# 感知机

## 核心思想

感知机的核心思想：在线性可分数据$D=\{(x_i,y_i)|y_i\in\{-1,1\}\}$中，使用一个超平面$\omega\cdot x+b=0$将数据分开。其中线性可分的定义为：存在一超平面，使得$D$中任一数据点$(x_i,y_i)$都有

$$y_i(\omega\cdot x_i+b)>0$$

即$\omega\cdot x_i+b$与$y_i$同号。

那么如何寻找这种超平面呢？我们需要一个损失函数，然后在每步的操作中降低这个损失函数的值。根据上式，我们自然地定义损失函数为

$$Loss(D)=\sum_D Loss(x_i,y_i)$$
$$Loss(x_i,y_i)=\begin{cases}-y_i(\omega\cdot x_i+b) & y_i(\omega\cdot x_i+b)\le 0\\ 0 & y_i(\omega\cdot x_i+b)>0\end{cases}$$

不使用$0-1$损失函数是因为不方便求导；当该点被正确分类时，损失函数值为0是因为我们只在乎正确分类，而不在乎正确分类的效果。

将上式稍变形，得到

$$L(\omega,b)\equiv Loss(D)=-\sum_M y_i(\omega\cdot x_i+b)$$

其中$M$是误分类点的集合。

## 如何优化

那么接下来就变成了一个优化问题：通过调整$\omega$和$b$，使$L(\omega,b)$最小（为0）。算法流程如下：

1）在迭代前，设置$\omega$和$b$的初始值为0，$M\leftarrow D$（初始化时对任意数据点，均有$y_i(\omega\cdot x_i+b)\le 0$）。

2）从$M$中任取出点$(x_i,y_i)$，使用梯度下降，即每次迭代，参数值都向负梯度方向移动：

$$\omega\leftarrow\omega-\eta\frac{\partial L}{\partial\omega}=\omega+\eta\sum_M y_ix_i$$
$$b\leftarrow b-\eta\frac{\partial L}{\partial b}=b+\eta\sum_M y_i$$

其中$\eta$被称作学习率，一般$0<\eta\le 1$。

3）如果该点在迭代后被更新后的超平面正确分类，即$y_i(\omega\cdot x_i+b)\ge 0$，则将该点从$M$中移除，否则重复2)

4）直到$L(\omega,b)=0$（等价于$M=\emptyset$）

注：直接使用梯度下降有弊端：每更新一次参数，需要计算集合$M$中的所有点，耗费时间比较长。为了改良，我们这里使用随机梯度下降(STD)，每次只随机取出$M$中的一个点$(x_i,y_i)$更新参数：

$$\omega\leftarrow\omega+\eta y_ix_i$$
$$b\leftarrow b+\eta y_i$$

这样做会使参数每次收敛的时间更少（虽然需要收敛的次数几乎没有变），也在有些问题上更容易避免局部最小（当然，感知机只存在全局最小，没有局部最小）。

显然，这样的超平面有无穷多个，$M$中点迭代的顺序会影响最后得到的超平面参数。

## 算法的收敛性

我们随后更关心的问题是：这个算法能否在有限步内完成迭代？如果能，迭代次数大概是多大的规模？ $\mathrm{Novihoff}$给出了一个关于迭代步数$k$的定理：

$$k \le \left(\frac{R}{\gamma}\right)^2$$

其中$R = \max\limits_D ||(x_i, y_i)||$，$\gamma = \frac{\min\limits_D y_i(\omega_{opt} \cdot x_i + b_{opt})}{||(\omega_{opt}, b_{opt})||}$，$\omega_{opt}, b_{opt}$是将数据集完全分开时的超平面参数。

证明：

不妨假设$\omega_0 = b_0 = 0$。为了后续表示方便，记$\omega^+ = (\omega, b), x_i^+ = (x_i, 1)$，在第$k$次迭代时有

$$\omega_k^+ = \omega_{k-1}^+ + \eta y_k x_k^+$$

其中$(x_k, y_k)$是此时$M$中仅存的元素。

在上式两端同乘$\omega_{opt}^+$，得到：

$$\omega_k^+ \cdot \omega_{opt}^+ = \omega_{k-1}^+ \cdot \omega_{opt}^+ + \eta y_k (x_k^+ \cdot \omega_{opt}^+)$$

由于$\omega_{opt}^+ \cdot x = 0$是最优超平面，依线性可分的定义，有
$y_k(x_k^+ \cdot \omega_{opt}^+) \ge \min\limits_D y_i(\omega_{opt} \cdot x_i + b_{opt}) = \gamma \cdot ||\omega_{opt}^+||$。

递推可知

$$\omega_k^+ \cdot \omega_{opt}^+ \ge \omega_0^+ \cdot \omega_{opt}^+ + k\gamma \cdot ||\omega_{opt}^+|| = k\gamma \cdot ||\omega_{opt}^+||$$

而根据$\mathrm{Cauthy\text{-}Schwatz}$不等式，我们知道

$$\omega_k^+ \cdot \omega_{opt}^+ \le ||\omega_k^+|| \cdot ||\omega_{opt}^+||$$

与上式联立观察，即

$$k\gamma \le ||\omega_k^+||$$

自然地，我们希望能用$k$，$\gamma$和$R$表示出$||\omega_k^+||$的上界，这指引我们构造$\omega_k^+$的内积形式：

$$\begin{aligned} ||\omega_k^+||^2 = \omega_k^+ \cdot \omega_k^+ &= (\omega_{k-1}^+ + \eta y_k x_k^+) \cdot (\omega_{k-1}^+ + \eta y_k x_k^+) \\ &= ||\omega_{k-1}^+||^2 + \eta^2 y_k^2 ||x_k^+||^2 + 2\eta y_k (x_k^+ \cdot \omega_{k-1}^+) \end{aligned}$$

易知$y_k^2 = 1$，而$(x_k, y_k)$是超平面$\omega_{k-1}^+ \cdot x = 0$误分类的点（否则也不需要使用该点迭代了），则有 $y_k(x_k^+ \cdot \omega_{k-1}^+) \le 0$，代入化简：

$$||\omega_k^+||^2 \le ||\omega_{k-1}^+||^2 + \eta^2 ||x_k^+||^2 \le ||\omega_0^+||^2 + k\eta^2 ||x_k^+||^2 = k\eta^2 ||x_k^+||^2 \le k\eta^2 R^2$$

代入上文，即

$$k\gamma \le \sqrt{k\eta^2 R^2}$$

化简即得

$$k \le \left(\frac{R}{\gamma}\right)^2$$

于是我们知道，在有限步内，一定能取得最优的超平面。其中数据点的模长最大值越大，与最优超平面的距离越小，迭代次数的上界越大。

### 对偶算法

从算法流程中我们发现，$\omega$和$b$是大小分别为$n$和1的两个向量，实际上分别是$y_ix_i$和$y_i$的线性组合，且由于两个参数是同步更新的，所以两个组合的权重也相同。于是，我们可以仅采用一个大小为数据集大小$N$的权重向量$\alpha = (\alpha_1, \alpha_2, \ldots, \alpha_N)$来代替$\omega$和$b$两个参数，得到$\alpha$后，$\omega$和$b$可以自然得出：

$$\omega_{opt} = \sum_{i=1}^{N} \alpha_i y_i x_i, \quad b_{opt} = \sum_{i=1}^{N} \alpha_i y_i$$

于是我们得到了一款新的算法来实现感知机。由于此算法的参数大小为$N$，原算法参数的大小为$n$，正好是数据集的两个维度，所以称此算法是原算法的对偶算法，流程如下：

1）在迭代前，设置$\alpha$的初始值为0，$M \leftarrow D$（初始化时所有数据点均未被正确分类）。

2）从$M$中任取出点$(x_i, y_i)$。当点$(x_i, y_i)$在迭代时，其权重$\alpha_i$做如下更新：

$$\alpha_i \leftarrow \alpha_i + \eta$$

3）如果该点在迭代后被更新后的超平面正确分类，即$y_i(\omega \cdot x_i + b) = y_i \left( \sum_{j=1}^{N} \alpha_j y_j (x_j \cdot x_i + 1) \right) \geq 0$，则将该点从$M$中移除，否则重复2）

4）直到$L(\omega, b) = 0$（等价于$M = \emptyset$）

注意到对偶算法中很多次地用到内积运算，我们可以提前计算好$D$中两两数据点之间的内积，即$Gram$矩阵：

$$Gram(D) = [x_i \cdot x_j]_{N \times N}$$

来降低算法的时间复杂度。

### 原算法与对偶算法的比较

最后，让我们来比较原算法和对偶算法：

原算法需要$k$次迭代，每次迭代$\omega$与判断是否正确分类时各需要一次时间复杂度为$n$（其中$n$是数据的维数）的向量乘法。总的时间复杂度为$2kn = \Theta(kn)$;

对偶算法也需要$k$次迭代，但每次迭代$\alpha_i$和判断是否正确的时间复杂度分别是$\Theta(1)$和$\Theta(N)$，建$Gram$矩阵的时间复杂度为$N(N-1)/2$，总的时间复杂度为$N(N-1)/2 + kN = \Theta(N^2 + kN)$

一般情况下，$k = cN$（$c$为$> 1$的常数）。于是原算法的时间复杂度为$\Theta(Nn)$，对偶算法的时间复杂度为$\Theta(N^2)$。当$n \gg N$时，对偶算法将在时间复杂度上更占优势。

## 线性可分支持向量机

### 优化问题的提出

由上文，我们得到了一个超平面，它可以将线性可分数据$D = \{(x_i, y_i) | y_i \in \{-1, 1\}\}$分开，且这种超平面有无穷多个。我们希望在这些超平面中，以某种指标选择唯一最好的超平面。为了能用于新数据的预测，我们自然地认为，超平面与$D$中所有数据点的距离最小值越大越好，说明数据点被分得足够“开”。于是，我们得到了优化的目标，即

$$\max_{\omega, b} \min_{D} \frac{|\omega \cdot x_i + b|}{||\omega||}$$

此外，我们还要保证该超平面能将数据集分开，所以要加上感知机的限制条件：

$$y_i(\omega \cdot x_i + b) \geq \gamma > 0, \quad i = 1, 2, \ldots, N$$

其中$\gamma = \min\limits_{D} y_i(\omega \cdot x_i + b)$。

注意到$\min\limits_{D}\frac{|\omega\cdot x_i+b|}{||\omega||}=\frac{\min\limits_{D} y_i(\omega\cdot x_i+b)}{||\omega||}=\frac{\gamma}{||\omega||}$。于是我们得到了完整的最优化问题：

$$\begin{aligned}\max_{\omega,b}\quad & \frac{\gamma}{||\omega||}\\ s.t.\quad & y_i(\omega\cdot x_i+b)\geq\gamma,\quad i=1,2,\ldots,N\end{aligned}$$

然而，这个最优化函数难以对参数求导，我们计划对该问题进行简化：

注意到，该问题有无穷多个最优解，对应一个相同的超平面。如果$(\omega,b)$是上述问题的最优解之一，那么对$\forall k\neq 0$，$(k\omega,kb)$都是上述问题的最优解，且$\gamma$同时增大$k$倍，所以$\gamma$的值其实并不重要。于是我们可以直接令$\gamma=1$，从而将该问题简化为（因子2是为了对应下文谈到的几何意义）

$$\begin{aligned}\max_{\omega,b}\quad & \frac{2}{||\omega||}\\ s.t.\quad & y_i(\omega\cdot x_i+b)\geq 1,\quad i=1,2,\ldots,N\end{aligned}$$

简化后问题的最优解将是$\left(\frac{\omega}{\gamma},\frac{b}{\gamma}\right)$，与原问题的解$(\omega,b)$指代相同的超平面。

进一步注意到，$\max\limits_{D}\frac{2}{||\omega||}$等效于$\min\limits_{D}\frac{1}{2}||\omega||^2$（因子$\frac{1}{2}$是为了后续求导方便），于是最终我们得到了所需要的优化问题：

$$\begin{aligned}\min_{\omega,b}\quad & \frac{1}{2}||\omega||^2\\ s.t.\quad & 1-y_i(\omega\cdot x_i+b)\leq 0,\quad i=1,2,\ldots,N\end{aligned}$$

且简化后的问题的解存在且唯一。

### 最优超平面存在且唯一

1）存在性

由于数据集是线性可分的，所以一定存在可行解，取可行解中$||\omega||^2$的最小值即可。

2）唯一性

假设存在两组不同最优解$(\omega_1,b_1),(\omega_2,b_2)$，使得$||\omega_1||=||\omega_2||=\min\limits_{\omega,b}||\omega||$。令$\omega_0=\frac{\omega_1+\omega_2}{2},b_0=\frac{b_1+b_2}{2}$，由于两组最优解均满足约束条件，两式相加，有

$$y_i(\omega_0\cdot x_i+b_0)\geq 1,\quad i=1,2,\ldots,N$$

于是$(\omega_0,b_0)$是问题的可行解。则有

$$\begin{aligned}||\omega_0||\geq||\omega_1||=||\omega_2||\\ ||\omega_0||\leq\frac{||\omega_1||+||\omega_2||}{2}\end{aligned}$$

即

$$||\frac{\omega_1+\omega_2}{2}||=||\omega_1||=||\omega_2||$$

解得，$\omega_1=\lambda\omega_2,\lambda=\pm1$。若$\lambda=-1$，则$\omega_0=0$，对应一个斜率为0的超平面。由于$D$中必然同时存在$y=+1$和$y=-1$的两类点，所以该平面必然不能将其分开，也就是说$(\omega_0,b_0)$不是问题的可行解，矛盾。所以必然有$\lambda=1$，即$\omega_1=\omega_2$，记为$\omega$。

另外，注意到此问题的约束条件中，在最优解下，正类点和负类点中必各有一点$(x_1,1)$和$(x_2,-1)$使得等号成立，否则会有更优的解使得$||\omega||$更小（即点距离直线的最小值更大，可以通过画图直观感受）。取在最优解$(\omega,b_1),(\omega,b_2)$下使约束条件取等的点分别为$(x_{11},1),(x_{12},-1),(x_{21},1),(x_{22},-1)$，有

$$\begin{aligned}\omega\cdot x_{11}+b_2\geq 1=\omega\cdot x_{11}+b_1\\ \omega\cdot x_{21}+b_1\geq 1=\omega\cdot x_{21}+b_2\end{aligned}$$

于是我们得到$b_1=b_2$，即$(\omega_1,b_1)=(\omega_2,b_2)$，两组解相同。

### 几何意义

使约束条件取等的数据点在两个超平面$\omega \cdot x+b=1(y_i=+1)$或$\omega \cdot x+b=-1(y_i=-1)$上，使约束条件取小于号的数据点在两个超平面的外侧。最优化的目标$\frac{2}{||\omega||}$代表着两个超平面的间距。

注意到，只有在两个超平面上的少数数据点决定了间距的大小（在两个超平面之外的点对优化问题没有实际作用），因此这些点所对应的向量也被称作支持向量，这也是“支持向量机”这一名称的由来。

另外，由于两个超平面内没有点存在，这一要求是“绝对”的，所以也称此时的间距为“硬间隔”（对应地，在非线性可分的支持向量机中还会提到“软间隔”）。

## $\mathrm{Lagrange}$法简介

接下来我们考虑如何求解。这是一个典型的凸二次规划问题，我们将采用$\mathrm{Lagrange}$法求解该问题。首先简单介绍$\mathrm{Lagrange}$法：

考虑如下带约束的最优化问题：

$$\begin{aligned} \min_x \quad & f(x) \\ s.t. \quad & c_i(x) \leq 0, \quad i=1,2,\ldots,k \\ & h_j(x)=0, \quad j=1,2,\ldots,l \end{aligned}$$

其中$x \in \mathbb{R}^n$，$c_i(x)$与$h_i(x)$都是连续可微的。

引入广义$\mathrm{Lagrange}$函数：

$$L(x,\alpha,\beta)=f(x)+\sum_{i=1}^{k}\alpha_i c_i(x)+\sum_{j=1}^{l}\beta_j h_j(x)$$

其中$\alpha$和$\beta$是$\mathrm{Lagrange}$乘子，$\alpha_i \geq 0$。

令$\theta_P(x)=\max\limits_{\alpha,\beta} L(x,\alpha,\beta)$，显然

$$\theta_P(x)=\begin{cases} f(x) & c_i(x) \leq 0, h_i(x) \neq 0 \\ +\infty & otherwise \end{cases}$$

于是，我们可以使用无约束的最优化问题（记为极小极大问题）

$$\min_x \max_{\alpha,\beta} L(x,\alpha,\beta)$$

作为有约束的优化问题

$$\begin{aligned} \min_x \quad & f(x) \\ s.t. \quad & c_i(x) \leq 0, \quad i=1,2,\ldots,k \\ & h_j(x)=0, \quad j=1,2,\ldots,l \end{aligned}$$

的替代。

自然地，我们在极小极大问题（原问题）的基础上，考虑其对偶问题，即极大极小问题：

$$\max_{\alpha,\beta} \min_x L(x,\alpha,\beta)$$

对应地，记$\min\limits_x L(x,\alpha,\beta)$为$\theta_D(x)$。

由于

$$\theta_D(x) \leq L(x,\alpha,\beta) \leq \theta_P(x), \quad \forall x \in \mathbb{R}^n$$

于是我们可以知道极小极大问题与极大极小问题的关系：

$$\max_{\alpha,\beta} \theta_D(x) \leq \min_x \theta_P(x)$$

即

$$\max_{\alpha,\beta}\min_{x} L(x,\alpha,\beta) \le \min_{x}\max_{\alpha,\beta} L(x,\alpha,\beta)$$

记$\max\limits_{\alpha,\beta}\min\limits_{x} L(x,\alpha,\beta)=d^*, \min\limits_{x}\max\limits_{\alpha,\beta} L(x,\alpha,\beta)=p^*$。由于对偶问题往往比原问题好解，所以我们希望可以通过求解对偶问题来求解原问题，最好两个问题的解也有联系。这里不加证明地给出两个定理：

**定理一：如果$f(x)$和$c_i(x)$都是凸函数且$h_j(x)$是仿射函数且满足Slater条件，则$d^*=p^*$，此时称为原问题具有强对偶性。**

其中Slater条件为：

$\exists x\in\mathbb{R}^n$，使得$c_i(x)<0,\forall i$（不等号能在部分定义域上对所有约束条件严格取到）。

注：仿射函数是指类似$h_j(x)=Ax+b$的函数。

其中，仿射函数指形如$h_j(x)=Ax+b$的函数。

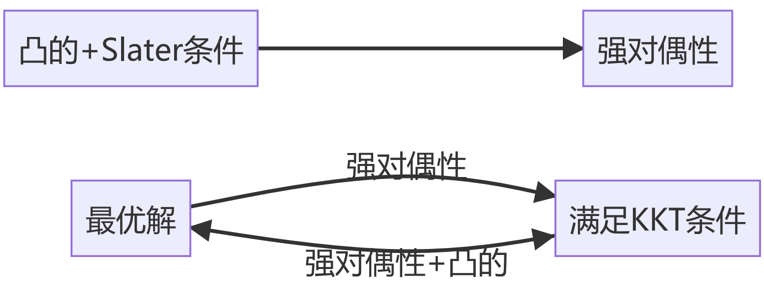
**定理二：对于具有强对偶性的问题，其最优解$x$和对偶问题的最优解$\alpha,\beta$必然满足Karush-Kuhn-Tucker(KKT)条件；如果该问题还同时满足：$f(x)$和$c_i(x)$都是凸函数且$h_j(x)$是仿射函数，则满足KKT条件的数据$x,\alpha,\beta$也一定分别是原问题和对偶问题的最优解。**

其中KKT条件为：

$$\begin{gathered}\frac{\partial L}{\partial x}=0 \quad (1)\\ \alpha_i c_i(x)=0 \quad (2)\\ c_i(x)\le 0, h_i(x)=0 \quad (3)\\ \alpha_i\ge 0 \quad (4)\end{gathered}$$

其中(1)被称为稳定性条件（stationarity），(2)被称为对偶松弛条件（complementary slackness），(3)被称为原问题可行性条件（primal feasibility），(4)被称为对偶问题可行性条件（dual feasibility）。

约定：如果$f(x)$和$c_i(x)$都是凸函数且$h_j(x)$是仿射函数，则称该问题是凸的。基于此，两个定理的联系逻辑图如下：




这两个定理告诉我们，如果满足一定的条件，原问题和对偶问题的最优值将相同，二者的解也有联系。

## 用Lagrange法求解问题（得到对偶问题）

我们将用Lagrange方法解上文的优化问题，首先写出广义Lagrange函数：

$$L(\omega,b,\alpha)=\frac{1}{2}||\omega||^2+\sum_{i=1}^{N}\alpha_i\left(1-y_i(\omega\cdot x_i+b)\right)$$

其中$\alpha_i\ge 0$。

我们根据上文可知，原本的有限制优化问题

$$\begin{aligned}\min_{\omega,b}\quad & \frac{1}{2}||\omega||^2\\ s.t.\quad & 1-y_i(\omega\cdot x_i+b)\le 0,\quad i=1,2,\dots,N\end{aligned}$$

将等价于极小极大问题：

$$\min_{\omega,b}\max_{\alpha}L(\omega,b,\alpha)$$

与Lagrange法的一般情况对比，$f(\omega,b)=\frac{1}{2}||\omega||^2$和$c_i(\omega,b)=1-y_i(\omega\cdot x_i+b)$都是凸函数，且此时$h_j(\omega,b)\equiv 0$是仿射函数，所以该问题是凸的；接下来，我们关注Slater条件是否成立：即证明$\exists(\omega,b)$，使得对于$\forall i$，都有$c_i(\omega,b)<0$。

考虑任一能将数据集$D$线性分开的超平面参数$(\omega_0,b_0)$，考虑线性可分的定义，即对数据集的每个点$(x_i,y_i)$，都有

$$y_i(\omega_0\cdot x_i+b_0)>0$$

记$\gamma_0=\min\limits_{D}y_i(\omega_0\cdot x_i+b_0)$，取$(\omega_0^{'},b_0^{'})=\left(\frac{2\omega_0}{\gamma_0},\frac{2b_0}{\gamma_0}\right)$，则有

$$1-y_i(\omega_0^{'}\cdot x_i+b_0^{'})\leq -1<0,\quad \forall i$$

于是Slater条件成立，问题是强对偶的。所以我们只需要解出对偶问题，就能根据KKT条件得到原问题的解，且两个解的最优值相同。对偶问题是

$$\max_{\alpha}\min_{\omega,b}L(\omega,b,\alpha)$$

首先我们需要计算$\min\limits_{\omega,b}L(\omega,b,\alpha)$，这只需令导数为0，即

$$\frac{\partial L}{\partial \omega}=\omega-\sum_{i=1}^{N}\alpha_i y_i x_i=0$$
$$\frac{\partial L}{\partial b}=-\sum_{i=1}^{N}\alpha_i y_i=0$$

代入化简后的广义Lagrange函数：

$$L(\omega,b,\alpha)=\frac{1}{2}\omega^2+\sum_{i=1}^{N}\alpha_i-\left(\sum_{i=1}^{N}\alpha_i y_i\cdot x_i\right)\omega-\left(\sum_{i=1}^{N}\alpha_i y_i\right)b$$

得到：

$$\min_{\omega,b}L(\omega,b,\alpha)=\sum_{i=1}^{N}\alpha_i-\frac{1}{2}\sum_{i,j}^{N}\alpha_i\alpha_j y_i y_j(x_i\cdot x_j)$$

即对偶问题为：

$$\begin{aligned}\max_{\alpha}\quad & \sum_{i=1}^{N}\alpha_i-\frac{1}{2}\sum_{i,j}^{N}\alpha_i\alpha_j y_i y_j(x_i\cdot x_j)\\ s.t.\quad & \alpha_i\geq 0,\quad i=1,2,\dots,N\\ & \sum_{i=1}^{N}\alpha_i y_i=0\end{aligned}$$

提出式子中的负号，变为

$$\begin{aligned}\min_{\alpha}\quad & \frac{1}{2}\sum_{i,j}^{N}\alpha_i\alpha_j y_i y_j(x_i\cdot x_j)-\sum_{i=1}^{N}\alpha_i\\ s.t.\quad & \alpha_i\geq 0,\quad i=1,2,\dots,N\\ & \sum_{i=1}^{N}\alpha_i y_i=0\end{aligned}$$

这个问题我们在求解线性不可分的支持向量机时再解。

### 对偶问题与原问题解的关系

先假设我们解得了对偶问题的最优解$\alpha^*$，我们可以根据$\mathrm{KKT}$条件：

$$\begin{cases} \frac{\partial L}{\partial \omega} = \omega - \sum\limits_{i=1}^{N} \alpha_i y_i x_i = 0, \quad \frac{\partial L}{\partial b} = -\sum\limits_{i=1}^{N} \alpha_i y_i = 0 \\ \alpha_i \left(1 - y_i(\omega \cdot x_i + b)\right) = 0 \\ 1 - y_i(\omega \cdot x_i + b) \leq 0 \\ \alpha_i \geq 0 \end{cases}$$

解出原问题的解$(\omega^*, b^*)$。首先易得到$\omega^* = \sum\limits_{i=1}^{N} \alpha_i^* y_i x_i$。其次，由上文可知，$\omega^* \neq 0$，所以$\alpha_i^*$不能全为0。选择任一$\alpha_j^* \neq 0$，则$1 - y_j(\omega^* \cdot x_j + b^*) = 0$。在两端同乘$y_j$，即$y_j - y_j^2(\omega^* \cdot x_j + b^*) = 0$。考虑$y_j^2 = 1$，化简得到

$$\omega^* = \sum_{i=1}^{N} \alpha_i^* y_i x_i$$

$$b^* = y_j - \sum_{i=1}^{N} \alpha_i^* y_i (x_i \cdot x_j)$$

将约束$\alpha_i \left(1 - y_i(\omega \cdot x_i + b)\right) = 0$两端求和：

$$\begin{aligned} \sum_{i=1}^{N} \alpha_i^* \left(1 - y_i(\omega^* \cdot x_i + b^*)\right) &= \sum_{i=1}^{N} \alpha_i^* - \left(\sum_{i=1}^{N} \alpha_i^* y_i x_i\right)\omega^* - \left(\sum_{i=1}^{N} \alpha_i^* y_i\right) b^* \\ &= \sum_{i=1}^{N} \alpha_i^* - ||\omega^*||^2 \\ &= 0 \end{aligned}$$

据此，我们可以用对偶问题的解表示原问题的最优值，即最小间隔：

$$\frac{2}{||\omega^*||} = \frac{2}{\sqrt{\sum\limits_{i=1}^{N} \alpha_i^*}}$$

从$\omega^*, b^*$的表达式可以看出，只有$\alpha_i^* > 0$的点对参数起作用，这些向量也就是我们上文提到的“支持向量”。由前文可知，当$\alpha_i \neq 0$时，有$y_i(\omega^* \cdot x_j + b^*) = 1$，这说明这些点恰好在两个超平面$\omega^* \cdot x + b^* = 1 (y_i = +1)$或$\omega^* \cdot x^* + b = -1 (y_i = -1)$上。

## 线性不可分（线性）支持向量机

### 引入松弛因子

首先明确：题目的第一个“线性”表示这里讨论的是数据集$D$不满足线性可分条件的情形；第二个“线性”表示我们的分类器依然是一个超平面，而非曲面。

对于某些非线性可分的数据集$D$，即

$$\forall \omega, b, \quad \exists x_i, y_i, \quad s.t. \quad y_i(\omega \cdot x_i + b) < 0$$

于是我们需要给误分类的点$(x_i, y_i)$加上一个松弛因子$\xi_i \geq 0$，就能保证$\exists \omega, b$，使得

$$y_i(\omega \cdot x_i + b) + \xi_i \geq 1, \quad \forall x_i, y_i$$

当然，我们希望松弛因子不要加太多，所以我们要在原优化目标上加上松弛因子的和，再乘上常数因子作为惩罚项，即原优化问题将变为；

$$
\begin{aligned}
\min_{\omega,b} \quad & \frac{1}{2}||\omega||^2 + C\sum_{i=1}^{N}\xi_i \\
s.t. \quad & 1 - y_i(\omega\cdot x_i + b) - \xi_i \le 0, \quad i = 1,2,\ldots,N \\
& -\xi_i \le 0, \quad i = 1,2,\ldots,N
\end{aligned}
$$

其中超参数$C \ge 0$，一般通过在验证集上的表现确定。$C$值越小，对松弛因子的惩罚越小，视觉上超平面的分类效果越差。

当然，"松弛因子的和"这一惩罚表述不是绝对的，我们有时也可以选用$\xi_i$的$p$次幂之和作为惩罚项，即：

$$
\begin{aligned}
\min_{\omega,b} \quad & \frac{1}{2}||\omega||^2 + C\sum_{i=1}^{N}\xi_i^p \\
s.t. \quad & 1 - y_i(\omega\cdot x_i + b) - \xi_i \le 0, \quad i = 1,2,\ldots,N \\
& -\xi_i \le 0, \quad i = 1,2,\ldots,N
\end{aligned}
$$

其中超参数$p \ge 0$，也可以通过在验证集上的表现确定。

## 原问题与结构风险最小化的联系

通过观察原问题，我们可以注意到，对于最优解$(\omega^*, b^*)$，如果$\xi_i^* < \max\left(1 - y_i(\omega^*\cdot x_i + b^*), 0\right)$，则满足不了约束；如果$\xi_i^* > \max\left(1 - y_i(\omega^*\cdot x_i + b^*), 0\right)$，则不能保证$\sum_{i=1}^{N}\xi_i$最小。因此$\xi_i$的最优解$\xi_i^*$必为$\max\left(1 - y_i(\omega^*\cdot x_i + b^*), 0\right)$。所以我们不妨直接令$\xi_i = \max\left(1 - y_i(\omega\cdot x_i + b), 0\right)$，代入原优化问题可以得到等价的无限制优化问题：

$$
\min_{\omega,b} \quad \frac{1}{2}||\omega||^2 + C\sum_{i=1}^{N}\max\left(1 - y_i(\omega\cdot x_i + b), 0\right)
$$

令$h(x) = \max(1 - x, 0)$，则等价于

$$
\min_{\omega,b} \quad \sum_{i=1}^{N} h\left(y_i(\omega\cdot x_i + b)\right) + C'||\omega||^2
$$

我们可以看出，原问题等价于损失函数为$h(x)$时的结构风险最小化问题。其中由于$h(x)$的图像长得像门上的合页，所以称$h(x)$为合页函数。

对应地，可以发现，如果我们不使用松弛因子的和作为惩罚项，而用"使用松弛因子的数据点的数目"作为惩罚项，即：

$$
\begin{aligned}
\min_{\omega,b} \quad & \frac{1}{2}||\omega||^2 + C\sum_{i=1}^{N}\mathbb{I}(\xi_i \ne 0) \\
s.t. \quad & 1 - y_i(\omega\cdot x_i + b) - \xi_i \le 0, \quad i = 1,2,\ldots,N \\
& -\xi_i \le 0, \quad i = 1,2,\ldots,N
\end{aligned}
$$

该问题将等价于损失函数为$0-1$函数时的结构风险最小化问题，即：

$$
\min_{\omega,b} \quad \sum_{i=1}^{N} g\left(y_i(\omega\cdot x_i + b)\right) + C'||\omega||^2
$$

其中

$$
g(x) = \begin{cases} 1 & x > 0 \\ 0 & x \le 0 \end{cases}
$$

### 最优超平面的存在性（唯一性见下文）

这里先只证明最优超平面一定存在。对$\forall \omega, b$，只需取$\xi_i = 1 - y_i(\omega \cdot x_i + b)$，再从中选取使$\frac{1}{2}||\omega||^2 + C\sum_{i=1}^{N}\xi_i$最小的$(\omega, b, \xi)$作为最优解即可。

### 对偶问题的形式

为了求解原问题，我们仍然采用Lagrange方法。首先写出广义Lagrange函数：

$$L(\omega, b, \xi, \alpha, \beta) = \frac{1}{2}||\omega||^2 + C\sum_{i=1}^{N}\xi_i + \sum_{i=1}^{N}\alpha_i\left(1 - y_i(\omega \cdot x_i + b) - \xi_i\right) - \sum_{i=1}^{N}\beta_i\xi_i$$

其中$\alpha_i \geq 0, \beta_i \geq 0$。

与线性情况类似地，原问题等价于Lagrange函数的极小极大问题：

$$\min_{\omega,b,\xi}\max_{\alpha,\beta} L(\omega, b, \xi, \alpha, \beta)$$

与线性情况类似，可以判定该问题是凸的。任取$(\omega_0, b_0)$，取$\xi_i = \max(2 - \min_D y_i(\omega_0 \cdot x_i + b_0), 1)$，则有

$$\begin{aligned} 1 - y_i(\omega \cdot x_i + b) - \xi_i \leq -1 < 0, \quad & i = 1, 2, \ldots, N \\ -\xi_i \leq -1 < 0, \quad & i = 1, 2, \ldots, N \end{aligned}$$

即不等式是严格可行的，满足Slater条件，所以问题是强对偶的。

于是我们只需要考虑对偶问题$\max_{\alpha,\beta}\min_{\omega,b,\xi} L(\omega, b, \xi, \alpha, \beta)$，先求$\min_{\omega,b,\xi} L(\omega, b, \xi, \alpha, \beta)$，令导数为0：

$$\begin{aligned} \frac{\partial L}{\partial \omega} &= \omega - \sum_{i=1}^{N}\alpha_i y_i x_i = 0 \\ \frac{\partial L}{\partial b} &= -\sum_{i=1}^{N}\alpha_i y_i = 0 \\ \frac{\partial L}{\partial \xi_i} &= C - \alpha_i - \beta_i = 0 \end{aligned}$$

代入化简后的广义Lagrange函数：

$$L(\omega, b, \xi, \alpha, \beta) = \frac{1}{2}\omega^2 + \sum_{i=1}^{N}\alpha_i + \sum_{i=1}^{N}(C - \alpha_i - \beta_i)\xi_i - \left(\sum_{i=1}^{N}\alpha_i y_i \cdot x_i\right)\omega - \left(\sum_{i=1}^{N}\alpha_i y_i\right)b$$

得到：

$$\min_{\omega,b} L(\omega, b, \xi, \alpha, \beta) = \sum_{i=1}^{N}\alpha_i - \frac{1}{2}\sum_{i,j}^{N}\alpha_i\alpha_j y_i y_j(x_i \cdot x_j)$$

即对偶问题为：

$$\begin{aligned} \max_{\alpha} \quad & \sum_{i=1}^{N}\alpha_i - \frac{1}{2}\sum_{i,j}^{N}\alpha_i\alpha_j y_i y_j(x_i \cdot x_j) \\ s.t. \quad & \alpha_i \geq 0, \quad i = 1, 2, \ldots, N \\ & \beta_i \geq 0 \\ & C - \alpha_i - \beta_i = 0 \\ & \sum_{i=1}^{N}\alpha_i y_i = 0 \end{aligned}$$

提出式子中的负号，并将$\beta_i$消掉，变为

$$
\begin{aligned}
\min_{\alpha} \quad & \frac{1}{2}\sum_{i,j}^{N}\alpha_i\alpha_j y_i y_j (x_i\cdot x_j) - \sum_{i=1}^{N}\alpha_i \\
s.t. \quad & 0 \le \alpha_i \le C, \quad i=1,2,\ldots,N \\
& \sum_{i=1}^{N}\alpha_i y_i = 0
\end{aligned}
$$

与线性可分时对比，除了限制条件多了$\alpha_i \le C$外，其他部分没有区别。

这个问题我们同样在求解线性不可分的支持向量机时再解。

### 对偶问题与原问题解的关系

同样地，先假设我们解得了对偶问题的最优解$\alpha^*,\beta^*$，我们可以根据KKT条件：

$$
\begin{cases}
\frac{\partial L}{\partial \omega} = \omega - \sum\limits_{i=1}^{N}\alpha_i y_i x_i = 0, \quad \frac{\partial L}{\partial b} = -\sum\limits_{i=1}^{N}\alpha_i y_i = 0, \quad \frac{\partial L}{\partial \xi_i} = C - \alpha_i - \beta_i = 0 \\
\alpha_i\left(1 - y_i(\omega\cdot x_i + b) - \xi_i\right) = 0, \quad -\beta_i\xi_i = 0 \\
1 - y_i(\omega\cdot x_i + b) - \xi_i \le 0, \quad -\xi_i \le 0 \\
\alpha_i \ge 0, \quad \beta_i \ge 0
\end{cases}
$$

解出原问题的最优解$(\omega^*,b^*,\xi^*)$。首先易得到$\omega^* = \sum\limits_{i=1}^{N}\alpha_i^* y_i x_i$。接下来我们证明，$\alpha_i^*$不能全为$0$：

假设$\alpha_i^*$全为$0$，则$\omega^*=0,\beta_i^*=C$。由$-\beta_i^*\xi_i^*=0$知，$\xi_i^*=0$，即$y_i b^* \ge 1$。由于$D$中同时有正例和负例点，所以不可能对$\forall i$，都有$y_i b^* \ge 1$，矛盾。原命题得证。

在下文正式求解对偶问题时可以证明，最优解$\alpha^*$是唯一的，于是$\omega^*$也是唯一的。取$b_2 \ne b_1 = b^*$，则对任一$\alpha_j^* > 0$，有

$$
\begin{aligned}
1 - y_j(\omega^*\cdot x_j + b_1) - \xi_{1j}^* = 0 \\
1 - y_j(\omega^*\cdot x_j + b_2) - \xi_{2j}^* = 0
\end{aligned}
$$

两式相减并求和：

$$
\left(\sum_{j,\alpha_j^*>0} y_j\right)(b_2 - b_1) = \sum_{j,\alpha_j^*>0}\xi_{1j}^* - \sum_{j,\alpha_j^*>0}\xi_{2j}^*
$$

由上文知，$\alpha_i^*=0$时，$\xi_i^*=0$。于是$\sum\limits_{j,\alpha_j^*>0}\xi_{1j}^* - \sum\limits_{j,\alpha_j^*>0}\xi_{2j}^* = \sum\limits_{j}\xi_{1j}^* - \sum\limits_{j}\xi_{2j}^*$。代入上式：

$$
\left(\sum_{j,\alpha_j^*>0} y_j\right)(b_2 - b_1) = \sum_{j}\xi_{1j}^* - \sum_{j}\xi_{2j}^*
$$

当$\sum\limits_{j,\alpha_j^*>0} y_j = 0$时，既有$\sum\limits_{j}\xi_{1j}^* = \sum\limits_{j}\xi_{2j}^*$，即$b_2$也是最优解，$b^*$不是唯一的，最优超平面也不是唯一的。注意：$\sum\limits_{j,\alpha_j^*>0} y_j = 0$是最优超平面不唯一的充分必要条件。接下来我们尝试解出$b^*$：

当$\alpha_i^*$不全为$C$时，我们只需取任一$0<\alpha_j^*<C$，则有$0<\beta_j^*<C$。由$-\beta_i^*\xi_i^*=0$知，$\xi_i^*=0$。即$b^* = y_j - \sum\limits_{i=1}^{N}\alpha_i^* y_i (x_i\cdot x_j)$。$b^*$不唯一，会随着$\alpha_j^*$的不同而变化，但最多有$N$个取值。

当$\alpha_i^*=C$时，由$-\sum\limits_{i=1}^{N}\alpha_i y_i = 0$可知，必有$\sum\limits_{i=1}^{N} y_i = 0$，即正类点和负类点的数目相同。取任一$\alpha_j^*=C$，代入$\alpha_i\left(1 - y_i(\omega\cdot x_i + b) - \xi_i\right) = 0$可知$\xi_i^* > 0, \forall i$，且$b^* = y_i(1-\xi_j^*) - C\sum\limits_{i=1}^{N} y_i (x_i\cdot x_j)$，此时$b^*$也不唯一，只要$\xi_j^*$符合限制条件，$\alpha_j^*$就随之变化，有无穷个取值。

于是，我们可以得到最优解：

$$\omega^* = \sum_{i=1}^{N} \alpha_i^* y_i x_i$$

$$b^* = \begin{cases} y_j - \sum\limits_{i=1}^{N} \alpha_i^* y_i (x_i \cdot x_j) & 0 < \alpha_j^* < C, \exists j \\ y_j(1-\xi_j^*) - C\sum\limits_{i=1}^{N} y_i(x_i \cdot x_j) & \alpha_j^* = C, \forall j \end{cases}$$

实际编程实现时，一般将若干个$\alpha_j^* > 0$代入得到的$b^*$求均值作为最优超平面的截距。

我们也关心软间隔能否由$\alpha_i$表示。类似地，我们将约束$\alpha_i\left(1-y_i(\omega \cdot x_i + b) - \xi_i\right) = 0$两端求和：

$$\begin{aligned}\sum_{i=1}^{N} \alpha_i^* \left(1-y_i(\omega^* \cdot x_i + b^*) - \xi_i^*\right) &= \sum_{i=1}^{N} \alpha_i^* - \left(\sum_{i=1}^{N} \alpha_i^* y_i x_i\right)\omega^* - \left(\sum_{i=1}^{N} \alpha_i^* y_i\right) b^* - \sum_{i=1}^{N} \alpha_i^* \xi_i^* \\ &= \sum_{i=1}^{N} \alpha_i^*(1-\xi_i^*) - ||\omega^*||^2 \\ &= 0\end{aligned}$$

于是最大软间隔可表示为：

$$\frac{2}{||\omega^*||} = \frac{2}{\sqrt{\sum\limits_{i=1}^{N} \alpha_i^*(1-\xi_i^*)}}$$

### 几何意义

不同$\alpha_i^*, \xi_i^*$的取值对应的数据点有不同的几何意义，如下表：

| | $\alpha_i^* = 0$ | $0 < \alpha_i^* < C$ | $\alpha_i^* = C$ |
|---|---|---|---|
| $\xi_i^* = 0$ | 两个超平面上/两个超平面外 | **两个超平面上** | **两个超平面上** |
| $0 < \xi_i^* < 1$ | / | / | **两个超平面之间** |
| $\xi_i^* = 1$ | / | / | **两个超平面中间** |
| $\xi_i^* > 1$ | / | / | **两个超平面之间** |

其中加粗代表是支持向量，斜体代表被错误分类，/代表不可能出现此种情况。

## 非线性支持向量机

### 核心思想

有些数据采用超平面会难以分开，但用超曲面会很好分开。比如考虑正例点：$\{(x,1)|x_1^2+x_2^2=1\}$和负例点：$\{(x,-1)|x_1^2+x_2^2=2\}$组成的数据集$D$，显然该数据集是线性不可分的，但用一个超曲面：$x^2=1.5$就能将数据集完全分开。这启示我们寻找一个映射$\phi(\mathcal{X}): \mathcal{X} \to \mathcal{Z}$ 将数据点从原空间$\mathcal{X}$映射到更容易分类的特征空间$\mathcal{Z}$中。在上例中，$\phi(x)=x^2$。如果我们能找到这样的映射，那么原优化问题将会变为：

$$\begin{aligned} \min_{\omega,b} \quad & \frac{1}{2}||\omega||^2 + C\sum_{i=1}^{N}\xi_i \\ s.t. \quad & 1-y_i(\omega \cdot \phi(x_i) + b) - \xi_i \le 0, \quad i=1,2,\dots,N \\ & -\xi_i \le 0, \quad i=1,2,\dots,N \end{aligned}$$

对偶问题将变为：

$$
\begin{aligned}
\min_{\alpha} \quad & \frac{1}{2}\sum_{i,j}^{N}\alpha_i\alpha_j y_i y_j\left(\phi(x_i)\cdot\phi(x_j)\right)-\sum_{i=1}^{N}\alpha_i \\
s.t. \quad & 0\le\alpha_i\le C,\quad i=1,2,\ldots,N \\
& \sum_{i=1}^{N}\alpha_i y_i=0
\end{aligned}
$$

其中对偶问题的解法与线性支持向量机时完全一致。得到$\alpha^*$后，我们就可以解得新的超曲面为

$$
\omega^*\cdot\phi(x)+b^*=0
$$

其中$\omega^*=\sum\limits_{i=1}^{N}\alpha_i^* y_i\phi(x_i), b^*$也能同样地由KKT条件得到：

$$
\begin{aligned}
\omega^* &= \sum_{i=1}^{N}\alpha_i^* y_i\phi(x_i) \\
b^* &= y_j-\sum_{i=1}^{N}\alpha_i^* y_i\left(\phi(x_i)\cdot\phi(x_j)\right),\quad 0<\alpha_j^*<C
\end{aligned}
$$

即当$\alpha_i^*$不全为$C$时，超曲面为

$$
\sum_{i=1}^{N}\alpha_i^* y_i\left(\phi(x_i)\cdot\phi(x)\right)+y_j-\sum_{i=1}^{N}\alpha_i^* y_i\left(\phi(x_i)\cdot\phi(x_j)\right)=0,\quad 0<\alpha_j^*<C
$$

### 核函数

然而我们往往难以直接确定$\phi(x)$，我们发现，超曲面的参数都是由$\phi(x_i)\cdot\phi(x_j)$的形式给出，所以我们换个思路：如果能直接定义$K(x_i,x_j)\equiv\phi(x_i)\cdot\phi(x_j)$，则不需要显式定义$\phi(x)$，直接就可以得到超曲面：

$$
\sum_{i=1}^{N}\alpha_i^* y_i K(x_i,x)+y_j-\sum_{i=1}^{N}\alpha_i^* y_i K(x_i,x_j)=0,\quad 0<\alpha_j^*<C
$$

当$K(x_i,x_j)=x_i\cdot x_j$时，即为线性支持向量机的情形。我们称$K(x_i,x_j)$为核函数，这种"替代"的思路为核技巧。

如果$K(x_i,x_j)$的Gram矩阵是对称半正定的，我们就称$K(x_i,x_j)$是正定对称核函数。常用的正定对称核函数有：

多项式核函数：$K(x_i,x_j)=(x_i\cdot x_j+c)^d$，其中超参数$c\ge 0,d>0$；

Gauss核函数：$K(x_i,x_j)=\exp\left(-\frac{||x_i-x_j||^2}{2\sigma^2}\right)$，其中超参数$\sigma^2>0$。

核函数与超参数的选取都和惩罚项因子$C$的选取一样，通过在验证集上的表现而定。

## SMO算法

最后我们要想办法求解对偶问题：

$$
\begin{aligned}
\min_{\alpha} \quad & \frac{1}{2}\sum_{i,j}^{N}\alpha_i\alpha_j y_i y_j K(x_i,x_j)-\sum_{i=1}^{N}\alpha_i \\
s.t. \quad & 0\le\alpha_i\le C,\quad i=1,2,\ldots,N \\
& \sum_{i=1}^{N}\alpha_i y_i=0
\end{aligned}
$$

此问题是有限制的凸二次优化问题，该问题有唯一解。记$K(x_i,x_j)=K_{ij}$，该优化问题中有$N$个参数，传统方法将非常耗时。Platt提出了Sequence-Minimal-Optimization(SMO)算法，即每次只优化尽量少的参数，而固定其他参数不变。由于有限制$\sum\limits_{i=1}^{N}\alpha_i y_i=0$，所以一次最少更改两个参数。

## $\alpha_1,\alpha_2$的选取

首先我们需要确定每次更改哪几个参数。第一个需要更改的$\alpha_1$是违反KKT条件最严重的$\alpha_i$：

$$\alpha_1=\arg\max_{\alpha_i}\begin{cases}\max(1-y_i(\omega^*\cdot x+b^*),0) & \alpha_i=0(\xi_i=0,y_i(\omega^*\cdot x+b^*)\geq 1)\\ |1-y_i(\omega^*\cdot x+b^*)| & 0\leq\alpha_i\leq C(\xi_i=0,y_i(\omega^*\cdot x+b^*)=1)\\ \max(y_i(\omega^*\cdot x+b^*)-1,0) & \alpha_i=C(\xi_i\geq 0,y_i(\omega^*\cdot x+b^*)\leq 1)\end{cases}$$

第二个需要更改的$\alpha_2$我们将在本节的最后给出选取规则。我们这里假设我们已经选好了合适的$\alpha_2$。

## 两个参数的凸二次规划问题的解析解

接下来，我们求解在固定$\alpha_i(i\geq 3)$的条件下，如何更新$\alpha_1$和$\alpha_2$：

记优化目标函数为$W(\alpha_1,\alpha_2)$，由$y_1^2=y_2^2=1$知：

$$\begin{aligned}W(\alpha_1,\alpha_2)&=\frac{1}{2}\sum_{i,j}^{N}\alpha_i\alpha_j y_i y_j K_{ij}-\sum_{i=1}^{N}\alpha_i\\&=\frac{1}{2}\alpha_1^2K_{11}+\frac{1}{2}\alpha_2^2K_{22}+\alpha_1\alpha_2y_1y_2K_{12}+\alpha_1y_1\sum_{j=3}^{N}\alpha_jy_jK_{1j}+\alpha_2y_2\sum_{j=3}^{N}\alpha_jy_jK_{2j}\\&+\sum_{i\geq 3,j\geq 3}^{N}\alpha_i\alpha_jy_iy_jK_{ij}-\alpha_1-\alpha_2+\sum_{i=3}^{N}\alpha_i\end{aligned}$$

记$y_1y_2=s\in\{-1,+1\},v_i=\sum\limits_{j=3}^{N}\alpha_jy_jK_{1j}(i=1,2)$，由于$\sum\limits_{i\geq 3,j\geq 3}^{N}\alpha_i\alpha_jy_iy_jK_{ij}$与$\sum\limits_{i=3}^{N}\alpha_i$两项与$\alpha_1,\alpha_2$都无关，可以记成常数$C^{'}$。

约束$\sum\limits_{i=1}^{N}\alpha_iy_i=0$可以改为：

$$\alpha_1y_1+\alpha_2y_2=-\sum_{i=3}^{N}\alpha_iy_i$$

在等号两端同乘$y_i$：

$$\alpha_1+s\alpha_2=-y_1\sum_{i=3}^{N}\alpha_iy_i$$

令$\gamma=-y_1\sum\limits_{i=3}^{N}\alpha_iy_i$，可以用$\alpha_2$表示$\alpha_1$：

$$\alpha_1=\gamma-s\alpha_2$$

于是原约束问题可以改为：

$$\begin{aligned}\min_{\alpha_2}\quad&\frac{1}{2}(\gamma-s\alpha_2)^2K_{11}+\frac{1}{2}\alpha_2^2K_{22}+s(\gamma-s\alpha_2)\alpha_2K_{12}+(\gamma-s\alpha_2)y_1v_1+\alpha_2y_2v_2-(\gamma-s\alpha_2)-\alpha_2+C^{'}\\ s.t.\quad&0\leq\alpha_2\leq C\\&0\leq\gamma-s\alpha_2\leq C\end{aligned}$$

考虑$s^2=y_1^2y_2^2=1$，化简得$W(\alpha_2)$的二次项$\frac{1}{2}(K_{11}-2K_{12}+K_{22})$，当$\frac{1}{2}(K_{11}-2K_{12}+K_{22})>0$时，$W(\alpha_2)$是开口向上的二次函数，$\arg\min\limits_{\alpha_2}\quad W(\alpha_2)$就是$\frac{\partial W(\alpha_2)}{\partial\alpha_2}=0$的解。令$\frac{\partial W(\alpha_2)}{\partial\alpha_2}=0$，即

$$\frac{\partial W(\alpha_2)}{\partial \alpha_2} = (K_{11} - 2K_{12} + K_{22})\alpha_2 - [\gamma s(K_{11} - K_{12}) + y_2(v_1 - v_2) + 1 - s] = 0$$

解得

$$\alpha_2^{new} = \frac{\gamma s(K_{11} - K_{12}) + y_2(v_1 - v_2) + 1 - s}{K_{11} - 2K_{12} + K_{22}}$$

此式子可以在形式上进一步化简：考虑当前的超平面$f(x) = \omega \cdot x + b = \sum_{i=1}^{N} \alpha_i y_i K(x_i, x) + b$，于是

$$f(x_1) = v_1 + \alpha_1 y_1 K_{11} + \alpha_2 y_2 K_{12} + b$$
$$f(x_2) = v_2 + \alpha_1 y_1 K_{21} + \alpha_2 y_2 K_{22} + b$$

将$\alpha_1 = \gamma - s\alpha_2$，二式相减得：

$$v_1 - v_2 = f(x_1) - f(x_2) + \alpha_2 y_2 (K_{11} - 2K_{12} + K_{22}) - \gamma y_1 (K_{11} - K_{22})$$

代入得：

$$\begin{aligned}
\alpha_2^{new} &= \frac{\gamma s(K_{11} - K_{12}) + y_2(v_1 - v_2) + 1 - s}{K_{11} - 2K_{12} + K_{22}} \\
&= \frac{\gamma s(K_{11} - K_{12}) + y_2(f(x_1) - f(x_2)) + \alpha_2(K_{11} - 2K_{12} + K_{22}) - \gamma s(K_{11} - K_{22}) + 1 - s}{K_{11} - 2K_{12} + K_{22}} \\
&= \alpha_2 + \frac{y_2(f(x_1) - f(x_2)) + y_2^2 - y_1 y_2}{K_{11} - 2K_{12} + K_{22}} \\
&= \alpha_2 + y_2 \frac{f(x_1) - f(x_2) + y_2 - y_1}{K_{11} - 2K_{12} + K_{22}} \\
&= \alpha_2^{old} + y_2 \frac{(f(x_1) - y_1) - (f(x_2) - y_2)}{K_{11} - 2K_{12} + K_{22}}
\end{aligned}$$

以上是当$\frac{1}{2}(K_{11} - 2K_{12} + K_{22}) > 0$时的情况。$\frac{1}{2}(K_{11} - 2K_{12} + K_{22}) = 0$时，$W(\alpha_2)$是一次函数，由上式知，其斜率为$-[\gamma s(K_{11} - K_{12}) + y_2(v_1 - v_2) + 1 - s] \equiv -y_2[(f(x_1) - y_1) - (f(x_2) - y_2)]$。此时$\arg\min_{\alpha_2} W(\alpha_2)$在$\alpha_2 = \pm\infty$处取得（当斜率也为0时，$\arg\min_{\alpha_2} W(\alpha_2)$为任意值）：

$$\alpha_2^{new} = \begin{cases} -\infty & -y_2[(f(x_1) - y_1) - (f(x_2) - y_2)] < 0 \\ \forall \alpha_2 \in \mathbb{R} & -y_2[(f(x_1) - y_1) - (f(x_2) - y_2)] = 0 \\ \infty & -y_2[(f(x_1) - y_1) - (f(x_2) - y_2)] > 0 \end{cases}$$

由于

$$(\phi(x_1) - \phi(x_2))^2 \geq 0 \Rightarrow \phi(x_1) \cdot \phi(x_1) + \phi(x_2) \cdot \phi(x_2) \geq 2\phi(x_1) \cdot \phi(x_2) \Rightarrow K_{11} - 2K_{12} + K_{22} \geq 0$$

所以不会出现$\frac{1}{2}(K_{11} - 2K_{12} + K_{22}) < 0$的情况。

## 解的剪辑

然而，考虑到$\alpha_2$的限制，有时$\alpha_2^{new}$不一定能取到。所以我们需要判断$\alpha_2$的上下界与$\alpha_2^{new}$的关系。我们把这一过程称为解的剪辑。

当$y_1, y_2$同号，即$s = 1$时，有

$$0 \leq \alpha_1 \leq C$$
$$0 \leq \alpha_2 \leq C$$
$$\alpha_1 + \alpha_2 = \gamma$$

这是一个线性规划问题，易得$\alpha_2$的取值范围：

$$\max(0, \gamma - C) \leq \alpha_2 \leq \min(C, \gamma)$$

当$y_1, y_2$同号，即$s = -1$时，有

$$
\begin{gathered}
0 \le \alpha_1 \le C \\
0 \le \alpha_2 \le C \\
\alpha_1 - \alpha_2 = \gamma
\end{gathered}
$$

同样地，可以得到$\alpha_2$的取值范围：

$$\max(0, -\gamma) \le \alpha_2 \le \min(C, C - \gamma)$$

令$L$为$\alpha_2$的下界，$H$为$\alpha_2$的上界，则有

$$
\begin{gathered}
L = \begin{cases} \max(0, -\gamma) & s = -1 \\ \max(0, \gamma - C) & s = 1 \end{cases} \\
H = \begin{cases} \min(C, C - \gamma) & s = -1 \\ \min(C, \gamma) & s = 1 \end{cases}
\end{gathered}
$$

剪辑后的解$\alpha_2^{new,clipped}$为：

$$
\alpha_2^{new} = \begin{cases} L & \alpha_2^{new,unclipped} < L \\ \alpha_2^{new,unclipped} & L \le \alpha_2^{new,unclipped} \le H \\ H & \alpha_2^{new,unclipped} > H \end{cases}
$$

相应地，也可以得到$\alpha_1^{new}$：

$$
\begin{aligned}
\alpha_1^{new} &= \gamma - s\alpha_2^{new} \\
&= \alpha_1^{old} + s\alpha_2^{old} - s\alpha_2^{new} \\
&= \alpha_1^{old} - s(\alpha_2^{new} - \alpha_2^{old})
\end{aligned}
$$

于是我们完成了原问题的求解。

最后，如何选择$\alpha_2$呢？我们选择除$\alpha_1$外，每次更新时使对偶优化目标改善最大的$\alpha_i$：

$$\alpha_2 = \arg\min_{\alpha_i} \quad W(\alpha_1, \alpha_{i\neq 1}^{old}) - W(\alpha_1, \alpha_{i\neq 1}^{new})$$

将$W(\alpha_1, \alpha_2)$的表达式代入，可以化简得到：

$$W(\alpha_1, \alpha_{i\neq 1}^{old}) - W(\alpha_1, \alpha_{i\neq 1}^{new}) = y_i[(f(x_1) - y_1) - (f(x_i) - y_i)]\delta\alpha_i - \frac{1}{2}(K_{11} - 2K_{1i} + K_{ii})(2\alpha_i\delta\alpha_i + \delta\alpha_i^2)$$

其中$\delta\alpha_i = \alpha_i^{new} - \alpha_i^{old}$。所以在代码实现时，实际上我们是先计算好每个$\alpha_{i\neq 1}$的变化$\delta\alpha_i$，再代入计算$W(\alpha_1, \alpha_{i\neq 1}^{old}) - W(\alpha_1, \alpha_{i\neq 1}^{new})$，选择改善最大的$\alpha_i$。为了加快计算速度，可以将$y_i[(f(x_1) - y_1) - (f(x_i) - y_i)]$，$\frac{1}{2}(K_{11} - 2K_{1i} + K_{ii})$等元素计算好储存，在选择$\alpha_2$时可以复用。

## 更新超曲面

由于挑选$\alpha_1$时需要计算违反KKT条件的程度，所以我们需要在每次迭代后重新计算$b^{new}$和$f^{new}(x)$（由于我们不知道$\phi(x)$，所以我们无法求得$\omega^{new}$）。注意，$b^*$不唯一，所以我们此时令$b^{new} = \frac{1}{\mathbb{I}(\alpha_j^* \neq 0)} \sum_{j, \alpha_j^{new} > 0} b_j^{new}$

即可。其中

$$b_j^{new} = y_j - \sum_{i=1}^{N} \alpha_i y_i K(x_i, x_j), \quad 0 < \alpha_j < C$$

综上所述，

$$f^{new}(x) = \sum_{i=1}^{N} \alpha_i y_i K(x_i, x) + b^{new}$$

然后继续迭代，直到所有$\alpha_i$都满足KKT条件。因为问题是凸且强对偶的，所以满足KKT条件的解也一定是最优解。

### 代码实现建议

在具体实现时，初始化$\alpha = 0$，$b$为任意随机数即可，因为$\xi$会隐性地协助我们满足约束条件，而不用显式定义。