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ω和b，使$L(\omega,b)$最小（为0）。算法流程如下：

1）在迭代前，设置ω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η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？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ω_{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Cauthy-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，γ和R表示出$||\omega_k^+||$的上界，这指引我们构造ω_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，ω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：

$$\omega_{opt}=\sum_{i=1}^{N}\alpha_iy_ix_i,\quad b_{opt}=\sum_{i=1}^{N}\alpha_iy_i$$

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α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α_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$y_i(\omega\cdot x_i+b)=y_i\left(\sum_{j=1}^{N}\alpha_jy_j(x_j\cdot x_i+1)\right)\geq 0$，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ω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α_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(ω,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γ同时增大k倍，所以γ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(ω_0,b_0)是问题的可行解。则有

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

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

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

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”）。

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Lagrange法求解该问题。首先简单介绍Lagrange法：

考虑如下带约束的最优化问题：

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

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Lagrange函数：

$$L(x,\alpha,\beta)=f(x)+\sum_{i=1}^k\alpha_ic_i(x)+\sum_{j=1}^l\beta_jh_j(x)$$

其中α和β是Lagrange乘子，$\alpha_i\ge 0$。

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

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

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

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

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

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

于是我们可以知道极小极大问题与极大极小问题的关系：

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

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。

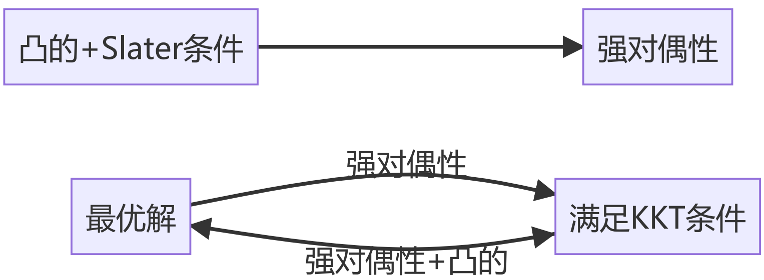
定理二：对于具有强对偶性的问题，其最优解x和对偶问题的最优解α,β必然满足$\mathrm{Karush\text{-}Kuhn\text{-}Tucker(KKT)}$条件；如果该问题还同时满足：$f(x)$和$c_i(x)$都是凸函数且$h_j(x)$是仿射函数，则满足$\mathrm{KKT}$条件的数据$x,\alpha,\beta$也一定分别是原问题和对偶问题的最优解。

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$\mathrm{Lagrange}$法求解问题（得到对偶问题）

我们将用$\mathrm{Lagrange}$方法解上文的优化问题，首先写出广义$\mathrm{Lagrange}$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(ω_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α^*，我们可以根据KKT条件：

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

解出原问题的解(ω^*,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ω^*,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；

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

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ξ_i的p次幂之和作为惩罚项，即：

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

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(ω^*,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：

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

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$\frac{1}{2}||\omega||^2 + C\sum\limits_{i=1}^{N}\xi_i$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(ω_0, b_0)，取$\xi_i = \max(2 - \min\limits_{D} y_i(\omega_0 \cdot x_i + b_0), 1)$，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$\max\limits_{\alpha, \beta}\min\limits_{\omega, b, \xi} L(\omega, b, \xi, \alpha, \beta)$，先求$\min\limits_{\omega, b, \xi} L(\omega, b, \xi, \alpha, \beta)$，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：

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

即对偶问题为：

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

提出式子中的负号，并将β_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α^*,β^*，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(ω^*,b^*,ξ^*)。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α_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α^*是唯一的，于是ω^*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α_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α_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α_i^*, ξ_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：

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

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α^*后，我们就可以解得新的超曲面为

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

其中$\omega^*=\sum_{i=1}^{N}\alpha_i^* y_i\phi(x_i), b^*$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α_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$c\ge0,d>0$;

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。

α_1,α_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α_1是违反KKT条件最严重的α_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α_2是除α_1外，每次更新时变化最大的α_i：

$$\alpha_2=\arg\max_{\alpha_i}\quad|a_i^{new}-a_i^{old}|$$

所以实际的逻辑是：我们比较除α_1外的任一α_i，都计算a_i^{new}，然后选择$|a_i^{new}-a_i^{old}|$最大的α_i作为真实更新的参数。

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α_1和α_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：

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

发现$W(\alpha_2)$是一个二次函数，考虑$s^2=y_1^2y_2^2=1$，$W(\alpha_2)$的二次项$\frac{1}{2}(K_{11}-2K_{12}+K_{22})$，显然:

$$(\phi(x_1)-\phi(x_2))^2 \geq 0 \Rightarrow \phi(x_1)\cdot\phi(x_1)+\phi(x_2)\cdot\phi(x_2) \geq 2\phi(x_1)\cdot\phi(x_2)$$

于是$W(\alpha_2)$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$f(x)=\omega\cdot x+b=\sum\limits_{i=1}^{N}\alpha_i y_i K(x_i,x)+b$，于是

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

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:

$$\begin{aligned}
\alpha_2^{new}&=\frac{\gamma s(K_{11}-K_{12})+y_2(v_1-v_2)+1-s}{K_{11}-2K_{12}+K_{22}}\\
&=\frac{\gamma s(K_{11}-K_{12})+y_2(f(x_1)-f(x_2))+\alpha_2(K_{11}-2K_{12}+K_{22})-\gamma s(K_{11}-K_{22})+1-s}{K_{11}-2K_{12}+K_{22}}\\
&=\alpha_2+\frac{y_2(f(x_1)-f(x_2))+y_2^2-y_1y_2}{K_{11}-2K_{12}+K_{22}}\\
&=\alpha_2+y_2\frac{f(x_1)-f(x_2)+y_2-y_1}{K_{11}-2K_{12}+K_{22}}\\
&=\alpha_2^{old}+y_2\frac{(f(x_1)-y_1)-(f(x_2)-y_2)}{K_{11}-2K_{12}+K_{22}}
\end{aligned}$$

解的剪辑

然而，考虑到α_2的限制，有时α_2^{new}不一定能取到。所以我们需要判断α_2的上下界与α_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

$$\begin{aligned}
0\leq\alpha_1\leq C\\
0\leq\alpha_2\leq C\\
\alpha_1+\alpha_2=\gamma
\end{aligned}$$

这是一个线性规划问题，易得α_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

$$\begin{aligned}
0\leq\alpha_1\leq C\\
0\leq\alpha_2\leq C\\
\alpha_1-\alpha_2=\gamma
\end{aligned}$$

同样地，可以得到α_2的取值范围:

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

令L为α_2的下界，H为α_2的上界，则有

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

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

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α_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。

回到α_2的选择上。考虑$|y_i| = 1$，我们只需要挑选

$$\alpha_2 = \arg\max_{\alpha_i} \quad \left| \frac{(f(x_1) - y_1) - (f(x_i) - y_i)}{K_{11} - 2K_{i2} + K_{ii}} \right|$$

即可。

更新超曲面

由于挑选α_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ω^{new}）。注意，b^*不唯一，所以我们此时令$b^{new} = \frac{1}{\mathbb{I}(\alpha_j^* \neq 0)} \sum\limits_{j, \alpha_j^{new} > 0} b_j^{new}$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α_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。

一个遗留问题

如果所有α_i^*都等于C，则b^*该如何求解？