第6章 支持向量机*

1. 线性可分支持向量机与硬间隔最大化

2. 线性支持向量机与软间隔最大化

3. 非线性支持向量机与核函数

4. 序列最小最优化算法

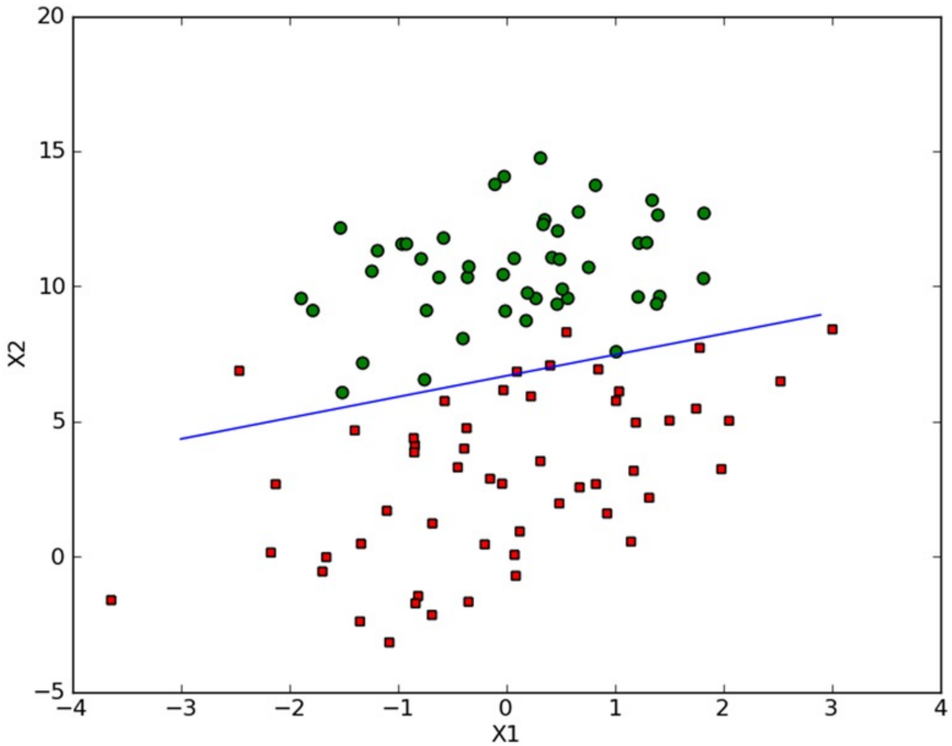
*参阅《统计学习方法》第7章

线性支持向量机

☐ 线性支持向量机

数据： $D=\{(\boldsymbol{x}_1,y_1),(\boldsymbol{x}_2,y_2),\cdots,(\boldsymbol{x}_m,y_m)\}$， $\boldsymbol{x}_i\in\mathbb{R}^d, y_i\in\{-1,1\}$

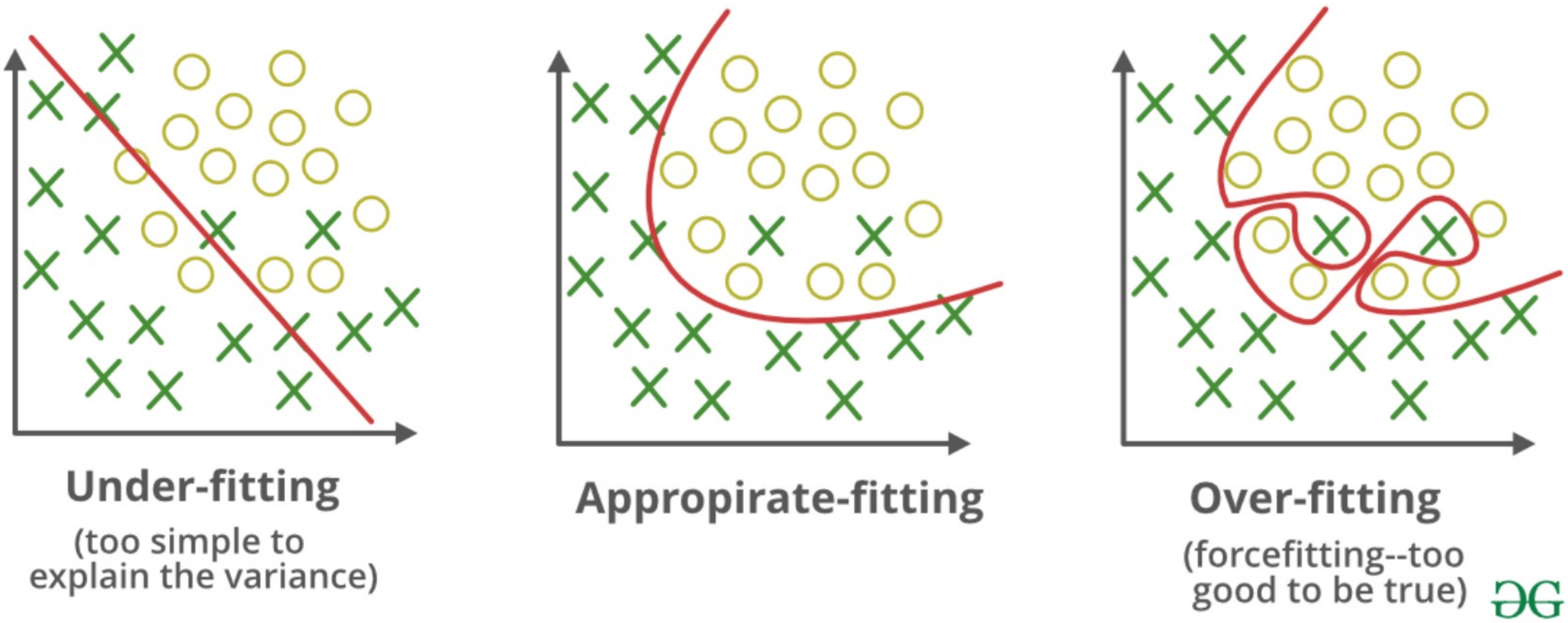
模型： $f(\boldsymbol{x}_i)=\mathrm{sign}\left(\boldsymbol{\omega}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{x}_i+b\right)$，使得$f(\boldsymbol{x}_i)\simeq y_i$，其中$\boldsymbol{\omega}\in\mathbb{R}^d$



$$
\begin{aligned}
\min_{\boldsymbol{\omega},b} \quad & \frac{1}{2}\|\boldsymbol{\omega}\|^2 \\
\text{s.t.} \quad & y_i\left(\boldsymbol{\omega}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{x}_i+b\right)\geq 1, \\
& i=1,\cdots,m
\end{aligned}
$$

线性支持向量机

线性可分问题的支持向量机学习方法，
对线性不可分训练数据是不适用的，
因为这时上述方法中的不等式约束并不能都成立。



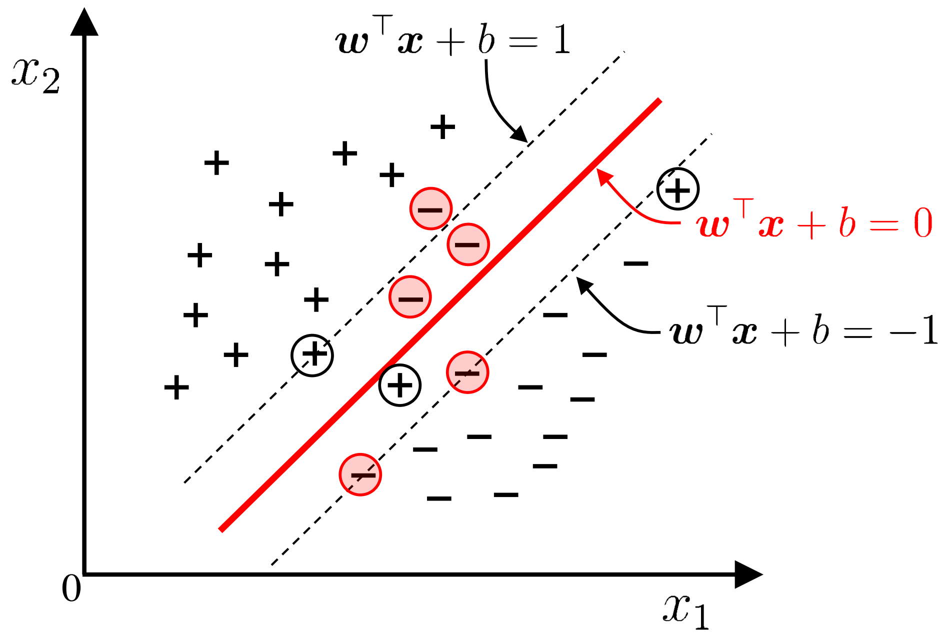
https://www.geeksforgeeks.org/underfitting-and-overfitting-in-machine-learning/

软间隔

线性可分问题的支持向量机学习方法，
对线性不可分训练数据是不适用的，
因为这时上述方法中的不等式约束并不能都成立。

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.

不满足约束的样本　越少越好



软间隔

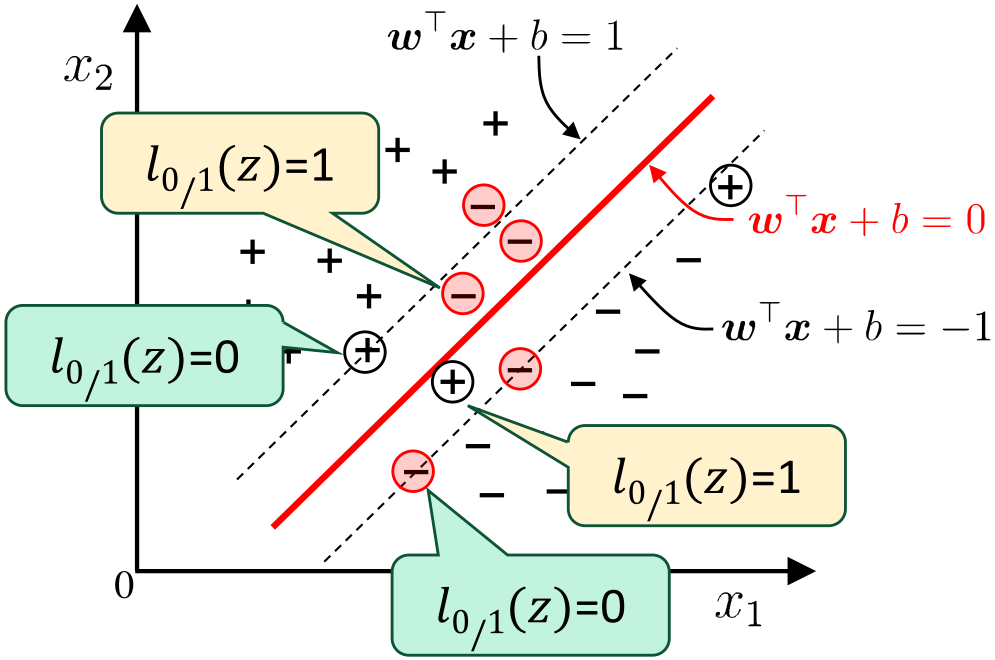
- 数据非完全可分的情况

支持向量机

$$\min_{b,\boldsymbol{\omega}} \quad \frac{1}{2}\|\boldsymbol{\omega}\|^2$$
$$\text{s.t.} \quad y_i(\boldsymbol{\omega}^T x_i + b) \geq 1$$

不满足约束的样本　越少越好

$$\min_{b,\boldsymbol{\omega}}\left(\sum_{i=1}^{m} \boldsymbol{l_{0/1}}(y_i(\boldsymbol{\omega}^T \boldsymbol{x}_i + b) - 1) \right)$$



$$l_{0/1}(z)=\begin{cases}1, & if\ z<0 \\ 0, & othereise\end{cases}$$

不满足约束

满足约束

软间隔

- 数据非完全可分的情况

支持向量机

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

$$\text{s.t.} \quad y_i(\boldsymbol{\omega}^T x_i + b) \geq 1$$

不满足约束的样本　越少越好

$$\min_{b,\boldsymbol{\omega}}\left(\sum_{i=1}^{m} \boldsymbol{l}_{\boldsymbol{0/1}}(y_i(\boldsymbol{\omega}^T\boldsymbol{x}_i + b) - 1) \right)$$

两者结合一下？

$$\min_{b,w} \quad \frac{1}{2}\|w\|^2 \;+\; \boldsymbol{C} * \sum_{i=1}^{m} \boldsymbol{l}_{\boldsymbol{0/1}}(y_i(\boldsymbol{\omega}^T\boldsymbol{x}_i + b) - 1)$$

$C > 0$为惩罚参数，一个常数：

当C取值增大时对误分类的惩罚增大

当C取值变小时对误分类的惩罚减小

软间隔

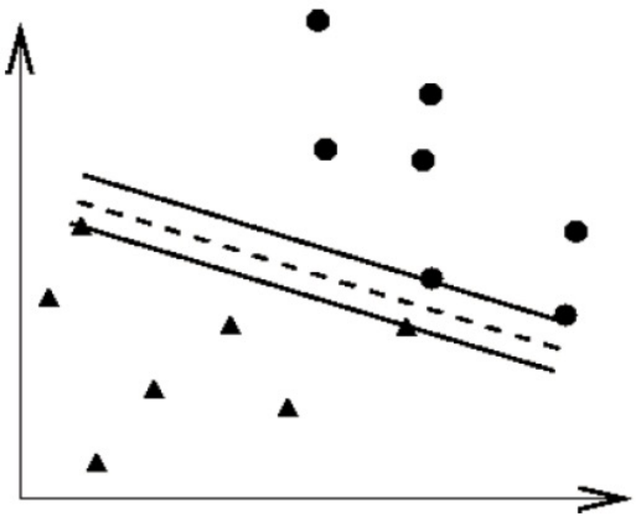
两者结合一下？

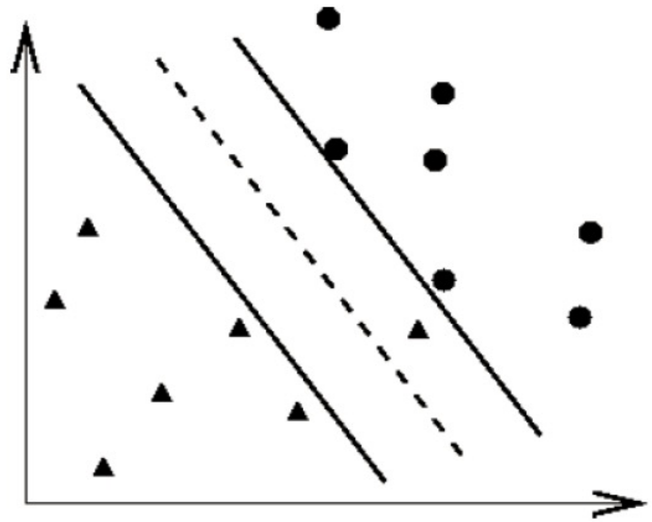
$$\min_{b,w} \quad \frac{1}{2}\|w\|^2 \quad + \quad \boxed{C * \sum_{i=1}^{m} l_{0/1}(y_i(\boldsymbol{\omega}^T \boldsymbol{x}_i + b) - 1)}$$

$C > 0$为惩罚参数，一个常数：

当C取值增大时对误分类的惩罚增大；

当C取值小时对误分类的惩罚减小





软间隔

- 数据非完全可分的情况

支持向量机

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

$$\text{s.t.} \quad y_i(\boldsymbol{\omega}^T x_i + b) \geq 1$$

不满足约束的样本　越少越好

$$\min_{b,\boldsymbol{\omega}}\left(\sum_{i=1}^{m} \boldsymbol{l_{0/1}}(y_i(\boldsymbol{\omega}^T \boldsymbol{x}_i + b) - 1) \right)$$

两者结合一下？

$$\min_{b,w} \quad \frac{1}{2}\|w\|^2 + \boxed{C * \sum_{i=1}^{m} \boldsymbol{l_{0/1}}(y_i(\boldsymbol{\omega}^T \boldsymbol{x}_i + b) - 1)}$$

0/1损失函数

存在的问题：0/1损失函数非凸、非连续，不易优化！

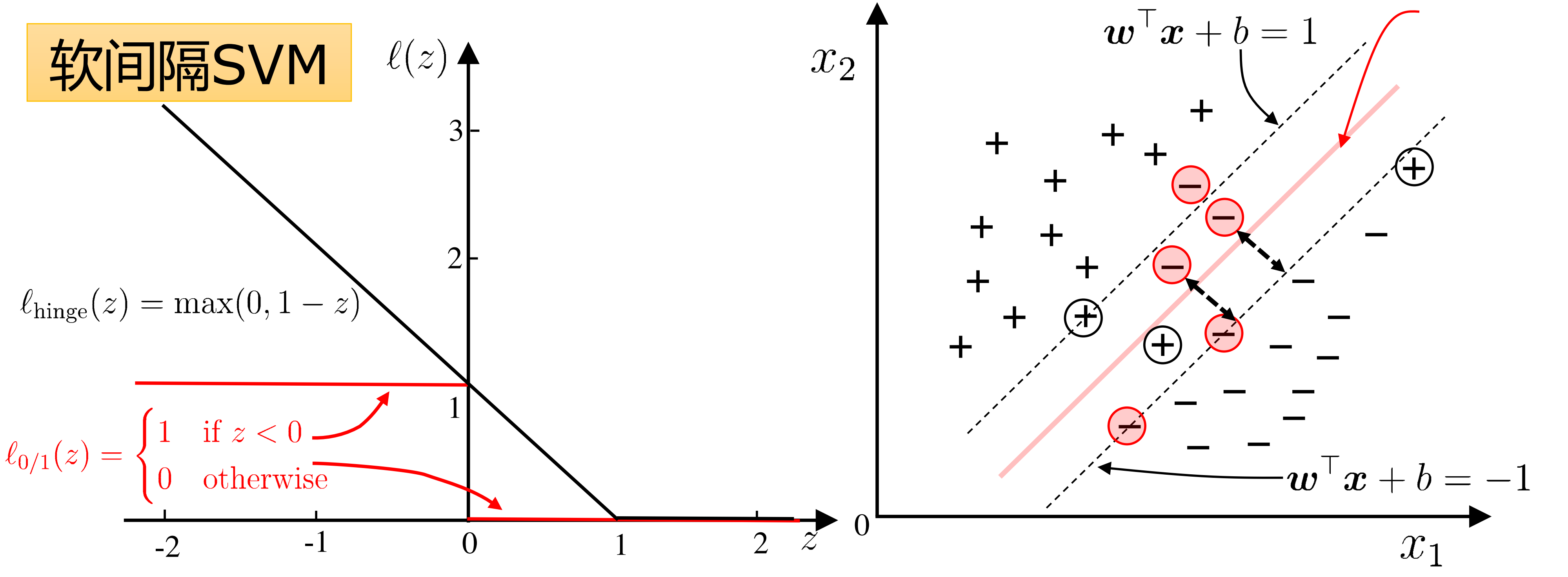
替代损失

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

$$s.t. \quad y_i(\boldsymbol{\omega}^T x_i + b) \geq 1 \text{ for all } i \leq m$$

- Loss
  - IF $y_i(\boldsymbol{\omega}^T x_i + b) \geq 1$ $\quad loss = 0$ 正确分类
  - IF $y_i(\boldsymbol{\omega}^T x_i + b) < 1$ $\quad loss = 1 - y_i(\boldsymbol{\omega}^T x_i + b)$ 错误分类

软间隔SVM



软间隔

- 引入松弛变量

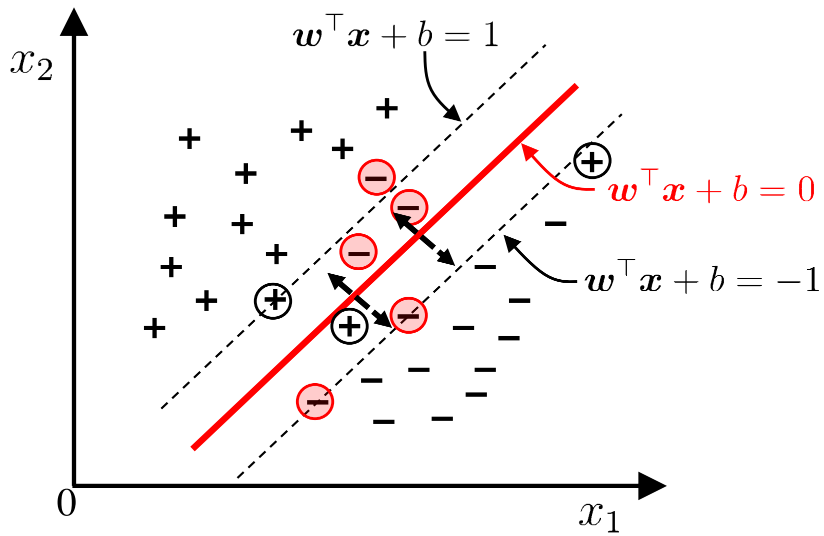
$$\min_{b,w} \quad \frac{1}{2}\|\boldsymbol{\omega}\|^2 + \mathrm{C} * \sum_{i=1}^{m} max(0,1 - y_i(\boldsymbol{\omega}^T \boldsymbol{x}_i + b))$$

$$s.t. \quad y_i(\boldsymbol{\omega}^T x_i + b) \geq 1$$

$\xi_i \geq 0$

$$\min_{b,w} \quad \frac{1}{2}\|\boldsymbol{\omega}\|^2 + \mathrm{C} * \sum_{i=1}^{m} \xi_i$$

$$s.t. \quad y_i(\boldsymbol{\omega}^T \boldsymbol{x}_i + b) \geq 1 - \xi_i, \ \xi_i \geq 0$$



线性支持向量机

◻ 线性支持向量机

线性不可分

数据： $D=\{(\boldsymbol{x}_1,y_1),(\boldsymbol{x}_2,y_2),\cdots,(\boldsymbol{x}_m,y_m)\}$， $\boldsymbol{x}_i\in\mathbb{R}^d, y_i\in\{-1,1\}$

模型： $f(\boldsymbol{x}_i)=\mathrm{sign}\left(\boldsymbol{\omega}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{x}_i+b\right)$，使得$f(\boldsymbol{x}_i)\simeq y_i$，其中$\boldsymbol{\omega}\in\mathbb{R}^d$

$$
\begin{aligned}
\min_{\boldsymbol{\omega},b}\quad & \frac{1}{2}\|\boldsymbol{\omega}\|^2 \\
\text{s.t.}\quad & y_i\left(\boldsymbol{\omega}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{x}_i+b\right)\geq 1, \\
& i=1,\cdots,m
\end{aligned}
$$

引进一个松弛变量$\xi_i\geq 0$

$$y_i\left(\boldsymbol{\omega}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{x}_i+b\right)\geq 1-\xi_i$$

对每一个松弛变量支付一个代价引入目标函数

$$
\begin{aligned}
\min_{\boldsymbol{\omega},b,\xi}\quad & \frac{1}{2}\|\boldsymbol{\omega}\|^2+C\sum_{i=1}^{m}\xi_i \\
\text{s.t.}\quad & y_i\left(\boldsymbol{\omega}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{x}_i+b\right)\geq 1-\xi_i, \\
& \xi_i\geq 0 \\
& i=1,\cdots,m
\end{aligned}
$$

$C>0$为惩罚参数：当C取值增大时对误分类的惩罚增大；当C取值小时对误分类的惩罚减小

线性支持向量机

☐ 线性支持向量机

线性不可分

数据： $D=\{(\boldsymbol{x}_1,y_1),(\boldsymbol{x}_2,y_2),\cdots,(\boldsymbol{x}_m,y_m)\}$，$\boldsymbol{x}_i\in\mathbb{R}^d, y_i\in\{-1,1\}$

模型： $f(\boldsymbol{x}_i)=\mathrm{sign}\left(\boldsymbol{\omega}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{x}_i+b\right)$，使得$f(\boldsymbol{x}_i)\simeq y_i$，其中$\boldsymbol{\omega}\in\mathbb{R}^d$

策略： 找到能够正确划分训练数据的超平面并且使得该超平面关于训练数据集的几何间隔最大（引入松弛变量和惩罚参数）

$$
\begin{aligned}
(\boldsymbol{\omega}^*,b^*,\boldsymbol{\xi}^*)=\min_{\boldsymbol{\omega},b,\boldsymbol{\xi}}\ &\frac{1}{2}\|\boldsymbol{\omega}\|^2+C\sum_{i=1}^{m}\xi_i\\
\mathrm{s.t.}\quad & y_i\left(\boldsymbol{\omega}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{x}_i+b\right)\geq 1-\xi_i, i=1,\cdots,m\\
&\xi_i\geq 0, i=1,\cdots,m
\end{aligned}
$$

软间隔最大化
soft margin maximization

算法： 对偶算法

学得模型： 分离超平面$\boldsymbol{\omega}^*\cdot\boldsymbol{x}+b^*=0$和分类决策函数为$f(\boldsymbol{x})=\mathrm{sign}(\boldsymbol{\omega}^*\cdot\boldsymbol{x}+b^*)$，即线性支持向量机。

学习的对偶算法

线性支持向量机

$$\min_{\boldsymbol{\omega},b,\boldsymbol{\xi}} \quad \frac{1}{2}\|\boldsymbol{\omega}\|^2 + C\sum_{i=1}^{m}\xi_i$$

$$\text{s.t.} \quad y_i\left(\boldsymbol{\omega}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{x}_i + b\right) \geq 1 - \xi_i, i = 1, \cdots, m;\ \xi_i \geq 0, i = 1, \cdots, m$$

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

$$L(\boldsymbol{\omega}, b, \boldsymbol{\xi}, \boldsymbol{\alpha}, \boldsymbol{\beta}) = \frac{1}{2}\|\boldsymbol{\omega}\|^2 + C\sum_{i=1}^{m}\xi_i + \sum_{i=1}^{m}\alpha_i\left(1 - \xi_i - y_i\left(\boldsymbol{\omega}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{x}_i + b\right)\right) - \sum_{i=1}^{m}\beta_i\xi_i$$

$$\boldsymbol{\alpha} = (\alpha_1; \cdots; \alpha_m), \boldsymbol{\beta} = (\beta_1; \cdots; \beta_m)$$

根据拉格朗日对偶性，原始问题的对偶问题是极大极小问题：

$$\max_{\boldsymbol{\alpha},\boldsymbol{\beta}} \min_{\boldsymbol{\omega},b,\boldsymbol{\xi}} L(\boldsymbol{\omega}, b, \boldsymbol{\xi}, \boldsymbol{\alpha}, \boldsymbol{\beta})$$

为了得到对偶问题的解，需要先求$L(\boldsymbol{\omega}, b, \boldsymbol{\xi}, \boldsymbol{\alpha}, \boldsymbol{\beta})$对$\boldsymbol{\omega}, b, \boldsymbol{\xi}$的极小，再求对$\boldsymbol{\alpha}, \boldsymbol{\beta}$的极大

学习的对偶算法

线性支持向量机

$$\min_{\boldsymbol{\omega},b,\boldsymbol{\xi}} \quad \frac{1}{2}\|\boldsymbol{\omega}\|^2 + C\sum_{i=1}^{m}\xi_i$$

$$\text{s.t.} \quad y_i\left(\boldsymbol{\omega}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{x}_i + b\right) \geq 1 - \xi_i, i = 1, \cdots, m;\ \xi_i \geq 0, i = 1, \cdots, m$$

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

$$L(\boldsymbol{\omega}, b, \boldsymbol{\xi}, \boldsymbol{\alpha}, \boldsymbol{\beta}) = \frac{1}{2}\|\boldsymbol{\omega}\|^2 + C\sum_{i=1}^{m}\xi_i + \sum_{i=1}^{m}\alpha_i\left(1 - \xi_i - y_i\left(\boldsymbol{\omega}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{x}_i + b\right)\right) - \sum_{i=1}^{m}\beta_i\xi_i$$

第二步：令$L(\boldsymbol{\omega}, b, \boldsymbol{\xi}, \boldsymbol{\alpha}, \boldsymbol{\beta})$对$\boldsymbol{\omega}, b, \boldsymbol{\xi}$的偏导为零可得

$$\boldsymbol{\omega} = \sum_{i=1}^{m}\alpha_i y_i \boldsymbol{x}_i, \sum_{i=1}^{m}\alpha_i y_i = 0, C - \alpha_i - \beta_i = 0$$

学习的对偶算法

对偶问题 $\max\limits_{a}(\min\limits_{b,w} \frac{1}{2}\|\boldsymbol{\omega}\|^2 - \sum_{i=1}^{m} a_i(y_i(\boldsymbol{\omega}^T\boldsymbol{x}_i + b) - 1))$

第三步：求$\min\limits_{\boldsymbol{\omega},b} L(\boldsymbol{\omega}, b, \boldsymbol{\alpha})$对$\boldsymbol{\alpha}$的极大，即对偶问题

$\boldsymbol{\omega} = \sum_{i=1}^{m} a_i y_i \boldsymbol{x}_i$ $\sum_{i=1}^{m} a_i y_i = 0$

$$\max_{a}(\min_{b,\boldsymbol{\omega}} \frac{1}{2}\|\boldsymbol{\omega}\|^2 - \sum_{i=1}^{m} a_i(y_i\boldsymbol{\omega}^T\boldsymbol{x}_i - 1) - \underbrace{\sum_{i=1}^{m} a_i y_i b}_{0})$$

$$\max_{a}(\min_{b,\boldsymbol{\omega}} \frac{1}{2}\|\boldsymbol{\omega}\|^2 + \sum_{i=1}^{m} a_i(1 - y_i\boldsymbol{\omega}^T\boldsymbol{x}_i))$$

$$\max_{a}(\min_{b,\boldsymbol{\omega}} \frac{1}{2}\|\boldsymbol{\omega}\|^2 + \sum_{i=1}^{m} a_i - \overbrace{\sum_{i=1}^{m} a_i y_i\boldsymbol{\omega}^T\boldsymbol{x}_i}^{\boldsymbol{\omega}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{\omega}})$$

$$\max_{a}(-\frac{1}{2}\sum_{i=1}^{m}\sum_{j=1}^{m} a_i a_j y_i y_j x_i^T x_j + \sum_{i=1}^{m} a_i)$$

第三步：回代，得到对偶问题

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

$$\text{s.t.} \sum_{i=1}^{m} \alpha_i y_i = 0,$$
$$C = \alpha_i + \beta_i$$
$$\alpha_i \geq 0, \beta_i \geq 0, i = 1, \cdots, m$$

$\Rightarrow$

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

学习的对偶算法

第三步：回代，得到对偶问题

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

$$\boxed{\begin{aligned} \text{s.t.} \sum_{i=1}^{m}\alpha_i y_i = 0, \\ 0 \le \alpha_i \le C, i = 1, \cdots, m \end{aligned}}$$

KKT 条件要求：

硬间隔支持向量机

$$\begin{cases} \nabla_{\boldsymbol{\omega}}\mathcal{L}(\boldsymbol{x},\boldsymbol{\alpha},\boldsymbol{\beta}) = 0 \\ \nabla_b\mathcal{L}(\boldsymbol{x},\boldsymbol{\alpha},\boldsymbol{\beta}) = 0 \\ \alpha_i\left(1-\boldsymbol{y_i}(\boldsymbol{\omega}^T x_i + b)\right) = 0 \\ \boldsymbol{y_i}(\boldsymbol{\omega}^T x_i + b) \ge 1 \\ \alpha_i \ge 0 \end{cases}$$

软间隔支持向量机

$$\begin{cases} \nabla_{\boldsymbol{\omega}}\mathcal{L}(\boldsymbol{\omega},b,\boldsymbol{\xi},\boldsymbol{\alpha},\boldsymbol{\beta}) = 0 \\ \nabla_b\mathcal{L}(\boldsymbol{\omega},b,\boldsymbol{\xi},\boldsymbol{\alpha},\boldsymbol{\beta}) = 0 \\ \nabla_{\xi}\mathcal{L}(\boldsymbol{\omega},b,\boldsymbol{\xi},\boldsymbol{\alpha},\boldsymbol{\beta}) = 0 \\ \alpha_i\left(1-\boldsymbol{y_i}(\boldsymbol{\omega}^T x_i + b) - \xi_i\right) = 0 \\ \boldsymbol{y_i}(\boldsymbol{\omega}^T x_i + b) + \xi_i \ge 1 \\ \alpha_i \ge 0 \\ \xi_i \ge 0 \\ \beta_i \ge 0 \quad \beta_i\xi_i = 0 \end{cases}$$

学习的对偶算法

第三步：回代，得到对偶问题

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

$$\boxed{\begin{aligned} \text{s.t.} \sum_{i=1}^{m}\alpha_i y_i = 0, \\ 0 \le \alpha_i \le C, i = 1,\cdots,m \end{aligned}}$$

KKT 条件要求：

软间隔支持向量机

$$\begin{cases} \nabla_{\omega}\mathcal{L}(\boldsymbol{\omega}, b, \boldsymbol{\xi}, \boldsymbol{\alpha}, \boldsymbol{\beta}) = 0 \\ \nabla_{b}\mathcal{L}(\boldsymbol{\omega}, b, \boldsymbol{\xi}, \boldsymbol{\alpha}, \boldsymbol{\beta}) = 0 \\ \nabla_{\xi}\mathcal{L}(\boldsymbol{\omega}, b, \boldsymbol{\xi}, \boldsymbol{\alpha}, \boldsymbol{\beta}) = 0 \\ \underline{\alpha_i\,(1 - \boldsymbol{y_i}(\boldsymbol{\omega}^T x_i + b) - \xi_i) = 0} \\ \boldsymbol{y_i}(\boldsymbol{\omega}^T x_i + b) + \xi_i \ge 1 \\ \alpha_i \ge 0 \\ \xi_i \ge 0 \\ \beta_i \ge 0 \quad \beta_i\xi_i = 0 \end{cases}$$

$\longrightarrow$ 对任意训练样本$(\boldsymbol{x}_i, y_i)$，

有 $\alpha_i = 0$ 或

$1 - \boldsymbol{y_i}(\boldsymbol{\omega}^T x_i + b) - \xi_i = 0.$

学习的对偶算法

第三步：回代，得到对偶问题

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

分离超平面

$$f(\boldsymbol{x}) = \sum_{i=1}^{m}\alpha_i^* y_i \boldsymbol{x}_i^{\mathrm{T}}\boldsymbol{x} + b^*$$

KKT 条件要求：

软间隔支持向量机

$$\begin{cases} \nabla_{\boldsymbol{\omega}}\mathcal{L}(\boldsymbol{\omega}, b, \boldsymbol{\xi}, \boldsymbol{\alpha}, \boldsymbol{\beta}) = 0 \\ \nabla_{b}\mathcal{L}(\boldsymbol{\omega}, b, \boldsymbol{\xi}, \boldsymbol{\alpha}, \boldsymbol{\beta}) = 0 \\ \nabla_{\xi}\mathcal{L}(\boldsymbol{\omega}, b, \boldsymbol{\xi}, \boldsymbol{\alpha}, \boldsymbol{\beta}) = 0 \\ \alpha_i\left(1 - \boldsymbol{y_i}(\boldsymbol{\omega}^T x_i + b) - \xi_i\right) = 0 \\ \boldsymbol{y_i}(\boldsymbol{\omega}^T x_i + b) + \xi_i \geq 1 \\ \alpha_i \geq 0 \\ \xi_i \geq 0 \\ \beta_i \geq 0 \quad \beta_i\xi_i = 0 \end{cases}$$

若$\alpha_i = 0$，不会对$f(\boldsymbol{x})$有任何影响

学习的对偶算法

第三步：回代，得到对偶问题

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

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

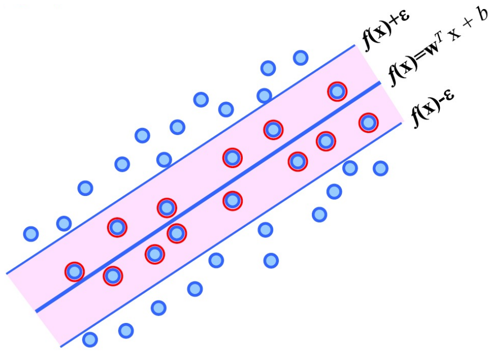
$$C = \alpha_i + \beta_i$$

$$\alpha_i \geq 0, \beta_i \geq 0$$

KKT 条件要求：

软间隔支持向量机

$$\begin{cases} \nabla_{\boldsymbol{\omega}}\mathcal{L}(\boldsymbol{\omega}, b, \boldsymbol{\xi}, \boldsymbol{\alpha}, \boldsymbol{\beta}) = 0 \\ \nabla_{b}\mathcal{L}(\boldsymbol{\omega}, b, \boldsymbol{\xi}, \boldsymbol{\alpha}, \boldsymbol{\beta}) = 0 \\ \nabla_{\boldsymbol{\xi}}\mathcal{L}(\boldsymbol{\omega}, b, \boldsymbol{\xi}, \boldsymbol{\alpha}, \boldsymbol{\beta}) = 0 \\ \alpha_i\left(1 - \boldsymbol{y_i}(\boldsymbol{\omega}^T x_i + b) - \xi_i\right) = 0 \\ \boldsymbol{y_i}(\boldsymbol{\omega}^T x_i + b) + \xi_i \geq 1 \\ \alpha_i \geq 0 \\ \xi_i \geq 0 \\ \beta_i \geq 0 \quad \beta_i\xi_i = 0 \end{cases}$$



若$\alpha_i = 0$，不会对$f(\boldsymbol{x})$有任何影响；

若$\alpha_i > 0$，则$y_i f(\boldsymbol{x}_i) = 1 - \xi_i$.

若$\alpha_i < C$，则$\beta_i > 0$，进而有$\xi_i = 0$，即该样本恰在最大间隔边界上

学习的对偶算法

第三步：回代，得到对偶问题

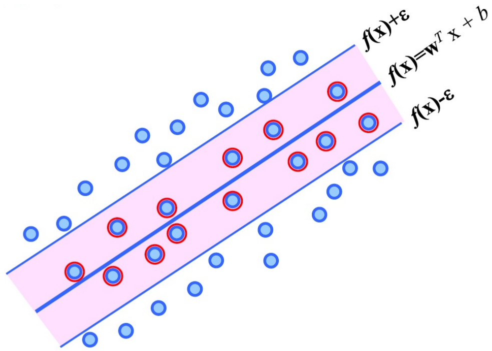
$$\max_{\boldsymbol{\alpha}} -\frac{1}{2}\sum_{i=1}^{m}\sum_{j=1}^{m}\alpha_i\alpha_j y_i y_j \boldsymbol{x}_i^T\boldsymbol{x}_j + \sum_{i=1}^{m}\alpha_i$$

$$\text{s.t.} \sum_{i=1}^{m}\alpha_i y_i = 0,$$
$$C = \alpha_i + \beta_i$$
$$\alpha_i \geq 0, \beta_i \geq 0$$

KKT 条件要求：

软间隔支持向量机

$$\begin{cases} \nabla_{\omega}\mathcal{L}(\boldsymbol{\omega}, b, \boldsymbol{\xi}, \boldsymbol{\alpha}, \boldsymbol{\beta}) = 0 \\ \nabla_{b}\mathcal{L}(\boldsymbol{\omega}, b, \boldsymbol{\xi}, \boldsymbol{\alpha}, \boldsymbol{\beta}) = 0 \\ \nabla_{\xi}\mathcal{L}(\boldsymbol{\omega}, b, \boldsymbol{\xi}, \boldsymbol{\alpha}, \boldsymbol{\beta}) = 0 \\ \alpha_i\left(1 - \boldsymbol{y_i}(\boldsymbol{\omega}^T x_i + b) - \xi_i\right) = 0 \\ \boldsymbol{y_i}(\boldsymbol{\omega}^T x_i + b) + \xi_i \geq 1 \\ \alpha_i \geq 0 \\ \xi_i \geq 0 \\ \beta_i \geq 0 \quad \beta_i\xi_i = 0 \end{cases}$$



若$\alpha_i = 0$，不会对$f(\boldsymbol{x})$有任何影响；

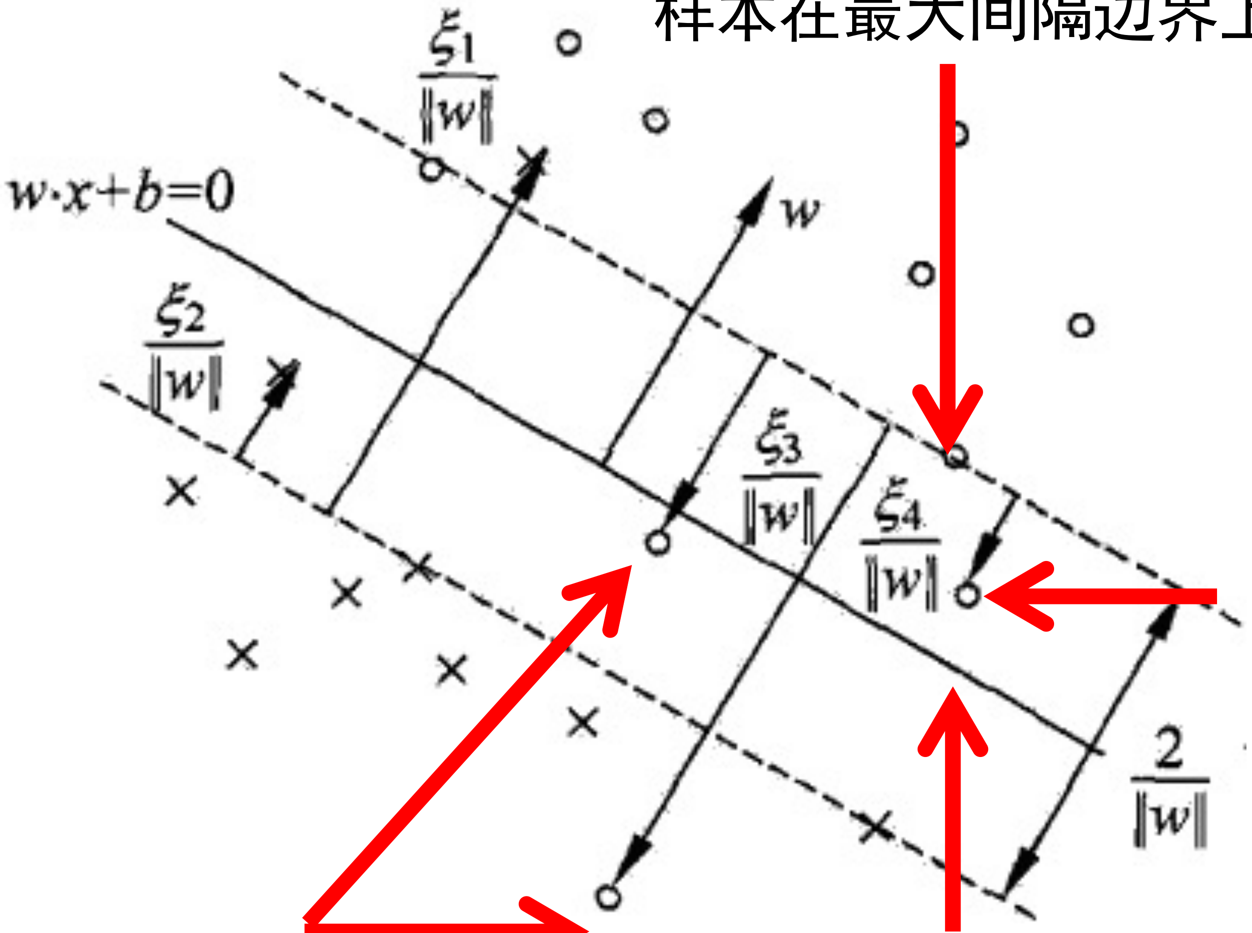
若$\alpha_i > 0$，则$y_i f(\boldsymbol{x}_i) = 1 - \xi_i$.

若$\alpha_i < C$，则$\beta_i > 0$，进而有$\xi_i = 0$，即该样本恰在最大间隔边界上

若$\alpha_i = C$，则$\beta_i = 0$，若$\xi_i \leq 1$则该样本落在最大间隔内部，若$\xi_i > 1$则该样本被错误分类.

支持向量

若$\alpha_i < C$，则$\varepsilon_i = 0$，
样本在最大间隔边界上



若$\alpha_i = C$，$\varepsilon_i \leq 1$，
样本落在最大间隔内部

若$\alpha_i = C$，$\xi_i > 1$，
样本被错误分类

若$\alpha_i = C$，$\xi_i = 1$

支持向量

软间隔支持向量： **注意 $\alpha_j^* > 0$ 的样本点均称为支持向量！**

图中，第一个点到其正确边界的距离为：$\dfrac{\xi_1}{\|\mathbf{w}\|}$ ，其它类推。

1: $\alpha^* = C,\ \xi_1 > 1$

2: $\alpha^* = C,\ \xi_2 > 1$

3: $\alpha^* = C,\ 0 < \xi_3 < 1$

4: $\alpha^* = C,\ \xi_4 > 1$

5: $\alpha^* = C,\ 0 < \xi_5 < 1$

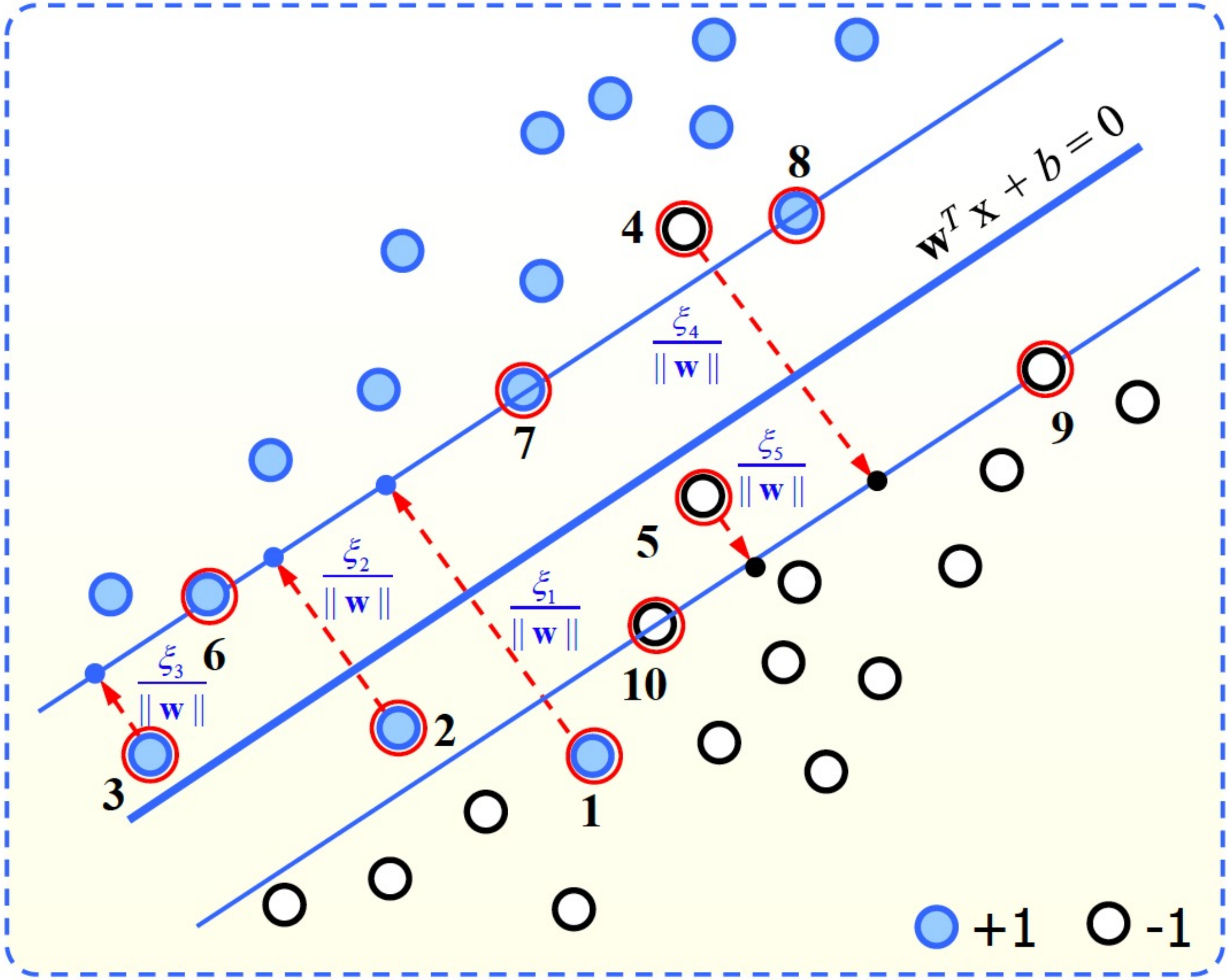
6: $0 < \alpha^* < C,\ \xi_6 = 0$

7: $0 < \alpha^* < C,\ \xi_7 = 0$

8: $0 < \alpha^* < C,\ \xi_8 = 0$

9: $0 < \alpha^* < C,\ \xi_9 = 0$

10: $0 < \alpha^* < C,\ \xi_{10} = 0$



图中带红色圆圈的均表示支持向量

学习的对偶算法

线性支持向量机

第三步：回代，得到对偶问题

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

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

$$0 \le \alpha_i \le C, i = 1,\cdots,m$$

第四步：解出$\boldsymbol{\alpha}^*$，根据KKT条件求出$(\boldsymbol{\omega}^*, b^*)$

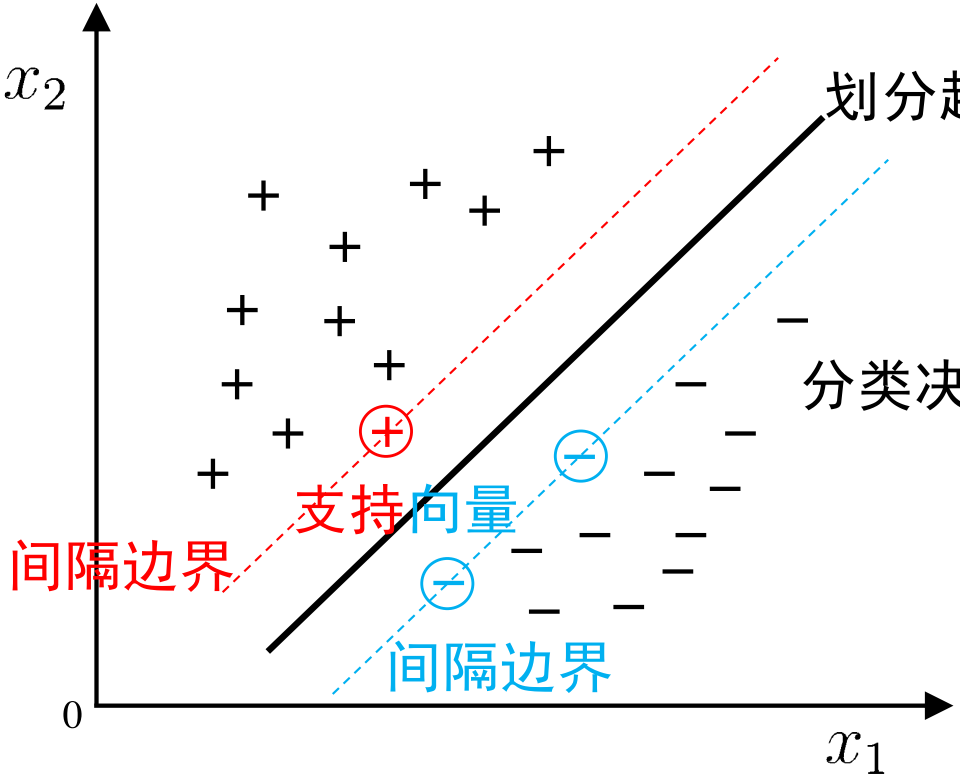
$$\boldsymbol{\omega}^* = \sum_{i=1}^{m}\alpha_i^* y_i \boldsymbol{x}_i, b^* = y_j - \sum_{i=1}^{m}\alpha_i^* y_i \boldsymbol{x}_i^T\boldsymbol{x}_j$$

j为$\boldsymbol{\alpha}^*$中的一个正分量$0 < \alpha_j^* < C$所对应的下标

学习的对偶算法

□ 线性支持向量机

第五步：最终模型$f(\boldsymbol{x}) = \mathrm{sign}\left(\boldsymbol{\omega}^{*\mathrm{T}}\boldsymbol{x} + b^*\right)$



划分超平面：$\sum_{i=1}^{m} \alpha_i^* y_i \boldsymbol{x}_i^{\mathrm{T}} \boldsymbol{x} + b^* = 0$

分类决策函数：$f(\boldsymbol{x}) = \mathrm{sign}\left(\sum_{i=1}^{m} \alpha_i^* y_i \boldsymbol{x}_i^{\mathrm{T}} \boldsymbol{x} + b^*\right)$

现象：分类决策函数只依赖于输入$\boldsymbol{x}$和训练样本输入的内积。

线性支持向量机学习算法

□ 线性支持向量机

输入： 训练数据集$D=\{(\boldsymbol{x}_1,y_1),(\boldsymbol{x}_2,y_2),\cdots,(\boldsymbol{x}_m,y_m)\}$，其中$\boldsymbol{x}_i\in\mathbb{R}^d,y_i\in\{-1,1\}$， $i=1,\cdots,m$

输出： 划分超平面和分类决策函数

（1） 选择惩罚参数$C>0$，构造并求解约束最优化问题

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

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

$$0\le\alpha_i\le C,i=1,\cdots,m$$

求得最优解$\boldsymbol{\alpha}^*=(\alpha_1^*,\alpha_2^*,\cdots,\alpha_d^*)^{\mathrm{T}}$。

线性支持向量机学习算法

◻ 线性支持向量机

输入： 训练数据集$D=\{(\boldsymbol{x}_1,y_1),(\boldsymbol{x}_2,y_2),\cdots,(\boldsymbol{x}_m,y_m)\}$，其中$\boldsymbol{x}_i\in\mathbb{R}^d, y_i\in\{-1,1\}$， $i=1,\cdots,m$

输出： 划分超平面和分类决策函数

（2） 计算

$$\boldsymbol{\omega}^*=\sum_{i=1}^{m}\alpha_i^* y_i\boldsymbol{x}_i$$

并选择$\boldsymbol{\alpha}^*$中的一个正分量$0<\alpha_j^*<C$，计算

$$b^*=y_j-\sum_{i=1}^{m}\alpha_i^* y_i\boldsymbol{x}_i^T\boldsymbol{x}_j$$

线性支持向量机学习算法

◻ 线性可分支持向量机

输入： 训练数据集$D=\{(\boldsymbol{x}_1,y_1),(\boldsymbol{x}_2,y_2),\cdots,(\boldsymbol{x}_m,y_m)\}$，其中 $\boldsymbol{x}_i\in\mathbb{R}^d, y_i\in\{-1,1\}$， $i=1,\cdots,m$

输出： 划分超平面和分类决策函数

（3） 求得划分超平面

$$\boldsymbol{\omega}^{*\mathrm{T}}\boldsymbol{x}+b^*=0 \text{ 即} \sum_{i=1}^{m}\alpha_i^* y_i \boldsymbol{x}_i^{\mathrm{T}}\boldsymbol{x}+b^*=0$$

和分类决策函数

$$f(\boldsymbol{x})=\mathrm{sign}\left(\sum_{i=1}^{m}\alpha_i^* y_i \boldsymbol{x}_i^{\mathrm{T}}\boldsymbol{x}+b^*\right)$$

硬间隔：

$$\min_{a}\left(\frac{1}{2}\sum_{i=1}^{m}\sum_{j=1}^{m} a_i\, a_j\, y_i y_j x_i{}^T x_i - \sum_{i=1}^{m} a_i\right)$$

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

KKT条件：

$$1 - \boldsymbol{y_i}(\boldsymbol{\omega}^T x_i + b) \leq 0$$
$$\alpha_i \geq 0, i = 1, \ldots m$$

$$\alpha_i\,(1 - \boldsymbol{y_i}(\boldsymbol{\omega}^T x_i + b)) = 0$$

软间隔：

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

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

KKT条件：

$$y_i\left(\boldsymbol{\omega}^{\mathrm{T}} \boldsymbol{x}_i + b\right) \geq 1 - \xi_i, i = 1, \cdots, m$$
$$\xi_i \geq 0, a_i \geq 0, \beta_i \geq 0, i = 1, \cdots, m$$

$$0 < \alpha_i < C \ \Rightarrow \ \boldsymbol{y_i}(\boldsymbol{\omega}^T x_i + b) = 1$$
$$\alpha_i = 0 \ \Rightarrow \ \boldsymbol{y_i}(\boldsymbol{\omega}^T x_i + b) \geq 1$$
$$\alpha_i = C \ \Rightarrow \ \boldsymbol{y_i}(\boldsymbol{\omega}^T x_i + b) \leq 1$$

线性支持向量机

□ 线性支持向量机

线性不可分

数据：$D=\{(\boldsymbol{x}_1,y_1),(\boldsymbol{x}_2,y_2),\cdots,(\boldsymbol{x}_m,y_m)\}$，$\boldsymbol{x}_i\in\mathbb{R}^d,y_i\in\{-1,1\}$

模型：$f(\boldsymbol{x}_i)=\mathrm{sign}\left(\boldsymbol{\omega}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{x}_i+b\right)$，使得$f(\boldsymbol{x}_i)\simeq y_i$，其中$\boldsymbol{\omega}\in\mathbb{R}^d$

策略：找到能够正确划分训练数据的超平面并且使得该超平面关于训练数据集的几何间隔最大（引入松弛变量和惩罚参数）

$$(\boldsymbol{\omega}^*,b^*,\boldsymbol{\xi}^*)=\min_{\boldsymbol{\omega},b,\boldsymbol{\xi}}\frac{1}{2}\|\boldsymbol{\omega}\|^2+C\sum_{i=1}^{m}\xi_i$$

$$\text{s.t.}\quad y_i\left(\boldsymbol{\omega}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{x}_i+b\right)\geq 1-\varepsilon_i,i=1,\cdots,m$$

$$\xi_i\geq 0,i=1,\cdots,m$$

软间隔最大化
soft margin
maximization

算法：对偶算法

学得模型：分离超平面$\boldsymbol{\omega}^*\cdot\boldsymbol{x}+b^*=0$和分类决策函数为$f(\boldsymbol{x})=\mathrm{sign}(\boldsymbol{\omega}^*\cdot\boldsymbol{x}+b^*)$，即线性支持向量机。

谢谢！