第八讲 对偶支撑向量机与核支撑向量机(Dual SVM & Kernel SVM)

- 8.1 对偶支撑向量机动机(Motivation of Dual SVM)
- 8.2 对偶支撑向量机的拉格朗日分析(Lagrange Dual SVM)
- 8.3 求解对偶支撑向量机最佳值(Solving Dual SVM)
- 8.4 对偶支撑向量机讨论(Messages behind Dual SVM)
- 8.5 核函数支撑向量机(Kernel SVM)

8.1 对偶支撑向量机动机



线性支撑向量机模型

最佳的
$$(w,b) = ?$$

$$\min_{\mathbf{w}} \quad \frac{1}{2} \mathbf{w}^{T} \mathbf{w}$$
 Subject to
$$y_{n} (\mathbf{w}^{T} \mathbf{x}_{n} + \mathbf{b}) \geq 1$$

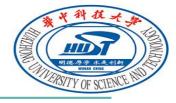
$$for n = 1, 2, ... N$$

①
$$\mathbf{Q} = \begin{bmatrix} \mathbf{0} & \mathbf{0}_d^T \\ \mathbf{0}_d & I_d \end{bmatrix}, \quad \mathbf{p} = \mathbf{0}_{d+1},$$

$$\mathbf{a}_n^T = y_n[1 \quad \mathbf{x}_n^T], \quad \mathbf{c}_n = 1,$$

- ③ 返回最终的b和w作为学到的 g_{SVM}

8.1 对偶支撑向量机动机



非线性支撑向量机模型

最佳的
$$(w,b)$$
 =?

$$\min_{\mathbf{w}} \frac{1}{2} \mathbf{w}^{T} \mathbf{w}$$
Subject to
$$y_{n}(\mathbf{w}^{T}(\mathbf{z}_{n}) + b) \ge 1$$

$$\phi(\mathbf{x}_{n})$$

$$for n = 1, 2, ... N$$

$$\mathbf{a}_n^T = y_n[1 \quad \mathbf{x}_n^T], \quad c_n = 1,$$

- ③ 返回最终的b和w作为学到的 g_{SVM}

如果 \tilde{a} 很大,甚至 无穷大,挑战巨大 $QP针对(\tilde{d}+1)$ 个变量和N个约束条件求解

目的: SVM算法求解可以不依赖于 \tilde{d} 吗?

8.1 对偶支撑向量机动机



将有约束条件下的寻优转变为无约束条件下的寻优问题

$$\min_{\mathbf{w}} \frac{1}{2} \mathbf{w}^{T} \mathbf{w}$$
Subject to
$$y_{n} (\mathbf{w}^{T} \mathbf{z}_{n} + b) \ge 1$$

$$for n = 1, 2, ... N$$

用Lagrange乘子 α_n 构造Lagrange函数

Subject to
$$y_n(\mathbf{w}^T \mathbf{z}_n + b) \ge 1$$

$$for \ n = 1, 2, ... N$$

$$\mathcal{L}(b, \mathbf{w}, \alpha) = \frac{1}{2} \mathbf{w}^T \mathbf{w} + \sum_{n=1}^{N} \alpha_n (1 - y_n(\mathbf{w}^T \mathbf{z}_n + b))$$

约束项隐含在max中

$$SVM \equiv \min_{b,w} (\max_{all \ \alpha_n \ge 0} \mathcal{L}(b, w, \alpha)) = \min_{b,w} (\infty \ if \ violating), \quad \frac{1}{2} w^T w \ if \ feasible) = \frac{1}{2} w^T w$$

- $\max_{all \; \alpha_n \geq 0} \left(\blacksquare + \sum_n \alpha_n (- 些正数) \right)$ ● 任何 (b, w)不在可行域内:
- $\max_{all \; \alpha_n \geq 0} \left(+ \sum_n \alpha_n (所有非正数) \right) = -$ ● 任何 (b, w)在可行域内:

第八讲 对偶支撑向量机与核支撑向量机(Dual SVM & Kernel SVM

- 8.1 对偶支撑向量机动机(Motivation of Dual SVM)
- 8.2 对偶支撑向量机的拉格朗日分析(Lagrange Dual SVM)
- 8.3 求解对偶支撑向量机最佳值(Solving Dual SVM)
- 8.4 对偶支撑向量机讨论(Messages behind Dual SVM)
- 8.5 核函数支撑向量机(Kernel SVM)



在所有的 $\alpha_n \geq 0$ 的中挑选任意一个 α' (: $max \geq any$)

$$\min_{b,w} \left(\max_{all \ \alpha_n \ge 0} \mathcal{L}(b,w,\alpha) \right) \ge \min_{b,w} (\mathcal{L}(b,w,\alpha'))$$

如果 $\alpha' \geq 0$ 是上式右边 $\max_{all \ \alpha_n \geq 0} \mathcal{L}(b, w, \alpha)$ 中的最佳值 (: best is one of any)

$$\min_{b,w} \left(\max_{all \ \alpha_n \geq 0} \mathcal{L}(b,w,\alpha) \right) \geq \max_{all \ \alpha'_n \geq 0} \left(\min_{b,w} (\mathcal{L}(b,w,\alpha')) \right)$$

Lagrange Dual Problem

原问题(求解b, w)与拉格朗日对偶问题(求解 α)的关系



二次规划(QP)满足强对偶特性

$$\min_{b,w} \left(\max_{all \ \alpha_n \geq 0} \mathcal{L}(b,w,\alpha) \right) \geq \max_{all \ \alpha_n \geq 0} \left(\min_{b,w} (\mathcal{L}(b,w,\alpha)) \right)$$
equiv.to original SVM
Primal Problem

Lagrange Dual Problem

- "≥"是一种弱对偶关系(weak duality)
- "="是一种强对偶关系(strong duality),如果满足:

二次规划(QP)问题



- 原问题是凸函数
- 原问题存在可行解
- 约束条件为线性的

非线性变换 $\phi(\mathbf{x}_n)$



二次规划(QP)满足强对偶特性

$$\min_{b,w} \left(\max_{all \; \alpha_n \geq 0} \mathcal{L}(b,w,\alpha) \right) = \max_{all \; \alpha_n \geq 0} \left(\min_{b,w} (\mathcal{L}(b,w,\alpha)) \right)$$

equiv.to original SVM
Primal Problem

Lagrange Dual Problem

等式两边对原问题求解和对对偶问题求解都能得到最优(b, w, α)

- "≥"是一种弱对偶关系(weak duality)
- "="是一种强对偶关系(strong duality),如果满足:

二次规划(QP)问题



- 原问题是凸函数
- 原问题存在可行解
- 约束条件为线性的

非线性变换 $\phi(\mathbf{x}_n)$



对偶问题求解

$$\max_{all \; \alpha_n \geq 0} \left(\min_{b, w} \left(\frac{1}{2} w^T w + \sum_{n=1}^{N} \alpha_n (1 - y_n (w^T \mathbf{z}_n + b)) \right) \right)$$

$$\mathcal{L}(b, w, \alpha)$$

• "括号"内的问题(inner problem)是无约束条件的优化问题

$$\frac{\partial \mathcal{L}(b, \mathbf{w}, \boldsymbol{\alpha})}{\partial b} = -\sum_{n=1}^{N} \alpha_n y_n = 0$$

$$\max_{all \; \alpha_n \geq 0, \sum_{n=1}^N \alpha_n y_n = 0} \left(\min_{b, w} \left(\frac{1}{2} w^T w + \sum_{n=1}^N \alpha_n (1 - y_n (w^T \mathbf{z}_n)) - \sum_{n=1}^N \alpha_n y_n b \right) \right)$$



对偶问题求解

$$\max_{all \; \alpha_n \geq 0} \left(\min_{b, w} \left(\frac{1}{2} w^T w + \sum_{n=1}^{N} \alpha_n (1 - y_n (w^T \mathbf{z}_n + b)) \right) \right)$$

$$\mathcal{L}(b, w, \alpha)$$

• "括号"内的问题(inner problem)是无约束条件的优化问题

$$\frac{\partial \mathcal{L}(b, \mathbf{w}, \boldsymbol{\alpha})}{\partial b} = -\sum_{n=1}^{N} \alpha_n y_n = 0$$

"括号"内的问题
$$b$$
取最佳解时:
$$\max_{all \; \alpha_n \geq 0, \sum_{n=1}^N \alpha_n y_n = 0} \left(\min_{\boldsymbol{w}} (\frac{1}{2} \boldsymbol{w}^T \boldsymbol{w} + \sum_{n=1}^N \alpha_n (1 - y_n (\boldsymbol{w}^T \boldsymbol{z}_n)) \right)$$

人工智能与自动化学院



对偶问题求解

$$\max_{all \; \boldsymbol{\alpha_n} \geq \mathbf{0}, \sum_{n=1}^{N} \alpha_n y_n = 0} \left(\min_{b, w} \left(\frac{1}{2} w^T w + \sum_{n=1}^{N} \alpha_n (1 - y_n (w^T \mathbf{z}_n)) \right) \right)$$

"括号"内的问题(inner problem)是无约束条件的优化问题

$$\frac{\partial \mathcal{L}(b, \mathbf{w}, \boldsymbol{\alpha})}{\partial w_i} = w_i - \sum_{n=1}^N \alpha_n y_n z_{n,i} = 0 \quad \Longrightarrow \quad \mathbf{w} = \sum_{n=1}^N \alpha_n y_n \mathbf{z}_n$$

"括号"内的问题
$$\mathbf{w}$$
取最佳解时:
$$\begin{pmatrix} 1 & 1 & \mathbf{w} \end{pmatrix}$$

$$\max_{\substack{all \ \alpha_n \geq 0, \ \sum_{n=1}^N \alpha_n y_n = 0, \ w = \sum_{n=1}^N \alpha_n y_n \mathbf{Z}_n}} \left(\min_{\mathbf{z}} \left(\frac{1}{2} \mathbf{w}^T \mathbf{w} + \sum_{n=1}^N \alpha_n - \mathbf{w}^T \mathbf{w} \right) \right)$$

人工智能与自动化学院



对偶问题求解

$$\max_{all \; \alpha_n \geq 0, \sum_{n=1}^N \alpha_n y_n = 0} \left(\min_{b, w} \left(\frac{1}{2} w^T w + \sum_{n=1}^N \alpha_n (1 - y_n (w^T \mathbf{z}_n)) \right) \right)$$

• "括号"内的问题(inner problem)是无约束条件的优化问题

$$\frac{\partial \mathcal{L}(b, \mathbf{w}, \boldsymbol{\alpha})}{\partial w_i} = w_i - \sum_{n=1}^N \alpha_n y_n z_{n,i} = 0 \quad \Longrightarrow \quad \mathbf{w} = \sum_{n=1}^N \alpha_n y_n \mathbf{z}_n$$

为出现的是是
$$w$$
 我取取证明的。
$$\max_{\substack{all \; \alpha_n \geq 0, \; \sum_{n=1}^N \alpha_n y_n = 0, \; w = \sum_{n=1}^N \alpha_n y_n \mathbf{Z}_n}} \left(\min_{\substack{b,w}} (-\frac{1}{2} \mathbf{w}^T \mathbf{w} + \sum_{n=1}^N \alpha_n) \right)$$



对偶问题求解

$$\max_{all \; \alpha_n \geq 0, \sum_{n=1}^N \alpha_n y_n = 0} \left(\min_{b, w} \left(\frac{1}{2} w^T w + \sum_{n=1}^N \alpha_n (1 - y_n (w^T \mathbf{z}_n)) \right) \right)$$

"括号"内的问题(inner problem)是无约束条件的优化问题

$$\frac{\partial \mathcal{L}(b, \mathbf{w}, \boldsymbol{\alpha})}{\partial w_i} = w_i - \sum_{n=1}^N \alpha_n y_n z_{n,i} = 0 \qquad \mathbf{w} = \sum_{n=1}^N \alpha_n y_n \mathbf{z}_n$$

"括号"内的问题
$$\mathbf{w}$$
取最佳解时:
$$\begin{pmatrix} & & & & \\ & & & & \end{pmatrix}$$

为的问题**W**取最佳解时:
$$\max_{\substack{all \ \alpha_n \geq 0, \ \sum_{n=1}^N \alpha_n y_n = 0, \ \mathbf{w} = \sum_{n=1}^N \alpha_n y_n \mathbf{z}_n}} \left(-\frac{1}{2} \left\| \sum_{n=1}^N \alpha_n y_n \mathbf{z}_n \right\|^2 + \sum_{n=1}^N \alpha_n \right)$$



KKT条件

$$\max_{all \; \alpha_n \geq 0, \; \sum_{n=1}^N \alpha_n y_n = 0, \; \mathbf{w} = \sum_{n=1}^N \alpha_n y_n \mathbf{z}_n} \left(-\frac{1}{2} \left\| \sum_{n=1}^N \alpha_n y_n \mathbf{z}_n \right\|^2 + \sum_{n=1}^N \alpha_n \right)$$

如果 (b, w, α) 是原问题-对偶问题的最佳解 $(primal-dual \ optimal)$:

- 原问题可行解(primal feasible): $y_n(\mathbf{w}^T\mathbf{z}_n + b) \ge 1$
- 对偶问题可行解(dual feasible): $\alpha_n \ge 0$
- 对偶"括号"内优化解(dual-inner optimal): $\sum_{n=1}^{N} \alpha_n y_n = 0, \mathbf{w} = \sum_{n=1}^{N} \alpha_n y_n \mathbf{z}_n$
- 原问题"括号"内优化解(primal-inner optimal): $\alpha_n(1 y_n(\mathbf{w}^T \mathbf{z}_n + b) = 0$
- ----称为KKT条件,为优化的充要条件

利用对偶问题求解最佳 α 后,再用KKT条件得到(b, w)

人工智能与自动化学院

第八讲 对偶支撑向量机与核支撑向量机(Dual SVM & Kernel SVM

- 8.1 对偶支撑向量机动机(Motivation of Dual SVM)
- 8.2 对偶支撑向量机的拉格朗日分析(Lagrange Dual SVM)
- 8.3 求解对偶支撑向量机最佳值(Solving Dual SVM)
- 8.4 对偶支撑向量机讨论(Messages behind Dual SVM)
- 8.5 核函数支撑向量机(Kernel SVM)



支撑向量机的对偶问题求解

$$\max_{\substack{all \; \alpha_n \geq 0, \; \sum_{n=1}^N \alpha_n y_n = 0, \; w = \sum_{n=1}^N \alpha_n y_n z_n}} \left(-\frac{1}{2} \left\| \sum_{n=1}^N \alpha_n y_n z_n \right\|^2 + \sum_{n=1}^N \alpha_n \right)$$

标准的硬间隔SVM的对偶问题----求解最佳 α :

$$\min_{\alpha} \frac{1}{2} \sum_{n=1}^{N} \sum_{m=1}^{N} \alpha_n \alpha_m y_n y_m \mathbf{z}_n^T \mathbf{z}_m - \sum_{n=1}^{N} \alpha_n$$

Subject to
$$\sum_{n=1}^{N} \alpha_n y_n = 0$$

$$\alpha_n \ge 0$$
, for $n = 1, 2, ..., N$

- ι **α**的目标函数是二次函 数、凸函数! **//**个变量
- L → α的约束条件是线性函 L 数! N+1个约束条件

----二次规划(QP)问题!

QP有成熟方便的办法求 优化解!



SVM对偶问题的一般求解:

最佳的
$$\alpha = ?$$
 $\min_{\alpha} \frac{1}{2} \sum_{n=1}^{N} \sum_{m=1}^{N} \alpha_n \alpha_m y_n y_m \mathbf{z}_n^T \mathbf{z}_m - \sum_{n=1}^{N} \alpha_n$

$$\min_{\alpha} \frac{1}{2} \sum_{n=1}^{N} \sum_{m=1}^{N} \alpha_n \alpha_m y_n y_m \mathbf{z}_n^T \mathbf{z}_m - \sum_{n=1}^{N} \alpha_n$$

$$\min_{\mathbf{u}} \frac{1}{2} \mathbf{u}^T \mathbf{Q} \mathbf{u} + \mathbf{p}^T \mathbf{u}$$

二次规划(QP)的求解:

最佳的
$$\mathbf{u} \leftarrow \mathrm{QP}(\mathbf{Q}, \mathbf{p}, \mathbf{A}, \mathbf{c}, \mathbf{r}, \boldsymbol{v})$$

$$\min_{\mathbf{u}} \quad \frac{1}{2} \mathbf{u}^T \mathbf{Q} \mathbf{u} + \mathbf{p}^T \mathbf{u}$$

$$Subject \ to \quad \mathbf{a}_m^T \mathbf{u} \ge c_m, \mathbf{r}^T \mathbf{u} = \boldsymbol{v}$$

$$for \ m = 1, 2, ... M$$

$$\mathbf{u} = [\alpha_1 \quad \cdots \quad \alpha_n \quad \cdots \quad \alpha_N]^T \qquad \mathbf{Q} = \begin{bmatrix} y_1 y_1 \mathbf{z}_1^T \mathbf{z}_1 & \cdots & y_1 y_N \mathbf{z}_1^T \mathbf{z}_N \\ \vdots & y_n y_m \mathbf{z}_n^T \mathbf{z}_m & \vdots \\ y_N y_1 \mathbf{z}_N^T \mathbf{z}_1 & \cdots & y_N y_N \mathbf{z}_N^T \mathbf{z}_N \end{bmatrix} \quad \mathbf{p} = -\mathbf{1}_N$$

$$\frac{1}{2}\mathbf{u}^{T}\mathbf{Q}\mathbf{u} + \mathbf{p}^{T}\mathbf{u} = \frac{1}{2}\sum_{n=1}^{N}\sum_{m=1}^{N}\alpha_{n}\alpha_{m}y_{n}y_{m}\mathbf{z}_{n}^{T}\mathbf{z}_{m} - \sum_{n=1}^{N}\alpha_{n}$$



18 Ref.: NTU-LIN

SVM对偶问题的一般求解:

最佳的
$$\alpha = ?$$
min
 α
 $\frac{1}{2} \sum_{n=1}^{N} \sum_{m=1}^{N} \alpha_n \alpha_m y_n y_m \mathbf{Z}_n^T \mathbf{Z}_m - \sum_{n=1}^{N} \alpha_n$

Subject to

$$\alpha_n \ge 0$$
, for $n = 1, 2, ..., N$

$$\mathbf{u} = [\alpha_1 \quad \cdots \quad \alpha_n]$$

二次规划(QP)的求解:

最佳的
$$\mathbf{u}$$
 ← QP(\mathbf{Q} , \mathbf{p} , \mathbf{A} , \mathbf{c} , \mathbf{r} , \mathbf{v})

$$\min_{\mathbf{u}} \quad \frac{1}{2}\mathbf{u}^{T}\mathbf{Q}\mathbf{u} + \mathbf{p}^{T}\mathbf{u}$$

Subject to
$$\mathbf{a}_{m}^{T}\mathbf{u} \geq c_{m}$$
, for $m = 1, 2, ... M$

$$\mathbf{u} = [\alpha_1 \quad \cdots \quad \alpha_n \quad \cdots \quad \alpha_N]^T \quad q_{nm} = y_n y_m \mathbf{z}_n^T \mathbf{z}_m \quad \mathbf{p} = -\mathbf{1}_N$$

$$\mathbf{a}_1^T = \begin{bmatrix} 1 & \cdots & 0 & \cdots & 0 \end{bmatrix},$$

$$\mathbf{a}_n^T = [0 \quad \cdots \quad 1 \quad \cdots \quad 0], \quad \mathbf{c}_n = 0, M = N$$

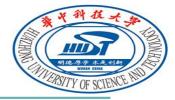
$$\mathbf{a}_N^T = \begin{bmatrix} 0 & \cdots & 0 & \cdots & 1 \end{bmatrix}$$

$$\mathbf{a}_{\mathbf{n}}^{T}\mathbf{u}=\alpha_{n}$$

$$\mathbf{a}_n^T \mathbf{u} \ge c_n$$
 $\alpha_n \ge 0$

$$\alpha_n \geq 0$$

人工智能与自动化学院



SVM对偶问题的一般求解:

最佳的
$$\alpha = ?$$
min
 $\frac{1}{2} \sum_{n=1}^{N} \sum_{m=1}^{N} \alpha_n \alpha_m y_n y_m \mathbf{z}_n^T \mathbf{z}_m - \sum_{n=1}^{N} \alpha_n$

Subject to

$$\alpha_n \geq 0$$
, for $n = 1, 2, ..., N$

二次规划(QP)的求解:

最佳的
$$\mathbf{u} \leftarrow \mathrm{QP}(\mathbf{Q}, \mathbf{p}, \mathbf{A}, \mathbf{c}, \mathbf{r}, \mathbf{v})$$

$$\min_{\mathbf{u}} \quad \frac{1}{2}\mathbf{u}^T\mathbf{Q}\mathbf{u} + \mathbf{p}^T\mathbf{u}$$

Subject to $\mathbf{a}_m^T \mathbf{u} \geq c_m$, for m = 1, 2, ... M

$$\mathbf{u} = [\alpha_1 \quad \cdots \quad \alpha_n]$$

$$\mathbf{u} = [\alpha_1 \quad \cdots \quad \alpha_n \quad \cdots \quad \alpha_N]^T \quad \mathbf{q}_{nm} = y_n y_m \mathbf{z}_n^T \mathbf{z}_m \quad \mathbf{p} = -\mathbf{1}_N$$

$$\mathbf{r}^T = [y_1 \cdots y_n \cdots y_N], \quad \mathbf{v} = 0$$

$$\mathbf{r}^T\mathbf{u} = \sum_{n=1}^N \alpha_n y_n = \mathbf{v} = 0$$

$$\mathbf{A} = \begin{bmatrix} \mathbf{a}_1 \\ \cdots \\ \mathbf{a}_n^T \\ \cdots \end{bmatrix} \qquad \mathbf{c} = \mathbf{0}_N$$

$$\mathbf{c} = \mathbf{0}_N \qquad M = N$$

人工智能与自动化学院



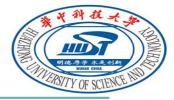
利用二次规划(QP)实现支撑向量机对偶问题求解

$$\mathbf{Q} = \begin{bmatrix} y_1 y_1 \mathbf{z}_1^T \mathbf{z}_1 & \cdots & y_1 y_N \mathbf{z}_1^T \mathbf{z}_N \\ \vdots & y_n y_m \mathbf{z}_n^T \mathbf{z}_m & \vdots \\ y_N y_1 \mathbf{z}_N^T \mathbf{z}_1 & \cdots & y_N y_N \mathbf{z}_N^T \mathbf{z}_N \end{bmatrix}, \quad \mathbf{p} = -\mathbf{1}_N,$$

$$\mathbf{a}_n^T = \begin{bmatrix} 0 & \cdots & 1 & \cdots & 0 \end{bmatrix}, \quad \mathbf{c}_n = 0, \qquad \qquad \mathbf{A} = \begin{bmatrix} \mathbf{a}_1^T \\ \cdots \\ \mathbf{a}_n^T \end{bmatrix}, \quad \mathbf{c} = \mathbf{0}_N$$

$$\mathbf{r}^T = \begin{bmatrix} y_1 \cdots y_n \cdots y_N \end{bmatrix}, \quad \mathbf{v} = \mathbf{0}$$

- 返回最终的 α



求解最佳的(b, w)

如果 (b, w, α) 是原问题-对偶问题的最佳解 $(primal-dual \ optimal)$:

- 原问题可行解(primal feasible): $y_n(\mathbf{w}^T\mathbf{z}_n + b) \ge 1$
- 对偶问题可行解(dual feasible): $\alpha_n \geq 0$
- 对偶"括号"内优化解(dual-inner optimal): $\sum_{n=1}^{N} \alpha_n y_n = 0, w = \sum_{n=1}^{N} \alpha_n y_n \mathbf{Z}_n$
- 原问题"括号"内优化解(primal-inner optimal): $\alpha_n(1 y_n(\mathbf{w}^T \mathbf{z}_n + b) = 0$
- ----称为KKT条件,为优化的充要条件

挑选任意一个 $\alpha_n > 0$ 的样本, $b = y_n - \mathbf{w}^T \mathbf{z}_n$

 $\alpha_n > 0$ 的样本是支撑向量

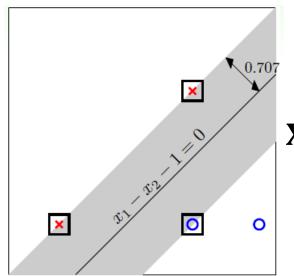
第八讲 对偶支撑向量机与核支撑向量机(Dual SVM & Kernel SVM

- 8.1 对偶支撑向量机动机(Motivation of Dual SVM)
- 8.2 对偶支撑向量机的拉格朗日分析(Lagrange Dual SVM)
- 8.3 求解对偶支撑向量机最佳值(Solving Dual SVM)
- 8.4 对偶支撑向量机讨论(Messages behind Dual SVM)
- 8.5 核函数支撑向量机(Kernel SVM)

7.3 支撑向量机



为什么叫支撑向量机?



$$\mathbf{X} = \begin{bmatrix} 0 & 0 \\ 2 & 2 \\ 2 & 0 \\ 3 & 0 \end{bmatrix} \mathbf{y} = \begin{bmatrix} -1 \\ -1 \\ +1 \\ +1 \end{bmatrix}$$

$$\min_{\mathbf{w}} \quad \frac{1}{2} \mathbf{w}^T \mathbf{w}$$

$$y_n(\mathbf{w}^T\mathbf{x}_n + \mathbf{b}) \ge 1$$
, for all n

优化得到的解为:

$$w_1 = 1$$
, $w_2 = -1$, $b = -1$

$$g(\mathbf{x}) = \operatorname{sign}(x_1 - x_2 - 1)$$

$$margin(\mathbf{w}) = \frac{1}{\|\mathbf{w}\|} = \frac{1}{\sqrt{2}}$$

- 分类面由边界上的样本确定,其他样本不起作用
- 边界上的样本被称为支撑向量(候选)

支撑向量机(SVM)—Support Vector Machine

----借助支撑向量学到间隔最大分类面

8.4 对偶支撑向量机讨论



SVM原问题

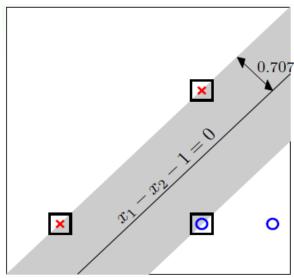
- > 分类面由边界上的样本确定,其他样本不起作用
- ▶ 边界上的样本被称为支撑向量(候选)

SVM对偶问题

- $> \alpha_n > 0$ 的样本落在分类面的边界上
- $\alpha_n > 0$ 的样本(z_n, y_n)被称为支撑向量(**逐**) $SV(\alpha_n > 0$ 的样本) ⊆ SV(边界上的样本)

求解w时,只需要支撑向量: $\mathbf{w} = \sum_{n=1}^{N} \alpha_n y_n \mathbf{z}_n = \sum_{SV} \alpha_n y_n \mathbf{z}_n$

求解b时,只需要任一个支撑向量 (\mathbf{z}_n, y_n) : $b = y_n - \mathbf{w}^T \mathbf{z}_n$



SVM ----利用对偶问 题的最佳解确定 支撑向量,从而 找到间隔最大的 分类面

8.4 对偶支撑向量机讨论



SVM:

$$\mathbf{w}_{SVM} = \sum_{n=1}^{N} \alpha_n (y_n \mathbf{z}_n)$$

 α_n 由对偶问题的解确定

PLA:

$$\mathbf{w}_{PLA} = \sum_{n=1}^{N} \beta_n(\mathbf{y}_n \mathbf{z}_n)$$

 β_n 由分错的样本确定

w 是 $y_n z_n$ 的线性组合

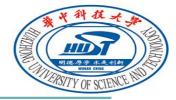
w 被数据 $y_n Z_n$ 所表达

w 体现出"模式"

SVM: 仅通过SV表达w



8.4 对偶支撑向量机讨论



SVM的原问题求解:

$$\min_{\mathbf{w}} \frac{1}{2} \mathbf{w}^{T} \mathbf{w}$$
Subject to
$$y_{n}(\mathbf{w}^{T} \mathbf{z}_{n} + b) \ge 1$$

$$for n = 1, 2, ... N$$

- $(\tilde{d} + 1)$ 个变量和N 个约束条件
- 求解最佳(b, w)

SVM的对偶问题求解:

$$\min_{\alpha} \frac{1}{2} \sum_{n=1}^{N} \sum_{m=1}^{N} \alpha_{n} \alpha_{m} y_{n} y_{m} \mathbf{Z}_{n}^{T} \mathbf{Z}_{m} - \sum_{n=1}^{N} \alpha_{n}$$

$$Subject \ to \qquad \sum_{n=1}^{N} \alpha_{n} y_{n} = 0$$

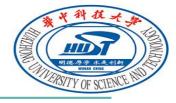
$$\alpha_{n} \geq 0, for \ n = 1, 2, ..., N$$

- N 个变量和 N+1 个约束条件
- 求解最佳α,确定支撑向量

两种方法都能得到最佳解(b, w)获得最大间隔分类面 $g_{SVM} = sign(w^T \phi(\mathbf{x}_n) + b)$

第八讲 对偶支撑向量机与核支撑向量机(Dual SVM & Kernel SVM

- 8.1 对偶支撑向量机动机(Motivation of Dual SVM)
- 8.2 对偶支撑向量机的拉格朗日分析(Lagrange Dual SVM)
- 8.3 求解对偶支撑向量机最佳值(Solving Dual SVM)
- 8.4 对偶支撑向量机讨论(Messages behind Dual SVM)
- 8.5 核函数支撑向量机(Kernel SVM)



研究对偶SVM的动机是不想依赖ã

$$\min_{\alpha} \frac{1}{2} \sum_{n=1}^{N} \sum_{m=1}^{N} \alpha_n \alpha_m y_n y_m \mathbf{Z}_n^T \mathbf{Z}_m - \sum_{n=1}^{N} \alpha_n$$

$$Subject \ to \qquad \sum_{n=1}^{N} \alpha_n y_n = 0$$

$$\alpha_n \ge 0, for \ n = 1, 2, ..., N$$



研究对偶SVM的动机是不想依赖 \tilde{a}

$$\min_{\alpha} \quad \frac{1}{2} \alpha^T \mathbf{Q} \alpha - \mathbf{1}^T \alpha$$

Subject to
$$\mathbf{y}^T \boldsymbol{\alpha} = 0$$

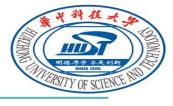
$$\alpha_n \geq 0$$
, for $n = 1, 2, \dots, N$

$$\mathbf{Q} = \begin{bmatrix} y_1 y_1 \mathbf{z}_1^T \mathbf{z}_1 & \cdots & y_1 y_N \mathbf{z}_1^T \mathbf{z}_N \\ \vdots & y_n y_m \mathbf{z}_n^T \mathbf{z}_m & \vdots \\ y_N y_1 \mathbf{z}_N^T \mathbf{z}_1 & \cdots & y_N y_N \mathbf{z}_N^T \mathbf{z}_N \end{bmatrix}$$

对偶SVM真的不依赖于 \tilde{d} ?

- N 个变量和 N+1 个约束条件
- 对偶问题的Q 是个稠密矩阵
- 每个元素 $q_{n,m} = y_n y_m \mathbf{z}_n^T \mathbf{z}_m$ 偶都要做内积运算,计算代价 $\mathbf{O}(\tilde{d})$

能提高 $\mathbf{z}_n^T \mathbf{z}_m = \Phi(\mathbf{x}_n)^T \Phi(\mathbf{x}_m)$ 计算效率吗?



二次多项式 $\Phi_2(x)$ 的快速内积计算

$$\boldsymbol{\Phi}_2(\mathbf{x}) = (1, x_1, x_2, \dots, x_d, x_1^2, x_1 x_2, \dots, x_1 x_d, x_2 x_1, x_2^2, \dots, x_2 x_d, x_d x_1, x_d x_2, \dots, x_d^2)$$

$$\Phi_{2}^{T}(\mathbf{x})\Phi_{2}(\mathbf{x}') = 1 + \sum_{i=1}^{d} x_{i}x_{i}' + \sum_{i=1}^{d} \sum_{j=1}^{d} x_{i}x_{j}x_{i}'x_{j}'$$

$$= 1 + \sum_{i=1}^{d} x_{i}x_{i}' + \sum_{i=1}^{d} x_{i}x_{i}' \sum_{i=1}^{d} x_{j}x_{i}'$$

$$= 1 + \mathbf{x}^T \mathbf{x}' + (\mathbf{x}^T \mathbf{x}')(\mathbf{x}^T \mathbf{x}')$$

计算复杂度从 $O(\tilde{d})$ 下降到O(d)



核函数: Φ 变换+内积计算 \longrightarrow $K_{\Phi}(\mathbf{x},\mathbf{x}') = \Phi^{T}(\mathbf{x})\Phi(\mathbf{x}')$

$$K_{\mathbf{\Phi}_2}(\mathbf{x}, \mathbf{x}') = \mathbf{\Phi}_2^T(\mathbf{x})\mathbf{\Phi}_2(\mathbf{x}') = 1 + \mathbf{x}^T\mathbf{x}' + (\mathbf{x}^T\mathbf{x}')(\mathbf{x}^T\mathbf{x}')$$

$$q_{n,m} = y_n y_m \mathbf{z}_n^T \mathbf{z}_m = y_n y_m \mathbf{\Phi}^T (\mathbf{x}_n) \mathbf{\Phi} (\mathbf{x}_m) = y_n y_m \mathbf{K}_{\mathbf{\Phi}} (\mathbf{x}_n, \mathbf{x}_m)$$

$$\mathbf{w} = \sum_{n=1}^{N} \alpha_n y_n \mathbf{z}_n = \sum_{SV} \alpha_n y_n \mathbf{z}_n$$

支撑SV(
$$\mathbf{z}_m, y_m$$
): $\mathbf{b} = y_m - \mathbf{w}^T \mathbf{z}_m = y_m - (\sum_{SV} \alpha_n y_n \mathbf{z}_n)^T \mathbf{z}_m$

输入测试样本 \mathbf{x} : $g_{SVM} = \text{sign}(\mathbf{w}^T \mathbf{\Phi}(\mathbf{x}) + \mathbf{b})$



核函数: Φ 变换+内积计算 \longrightarrow $K_{\Phi}(\mathbf{x},\mathbf{x}') = \Phi^{T}(\mathbf{x})\Phi(\mathbf{x}')$

$$K_{\mathbf{\Phi}_2}(\mathbf{x}, \mathbf{x}') = \mathbf{\Phi}_2^T(\mathbf{x})\mathbf{\Phi}_2(\mathbf{x}') = 1 + \mathbf{x}^T\mathbf{x}' + (\mathbf{x}^T\mathbf{x}')(\mathbf{x}^T\mathbf{x}')$$

$$q_{n,m} = y_n y_m \mathbf{z}_n^T \mathbf{z}_m = y_n y_m \mathbf{\Phi}^T (\mathbf{x}_n) \mathbf{\Phi} (\mathbf{x}_m) = y_n y_m \mathbf{K}_{\mathbf{\Phi}} (\mathbf{x}_n, \mathbf{x}_m)$$

$$\mathbf{w} = \sum_{n=1}^{N} \alpha_n y_n \mathbf{z}_n = \sum_{SV} \alpha_n y_n \mathbf{z}_n$$

支撑SV(
$$\mathbf{z}_m, y_m$$
): $\mathbf{b} = y_m - \mathbf{w}^T \mathbf{z}_m = y_m - \sum_{SV} \alpha_n y_n \mathbf{\Phi}^T (\mathbf{x}_n) \mathbf{\Phi} (\mathbf{x}_m)$

输入测试样本
$$\mathbf{x}$$
: $g_{SVM} = \text{sign}(\mathbf{w}^T \mathbf{\Phi}(\mathbf{x}) + \mathbf{b})$



核函数: Φ 变换+内积计算 \longrightarrow $K_{\Phi}(\mathbf{x},\mathbf{x}') = \Phi^{T}(\mathbf{x})\Phi(\mathbf{x}')$

$$K_{\boldsymbol{\Phi}_2}(\mathbf{x}, \mathbf{x}') = \boldsymbol{\Phi}_2^T(\mathbf{x})\boldsymbol{\Phi}_2(\mathbf{x}') = 1 + \mathbf{x}^T\mathbf{x}' + (\mathbf{x}^T\mathbf{x}')(\mathbf{x}^T\mathbf{x}')$$

$$q_{n,m} = y_n y_m \mathbf{z}_n^T \mathbf{z}_m = y_n y_m \mathbf{\Phi}^T (\mathbf{x}_n) \mathbf{\Phi} (\mathbf{x}_m) = y_n y_m \mathbf{K}_{\mathbf{\Phi}} (\mathbf{x}_n, \mathbf{x}_m)$$

$$\mathbf{w} = \sum_{n=1}^{N} \alpha_n y_n \mathbf{z}_n = \sum_{SV} \alpha_n y_n \mathbf{z}_n$$

支撑SV(
$$\mathbf{z}_m, y_m$$
): $b = y_m - \mathbf{w}^T \mathbf{z}_m = y_m - \sum_{SV} \alpha_n y_n K_{\mathbf{\Phi}}(\mathbf{x}_n, \mathbf{x}_m)$

输入测试样本
$$\mathbf{x}$$
: $g_{SVM} = \text{sign}(\mathbf{w}^T \mathbf{\Phi}(\mathbf{x}) + \mathbf{b}) = sign((\sum_{SV} \alpha_n y_n \mathbf{z}_n)^T \mathbf{\Phi}(\mathbf{x}) + \mathbf{b})$



核函数: Φ 变换+内积计算 \longrightarrow $K_{\Phi}(\mathbf{x},\mathbf{x}') = \Phi^{T}(\mathbf{x})\Phi(\mathbf{x}')$

$$K_{\boldsymbol{\Phi}_2}(\mathbf{x}, \mathbf{x}') = \boldsymbol{\Phi}_2^T(\mathbf{x})\boldsymbol{\Phi}_2(\mathbf{x}') = 1 + \mathbf{x}^T\mathbf{x}' + (\mathbf{x}^T\mathbf{x}')(\mathbf{x}^T\mathbf{x}')$$

$$q_{n,m} = y_n y_m \mathbf{z}_n^T \mathbf{z}_m = y_n y_m \mathbf{\Phi}^T (\mathbf{x}_n) \mathbf{\Phi} (\mathbf{x}_m) = y_n y_m \mathbf{K}_{\mathbf{\Phi}} (\mathbf{x}_n, \mathbf{x}_m)$$

$$\mathbf{w} = \sum_{n=1}^{N} \alpha_n y_n \mathbf{z}_n = \sum_{SV} \alpha_n y_n \mathbf{z}_n$$

支撑SV(
$$\mathbf{z}_m, y_m$$
): $b = y_m - \mathbf{w}^T \mathbf{z}_m = y_m - \sum_{SV} \alpha_n y_n K_{\mathbf{\Phi}}(\mathbf{x}_n, \mathbf{x}_m)$

输入测试样本
$$\mathbf{x}$$
: $g_{SVM} = \text{sign}(\mathbf{w}^T \boldsymbol{\Phi}(\mathbf{x}) + b) = sign(\sum_{SV} \alpha_n y_n \boldsymbol{\Phi}^T(\mathbf{x}_n) \boldsymbol{\Phi}(\mathbf{x}) + b)$



核函数: Φ 变换+内积计算 \longrightarrow $K_{\Phi}(\mathbf{x},\mathbf{x}') = \Phi^{T}(\mathbf{x})\Phi(\mathbf{x}')$

$$K_{\mathbf{\Phi}_2}(\mathbf{x}, \mathbf{x}') = \mathbf{\Phi}_2^T(\mathbf{x})\mathbf{\Phi}_2(\mathbf{x}') = 1 + \mathbf{x}^T\mathbf{x}' + (\mathbf{x}^T\mathbf{x}')(\mathbf{x}^T\mathbf{x}')$$

$$q_{n,m} = y_n y_m \mathbf{z}_n^T \mathbf{z}_m = y_n y_m \boldsymbol{\Phi}^T(\mathbf{x}_n) \boldsymbol{\Phi}(\mathbf{x}_m) = y_n y_m \boldsymbol{K}_{\boldsymbol{\Phi}}(\mathbf{x}_n, \mathbf{x}_m)$$

$$\mathbf{w} = \sum_{n=1}^{N} \alpha_n y_n \mathbf{z}_n = \sum_{SV} \alpha_n y_n \mathbf{z}_n$$

支撑SV(
$$\mathbf{z}_m, y_m$$
): $\mathbf{b} = y_m - \mathbf{w}^T \mathbf{z}_m = y_m - \sum_{SV} \alpha_n y_n K_{\mathbf{\Phi}}(\mathbf{x}_n, \mathbf{x}_m)$

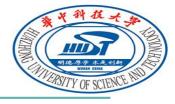
利用核函数,将 计算复杂度从 O(d)下降到O(d) 避免依赖d

输入测试样本 \mathbf{x} : $g_{SVM} = \text{sign}(\mathbf{w}^T \mathbf{\Phi}(\mathbf{x}) + b) = \text{sign}(\sum_{SV} \alpha_n y_n K_{\mathbf{\Phi}}(\mathbf{x}_n, \mathbf{x}) + b)$



利用二次规划(QP)实现核函数支撑向量机求解

- ① $q_{n,m} = y_n y_m K_{\Phi}(\mathbf{x}_n, \mathbf{x}_m)$, $\mathbf{p} = -\mathbf{1}_N$, 由约束条件得到(A, c, r, v)
- 2 $\alpha \leftarrow QP(\mathbf{Q}, \mathbf{p}, \mathbf{A}, \mathbf{c}, \mathbf{r}, \mathbf{v})$
- ③ 任选一支撑SV(\mathbf{x}_m, y_m): $\mathbf{b} \leftarrow (y_m \sum_{SV} \alpha_n y_n K_{\mathbf{\phi}}(\mathbf{x}_n, \mathbf{x}_m))$
- ④ 对于测试样本 \mathbf{x} : $g_{SVM} = sign(\sum_{SV} \alpha_n y_n K_{\mathbf{\Phi}}(\mathbf{x}_n, \mathbf{x}) + b)$
- 步骤①的时间复杂度: $O(N^2) \cdot (kernel\ evaluation)$
- 步骤②的开销 : *N*个变量,*N* + 1个约束
- 步骤③和④的复杂度: O(#SV)·(kernel evaluation)



二次多项式核函数的一般表达式

$\boldsymbol{\Phi}_2(\mathbf{x})$	$K_2(\mathbf{x},\mathbf{x}')$
$(1, x_1, \dots, x_d, x_1^2, x_1 x_2, \dots, x_d^2)$	$1 + \mathbf{x}^T \mathbf{x}' + (\mathbf{x}^T \mathbf{x}')^2$
$(1, \sqrt{2}x_1, \dots, \sqrt{2}x_d, x_1^2, x_1x_2, \dots, x_d^2)$	$1 + 2\mathbf{x}^T\mathbf{x}' + (\mathbf{x}^T\mathbf{x}')^2$
$(1, \sqrt{2\gamma}x_1, \dots, \sqrt{2\gamma}x_d, x_1^2, x_1x_2, \dots, x_d^2)$	$1 + \frac{2\gamma \mathbf{x}^T \mathbf{x}'}{2} + \frac{\gamma^2}{2} (\mathbf{x}^T \mathbf{x}')^2$

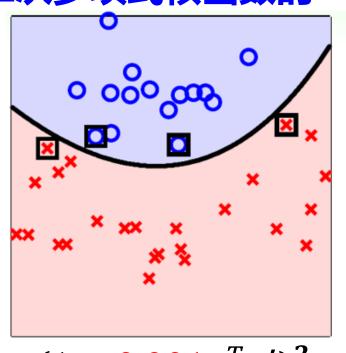
$$K_2(\mathbf{x}, \mathbf{x}') = (1 + \gamma \mathbf{x}^T \mathbf{x}')^2 \qquad \gamma > 0$$

不同的二次多项式变换:

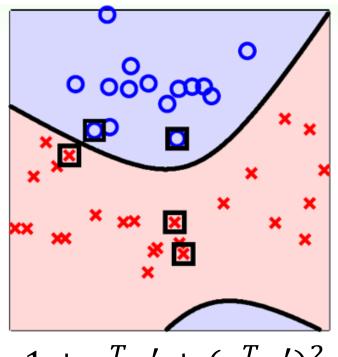
- 升维次数相同
- 内积结果不同 → 分类面不同



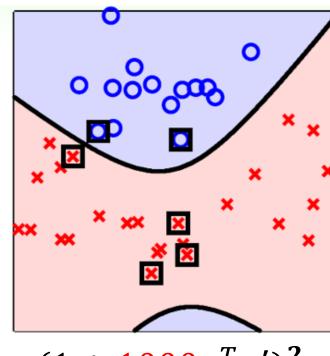
二次多项式核函数的一般表达式



$$(1 + 0.001x^Tx')^2$$



 $1 + \mathbf{x}^T \mathbf{x}' + (\mathbf{x}^T \mathbf{x}')^2$



 $(1 + 1000\mathbf{x}^T\mathbf{x}')^2$

- 核函数不同 \longrightarrow 支撑向量(SVs)不同,分类面(g_{SVM})不同
- 核函数变化 → Margin也会变化



多项式核函数的一般表达式

$$K_2(\mathbf{x}, \mathbf{x}') = (\zeta + \gamma \mathbf{x}^T \mathbf{x}')^2$$

$$\gamma > 0, \zeta \ge 0$$

$$K_3(\mathbf{x},\mathbf{x}') = (\zeta + \gamma \mathbf{x}^T \mathbf{x}')^3$$

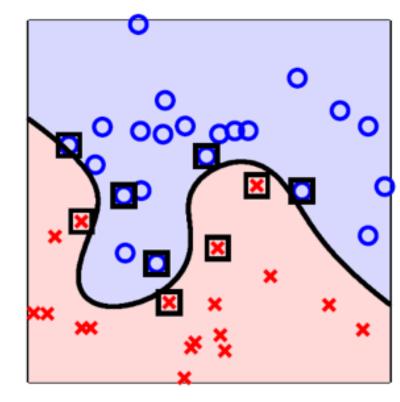
$$\gamma > 0, \zeta \ge 0$$

•

$$K_{\mathbf{0}}(\mathbf{x}, \mathbf{x}') = (\zeta + \gamma \mathbf{x}^T \mathbf{x}')^{\mathbf{0}}$$

$$\gamma > 0, \zeta \geq 0$$

- $Q \times \gamma \times \zeta$ 确定了多项式核函数的形式
- 利用核函数可不依赖于d 获得大间隔分类面



Margin为1的10次多项式

SVM + Polynomial Kernel = Polynomial SVM



核函数能实现无穷维变换?

当 $\phi(x)$ 为无穷维变换时,借助核函数K(x,x') 技巧仍可进行有效计算

为简单起见,考虑一维变量,即: $\mathbf{x} = (x)$

$$K(x,x') = \exp(-(x-x')^2) = \exp(-(x)^2)\exp(-(x')^2)\exp(2xx')$$

$$= \exp(-(x)^2) \exp(-(x')^2) \left(\sum_{i=0}^{\infty} \frac{(2xx')^i}{i!} \right)$$

$$= \sum_{i=0}^{\infty} (\exp(-(x)^{2}) \exp(-(x')^{2}) \sqrt{\frac{2^{i}}{i!}} \sqrt{\frac{2^{i}}{i!}} (x)^{i} (x')^{i})$$

$$\Phi(x) = \exp(-(x)^2) \cdot (1, \sqrt{\frac{2^1}{1!}} x, \sqrt{\frac{2^2}{2!}} x^2, \sqrt{\frac{2^3}{3!}} x^3, \dots, \dots)$$

人工智能与自动化学院



核函数能实现无穷维变换?

当 $\phi(x)$ 为无穷维变换时,借助核函数K(x,x') 技巧仍可进行有效计算

为简单起见,考虑一维变量,即: $\mathbf{x} = (x)$

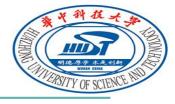
$$K(x, x') = \Phi(x)^T \Phi(x') = \exp(-(x - x')^2) = \exp(-(x)^2) \exp(-(x')^2) \exp(2xx')$$

$$= \exp(-(x)^{2}) \exp(-(x')^{2}) \left(\sum_{i=0}^{\infty} \frac{(2xx')^{i}}{i!} \right)$$

高斯核函数 $K(\mathbf{x}, \mathbf{x}')$ 的一般式
$$K(\mathbf{x}, \mathbf{x}') = \exp(-\gamma \|\mathbf{x} - \mathbf{x}'\|^{2}) = \sum_{i=0}^{\infty} (\exp(-(x)^{2}) \exp(-(x')^{2}) \sqrt{\frac{2^{i}}{i!}} \sqrt{\frac{2^{i}}{i!}} (x)^{i} (x')^{i})$$

$$\gamma > 0$$

$$\boldsymbol{\Phi}(x) = \exp(-(x)^2) \cdot (1, \sqrt{\frac{2^1}{1!}} x, \sqrt{\frac{2^2}{2!}} x^2, \sqrt{\frac{2^3}{3!}} x^3, \dots, \dots)$$



高斯核函数SVM

$$K(\mathbf{x}, \mathbf{x}') = \exp(-\gamma ||\mathbf{x} - \mathbf{x}'||^2) \qquad \gamma > 0$$

输入测试样本
$$\mathbf{x}$$
: $g_{SVM} = sign(\sum_{SV} \alpha_n y_n K_{\Phi}(\mathbf{x}_n, \mathbf{x}) + b)$

$$= sign(\sum_{SV} \alpha_n y_n \exp(-\gamma ||\mathbf{x} - \mathbf{x}_n||^2) + b)$$

- 以所有支撑向量 x_n 为中心的高斯函数的线性组合
- 也被称之为径向基核函数(Radial Basis Function, RBF)

高斯核函数SVM:通过求取 α_n 确定所有支撑向量 x_n ,构造以支撑向量为中心的高斯函数的线性组合,实现在无穷维空间获得最大间隔分类面

第八讲 对偶支撑向量机与核支撑向量机(Dual SVM & Kernel SVM

- 8.1 对偶支撑向量机动机($Motivation\ of\ Dual\ SVM$) 希望不依赖于非线性变换后升维的 \tilde{d}
- 8.2 对偶支撑向量机的拉格朗日分析(Lagrange Dual SVM) 通过KKT条件将原问题和对偶问题相关联获得最佳分类面
- 8.3 求解对偶支撑向量机最佳值(Solving Dual SVM)

 仍然是二次规划问题,可以方便求解
- 8.4 对偶支撑向量机讨论(Messages behind Dual SVM) 由支撑向量确定最大间隔分类面
- 8.5 核函数支撑向量机(Kernel SVM)

利用核函数避免了对升维后 ǚ 的依赖,且高效求解