

hw2-ans

1. 给定约束 $x + y + z = 9$ 与 $x + 2y + 3z = 20$, 采用拉格朗日乘子法最小化 $f(x, y, z) = x^2 + y^2 + z^2$ 。

解: let $g_1(x, y, z) = x + y + z - 9$, $g_2(x, y, z) = x + 2y + 3z - 20$.

$$L(x, y, z, \lambda_1, \lambda_2) = f(x, y, z) + \lambda_1 g_1(x, y, z) + \lambda_2 g_2(x, y, z)$$

let $\frac{\partial L(x, y, z, \lambda_1, \lambda_2)}{\partial i} = 0$, where $i \in \{x, y, z, \lambda_1, \lambda_2\}$, then:

$$\begin{bmatrix} 2 & 0 & 0 & 1 & 1 \\ 0 & 2 & 0 & 1 & 2 \\ 0 & 0 & 2 & 1 & 3 \\ 1 & 1 & 1 & 0 & 0 \\ 1 & 2 & 3 & 0 & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x \\ y \\ z \\ \lambda_1 \\ \lambda_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 9 \\ 20 \end{bmatrix}$$

then:

$$\begin{bmatrix} x \\ y \\ z \\ \lambda_1 \\ \lambda_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 2 \\ 3 \\ 4 \\ -2 \\ -2 \end{bmatrix}$$

The minimum is: $f(2, 3, 4) = 29$.

注意 ⚠: 严格来讲此处应当根据二阶导数判断一次极值类型 (未作为扣分点)。然而在有约束情况时, 不应直接根据 f 的 Hessian Matrix 来判断, 而应当根据其 Bordered Hessian 来判断。

2. 已知正样本点 $(6, 5), (9, 8), (9, 9), (5, 9), (6, 6)$ 与负样本点 $(2, 1), (0, 1), (2, 4), (0, 3), (1, 3)$ 。

(1) 若已知支持向量为 $(6, 5), (5, 9), (2, 4)$, 求 w, b 。(5分)

解: According to the definition of support vectors:

$$\begin{bmatrix} 6 & 5 & 1 \\ 5 & 9 & 1 \\ 2 & 4 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} w_1 \\ w_2 \\ b \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 \\ 1 \\ -1 \end{bmatrix}$$

$$\text{Then } \begin{bmatrix} w_1 \\ w_2 \\ b \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0.471 \\ 0.118 \\ -2.411 \end{bmatrix}$$

(2) 试根据上述模型预测新样本点 $(1, 15), (4, 2)$ 的类别。(5分)

$$\text{解: } f(x) = w_1 x_1 + w_2 x_2 + b$$

$$f((1, 15)) = -0.1764705882352935 < 0$$

$$f((4, 2)) = -0.2941176470588234 < 0$$

(3) 证明: 对于任意数据分布, 若其线性可分, 则正负样本中均存在至少一个支持向量。(10分)

解：假设在负样本中没有支持向量。用 k 表示正样本中某个支持向量的index。

将优化后的参数表示为 w^*, b^* ，将分隔超平面与点 i 的几何间隔表示为 d_i ，即 $d_i = y^{(i)}(w^{*T}x^{(i)} + b^*)/\|w^*\|$ 。

当我们固定 w^* 并对 b^* 进行轻微扰动 $b \rightarrow b + \delta b$ ，其中 $\delta b > 0$ ，那么对于所有正样本 i^+ ，有 $d_{i^+} \rightarrow d_{i^+} + \frac{\delta b}{\|w^*\|}$ ；对于所有负样本 i^- ，有 $d_{i^-} \rightarrow d_{i^-} - \frac{\delta b}{\|w^*\|}$ 。

可以验证，在所有样本中， k 仍旧是最靠近新超平面 $(w^*, b^* + \delta b)$ 的样本，因为 δb 非常小。然而， k 的几何间隔增加了，这与 (w^*, b^*) 是最优参数的假设相矛盾。

对于只有负样本中有支持向量的情况，同理。

因此，负样本和正样本中都应该存在支持向量。

注意⚠：（3）中更简单的证明方法是通过对偶形式。SVM的对偶形式中的约束条件为 $\sum_i \alpha_i y_i = 0$ ，由于非支持向量的 $\alpha_i = 0$ ，因此自然要求正负样本中均具有支持向量来使该式成立。

3. 已知正样本点 $(0, 1), (-1, -1), (1, -1)$ 与负样本点 $(2, 2), (-2, 2), (0, -2)$ 。容易观测到，该数据集线性不可分。现采用RBF kernel ($\sigma = 1$) SVM对其进行分类，并且已知优化得到的 α_i 依次为1.01, 1.55, 1.55, 1.02, 1.02, 2.08。

(1) 计算模型优化得到的 b （考虑到精度问题，采用上述样本点中的第一个支持向量作为计算依据）。（10分）

解：由每个 $\alpha_i > 0$ ，可得每个样本都是支持向量。使用第一个支持向量 $(x^{(1)}, y^{(1)}) = ((0, 1)^T, 1)$ 来计算 b 。

$$b^* = y^{(1)} - \sum_{j=1}^6 \alpha_j y_j^{(j)} k(x^{(1)}, x^{(j)}) = y^{(1)} - \sum_{j=1}^6 \alpha_j y_j^{(j)} e^{-\frac{\|x^{(1)} - x^{(j)}\|^2}{2}} \quad (1)$$

代入数值 $(x^{(j)}, y^{(j)})$ for $j = 1, 2, 3, 4, 5, 6$ ，计算出 $b^* = -0.0739$

(2) 写出该模型所对应的非线性分割线方程（写出形式即可，无需代入具体数值）（10分）。

解：非线性分割线方程：

$$\sum_{j=1}^6 \alpha_j y_j e^{-\frac{\|x - x^{(j)}\|^2}{2}} + b = 0 \quad (2)$$

注意⚠：是非线性分割方程，没有写出该等式的都不给该小题分。

(3) 验证 $(2, 2)$ 样本点得到了正确分类，并根据该模型判断 $(-2, -2)$ 的类别（10分）。

解：由 $f(x) = \sum_{j=1}^6 \alpha_j y_j e^{-\frac{\|x - x^{(j)}\|^2}{2}} + b^*$ ， $b^* = -0.0739$

代入 $(2, 2)$ ， $f((2, 2)) = \sum_{j=1}^6 \alpha_j y_j e^{-\frac{\|(2, 2)^T - x^{(j)}\|^2}{2}} + b^* = -1.000799 < 0$ ；因此 $(2, 2)$ 样本点是负样本。

代入 $(-2, -2)$ ， $f((-2, -2)) = \sum_{j=1}^6 \alpha_j y_j e^{-\frac{\|(-2, -2)^T - x^{(j)}\|^2}{2}} + b^* = 0.226432 > 0$

注意⚠：不写出计算过程和计算结果的会扣除5分，部分同学出错在于 b^* 忘记加了。

4. 已知训练数据集有正例点 $x_1 = (4, 3), x_2 = (3, 3), x_3 = (1.5, 1.5)$ ，负例点 $x_4 = (1, 1)$ 。训练一个硬间隔的SVM，分隔超平面为 $2x^{(1)} + 2x^{(2)} - 5 = 0$ 。

(1) 现重新训练一个带松弛变量的软间隔SVM。假设求得的松弛变量 $\xi_1 = 0, \xi_2 = 0, \xi_3 = 1.5, \xi_4 = 0$, 请问加松弛变量前后支持向量分别是哪些, 以及新的软间隔SVM的分隔超平面。

解: 加松弛变量前: $f(x) = 2x^{(1)} + 2x^{(2)} - 5$, 我们可为 x_i 计算函数间隔 $y_i f(x_i)$ 。

$$y_1 f(x_1) = 2 * 4 + 2 * 3 - 5 = 9$$

$$y_2 f(x_2) = 2 * 3 + 2 * 3 - 5 = 7$$

$$y_3 f(x_3) = 2 * 1.5 + 2 * 1.5 - 5 = 1$$

$$y_4 f(x_4) = -(2 * 1 + 2 * 1 - 5) = 1$$

可根据函数间隔为1来得到支持向量为 x_3, x_4 。(也可以通过计算几何间隔来得到) 【3分】

加松弛变量后: 我们可知 $\xi_i \neq 0$ 的点一定是支持向量, 可得 x_3 为支持向量, 又知对线性可分数据, 正负样本均至少存在一个支持向量, 而数据集中负样本只有一个 x_4 , 因此 x_4 也为支持向量, 进一步可得到优化不等式:

$$4w_1 + 3w_2 + b \geq 1 - 0 = 1$$

$$3w_1 + 3w_2 + b \geq 1 - 0 = 1$$

$$1.5w_1 + 1.5w_2 + b = 1 - 1.5 = -0.5 \quad (\text{由支持向量 } x_3 \text{ 得})$$

$$-(w_1 + w_2 + b) = 1 - 0 = 1 \quad (\text{由支持向量 } x_4 \text{ 得})$$

结合等式3、4可计算出 $w_1 + w_2 = 1, b = -2$, 由于我们目标函数最小化的是 $\frac{1}{2}w_1^2 + \frac{1}{2}w_2^2 + C \sum_i \xi_i$, 当 $w_1 = w_2 = \frac{1}{2}$ 时, 目标函数最小。因此我们可计算得到 x_2 也是支持向量。

综上所述, 加松弛变量后的支持向量由 x_2, x_3, x_4 。

软间隔SVM的分割超平面为 $\frac{1}{2}x^{(1)} + \frac{1}{2}x^{(2)} - 2 = 0$ 。

注意! 不少同学没有考虑 x_3 也是支持向量, 均扣除3分。

(2) 分别计算加松弛变量前的硬间隔和加松弛变量后的软间隔, 并根据该结果来解释加松弛变量对模型的好处。

间隔是: 根据老师上课定义, $\xi = 0$ 的支持向量到超平面的几何距离。

$$\text{解: 加松弛变量前的硬间隔是: } \frac{|wx+b|}{\|w\|} = \frac{|2*1.5+2*1.5-5|}{2\sqrt{2}} = \frac{1}{2\sqrt{2}}$$

$$\text{加松弛变量后的软间隔是: } \frac{|wx+b|}{\|w\|} = \frac{|0.5*3+0.5*3-2|}{0.5\sqrt{2}} = \frac{2}{\sqrt{2}}$$

加松弛变量增大了间隔大小, 减少模型对outlier的依赖性, 使得模型更为鲁棒。

注意! 有同学将距离乘2得到间隔, 和老师上课定义的margin不一致, 酌情扣了2分。

(3) 根据(1) 给定的松弛变量, 写出每个数据点的hinge loss, 并从hinge loss角度来解释为什么支持向量机能保持解的稀疏性。

解: 由 $\text{hinge loss} = \max\{0, 1 - y_i(w^T x_i + b)\}$ 得:

$$x_1 : \text{hinge loss} = 0,$$

$$x_2 : \text{hinge loss} = 0,$$

$$x_3 : \text{hinge loss} = 1.5,$$

$$x_4 : \text{hinge loss} = 0,$$

hinge loss = 0的区域对应 $y_i(w^T x_i + b) > 1$ 的点，这些点分类正确且距离超平面较远 (>1) 对loss不作贡献，而对于 $y_i(w^T x_i + b) \leq 1$ 的点，loss惩罚较高，即尽可能优化的是分类错误或距离平面较近的点，从而保证了解的稀疏性（只有 $\alpha > 0$ 的点和超平面的确定有关，即支持向量）。