CS189 作业: 硬间隔支持向量机(理论题)中文题面与证明

背景与记号

线性 SVM 的判别函数 (原文式 (1)) 为

$$r(x) = \begin{cases} +1, & w^{\top} x + \alpha \ge 0, \\ -1, & \text{otherwise.} \end{cases}$$

原始 (primal) 硬间隔 SVM (原文式 (2)):

$$\min_{w,\alpha} \|w\|^2 \quad \text{s.t.} \quad y_i (X_i^\top w + \alpha) \ge 1, \ i = 1, \dots, n.$$

其拉格朗日鞍点形式 (原文式 (3)):

$$\max_{\lambda_i \ge 0} \min_{w,\alpha} ||w||^2 - \sum_{i=1}^n \lambda_i (y_i (X_i^\top w + \alpha) - 1).$$

问题 1. (a) 把式 (3) 化为对偶优化 (原文式 (4)), 并解释新等式约束的来源。

证明. 设

$$\mathcal{L}(w, \alpha, \lambda) = \|w\|^2 - \sum_{i=1}^n \lambda_i (y_i(X_i^\top w + \alpha) - 1), \qquad \lambda_i \ge 0.$$

对内层最小化的一阶条件(站立性)为

$$\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial w} = 2w - \sum_{i=1}^{n} \lambda_i y_i X_i = 0 \implies w^* = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^{n} \lambda_i y_i X_i,$$

$$\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \alpha} = -\sum_{i=1}^{n} \lambda_i y_i = 0 \implies \sum_{i=1}^{n} \lambda_i y_i = 0.$$

将 w^* 与等式约束代回 \mathcal{L} , 注意

$$||w^*||^2 = \left(\frac{1}{2}\sum_i \lambda_i y_i X_i\right)^\top \left(\frac{1}{2}\sum_j \lambda_j y_j X_j\right) = \frac{1}{4}\sum_{i,j} \lambda_i \lambda_j y_i y_j X_i^\top X_j,$$

并且 $-\alpha \sum_{i} \lambda_{i} y_{i} = 0$, 故对偶函数为

$$g(\lambda) = \sum_{i=1}^{n} \lambda_i - \frac{1}{4} \sum_{i=1}^{n} \sum_{j=1}^{n} \lambda_i \lambda_j y_i y_j X_i^{\top} X_j.$$

弱对偶性保证 $g(\lambda)$ 是原始问题最优值的下界,故对偶问题为

$$\max_{\lambda \ge 0} g(\lambda) \quad s.t. \quad \sum_{i=1}^{n} \lambda_i y_i = 0.$$

新等式约束正是由 $\partial \mathcal{L}/\partial \alpha = 0$ 得到。证毕。

问题 2. (b) 已知能最优解式 (3) 的 λ_i^* 与 α^* 。证明由式 (1) 给出的判别函数可写为

$$r(x) = \operatorname{sign}\left(\alpha^* + \frac{1}{2} \sum_{i=1}^n \lambda_i^* y_i X_i^\top x\right).$$

证明. 由 (a) 的平稳性条件, $w^* = \frac{1}{2} \sum_i \lambda_i^* y_i X_i$ 。代回

$$r(x) = \operatorname{sign}(w^{*\top}x + \alpha^*) = \operatorname{sign}\left(\alpha^* + \frac{1}{2}\sum_{i=1}^n \lambda_i^* y_i X_i^{\top}x\right).$$

证毕。

问题 3. (c)利用互补松弛条件 $\lambda_i^* \left(y_i(X_i^\top w^* + \alpha^*) - 1 \right) = 0$,解释当 $\lambda_i^* > 0$ 时样本点 X_i 的几何意义。

证明. 若 $\lambda_i^* > 0$,则必有 $y_i(X_i^\top w^* + \alpha^*) = 1$,即该点恰落在两条间隔超平面之一 $\{x: w^{*\top}x + \alpha^* = \pm 1\}$ 上,因而是支持向量。证毕。

问题 4. (d) 说明在计算 r(x) 时, 只需使用 $\lambda_i^* > 0$ 的样本点。

证明. 由 (b)

$$w^{*\top}x + \alpha^* = \alpha^* + \frac{1}{2} \sum_{i=1}^n \lambda_i^* y_i X_i^{\top} x.$$

若某 i 使 $\lambda_i^* = 0$,其对和式无贡献; 只有 $\lambda_i^* > 0$ (支持向量) 才影响判别值, 故仅需支持向量即可计算 r(x)。证毕。

问题 5. (e) 给定近似参数 $w = [-0.4528, -0.5190]^{\mathsf{T}}, \ \alpha = 0.1471$ 。写出二维平面上决策边界 $w^{\mathsf{T}}x + \alpha = 0$ 及两条边距 $w^{\mathsf{T}}x + \alpha = \pm 1$ 的解析式,并说明支持向量所在位置。

证明. 令 $x = (x_1, x_2)^{\mathsf{T}}$ 。决策边界为

$$x_2 = -\frac{w_1}{w_2}x_1 - \frac{\alpha}{w_2} \approx -0.8723 x_1 - 0.2834,$$

两条边距为

$$x_2 = -\frac{w_1}{w_2} x_1 - \frac{\alpha \pm 1}{w_2}.$$

支持向量满足 $w^{\mathsf{T}}X_i + \alpha = \pm 1$, 即恰位于上述两条平行直线上。证毕。

问题 6. (f) 在线性可分情形下,用原始形式证明:最优解的每个类别(+1 与 -1)至少各有一个支持向量。

证明. 反证法。设最优解 (w^*, α^*) 下,正类无支持向量。则存在 $\varepsilon > 0$,对所有 $y_i = +1$ 有 $w^{*\top} X_i + \alpha^* \geq 1 + \varepsilon$ 。取

$$\tilde{\alpha} = \alpha^* - \varepsilon/2.$$

则正类满足 $w^{*\top}X_i + \tilde{\alpha} \ge 1 + \varepsilon/2 > 1$ 。对负类 $y_i = -1$,有

$$y_i(w^{*\top}X_i + \tilde{\alpha}) = -(w^{*\top}X_i + \alpha^*) + \varepsilon/2 \ge 1 + \varepsilon/2 > 1.$$

于是存在 $\delta = \varepsilon/2 > 0$ 使所有样本均满足 $y_i(w^{*\top}X_i + \tilde{\alpha}) \ge 1 + \delta$ 。对 $(w^*, \tilde{\alpha})$ 同比缩放

$$w' = \frac{w^*}{1 + \delta/2}, \qquad \alpha' = \frac{\tilde{\alpha}}{1 + \delta/2},$$

则 $y_i(w'^{\top}X_i + \alpha') \ge \frac{1+\delta}{1+\delta/2} > 1$, 故 (w', α') 仍可行,但目标 $||w'||^2 = ||w^*||^2/(1+\delta/2)^2 < ||w^*||^2$, 与最优性矛盾。故正类必须存在支持向量;对负类同理,结论成立。证毕。