故用SRF来估计：

$$Y_i = b_0 + b_1 X_i + e_i = \hat{Y}_i + e_i$$

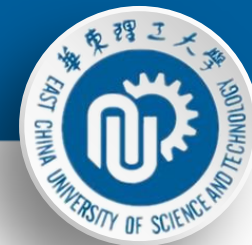


◆ 参数的普通最小二乘估计 (OLS)

- 给定一组样本观测值 $(X_i, Y_i)(i=1, 2, \dots, n)$ 要求样本回归函数尽可能好地拟合这组值。
- **普通最小二乘法** (Ordinary least squares, OLS) 给出的判断标准是：
二者之差的平方和

$$Q = \sum_{i=1}^n e^2 = \sum_{i=1}^n (Y_i - \hat{Y}_i)^2 = [Y_i - (b_0 + b_1 X_i)]^2 \text{ 最小。}$$

即在给定样本观测值之下，选择出 b_0, b_1 ，使 Y_i 与 \hat{Y}_i 之差的平方和为最小。



◆ 参数的普通最小二乘估计 (OLS)

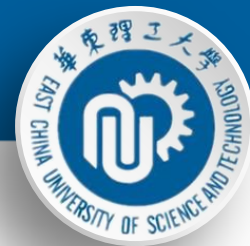
根据微分运算，可推得用于估计 b_0 ， b_1 的下列方程组：

$$\begin{cases} \sum (b_0 + b_1 X_i - Y_i) = 0 \\ \sum (b_0 + b_1 X_i - Y_i) X_i = 0 \end{cases}$$

得：

$$\begin{cases} \sum Y_i = nb_0 + b_1 \sum X_i \\ \sum X_i Y_i = b_0 \sum X_i + b_1 \sum X_i^2 \end{cases}$$
$$\begin{cases} b_0 = \frac{\sum X_i^2 \sum Y_i - \sum X_i \sum X_i Y_i}{n \sum X_i^2 - (\sum X_i)^2} = \bar{Y} - b_1 \bar{X} \\ b_1 = \frac{n \sum X_i Y_i - \sum X_i \sum Y_i}{n \sum X_i^2 - (\sum X_i)^2} \end{cases}$$

方程组 (*) 称为正规方程组 (normal equations).



◆ 参数的普通最小二乘估计 (OLS)

记:

$$\sum x_i^2 = \sum (X_i - \bar{X})^2 = \sum X_i^2 - \frac{1}{n}(\sum X_i)^2$$

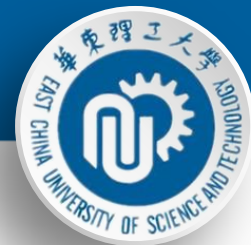
$$\sum x_i y_i = \sum (X_i - \bar{X})(Y_i - \bar{Y}) = \sum X_i Y_i - \frac{1}{n} \sum X_i \sum Y_i$$

上述参数估计量可以写成:

$$\begin{cases} b_1 = \frac{\sum x_i y_i}{\sum x_i^2} \\ b_0 = \bar{Y} - b_1 \bar{X} \end{cases}$$

称为OLS估计量的**离差形式** (deviation form)。

由于参数的估计结果是通过最小二乘法得到的，故称为**普通最小二乘估计量** (ordinary leastsquares estimators)，有时也简记为OLS估计量。

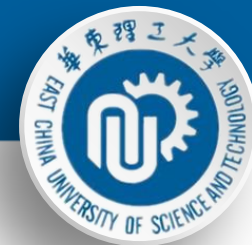


◆ OLS参数估计示例

在上述家庭可支配收入-消费支出例中，对于所抽出的一组样本数，参数估计的计算可通过下面的表进行。

参数估计的计算表

	X_i	Y_i	x_i	y_i	$x_i y_i$	x_i^2	y_i^2	X_i^2	Y_i^2
1	800	594	-1350	-973	1314090	1822500	947508	640000	352836
2	1100	638	-1050	-929	975870	1102500	863784	1210000	407044
3	1400	1122	-750	-445	334050	562500	198381	1960000	1258884
4	1700	1155	-450	-412	185580	202500	170074	2890000	1334025
5	2000	1408	-150	-159	23910	22500	25408	4000000	1982464
6	2300	1595	150	28	4140	22500	762	5290000	2544025
7	2600	1969	450	402	180720	202500	161283	6760000	3876961
8	2900	2078	750	511	382950	562500	260712	8410000	4318084
9	3200	2585	1050	1018	1068480	1102500	1035510	10240000	6682225
10	3500	2530	1350	963	1299510	1822500	926599	12250000	6400900
求和	21500	15674			5769300	7425000	4590020	53650000	29157448
平均	2150	1567							



◆ OLS参数估计示例

$$\begin{cases} b_1 = \frac{\sum x_i y_i}{\sum x_i^2} = \frac{5769300}{7425000} = 0.777 \\ b_0 = \bar{Y} - b_1 \bar{X} = 1567 - 0.777 \times 2150 = -103.172 \end{cases}$$

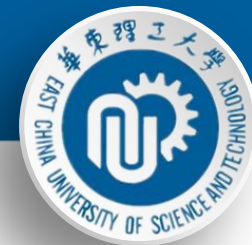
因此，由该样本估计的回归方程为：

$$\hat{Y}_i = -103.172 + 0.777X_i$$

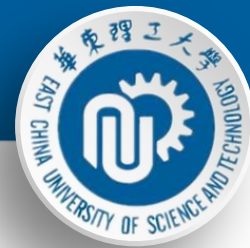
课时内容

第7章 支持向量机





- **目标：** 找到一个超平面，使得它能够尽可能多的将两类数据点正确的分开，同时使分开的两类数据点距离分类面最远。
- **解决方法：** 构造一个在约束条件下的优化问题，具体的说是一个约束二次规划问题(constrained quadratic programming),求解该问题，得到分类器。



◆ 最优分类超平面的定义

假定有以下 n 个独立、同分布且线性可分的训练样本

$$(x_1, y_1), (x_2, y_2), \dots, (x_n, y_n)$$

其中, $x_i \in \mathbb{R}^n$, n 为输入空间的维数; $y_i \in \{-1, +1\}$, 表示仅有两类不同的样本。SVM学习的目标就是要找到一个最优超平面

$$w \cdot x + b = 0$$

将两类不同的样本完全分开。其中, w 是权重向量, “ \cdot ”是向量的点积, x 是输入向量, b 是一个阈值。

如图, 其中 H 为分类超平面, H_1 和 H_2 分别为两个不同类的边界分割平面, H_1 和 H_2 均与 H 平行, 且 H_1 和 H_2 分别通过相应类中离 H 最近的样本点。

对 H , 若能满足 H 与两个类边界分割平面 H_1 和 H_2 等距, 且能使 H_1 和 H_2 之间的间隔最大, 则称该分类超平面为**最优分类超平面**。

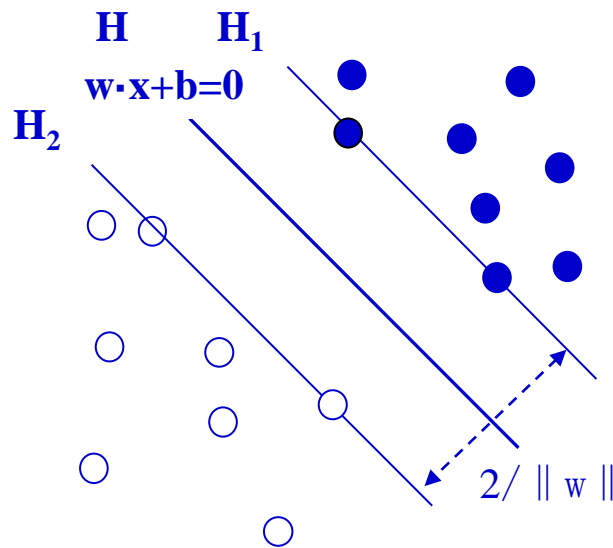
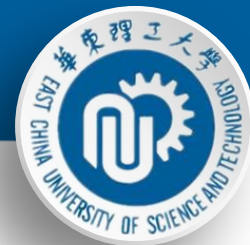


图 线性可分的最优超平面



◆ 最优分类超平面

两点说明：

分类间隔

所谓两个类边界分割平面之间的分类间隔是指它们之间的距离。稍后我们将指出，每个类边界分割平面到最优分类超平面的距离均为

$$1/\|w\|$$

因此两个类边界分割平面的间隔为

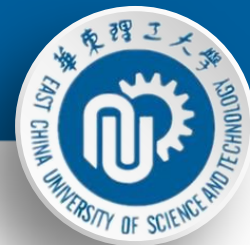
$$2/\|w\|$$

其中 $\|w\|$ 是欧氏模函数。

支持向量

最优超平面仅与在 H_1 和 H_2 上的训练样本点有关，而与其它训练样本点无关。这些分布在 H_1 和 H_2 上的样本点被称为支持向量。因此，

所谓支持向量，就是指那些分布在两个类边界分割平面上的样本点



◆ 最优分类超平面的分类间隔

最优分类超平面作为使分类间隔最大的超平面，可以实现期望风险及结构化风险的最小化。下面对上述类边界分割平面到最优分类超平面的距离，再进一步讨论如下。

对线性分类问题，其分类超平面方程的一般形式为

$$\mathbf{w} \cdot \mathbf{x} + \mathbf{b} = 0$$

由该方程可以得到判别函数的一般形式为

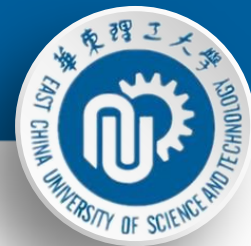
$$g(\mathbf{x}) = \mathbf{w} \cdot \mathbf{x} + \mathbf{b}$$

利用该判别函数，通过对 \mathbf{w} 和 \mathbf{b} 的调整，可将样本空间的样本点分为如下两类：

$$y_i = \begin{cases} +1 & \mathbf{w} \cdot \mathbf{x}_i + \mathbf{b} \geq 0 \\ -1 & \mathbf{w} \cdot \mathbf{x}_i + \mathbf{b} < 0 \end{cases}$$

为使两个不同类中的所有样本都满足 $|g(\mathbf{x})| \geq 1$ ，且只有那些离最优分类超平面最近的样本点才有 $|g(\mathbf{x})| = 1$ ，需对判别函数进行归一化处理，使其满足

$$y_i (\mathbf{w} \cdot \mathbf{x}_i + \mathbf{b}) \geq 1, \quad i=1, 2, \dots, n$$



◆ 最优分类超平面的分类间隔

事实上，由于一个样本点到判别式的距离为

$$\frac{|w \bullet x + b|}{\|w\|}$$

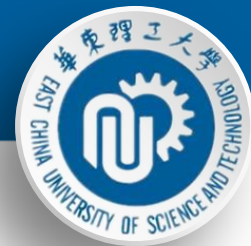
且 $y_i \in \{-1, +1\}$ 。因此，一个样本点到判别式的距离可改写为如下形式

$$\frac{y_i (w \bullet x + b)}{\|w\|}$$

我们知道，对线性可分的样本空间，至少应该有一个常 D ，满足

$$\frac{y_i (w \bullet x + b)}{\|w\|} \geq D$$

我们希望 D 能够最大化。 D 越大，说明样本点到分类超平面的距离越大。



◆ 最优分类超平面的分类间隔

改变 w ，可以得到 D 的无穷多个解。为能够得到其唯一解，我们约定

$$D\|w\|=1 \quad \text{或} \quad D=1/\|w\|$$

此时，要使 D 最大化，就需要 $\|w\|$ 最小化。它可归结为如下二次优化问题

$$\min \frac{1}{2} \|w\|^2$$

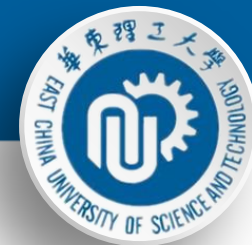
其约束条件为

$$y_i (w \cdot x_i + b) \geq 1, \quad i=1,2,\dots,n$$

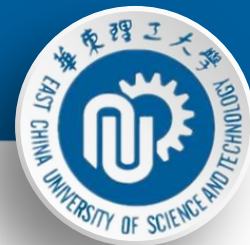
通过对上述二次优化问题的求解，即可得到相应的 w 、 b ，以及最优分类超平面到类边界分割平面的距离 $1/\|w\|$ 。

事实上，对 n 维空间中的线性可分问题，人们已经证明：若输入向量 x 位于一个半径为 r 的超球内，则对于满足 $\|w\| \leq A$ 的指示函数集

$$\{ f(x, w, b) = \text{sgn}(w \cdot x + b) \}$$



- **线性可分与最优分类超平面**
 - a. 最优分类超平面的概念
 - b. 最优分类超平面的分类间隔
 - c. **求解最优分类超平面**
- **线性支持向量机**
- **非线性支持向量机**



◆ 求解最优分类超平面

求解最优分类超平面，就是要解决前文中给出的二次优化问题，它可通过求解如下拉格朗日函数的鞍点来实现。

$$L(w, b, a) = \frac{1}{2} \|w\|^2 - \sum_{i=1}^n \alpha_i (y_i (w \bullet x_i + b) - 1) \quad (1)$$

其中 α_i 为拉格朗日乘子， $\alpha_i \geq 0$ ， $i=1, 2, \dots, n$ 。该二次规划问题存在唯一的最优解。并且，在鞍点上该最优解必须满足对 w 和 b 的偏导数为 0，即

$$\frac{\partial L}{\partial w} = w - \sum_{i=1}^n \alpha_i y_i x_i = 0 \quad (2)$$

$$\frac{\partial L}{\partial b} = \sum_{i=1}^n \alpha_i y_i = 0 \quad (3)$$

将(2)、(3)式代入(1)式，消去 w 、 b ，即可到原问题的对偶问题：

$$\max W(\alpha) = \sum_{i=1}^n \alpha_i - \frac{1}{2} \sum_{i,j=1}^n \alpha_i \alpha_j y_i y_j (x_i \bullet x_j) \quad (7.1)$$

并满足约束条件

$$\sum_{i=1}^n \alpha_i y_i = 0, \alpha_i \geq 0, i = 1, 2, \dots, n$$



◆ 求解最优分类超平面

可以看出：

使 $\alpha_i=0$ 的样本点对 $\max W(\alpha)$ 函数没有影响，即对分类不起作用。

仅有使 $\alpha_i>0$ 的样本点才会对分类问题起作用，而这些样本点正是我们所定义的**支持向量**。

从支持向量开始求最优超平面的**主要过程**为：

(1) 先从支持向量的样本点中取出任一 x_i ，求出参数 b ：

$$b = y_i - w \cdot x_i$$

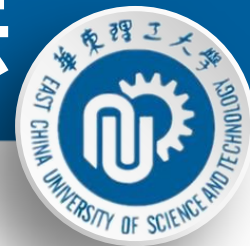
通常，为了保证稳定性，可对所有支持向量按上式计算，并以其平均值作为 b 的值。

(2) 然后求出分类判别函数

$$f(x) = \text{sgn}(w \bullet x + b) = \text{sgn}\left(\sum_{i=1}^m \alpha_i y_i (x_i \bullet x) + b\right) \quad (7.2)$$

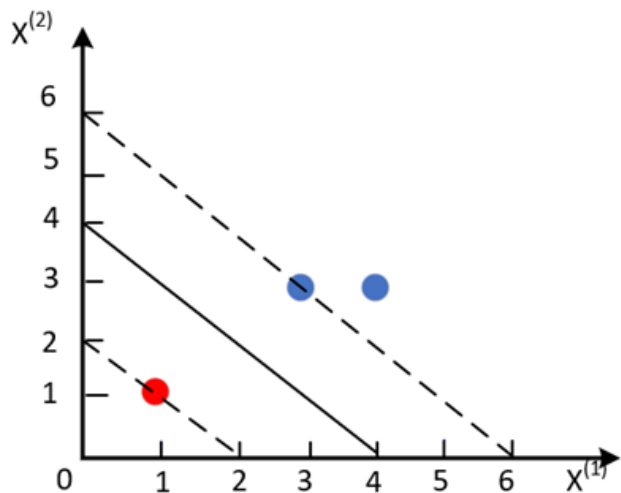
其中， m 为支持向量的个数。

这就是线性可分问题的支持向量机。由于有支持向量机所实现的分类超平面具有最大的分类间隔，故相应算法也称为**最大间隔算法**。



◆ 求解最优分类超平面

例7.1 如图所示的训练数据集，正例点为 $x_1 = (3, 3)^T$, $x_2 = (4, 3)^T$ ，负例点为 $x_3 = (1, 1)^T$ ，求最大间隔分离超平面。

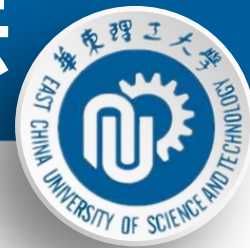


解法1： 约束二次最优化问题：

$$\begin{aligned} \min_{\omega, b} \quad & \frac{1}{2} (\omega_1^2 + \omega_2^2) \\ \text{s.t.} \quad & 3\omega_1 + 3\omega_2 + b \geq 1 \\ & 4\omega_1 + 3\omega_2 + b \geq 1 \\ & -\omega_1 - \omega_2 - b \geq 1 \end{aligned}$$

求得该最优化问题的解为 $\omega_1 = \omega_2 = \frac{1}{2}$ ， $b = -2$ ，所以最大间隔

分离超平面为 $\frac{1}{2}x^{(1)} + \frac{1}{2}x^{(2)} - 2 = 0$ ， x_1 和 x_3 为支持向量。



◆ 求解最优分类超平面

解法2：对偶问题

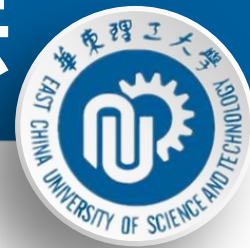
$$\begin{aligned} \min_{\alpha} \quad & \frac{1}{2} \sum_{i,j=1}^3 \alpha_i \alpha_j y_i y_j (x_i \cdot x_j) - \sum_{i=1}^3 \alpha_i \\ &= \frac{1}{2} (18\alpha_1^2 + 25\alpha_2^2 + 2\alpha_3^2 + 42\alpha_1\alpha_2 - 12\alpha_1\alpha_3 - 14\alpha_2\alpha_3) - \alpha_1 - \alpha_2 - \alpha_3 \\ \text{s.t.} \quad & \alpha_1 + \alpha_2 - \alpha_3 = 0 \\ & \alpha_i \geq 0, \quad i = 1, 2, 3 \end{aligned}$$

把 $\alpha_3 = \alpha_1 + \alpha_2$ 代入目标函数并记为

$$s(\alpha_1, \alpha_2) = 4\alpha_1^2 + \frac{13}{2}\alpha_2^2 + 10\alpha_1\alpha_2 - 2\alpha_1 - 2\alpha_2$$

$s(\alpha_1, \alpha_2)$ 对 α_1 和 α_2 求偏导数并令其等于零得

$$\frac{\partial s}{\partial \alpha_1} = 8\alpha_1 + 10\alpha_2 - 2 = 0$$



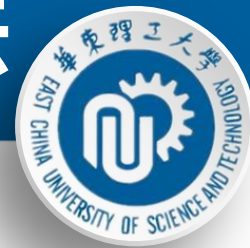
◆ 求解最优分类超平面

$$\frac{\partial s}{\partial \alpha_2} = 13\alpha_2 + 10\alpha_1 - 2 = 0$$

解得 $s(\alpha_1, \alpha_2)$ 在 $(\frac{3}{2}, -1)^T$ 处取得极值，但不满足 $\alpha_2 \geq 0$ ，所以最小值应在边界上取到。

因为 $s(0, \frac{2}{13}) = -\frac{2}{13}$ ， $s(\frac{1}{4}, 0) = -\frac{1}{4}$ ，因此 $s(\alpha_1, \alpha_2)$ 在 $(\frac{1}{4}, 0)^T$ 处取得极小值，此时 $\alpha_3 = \alpha_1 + \alpha_2 = \frac{1}{4}$ 。 $\alpha_1^* = \alpha_3^* = \frac{1}{4}$ 对应的实例点 x_1 和 x_3 是支持向量。计算得

$$\begin{pmatrix} \omega_1^* \\ \omega_2^* \end{pmatrix} = \frac{1}{4} \begin{pmatrix} 3 \\ 3 \end{pmatrix} + 0 - \frac{1}{4} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{1}{2} \\ \frac{1}{2} \end{pmatrix}$$



◆ 求解最优分类超平面

若取 $j=1$, (对应 X_3) , 则

$$b^* = 1 - \frac{1}{2} * 3 - \frac{1}{2} * 3 = -2$$

若取 $j=3$ (对应 X_1) , 则

$$b^* = -1 - \frac{1}{2} * 1 - \frac{1}{2} * 1 = -2$$

最终求得分离超平面:

$$\frac{1}{2}x^{(1)} + \frac{1}{2}x^{(2)} - 2 = 0$$

分类决策函数:

$$f(x) = \text{sign}\left(\frac{1}{2}x^{(1)} + \frac{1}{2}x^{(2)} - 2\right)$$

可以看到所得结果与解法 1 完全一致。