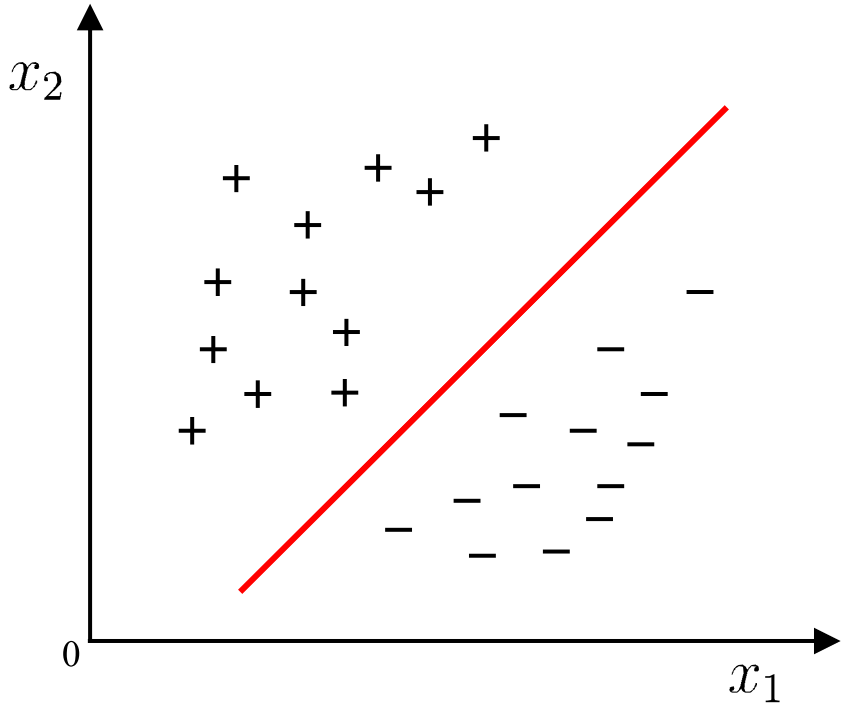
第六章：支持向量机

大纲

- 间隔与支持向量
- 对偶问题
- 核函数
- 软间隔与正则化
- 支持向量回归
- 核方法

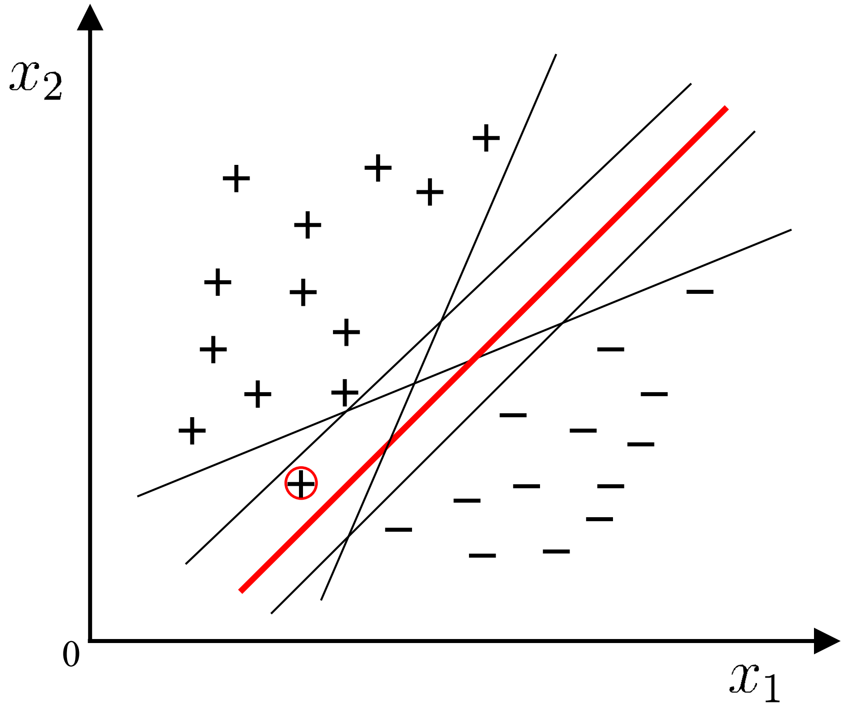
引子

线性模型：在样本空间中寻找一个超平面，将不同类别的样本分开.



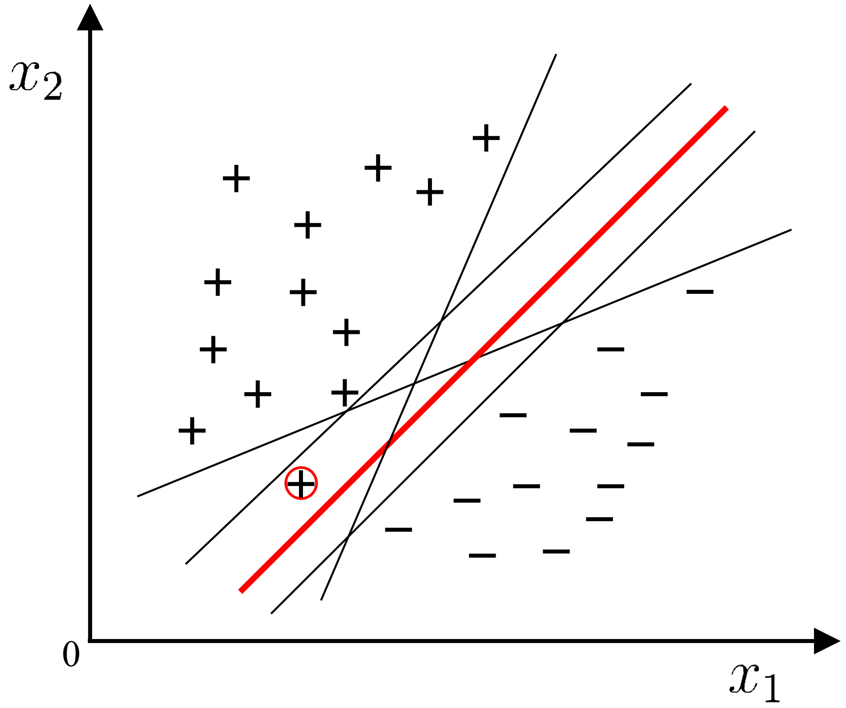
引子

-Q:将训练样本分开的超平面可能有很多, 哪一个好呢?



引子

-Q:将训练样本分开的超平面可能有很多, 哪一个好呢?



-A:应选择"正中间", 容忍性好, 鲁棒性高, 泛化能力最强.

间隔与支持向量

超平面H方程:$g(\mathbf{x}) = \boldsymbol{w}^\top \boldsymbol{x} + b = 0$

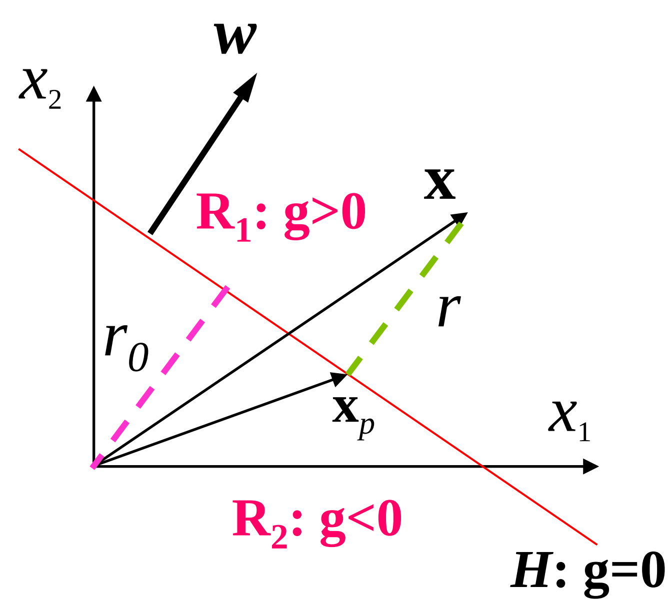
g(x)是点**x**到决策面*H*的距离的一种代数度量

函数间隔：量化分类的正确性、确信度

$$\hat{r}_i = y_i(\boldsymbol{w}^T\boldsymbol{x}_i + b)$$

几何间隔

$$r_i = y_i\frac{(\boldsymbol{w}^T\boldsymbol{x}_i + b)}{\|\boldsymbol{w}\|} = \frac{\hat{r}_i}{\|\boldsymbol{w}\|}$$



$$\mathbf{x} = \mathbf{x}_p + r\frac{\mathbf{w}}{\|\mathbf{w}\|}, \quad g(\mathbf{x}) = r\|\mathbf{w}\|$$

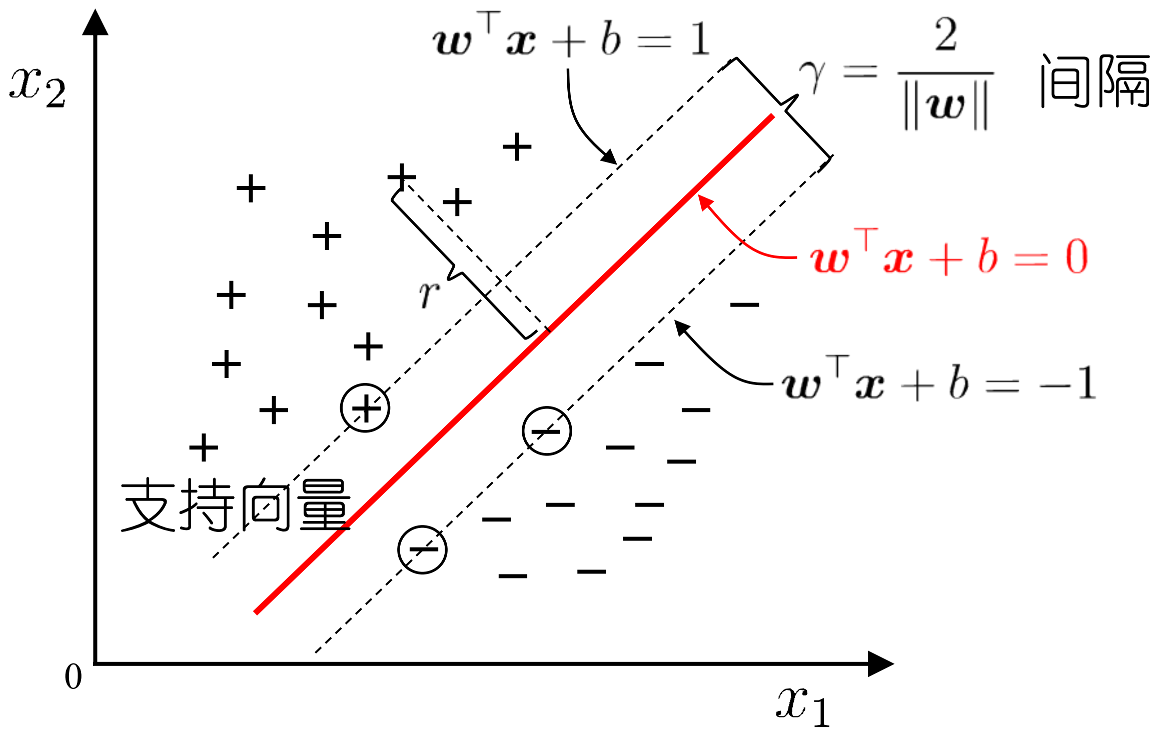
r是**x**到H的垂直距离

$\mathbf{x}_p$是**x**在H上的投影向量

$$r = \frac{g(\mathbf{x})}{\|\mathbf{w}\|}, \qquad r_0 = \frac{b}{\|\mathbf{w}\|}$$

间隔与支持向量

超平面方程: $\boldsymbol{w}^\top \boldsymbol{x} + b = 0$



支持向量机基本型

- 最大间隔：寻找参数 $\boldsymbol{w}$ 和 b，使得 γ 最大.

$$\arg\max_{\boldsymbol{w},b} \ \frac{2}{\|\boldsymbol{w}\|}$$
$$\text{s.t.} \ \ y_i(\boldsymbol{w}^\top \boldsymbol{x}_i + b) \geq 1, \ \ i = 1, 2, \ldots, m.$$

$$\Downarrow$$

$$\arg\min_{\boldsymbol{w},b} \ \frac{1}{2}\|\boldsymbol{w}\|^2$$
$$\text{s.t.} \ \ y_i(\boldsymbol{w}^\top \boldsymbol{x}_i + b) \geq 1, \ \ i = 1, 2, \ldots, m.$$

大纲

- 间隔与支持向量
- 对偶问题
- 核函数
- 软间隔与正则化
- 支持向量回归
- 核方法

对偶问题

- 拉格朗日乘子法
  - 第一步：引入拉格朗日乘子 $\alpha_i \geq 0$ 得到拉格朗日函数

$$L(\boldsymbol{w}, b, \boldsymbol{\alpha}) = \frac{1}{2}\|\boldsymbol{w}\|^2 - \sum_{i=1}^{m} \alpha_i \left(y_i(\boldsymbol{w}^\top \boldsymbol{x}_i + b) - 1\right)$$

  - 第二步：令 $L(\boldsymbol{w}, b, \boldsymbol{\alpha})$ 对 $\boldsymbol{w}$ 和 b 的偏导为零可得

$$\boldsymbol{w} = \sum_{i=1}^{m} \alpha_i y_i \boldsymbol{x}_i, \quad \sum_{i=1}^{m} \alpha_i y_i = 0.$$

  - 第三步：回代

$$\max_{\boldsymbol{\alpha}} \sum_{i=1}^{m} \alpha_i - \frac{1}{2} \sum_{i=1}^{m} \sum_{j=1}^{m} \alpha_i \alpha_j y_i y_j \boldsymbol{x}_i^{\mathrm{T}} \boldsymbol{x}_j$$

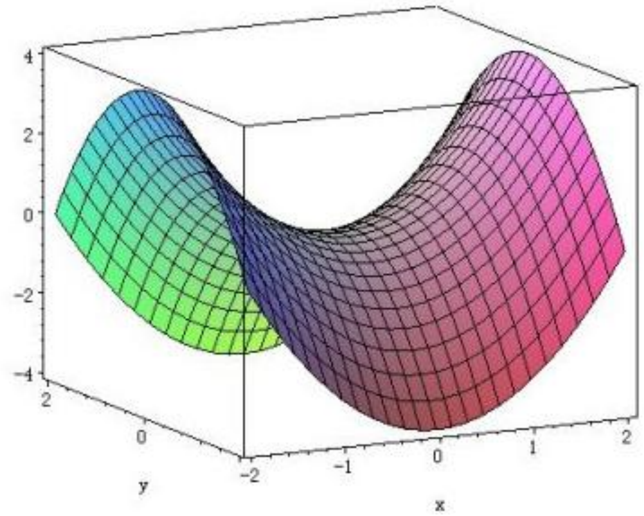
$$\min_{\boldsymbol{\alpha}} \frac{1}{2} \sum_{i=1}^{m} \sum_{j=1}^{m} \alpha_i \alpha_j y_i y_j \boldsymbol{x}_i^\top \boldsymbol{x}_j - \sum_{i=1}^{m} \alpha_i$$

$$\text{s.t.} \sum_{i=1}^{m} \alpha_i y_i = 0, \ \alpha_i \geq 0, \ i = 1, 2, \ldots, m.$$

对偶问题

$$\theta_P(\mathbf{x}) = \max_{\boldsymbol{\alpha},\boldsymbol{\beta}:\alpha_i \geq 0} L(\mathbf{x},\boldsymbol{\alpha},\boldsymbol{\beta})$$ P表示原始问题

$$\theta_D(\boldsymbol{\alpha},\boldsymbol{\beta}) = \min_{\mathbf{x}} L(\mathbf{x},\boldsymbol{\alpha},\boldsymbol{\beta})$$ D表示对偶问题



$$\min_{\mathbf{x}} \theta_P(\mathbf{x}) = \min_{\mathbf{x}} \max_{\boldsymbol{\alpha},\boldsymbol{\beta}:\alpha_i \geq 0} L(\mathbf{x},\boldsymbol{\alpha},\boldsymbol{\beta})$$

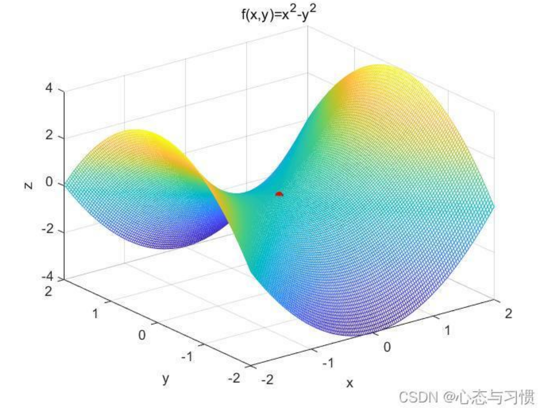
$$\max_{\boldsymbol{\alpha},\boldsymbol{\beta}:\alpha_i \geq 0} \theta_D(\boldsymbol{\alpha},\boldsymbol{\beta}) = \max_{\boldsymbol{\alpha},\boldsymbol{\beta}:\alpha_i \geq 0} \min_{\mathbf{x}} L(\mathbf{x},\boldsymbol{\alpha},\boldsymbol{\beta})$$

广义拉格朗日函数的极大极小问题

$$d^* = \max_{\boldsymbol{\alpha},\boldsymbol{\beta}:\alpha_i \geq 0} \min_{\mathbf{x}} L(\mathbf{x},\boldsymbol{\alpha},\boldsymbol{\beta}) \leq \min_{\mathbf{x}} \max_{\boldsymbol{\alpha},\boldsymbol{\beta}:\alpha_i \geq 0} L(\mathbf{x},\boldsymbol{\alpha},\boldsymbol{\beta}) = p^*$$

定理1：若原始问题和对偶问题都有最优值，则式成立

强对偶定理: 等号成立



充要条件：优化变量满足
Karush-Kuhn-Tucker(KKT)条件

$$\begin{aligned} \min \quad & f(\mathbf{x}) \\ \text{s.t.} \quad & g_i(\mathbf{x}) \leq b_i, \quad i = 1,2,\cdots,k \\ & h_j(\mathbf{x}) = c_j, \quad j = 1,2,\cdots,l \end{aligned}$$

对偶问题

$$
\begin{aligned}
L(\boldsymbol{w}, b, \boldsymbol{\alpha}) &= \frac{1}{2}||\boldsymbol{w}||^2 + \sum_{i=1}^{m} \alpha_i (1 - y_i(\boldsymbol{w}^T \boldsymbol{x}_i + b)) \\
&= \frac{1}{2}||\boldsymbol{w}||^2 + \sum_{i=1}^{m} (\alpha_i - \alpha_i y_i \boldsymbol{w}^T \boldsymbol{x}_i - \alpha_i y_i b) \\
&= \frac{1}{2}\boldsymbol{w}^T \boldsymbol{w} + \sum_{i=1}^{m} \alpha_i - \sum_{i=1}^{m} \alpha_i y_i \boldsymbol{w}^T \boldsymbol{x}_i - \sum_{i=1}^{m} \alpha_i y_i b
\end{aligned}
$$

$$
\frac{\partial L}{\partial \boldsymbol{w}} = \frac{1}{2} \times 2 \times \boldsymbol{w} + 0 - \sum_{i=1}^{m} \alpha_i y_i \boldsymbol{x}_i - 0 = 0 \Longrightarrow \boldsymbol{w} = \sum_{i=1}^{m} \alpha_i y_i \boldsymbol{x}_i
$$

$$
\frac{\partial L}{\partial b} = 0 + 0 - 0 - \sum_{i=1}^{m} \alpha_i y_i = 0 \Longrightarrow \sum_{i=1}^{m} \alpha_i y_i = 0
$$

对偶问题

$$\begin{aligned}\inf_{\boldsymbol{w},b} L(\boldsymbol{w},b,\boldsymbol{\alpha}) &= \frac{1}{2}\boldsymbol{w}^T\boldsymbol{w} + \sum_{i=1}^{m}\alpha_i - \sum_{i=1}^{m}\alpha_i y_i \boldsymbol{w}^T\boldsymbol{x}_i - \sum_{i=1}^{m}\alpha_i y_i b \\ &= \frac{1}{2}\boldsymbol{w}^T\sum_{i=1}^{m}\alpha_i y_i \boldsymbol{x}_i - \boldsymbol{w}^T\sum_{i=1}^{m}\alpha_i y_i \boldsymbol{x}_i + \sum_{i=1}^{m}\alpha_i - b\sum_{i=1}^{m}\alpha_i y_i \\ &= -\frac{1}{2}\boldsymbol{w}^T\sum_{i=1}^{m}\alpha_i y_i \boldsymbol{x}_i + \sum_{i=1}^{m}\alpha_i - b\sum_{i=1}^{m}\alpha_i y_i\end{aligned}$$

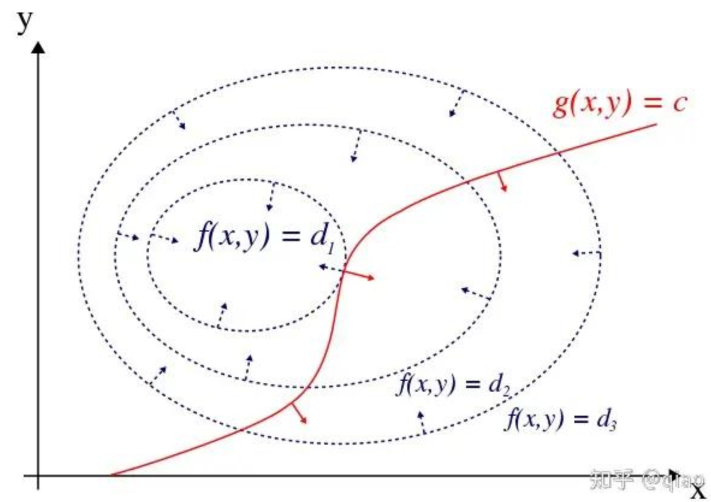
$$\begin{aligned}\inf_{\boldsymbol{w},b} L(\boldsymbol{w},b,\boldsymbol{\alpha}) &= -\frac{1}{2}\boldsymbol{w}^T\sum_{i=1}^{m}\alpha_i y_i \boldsymbol{x}_i + \sum_{i=1}^{m}\alpha_i \\ &= -\frac{1}{2}\left(\sum_{i=1}^{m}\alpha_i y_i \boldsymbol{x}_i\right)^T\left(\sum_{i=1}^{m}\alpha_i y_i \boldsymbol{x}_i\right) + \sum_{i=1}^{m}\alpha_i \\ &= -\frac{1}{2}\sum_{i=1}^{m}\alpha_i y_i \boldsymbol{x}_i^T\sum_{i=1}^{m}\alpha_i y_i \boldsymbol{x}_i + \sum_{i=1}^{m}\alpha_i \\ &= \sum_{i=1}^{m}\alpha_i - \frac{1}{2}\sum_{i=1}^{m}\sum_{j=1}^{m}\alpha_i\alpha_j y_i y_j \boldsymbol{x}_i^T\boldsymbol{x}_j\end{aligned}$$

解的稀疏性

- 最终模型：$f(\boldsymbol{x}) = \boldsymbol{w}^\top \boldsymbol{x} + b = \boxed{\sum_{i=1}^{m} \alpha_i y_i \boldsymbol{x}_i^\top \boldsymbol{x}} + b$

- KKT条件：

$$\begin{cases} \alpha_i \geq 0, \\ y_i f(\boldsymbol{x}_i) \geq 1, \\ \alpha_i (y_i f(\boldsymbol{x}_i) - 1) = 0. \end{cases}$$



$$y_i f(\boldsymbol{x}_i) > 1 \quad \Rightarrow \quad \alpha_i = 0$$

支持向量机解的稀疏性：训练完成后，大部分的训练样本都不需保留，最终模型仅与支持向量有关.

求解方法 - SMO

- 基本思路：不断执行如下两个步骤直至收敛.
  - 第一步：选取一对需更新的变量 α_i 和 α_j.
  - 第二步：固定 α_i 和 α_j 以外的参数，求解对偶问题更新 α_i 和 α_j.

- 仅考虑 α_i 和 α_j 时，对偶问题的约束变为

$$\alpha_i y_i + \alpha_j y_j = -\sum_{k \neq i,j} \alpha_k y_k, \quad \alpha_i \geq 0, \quad \alpha_j \geq 0.$$

用一个变量表示另一个变量，回代入对偶问题可得一个单变量的二次规划，该问题具有闭式解.

- 偏移项 b：通过支持向量来确定.

$$y_s \left(\sum_{i \in S} \alpha_i y_i \boldsymbol{x}_i^{\mathrm{T}} \boldsymbol{x}_s + b \right) = 1$$

例：对于由正类样本点 (3,2)和反类样本点 (1,1)、(2,1) 组成的训练集，利用求解对偶问题的方法求出最优超平面，并判断哪些样本是支持向量。

$$\min \frac{1}{2}\sum_{i=1}^{3}\sum_{j=1}^{3}\alpha_i\alpha_j y_i y_j (x_i \cdot x_j) - \sum_{i=1}^{3}\alpha_i$$

代入数据后展开为：

$$\frac{1}{2}\left(13\alpha_1^2 + 2\alpha_2^2 + 5\alpha_3^2 - 10\alpha_1\alpha_2 - 16\alpha_1\alpha_3 + 6\alpha_2\alpha_3\right) - (\alpha_1 + \alpha_2 + \alpha_3)$$

约束条件为：

$$\alpha_1 - \alpha_2 - \alpha_3 = 0, \quad \alpha_i \geq 0 \quad (i = 1, 2, 3).$$

由 $\alpha_1=\alpha_2+\alpha_3$，代入目标函数化简为：

$$s(\alpha_2, \alpha_3) = \frac{5}{2}\alpha_2^2 + \alpha_3^2 + 3\alpha_2\alpha_3 - 2\alpha_2 - 2\alpha_3.$$

对 α_2和 α_3 求偏导并令其为0，解得α_2=-2， α_3=4，不满足非负约束。

检查边界条件：

- **当** $\alpha_2 = 0$ **时**，目标函数为 $\alpha_3^2 - 2\alpha_3$，极小值在 $\alpha_3 = 1$，对应 $\alpha_1 = 1$，目标值为 -1。
- **当** $\alpha_3 = 0$ **时**，目标函数为 $\frac{5}{2}\alpha_2^2 - 2\alpha_2$，极小值在 $\alpha_2 = \frac{2}{5}$，对应目标值为 -0.4。

最优解为 $\alpha_1 = 1, \alpha_2 = 0, \alpha_3 = 1$

- **权重向量** $w = \sum \alpha_i y_i x_i = (1)(+1)(3,2) + (1)(-1)(2,1) = (1,1)$
- **偏置项** $b = -4$

支持向量判断：

$\alpha_1 > 0$（对应点(3,2)）和 $\alpha_3 > 0$（对应点(2,1)）

最优超平面：

$$x^{(1)} + x^{(2)} - 4 = 0$$

大纲

- 间隔与支持向量
- 对偶问题
- 核函数
- 软间隔与正则化
- 支持向量回归
- 核方法

线性不可分

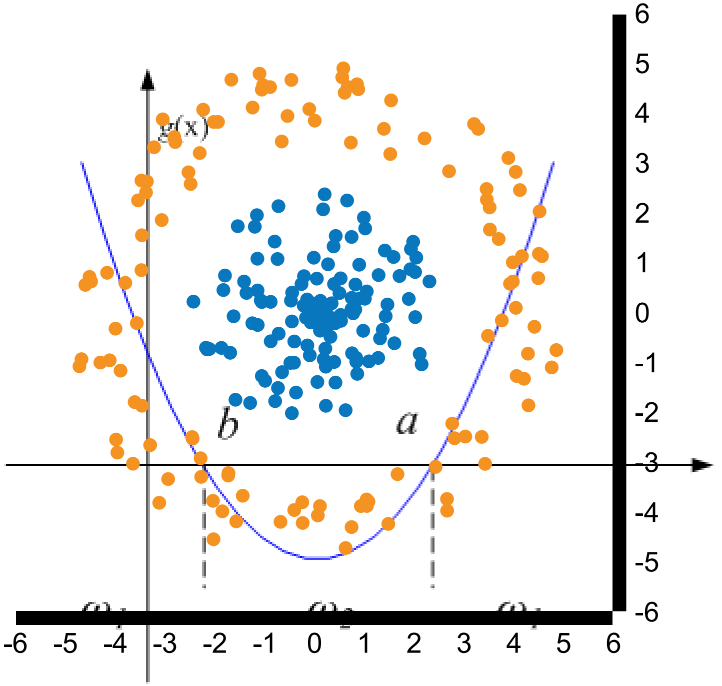
-Q:若不存在一个能正确划分两类样本的超平面, 怎么办?

-A:将样本从原始空间映射到一个更高维的特征空间, 使得样本在这个特征空间内线性可分.

- 广义线性判别函数

$$\text{如果}\begin{cases} x<b \text{ 或 } x>a & \text{则决策} x\in\omega_1 \\ b\le x\le a & \text{则决策} x\in\omega_2 \end{cases}$$

$$\boxed{g(x)=(x-a)(x-b)}$$



广义线性判别函数

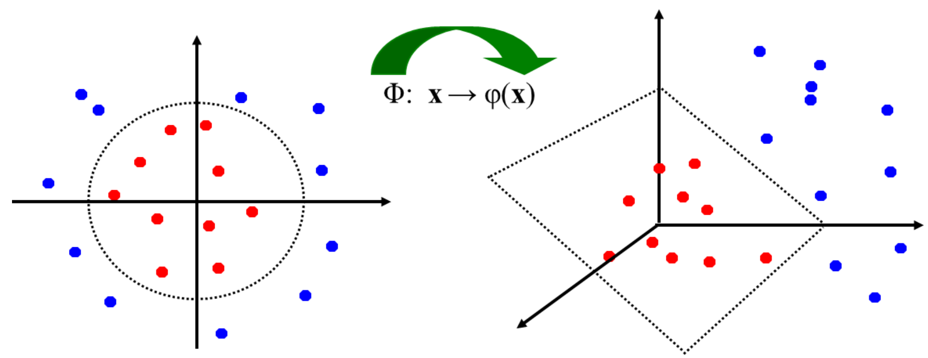
- 二次函数的一般形式

$$g(x) = c_0 + c_1 x + c_2 x^2$$

映射X→Y

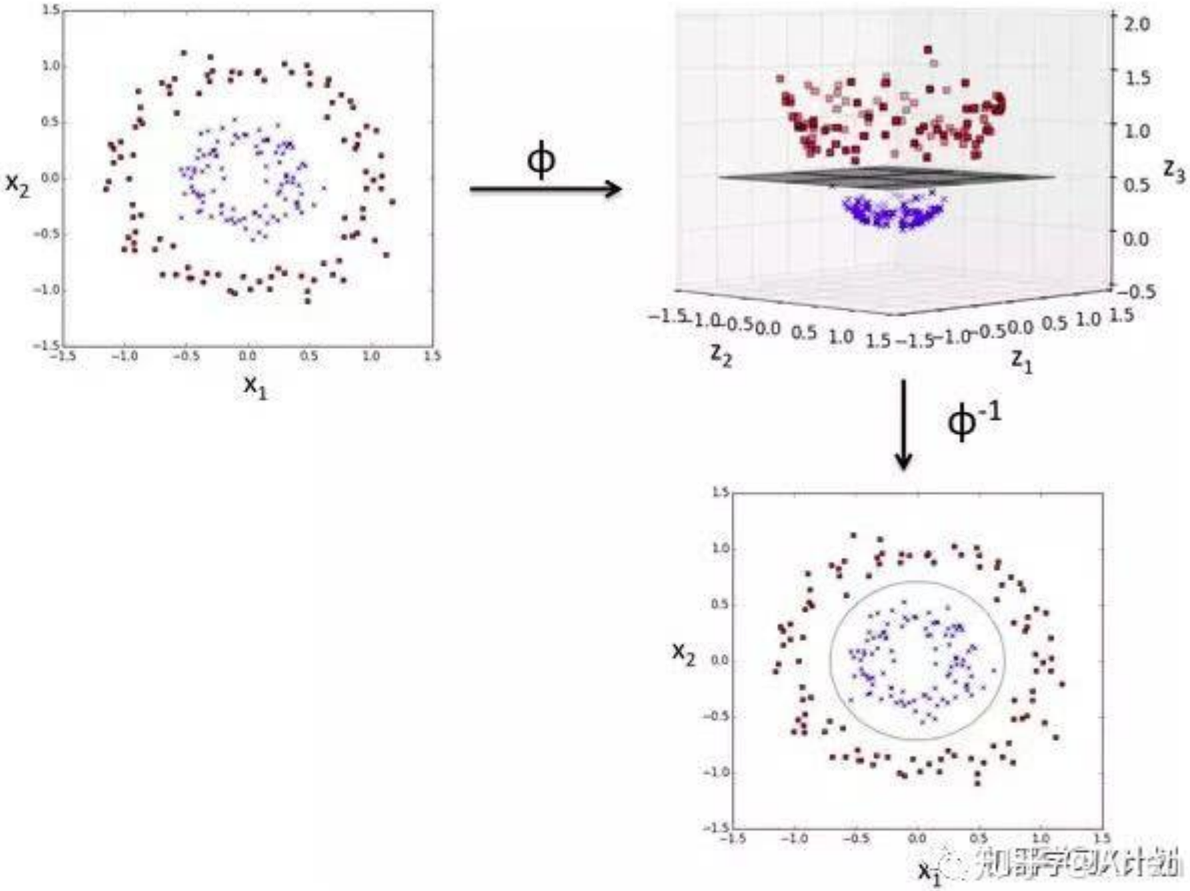
$$\mathbf{y} = \begin{bmatrix} y_1 \\ y_2 \\ y_3 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 \\ x \\ x^2 \end{bmatrix}, \quad \mathbf{a} = \begin{bmatrix} a_1 \\ a_2 \\ a_3 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} c_0 \\ c_1 \\ c_2 \end{bmatrix}$$

广义权向量



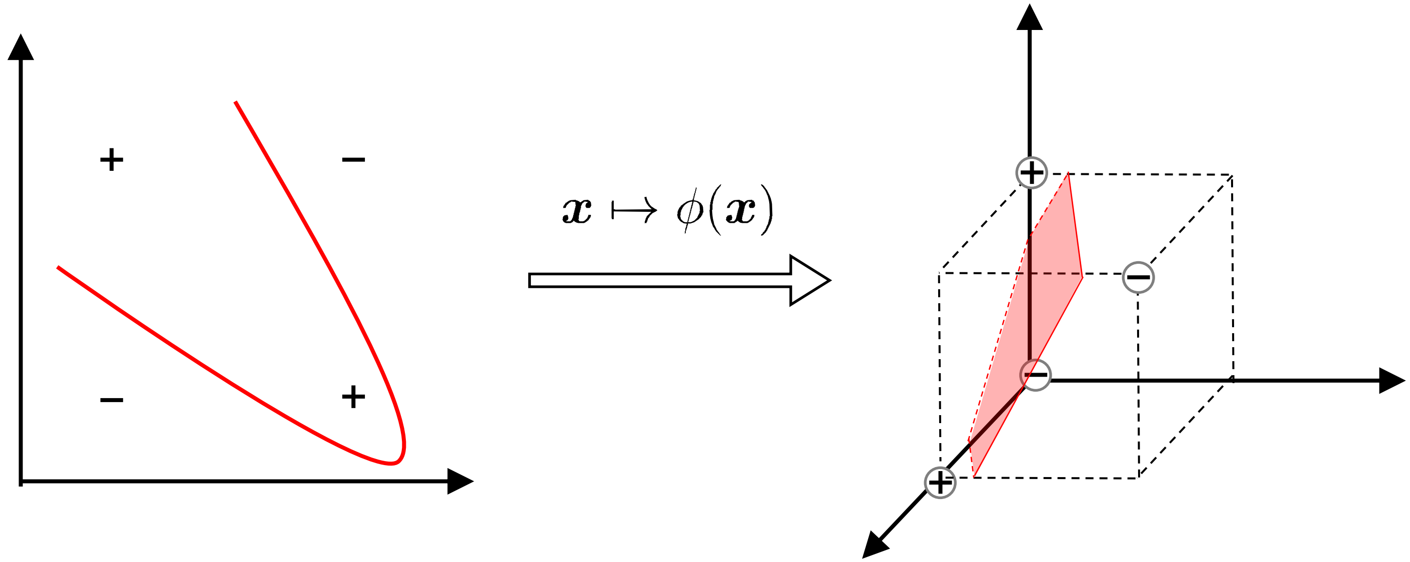
- 按照上述原理，任何非线性函数g(x)用级数展开成高次多项式后，都可转化成线性来处理；“维数灾难”

线性不可分



线性不可分

- 异或问题



核支持向量机

- 设样本 $\boldsymbol{x}$ 映射后的向量为 $\phi(\boldsymbol{x})$，划分超平面为 $f(\boldsymbol{x}) = \boldsymbol{w}^\top \phi(\boldsymbol{x}) + b$.

原始问题

$$\min_{\boldsymbol{w},b} \quad \frac{1}{2}\|\boldsymbol{w}\|^2$$

$$\text{s.t.} \quad y_i(\boldsymbol{w}^\top \phi(\boldsymbol{x}_i) + b) \geq 1, \ i = 1, 2, \ldots, m.$$

对偶问题

$$\min_{\boldsymbol{\alpha}} \quad \frac{1}{2}\sum_{i=1}^{m}\sum_{j=1}^{m}\alpha_i\alpha_j y_i y_j \boxed{\phi(\boldsymbol{x}_i)^\top \phi(\boldsymbol{x}_j)} - \sum_{i=1}^{m}\alpha_i$$

$$\text{s.t.} \quad \sum_{i=1}^{m}\alpha_i y_i = 0,$$

只以内积的形式出现

预测

$$f(\boldsymbol{x}) = \boldsymbol{w}^\top \phi(\boldsymbol{x}) + b = \sum_{i=1}^{m}\alpha_i y_i \boxed{\phi(\boldsymbol{x}_i)^\top \phi(\boldsymbol{x})} + b$$

核函数

- 基本想法：不显式地设计核映射，而是设计核函数.

$$\kappa(\boldsymbol{x}_i, \boldsymbol{x}_j) = \phi(\boldsymbol{x}_i)^\top \phi(\boldsymbol{x}_j)$$

- Mercer定理(充分非必要)：只要一个对称函数所对应的核矩阵半正定，则它就能作为核函数来使用.

(1)交换性：

$$\kappa(x_i, x_j) = \kappa(x_j, x_i)$$

(2)半正定性：

$$\forall \alpha_i \in R, \sum_{i=1}^{m}\sum_{j=1}^{m} \alpha_i \alpha_j \kappa(x_i, x_j) \geq 0$$

核函数

- 常用核函数：

名称	表达式	参数
线性核	$\kappa(\boldsymbol{x}_i, \boldsymbol{x}_j) = \boldsymbol{x}_i^\top \boldsymbol{x}_j$	
多项式核	$\kappa(\boldsymbol{x}_i, \boldsymbol{x}_j) = (\boldsymbol{x}_i^\top \boldsymbol{x}_j)^d$	$d \geq 1$为多项式的次数
高斯核	$\kappa(\boldsymbol{x}_i, \boldsymbol{x}_j) = \exp\left(-\frac{\lVert \boldsymbol{x}_i - \boldsymbol{x}_j \rVert^2}{2\delta^2}\right)$	$\delta > 0$为高斯核的带宽(width)
拉普拉斯核	$\kappa(\boldsymbol{x}_i, \boldsymbol{x}_j) = \exp\left(-\frac{\lVert \boldsymbol{x}_i - \boldsymbol{x}_j \rVert}{\delta}\right)$	$\delta > 0$
Sigmoid核	$\kappa(\boldsymbol{x}_i, \boldsymbol{x}_j) = \tanh(\beta \boldsymbol{x}_i^\top \boldsymbol{x}_j + \theta)$	tanh为双曲正切函数，$\beta > 0$, $\theta < 0$

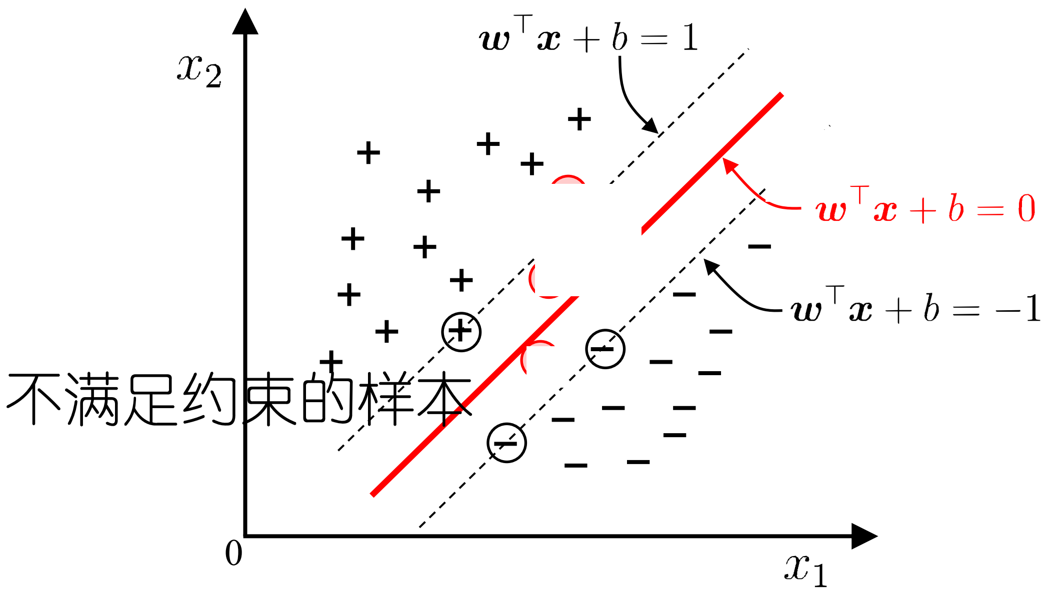
大纲

- 间隔与支持向量
- 对偶问题
- 核函数
- 软间隔与正则化
- 支持向量回归
- 核方法

软间隔

-Q:现实中，很难确定合适的核函数使得训练样本在特征空间中线性可分；同时一个线性可分的结果也很难断定是否是有过拟合造成的.

-A:引入"软间隔"的概念，允许支持向量机在一些样本上不满足约束.



0/1损失函数

- 基本想法：最大化间隔的同时，让不满足约束的样本应尽可能少.

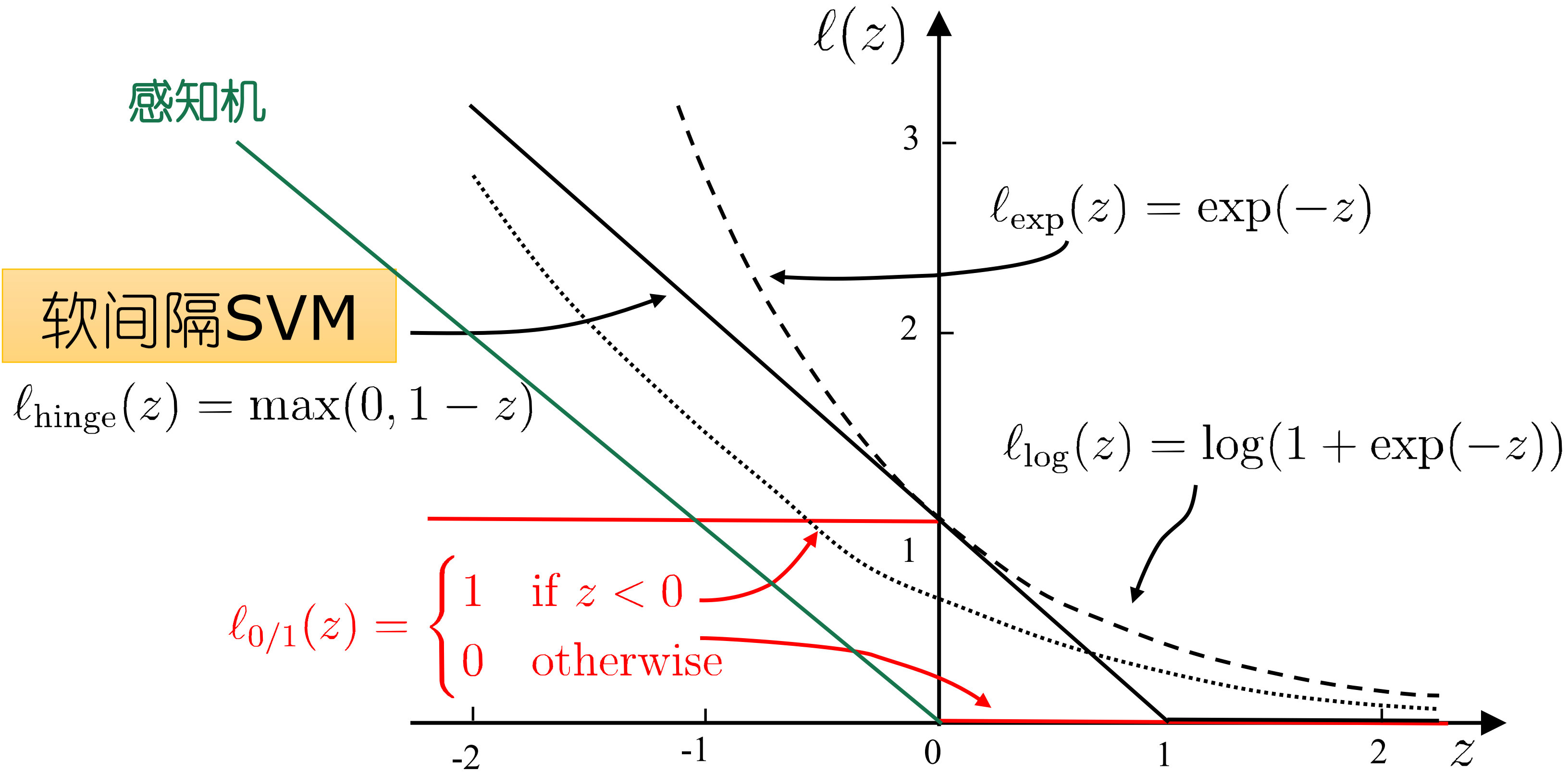
$$\min_{\boldsymbol{w},b} \quad \frac{1}{2}\|\boldsymbol{w}\|^2 + C\sum_{i=1}^{m} l_{0/1}\left(y_i(\boldsymbol{w}^\top\phi(\boldsymbol{x}_i)+b)-1\right)$$

其中 $l_{0/1}$是"0/1损失函数"

$$l_{0/1} = \begin{cases} 1 & z < 0 \\ 0 & otherwise \end{cases}$$

- 存在的问题：0/1损失函数非凸、非连续，不易优化！

替代损失



替代损失函数数学性质较好，一般是0/1损失函数的上界

软间隔支持向量机

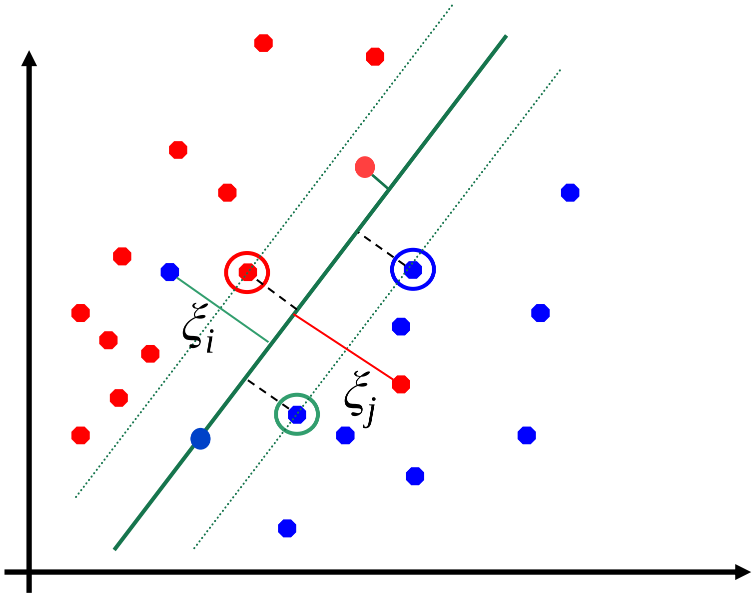
原始问题 $$\min_{\boldsymbol{w},b} \frac{1}{2}\|\boldsymbol{w}\|^2 + C\sum_{i=1}^{m} \boxed{\max\left(0, 1 - y_i(\boldsymbol{w}^\top \phi(\boldsymbol{x}_i) + b)\right)}$$

引入松弛变量（Slack variables） $\xi_i > 0$

$$\min_{w,b,\xi_i}\left(\frac{1}{2}\|w\|^2 + C\sum_{i=1}^{m}\xi_i\right)$$

$$y_i(w^T x_i + b) \geq 1 - \xi_i$$

$$\xi_i \geq 0, (i = 1, 2, \ldots, m)$$



软间隔支持向量机

原始问题 $$\min_{\boldsymbol{w},b} \frac{1}{2}\|\boldsymbol{w}\|^2 + C\sum_{i=1}^{m} \max\left(0, 1 - y_i(\boldsymbol{w}^\top \phi(\boldsymbol{x}_i) + b)\right)$$

$$\min_{\boldsymbol{w},b,\boldsymbol{\xi}} L(\boldsymbol{w}, b, \boldsymbol{\alpha}, \boldsymbol{\xi}, \boldsymbol{\mu}) = \frac{1}{2}||\boldsymbol{w}||^2 + C\sum_{i=1}^{m}\xi_i + \sum_{i=1}^{m}\alpha_i(1 - \xi_i - y_i(\boldsymbol{w}^T\boldsymbol{x}_i + b)) - \sum_{i=1}^{m}\mu_i\xi_i$$

$$\boldsymbol{w} = \sum_{i=1}^{m}\alpha_i y_i \boldsymbol{x}_i \qquad = \frac{1}{2}||\boldsymbol{w}||^2 + \sum_{i=1}^{m}\alpha_i(1 - y_i(\boldsymbol{w}^T\boldsymbol{x}_i + b)) + C\sum_{i=1}^{m}\xi_i - \sum_{i=1}^{m}\alpha_i\xi_i - \sum_{i=1}^{m}\mu_i\xi_i$$

$$0 = \sum_{i=1}^{m}\alpha_i y_i \qquad = -\frac{1}{2}\sum_{i=1}^{m}\alpha_i y_i \boldsymbol{x}_i^T\sum_{i=1}^{m}\alpha_i y_i \boldsymbol{x}_i + \sum_{i=1}^{m}\alpha_i + \sum_{i=1}^{m}C\xi_i - \sum_{i=1}^{m}\alpha_i\xi_i - \sum_{i=1}^{m}\mu_i\xi_i$$

$$C = \alpha_i + \mu_i \qquad = -\frac{1}{2}\sum_{i=1}^{m}\alpha_i y_i \boldsymbol{x}_i^T\sum_{i=1}^{m}\alpha_i y_i \boldsymbol{x}_i + \sum_{i=1}^{m}\alpha_i + \boxed{\sum_{i=1}^{m}(C - \alpha_i - \mu_i)\xi_i}$$

$$= \sum_{i=1}^{m}\alpha_i - \frac{1}{2}\sum_{i=1}^{m}\sum_{j=1}^{m}\alpha_i\alpha_j y_i y_j \boldsymbol{x}_i^T\boldsymbol{x}_j$$

软间隔支持向量机

原始问题

$$\min_{\boldsymbol{w},b} \frac{1}{2}\|\boldsymbol{w}\|^2 + C\sum_{i=1}^{m}\max\left(0, 1-y_i(\boldsymbol{w}^\top\phi(\boldsymbol{x}_i)+b)\right)$$

对偶问题

$$\min_{\boldsymbol{\alpha}} \frac{1}{2}\sum_{i=1}^{m}\sum_{j=1}^{m}\alpha_i\alpha_j y_i y_j \phi(\boldsymbol{x}_i)^\top\phi(\boldsymbol{x}_j) - \sum_{i=1}^{m}\alpha_i$$

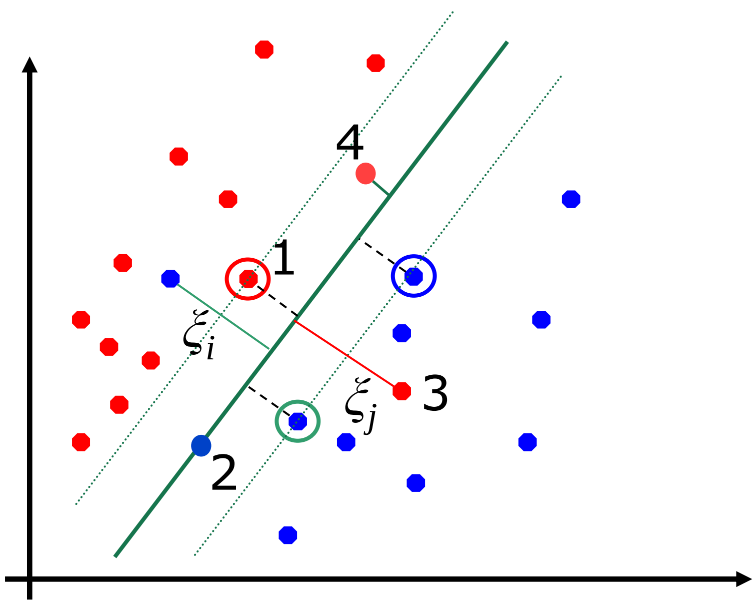
$$\text{s.t.} \sum_{i=1}^{m}\alpha_i y_i = 0,\ 0 \le \alpha_i \le C,\ i = 1, 2, \ldots, m.$$

$$\max_{\boldsymbol{\alpha}} \sum_{i=1}^{m}\alpha_i - \frac{1}{2}\sum_{i=1}^{m}\sum_{j=1}^{m}\alpha_i\alpha_j y_i y_j \boldsymbol{x}_i^{\mathrm{T}}\boldsymbol{x}_j$$

根据KKT条件可推得最终模型仅与支持向量有关，也即hinge损失函数依然保持了支持向量机解的稀疏性.

软间隔支持向量机

$$\begin{cases} \alpha_i \geqslant 0, \quad \mu_i \geqslant 0 \\ y_i f(\boldsymbol{x}_i) - 1 + \xi_i \geqslant 0 \\ \alpha_i \left(y_i f(\boldsymbol{x}_i) - 1 + \xi_i \right) = 0 \\ \xi_i \geqslant 0, \mu_i \xi_i = 0 \end{cases}$$



正则化

- 支持向量机学习模型的更一般形式

$$\min_{f} \quad \Omega(f) + C\sum_{i=1}^{m} l(f(\boldsymbol{x}_i), y_i)$$

结构风险，描述模型的某些性质

经验风险，描述模型与训练数据的契合程度

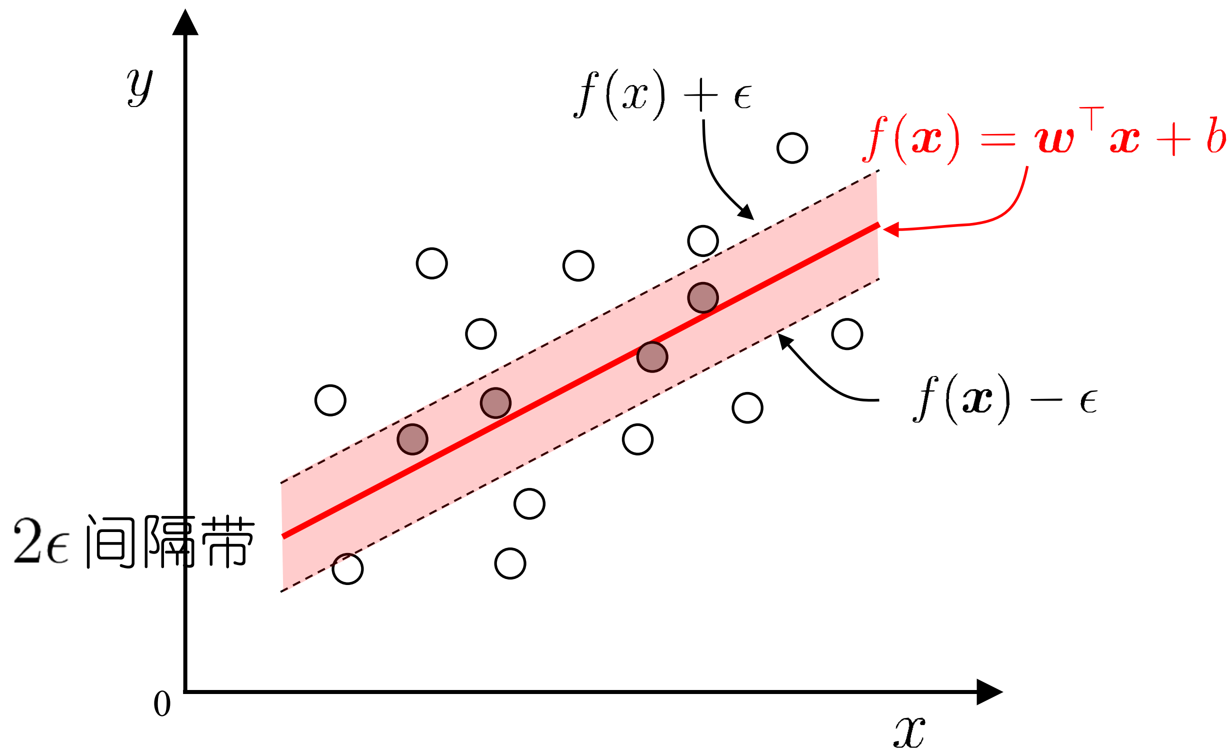
- 通过替换上面两个部分，可以得到许多其他学习模型
  - 对数几率回归(Logistic Regression)
  - 最小绝对收缩选择算子(LASSO)
  - ……

大纲

- 间隔与支持向量
- 对偶问题
- 核函数
- 软间隔与正则化
- 支持向量回归
- 核方法

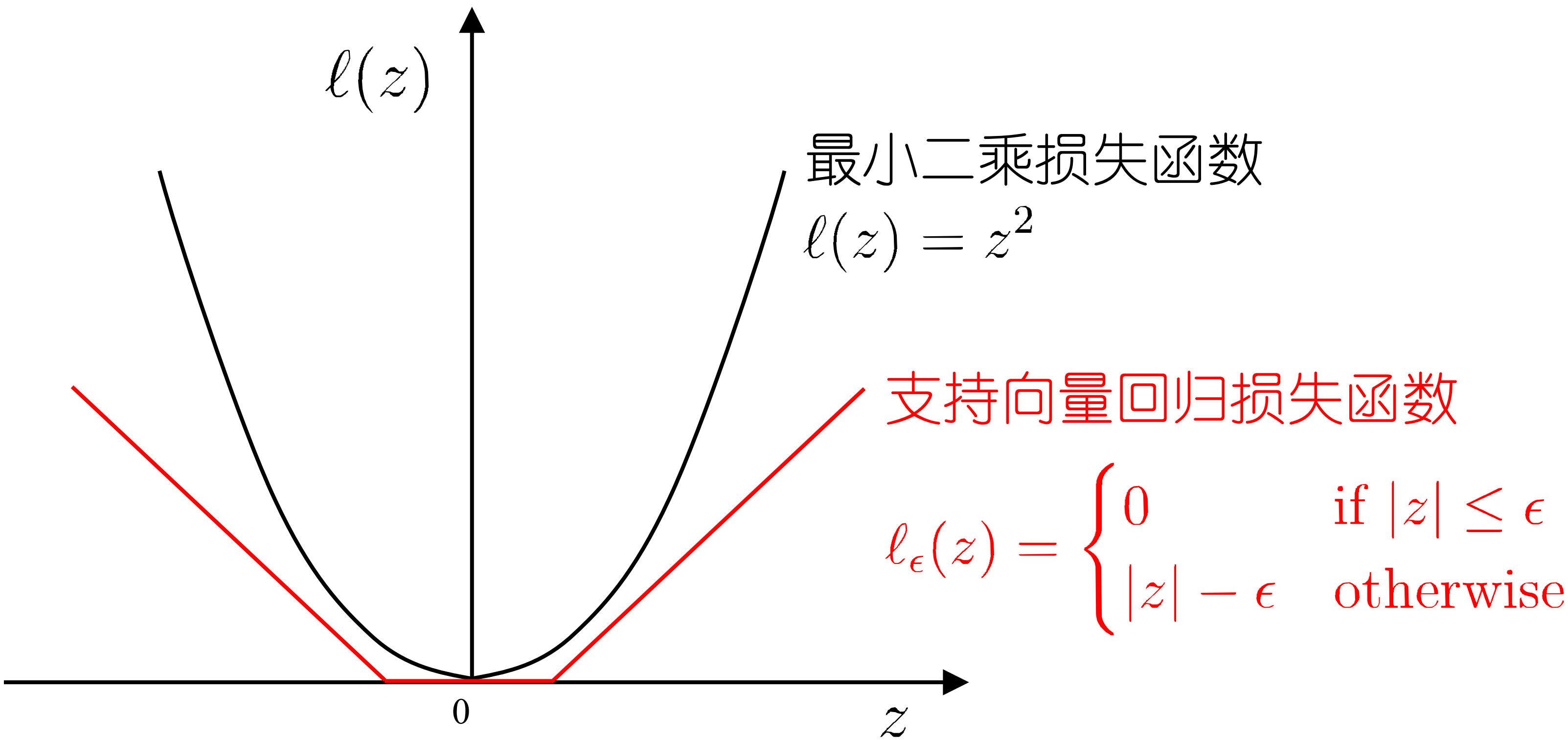
支持向量回归

特点：允许模型输出和实际输出间存在 2ϵ 的偏差.



损失函数

落入中间 2ϵ 间隔带的样本不计算损失，从而使得模型获得稀疏性.



形式化

原始问题

$$\min_{\boldsymbol{w},b,\xi_i,\hat{\xi}_i} \quad \frac{1}{2}\|\boldsymbol{w}\|^2 + C\sum_{i=1}^{m}(\xi_i + \hat{\xi}_i)$$

$$\begin{aligned} \text{s.t.} \quad & y_i - \boldsymbol{w}^\top \phi(\boldsymbol{x}_i) - b \le \epsilon + \xi_i, && \text{超平面上} \\ & y_i - \boldsymbol{w}^\top \phi(\boldsymbol{x}_i) - b \ge -\epsilon - \hat{\xi}_i, && \text{超平面下} \\ & \xi_i \ge 0,\ \hat{\xi}_i \ge 0,\ i = 1, 2, \ldots, m. \end{aligned}$$

对偶问题

$$\min_{\boldsymbol{\alpha},\hat{\boldsymbol{\alpha}}} \quad \frac{1}{2}\sum_{i=1}^{m}\sum_{j=1}^{m}(\alpha_i - \hat{\alpha}_i)(\alpha_j - \hat{\alpha}_j)\kappa(\boldsymbol{x}_i, \boldsymbol{x}_j) + \sum_{i=1}^{m}(\alpha_i(\epsilon - y_i) + \hat{\alpha}_i(\epsilon + y_i))$$

$$\begin{aligned} \text{s.t.} \quad & \sum_{i=1}^{m}(\alpha_i - \hat{\alpha}_i) = 0, \\ & 0 \le \alpha_i \le C,\ 0 \le \hat{\alpha}_i \le C. \end{aligned}$$

预测

$$f(\boldsymbol{x}) = \boldsymbol{w}^\top \phi(\boldsymbol{x}) + b = \sum_{i=1}^{m}(\hat{\alpha}_i - \alpha_i)y_i\kappa(\boldsymbol{x}_i, \boldsymbol{x}) + b$$

大纲

- 间隔与支持向量
- 对偶问题
- 核函数
- 软间隔与正则化
- 支持向量回归
- 核方法

表示定理

支持向量机 $f(\boldsymbol{x}) = \boldsymbol{w}^\top \phi(\boldsymbol{x}) + b = \sum_{i=1}^{m} \alpha_i y_i \kappa(\boldsymbol{x}_i, \boldsymbol{x}) + b$

支持向量回归 $f(\boldsymbol{x}) = \boldsymbol{w}^\top \phi(\boldsymbol{x}) + b = \sum_{i=1}^{m} (\hat{\alpha}_i - \alpha_i) y_i \kappa(\boldsymbol{x}_i, \boldsymbol{x}) + b$

结论：无论是支持向量机还是支持向量回归，学得的模型总可以表示成核函数的线性组合.

更一般的结论(表示定理)：对于任意单调增函数Ω和任意非负损失函数l，优化问题

$$\min_{h \in \mathbb{H}} \quad F(h) = \Omega(\|h\|_{\mathbb{H}}) + l(h(\boldsymbol{x}_1), \ldots, h(\boldsymbol{x}_m))$$

的解总可以写为 $h^* = \sum_{i=1}^{m} \alpha_i \kappa(\cdot, \boldsymbol{x}_i)$.

核线性判别分析

- 通过表示定理可以得到很多线性模型的"核化"版本
  - 核SVM
  - 核LDA
  - 核PCA
  - ……
- 核LDA：先将样本映射到高维特征空间，然后在此特征空间中做线性判别分析

$$\max_{\boldsymbol{w}} J(\boldsymbol{w}) = \frac{\boldsymbol{w}^\top \mathbf{S}_b^\phi \boldsymbol{w}}{\boldsymbol{w}^\top \mathbf{S}_w^\phi \boldsymbol{w}}$$

$$h(\boldsymbol{x}) = \boldsymbol{w}^\top \phi(\boldsymbol{x}) = \sum_{i=1}^{m} \alpha_i \kappa(\boldsymbol{x}_i, \boldsymbol{x})$$

$$\max_{\boldsymbol{\alpha}} J(\boldsymbol{\alpha}) = \frac{\boldsymbol{\alpha}^\top \mathbf{M} \boldsymbol{\alpha}}{\boldsymbol{\alpha}^\top \mathbf{N} \boldsymbol{\alpha}}$$