机器学习

Machine learning

第四章 非线性分类

Nonlinear Classifier

授课人：周晓飞
zhouxiaofei@iie.ac.cn
2025-11-21

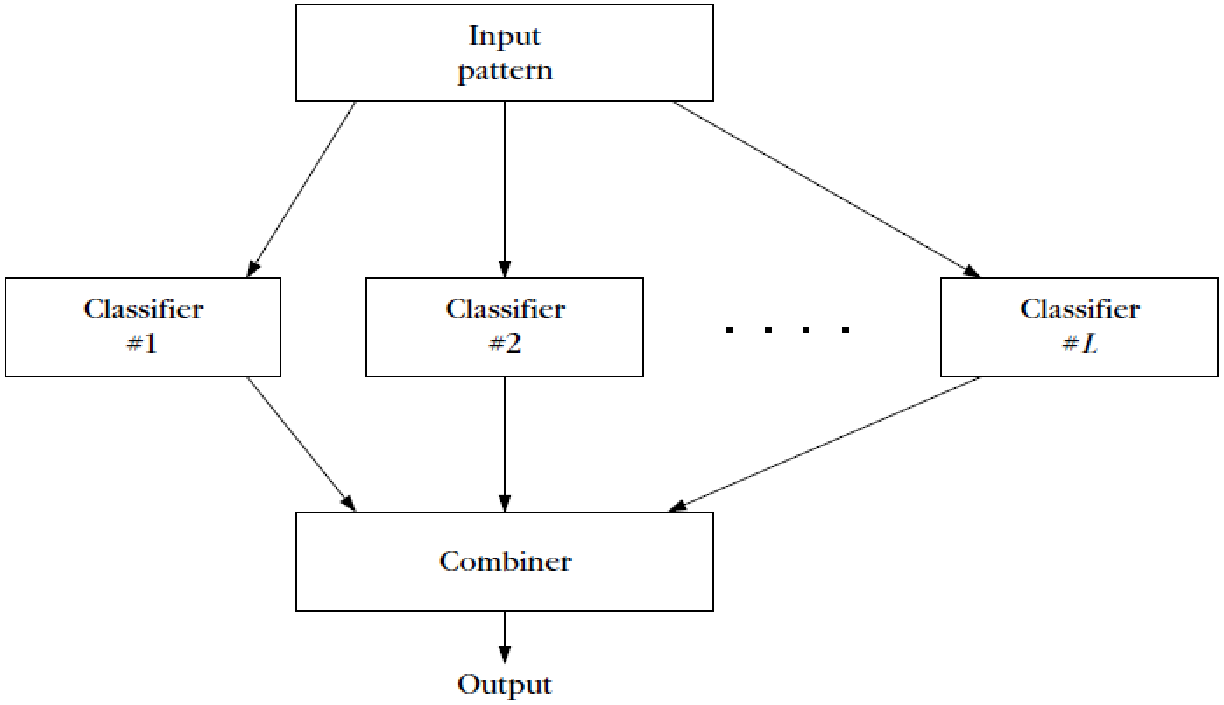
课件放映 –〉PDF 视图-〉全屏模式

第四章 非线性分类

集成学习

结合策略

原理：不同的分类器对样本有不同的鉴别力；综合优势，使错误率最小。



集成学习

结合策略

问题描述

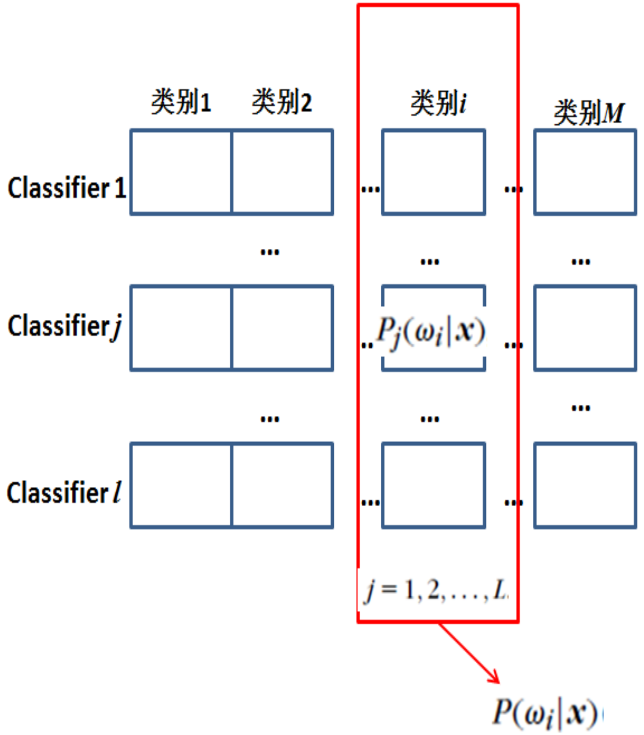
- 已知：一组训练分类器,分类器的类别后验为

$$P_j(\omega_i|\boldsymbol{x}),\quad i=1,2,\ldots,M,\quad j=1,2,\ldots,L.$$

(其中，i 索引类别，j 索引分类器.)

- 目标：对 x 进行分类，求

$$P(\omega_i|\boldsymbol{x})\qquad i=1,2,\ldots,M$$



结合: $P(\omega_1|\boldsymbol{x})\ldots\quad P(\omega_i|\boldsymbol{x})\ldots\quad P(\omega_l|\boldsymbol{x})$

结合策略

几种集成学习准则

- Geometric Average Rule
- Arithmetic Average Rule
- Majority Voting Rule

集成学习

Geometric Average Rule

目标函数： 最小化 KL 距离平均

集成方法：

$$P(\omega_i|x) = \prod_{j=1}^{L}(P_j(\omega_i|x))$$

决策规则：

$$\max_{\omega_i} \prod_{j=1}^{L} P_j(\omega_i|x)$$

- 每个分类器的类别后验

$$P_j(\omega_i|x),\ \ i = 1, 2, \ldots, M,\ \ j = 1, 2, \ldots, L$$

- 目标组合分类器类别后验： $P(\omega_i|x)$
- 每个分类器的 KL 距离

$$D_j = \sum_{i=1}^{M} P(\omega_i|x) \ln \frac{P(\omega_i|x)}{P_j(\omega_i|x)}, \qquad \sum_{i=1}^{M} P_j(\omega_i|x) = 1$$

- 平均 KL 距离

$$D_{av} = \frac{1}{L}\sum_{j=1}^{L} D_j = \frac{1}{L}\sum_{j=1}^{L}\sum_{i=1}^{M} P(\omega_i|x) \ln \frac{P(\omega_i|x)}{P_j(\omega_i|x)}$$

- 最小化 D_{av}

$$D_{av} = \frac{1}{L}\sum_{j=1}^{L}\sum_{i=1}^{M} P(\omega_i|x) \ln \frac{P(\omega_i|x)}{P_j(\omega_i|x)}, \qquad \sum_{i=1}^{M} P_j(\omega_i|x) = 1$$

- Langrange Multipliers:

$$P(\omega_i|x) = \frac{1}{C}\prod_{j=1}^{L}(P_j(\omega_i|x))^{\frac{1}{L}}, \qquad C = \sum_{i=1}^{M}\prod_{j=1}^{L}(P_j(\omega_i|x))^{\frac{1}{L}}$$

集成学习

Arithmetic Average Rule

目标函数： 最小化 Alternative KL 距离平均

集成方法：

$$P(\omega_i|\boldsymbol{x}) = \sum_{j=1}^{L} P_j(\omega_i|\boldsymbol{x})$$

决策规则：

$$\max_{\omega_i} \sum_{j=1}^{L} P_j(\omega_i|\boldsymbol{x})$$

- 每个分类器的 Alternative KL 距离

$$D_j = \sum_{i=1}^{M} P_j(\omega_i|\boldsymbol{x}) \ln \frac{P_j(\omega_i|\boldsymbol{x})}{P(\omega_i|\boldsymbol{x})}, \qquad \sum_{i=1}^{M} P_j(\omega_i|\boldsymbol{x}) = 1$$

- 平均 KL 距离

$$D_{av} = \frac{1}{L} \sum_{j=1}^{L} D_j$$

- 最小化 Dav

$$D_{av} = \frac{1}{L} \sum_{j=1}^{L} \sum_{i=1}^{M} P_j(\omega_i|\boldsymbol{x}) \ln \frac{P_j(\omega_i|\boldsymbol{x})}{P(\omega_i|\boldsymbol{x})}, \qquad \sum_{i=1}^{M} P_j(\omega_i|\boldsymbol{x}) = 1$$

- Langrange Multipliers:

$$P(\omega_i|\boldsymbol{x}) = \frac{1}{L} \sum_{j=1}^{L} P_j(\omega_i|\boldsymbol{x})$$

Majority Voting Rule

原理: 对两类问题，多个分类器进行决策投票，票数过半的类别为样本最终标签.

$$l_c = \begin{cases} \frac{L}{2} + 1, & L \text{ even} \\ \frac{L+1}{2}, & L \text{ odd} \end{cases}$$

什么样的基分类器组合比较好:

(1)多样性 (2)性能不太差

Majority Voting Rule

讨论：分类器彼此独立，并有相同的正确识别概率 p。L 个分类器的联合，正确识别概率 ？

$$P_c(L) = \sum_{m=l_c}^{L} \binom{L}{m} p^m (1-p)^{L-m}$$

$\boxed{\text{If } p > 0.5, P_c(L) \text{ is monotonically increasing in } L \text{ and } P_c(L) \to 1 \text{ as } L \to \infty}$.

If $p < 0.5$, $P_c(L)$ is monotonically decreasing in L and $P_c(L) \to 0$ as $L \to \infty$.

If $p = 0.5$, $P_c(L) = 0.5$ for all L.

要求基分类器：(1)相互独立， (2) 正确率 p>50%

集成学习

Bagging 和随机森林

1. **Bagging：**通过随机采样，训练分类器，保证分类器的差异。

- 从训练集中不断随机抽取样本构造分类器，分类时通过投票进行类别判断。

```
For t = 1, 2, …, T Do
      从数据集 S 中取样（放回选样）；
      训练得到模型 Ht;
 End For
未知样本 X，每个模型 Ht 都得出一个分类，得票最高的即为 X 的分类。
```

- 算法复杂度：基分类器复杂度 + 投票复杂度：

集成学习

Bagging 和随机森林

2. 随机森林： 多决策树的 Bagging；决策树随机属性选择；

- 从训练集中不断随机构造决策树分类器，分类时通过投票进行类别判断。

For t = 1, 2, ⋯, T Do

从数据集 S 中取样（放回选样）；

决策树模型 Ht：

For each node 通过随机选择 k 个属性子集，构建决策节点

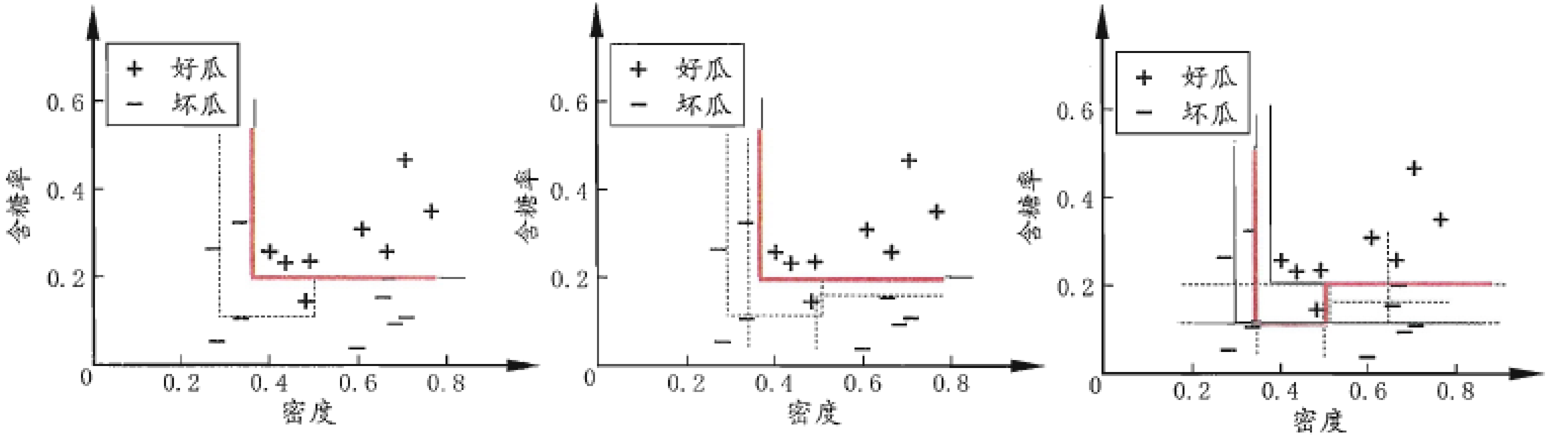
End For

未知样本 X,每个模型 Ht 都得出一个分类，得票最高的即为 X 的分类。

Bagging 和随机森林

例子：

密度	含糖率	好瓜
0.697	0.460	是
0.774	0.376	是
0.634	0.264	是
0.608	0.318	是
0.556	0.215	是
0.403	0.237	是
0.481	0.149	是
0.437	0.211	是
0.666	0.091	否
0.243	0.267	否
0.245	0.057	否
0.343	0.099	否
0.639	0.161	否
0.657	0.198	否
0.360	0.370	否
0.593	0.042	否
0.719	0.103	否



(a) 3个基学习器　(b) 5个基学习器　(b) 11个基学习器

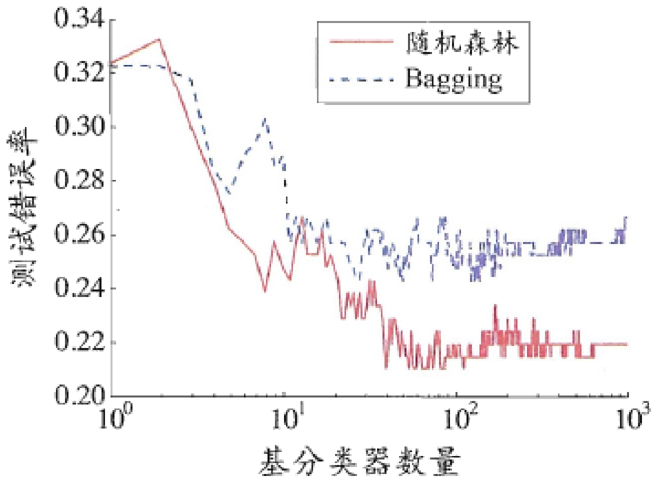
问题数：17*2=34

每棵树的每节点候选问题是 34 个问题的随机子集。

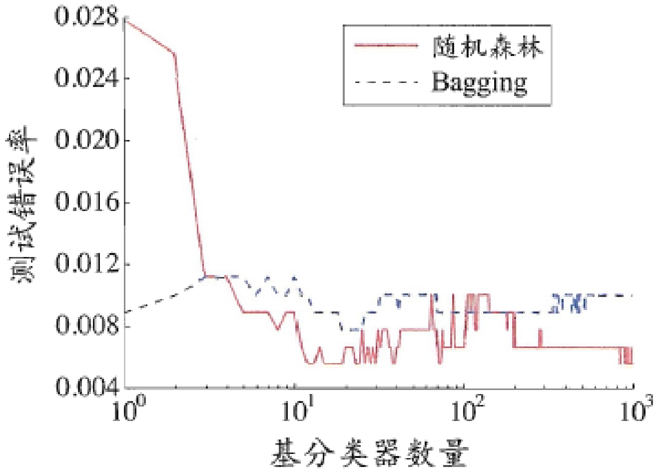
集成学习

Bagging 和随机森林

随机森林较一般 Bagging 效果好



(a) glass 数据集



(b) auto-mpg 数据集

集成学习

Boosting: AdaBoost

Boosting 原理：一系列弱分类器，在不同子集上学习，得到增强分类器。

original work [Vali 84, Kear 94] ：a "weak" learning algorithm can be boosted into a "strong" algorithm with good error performance?

[Schapire 98]：It turns out that given a sufficient number of iterations the classification error of the final combination measured on the training set can become arbitrarily low.

AdaBoost (Adaptive Boosting)算法:

Boosting 族算法最著名的代表是 AdaBoost [Freund and Schapire, 1997]

Boosting: AdaBoost

AdaBoost 加权分类器

$$F(\boldsymbol{x}) = \sum_{k=1}^{K} \alpha_k \phi(\boldsymbol{x}; \boldsymbol{\theta}_k)$$

参数向量

$$\phi(\boldsymbol{x}; \boldsymbol{\theta}_k) \in \{-1, 1\}$$

决策:

$$f(\boldsymbol{x}) = sign\{F(x)\}$$

集成学习

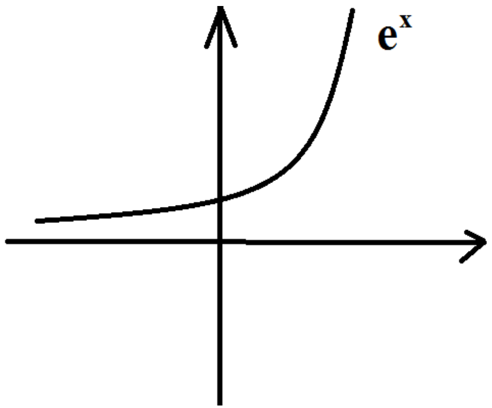
Boosting: AdaBoost

AdaBoost 目标函数

$$\arg \min_{\alpha_k;\boldsymbol{\theta}_k, k:1...,K} \sum_{i=1}^{N} \exp(-y_i F(\boldsymbol{x}_i))$$

错误分类时， $y_i F(x_i) < 0$， $-y_i F(x_i) > 0$

正确分类时， $y_i F(x_i) > 0$， $-y_i F(x_i) < 0$



目标函数更强调修正错误样本

其中，$\{(x_1, y_1), (x_2, y\ )..., (x_N, y_N)\}\ with\ y \in \{-1, 1\}, i = 1, 2..., N$

Boosting: AdaBoost

AdaBoost 求解推理过程

- 前 m 个分类器结果

$$F_m(\boldsymbol{x}) = \sum_{k=1}^{m} \alpha_k \phi(\boldsymbol{x};\boldsymbol{\theta}_k),\ m = 1, 2, \ldots, K$$

- 增量表示法

$$F_m(\boldsymbol{x}) = F_{m-1}(\boldsymbol{x}) + \alpha_m \phi(\boldsymbol{x};\boldsymbol{\theta}_m)$$

{m 个分类器组合结果} = {m-1 个结果} + {第 m}

Boosting: AdaBoost

AdaBoost 求解推理过程

- 前 m 个分类器的目标函数

$$J(\alpha,\boldsymbol{\theta})=\sum_{i=1}^{N}\exp(-y_i(F_{m-1}(\boldsymbol{x})+\alpha\phi(\boldsymbol{x};\boldsymbol{\theta})))$$

$$(\alpha_m,\boldsymbol{\theta}_m)=\arg\min_{\alpha,\boldsymbol{\theta}} J(\alpha,\boldsymbol{\theta})$$

- 转化目标函数形式

$$J(\alpha,\boldsymbol{\theta})=\sum_{i=1}^{N}w_i^{(m)}\exp(-y_i\alpha\phi(\boldsymbol{x};\boldsymbol{\theta}))$$

$$\boxed{w_i^{(m)}\equiv\exp(-y_iF_{m-1}(\boldsymbol{x}_i))}$$

定义样本权重：前 m-1 个分类器对 x_i 的错分指数，与第 m 个分类器的参数 α,θ 无关。

Boosting: AdaBoost

（1）求 θ_m （确定选择的基分类器）

$$\theta_m = \arg\min_{\theta} \sum_{i=1}^{N} w_i^{(m)} \exp(-y_i \alpha \phi(x;\theta))$$

$$\theta_m = \arg\min_{\theta} \left\{ \underbrace{P_m}_{\text{第 m 个分类器错误识别样本的平均权重}} = \sum_{i=1}^{N} w_i^{(m)} \underbrace{I(1 - y_i \phi(x;\theta))}_{\text{正确分类为 0}} \right\}$$

Function $I(\cdot)$ *is either* 0 *or* 1

- 重新理解目标：最优化第 m 个分类器，使得错分样本所对应平均权重最小化，

即第 m 个分类器正确分类的样本，尽可能是前 m-1 个组合分类器错分指数高的样本（$w_i^{(m)}$大）。

求 θ_m 这一过程，通常在选择第 m 个分类器时实现，选择阈值 P_m<0.5。

集成学习

Boosting: AdaBoost

(2) 求 α_m （分类器权重）

$$J(\alpha,\boldsymbol{\theta})=\sum_{i=1}^{N} w_i^{(m)} \exp(-y_i\alpha\phi(\boldsymbol{x};\boldsymbol{\theta}))$$

由于

$$\sum_{y_i\phi(\boldsymbol{x}_i;\boldsymbol{\theta}_m)<0} w_i^{(m)} = P_m \ , \quad y_i\phi(\boldsymbol{x}_i;\boldsymbol{\theta}_m)=-1$$

$$\sum_{y_i\phi(\boldsymbol{x}_i;\boldsymbol{\theta}_m)>0} w_i^{(m)} = 1-P_m \ , \quad y_i\phi(\boldsymbol{x}_i;\boldsymbol{\theta}_m)=1$$

$$\alpha_m = \arg\min_{\alpha}\{\exp(-\alpha)(1-P_m)+\exp(\alpha)P_m\} \Rightarrow \boxed{\alpha_m=\frac{1}{2}\ln\frac{1-P_m}{P_m}}$$

含义：1-p 表示正确分类样本的比重。第 m 个分类器能够正确分类样本的“比重”决定该分类器的权重。

Boosting: AdaBoost

（3）样本权重更新

$$w_i^{(m+1)} \equiv \exp(-y_i F_m(\boldsymbol{x}_i)) = w_i^{(m)} \exp(-y_i \alpha_m \phi(\boldsymbol{x}_i;\boldsymbol{\theta}_m))$$

将 $\alpha_m = \frac{1}{2}\ln\frac{1-P_m}{P_m}$ 代入，

被第 m 个分类器正确分类的样本权值为：

$y_i\phi(\boldsymbol{x}_i;\boldsymbol{\theta}_m)=1$， $w_i^{(m+1)} = w_i^{(m)}\exp(-\alpha_m) = w_i^{(m)}\sqrt{\frac{P_m}{1-P_m}}$

被第 m 个分类器错误分类的样本权值为：

$y_i\phi(\boldsymbol{x}_i;\boldsymbol{\theta}_m)=-1$， $w_i^{(m+1)} = w_i^{(m)}\exp(\alpha_m) = w_i^{(m)}\sqrt{\frac{1-P_m}{P_m}}$

归一化： $w_i^{(m+1)} = w_i^{(m+1)} \Big/ \sum_{i=1}^{N} w_i^{(m+1)}$

有的程序中，只修改了正确样本的权，或只修改错误样本权。

错分样本较正确分类样本放大的倍数（两者相除）：

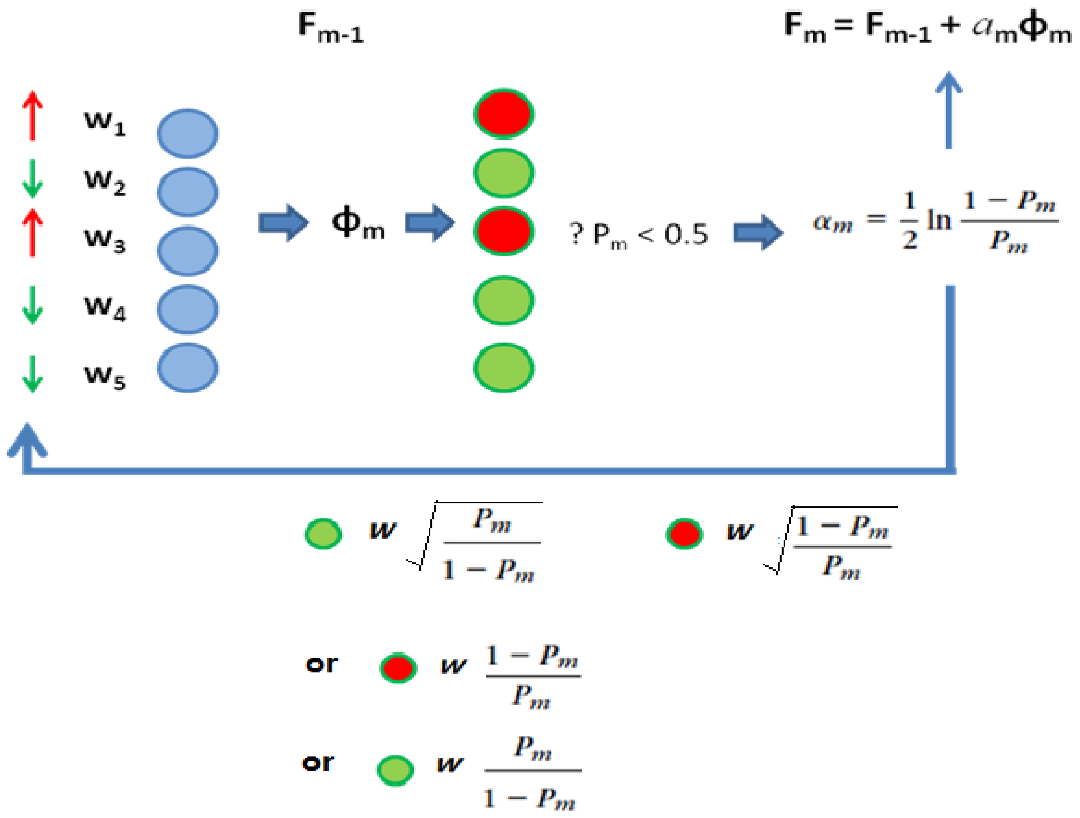
$$\exp(2\alpha_m) = \frac{1-P_m}{P_m}$$

所以，可以只修改错分样本权： $w_i^{(m+1)} = w_i^{(m)}\frac{1-P_m}{P_m}$

或者，之修正确分类样本权： $w_i^{(m+1)} = w_i^{(m)}\frac{P_m}{1-P_m}$

Boosting: AdaBoost

AdaBoost 流程:



集成学习

示例

样本权值更新:

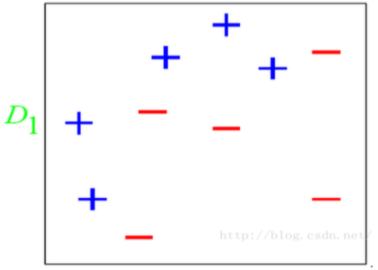
正确分类的样本权值不变

错误分类的样本权值为:

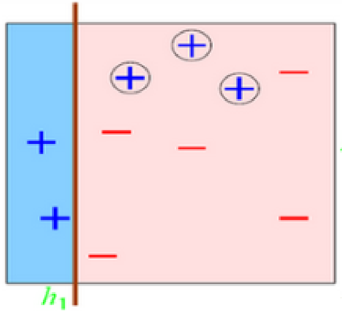
$$w_i^{(m+1)} = w_i^{(m)} \frac{1 - P_m}{P_m}$$

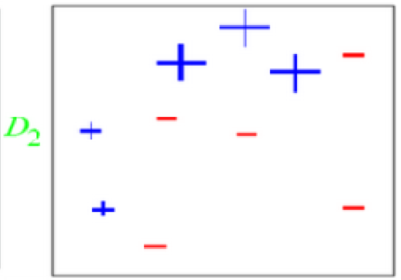
分类器权值:

$$\alpha_m = \frac{1}{2} \ln \frac{1 - P_m}{P_m}$$



$all\ x_i,\ \ w_i = 0.1$





$p_{m=}0.3,\qquad 1\text{-}p_{m=}0.7$

$$\alpha_1 = \frac{1}{2}\ln\left(\frac{1-\varepsilon_1}{\varepsilon_1}\right) = \frac{1}{2}\ln\left(\frac{1-0.3}{0.3}\right) = 0.42$$

正确分类不变 **wi=0.1;**

错误分类 **wi=0.233;** 对 **wi** 归一化

集成学习

示例

样本权值更新：

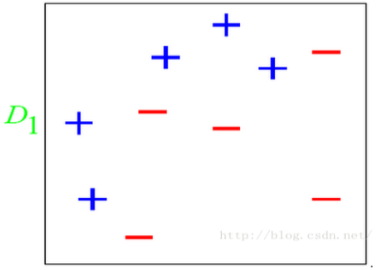
正确分类的样本权值不变

错误分类的样本权值为：

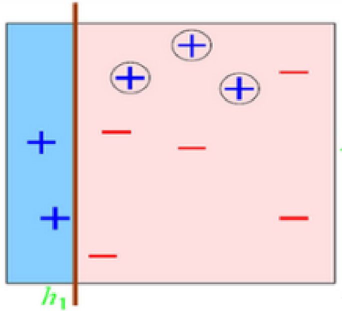
$$w_i^{(m+1)} = w_i^{(m)} \frac{1-P_m}{P_m}$$

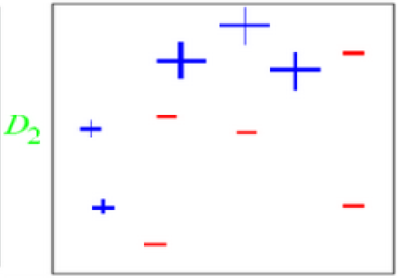
分类器权值：

$$\alpha_m = \frac{1}{2}\ln\frac{1-P_m}{P_m}$$



all x_i， $w_i = 0.1$



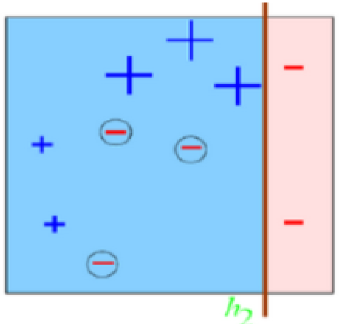


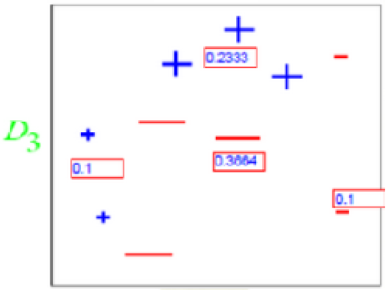
p_m=0.3， 1-p_m=0.7

$$\alpha_1 = \frac{1}{2}\ln\left(\frac{1-\varepsilon_1}{\varepsilon_1}\right) = \frac{1}{2}\ln\left(\frac{1-0.3}{0.3}\right) = 0.42$$

正确分类不变 w_i=0.1;

错误分类 w_i=0.233; 对 w_i 归一化





p_m=3* (0.1/(0.1*7+0.233*3)) = 0.2144

$$\alpha_2 = \frac{1}{2}\ln\left(\frac{1-\varepsilon_2}{\varepsilon_2}\right) = \frac{1}{2}\ln\left(\frac{1-0.2144}{0.2144}\right) = 0.6493$$

错误分类 $0.1\left(\frac{1-0.2144}{0.2144}\right) = 0.3644$

对 wi 归一化

集成学习

示例

样本权值更新:

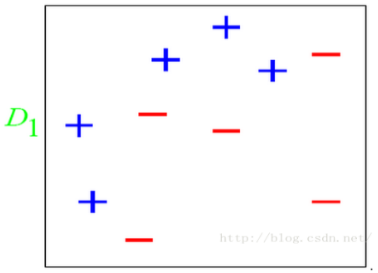
正确分类的样本权值不变

错误分类的样本权值为:

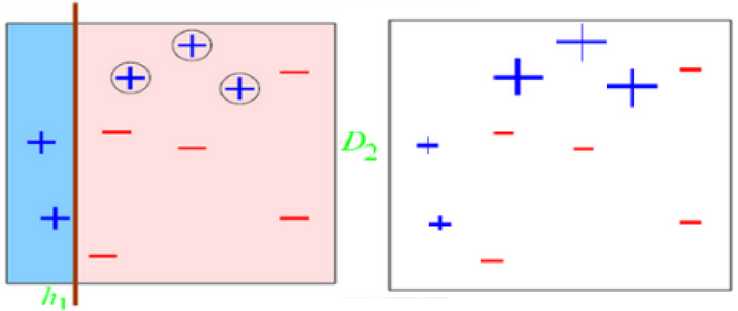
$$w_i^{(m+1)} = w_i^{(m)} \frac{1 - P_m}{P_m}$$

分类器权值:

$$\alpha_m = \frac{1}{2} \ln \frac{1 - P_m}{P_m}$$



$all\ x_i$, $w_i = 0.1$

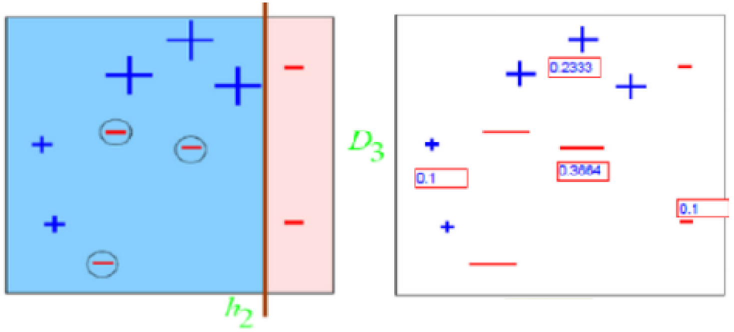


$p_m = 0.3$, $1 - p_m = 0.7$

$$\alpha_1 = \frac{1}{2}\ln\left(\frac{1-\varepsilon_1}{\varepsilon_1}\right) = \frac{1}{2}\ln\left(\frac{1-0.3}{0.3}\right) = 0.42$$

正确分类不变 w_i=0.1;

错误分类 w_i=0.233; 对 w_i 归一化

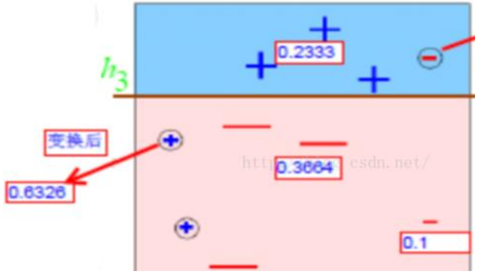


p_m=3* (0.1/(0.1*7+0.233*3)) = 0.2144

$$\alpha_2 = \frac{1}{2}\ln\left(\frac{1-\varepsilon_2}{\varepsilon_2}\right) = \frac{1}{2}\ln\left(\frac{1-0.2144}{0.2144}\right) = 0.6493$$

错误分类 $0.1\left(\frac{1-0.2144}{0.2144}\right) = 0.3644$

对 wi 归一化



p_m=3*(0.1/(0.1*4+0.233*3+0.3664*3))= 0.1365

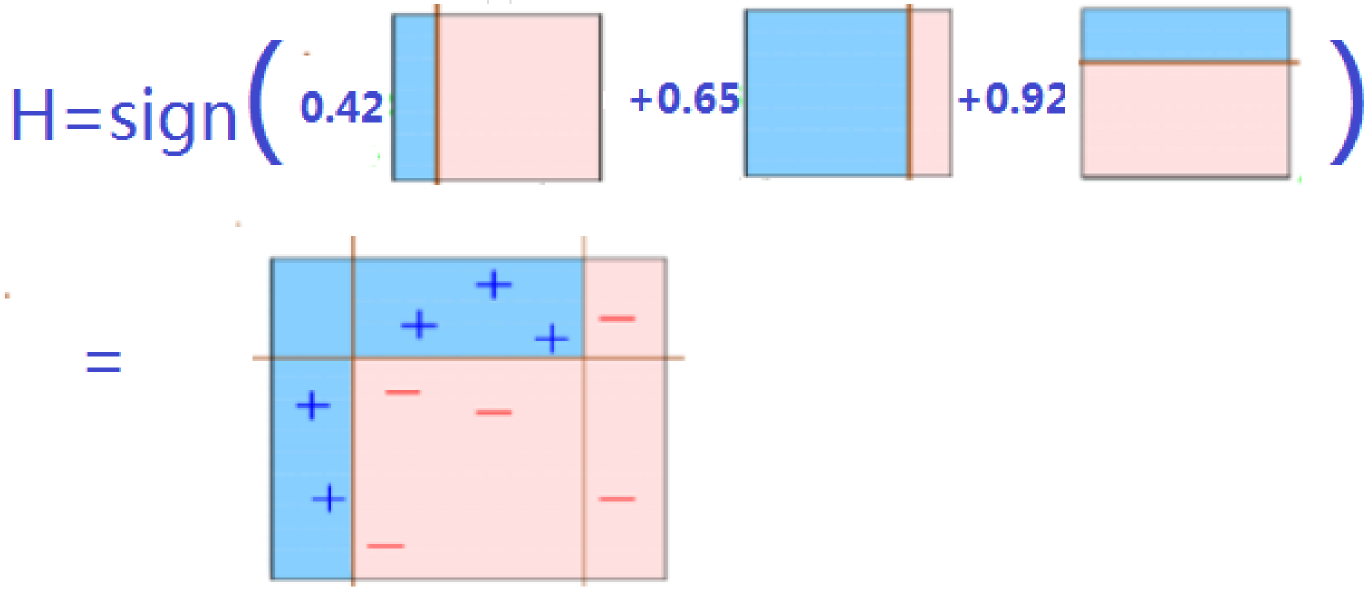
$$\alpha_3 = \frac{1}{2}\ln\left(\frac{1-\varepsilon_3}{\varepsilon_3}\right) = \frac{1}{2}\ln\left(\frac{1-0.1365}{0.1365}\right) = 0.9223$$

错误分类 $0.1\left(\frac{1-0.1365}{0.1365}\right) = 0.6326$

对 wi 归一化

集成学习

示例



第四章 非线性分类

非线性 SVM

SVM 原理

两个核心思想

- **最大间隔**

  找到最大间隔分类超平面；

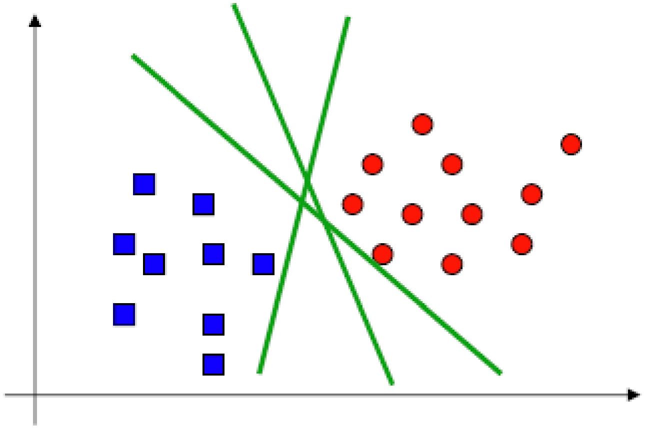
- **核函数方法**

  样本升维映射到高维空间后，采用线性决策。升维映射由核技巧实现。

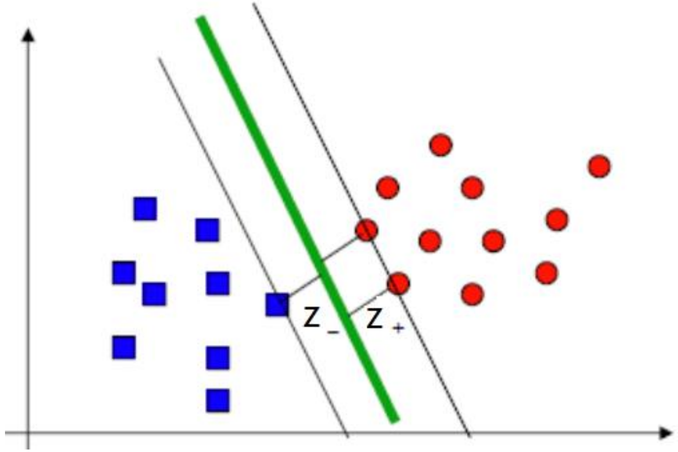
非线性 SVM

最大间隔

目标：找到最大间隔分类超平面



有多个超平面将数据分开，哪个更好？



类别集合到分类超平面的**最小距离最大化**

非线性 SVM

最大间隔

函数间隔： 给定的训练数据集$\boldsymbol{T}$和超平面$(\boldsymbol{w}, b)$，

- ✓ 超平面$(\boldsymbol{w}, b)$关于样本$(\boldsymbol{x_i}, y_i)$的函数间隔定义为

$$\hat{\gamma}_i = y_i(\boldsymbol{w} \cdot \boldsymbol{x_i} + b)$$

- ✓ 超平面$(\boldsymbol{w}, b)$关于训练数据集$\boldsymbol{T}$的函数间隔为

$$\hat{\gamma} = \min_{i=1,\cdots N} \hat{\gamma}_i$$

即所有样本点$(\boldsymbol{x_i}, y_i)$的函数间隔的最小值.

存在问题： 函数间隔可以表示分类预测的正确性及确信度，但是选择分离超平面时，只要成比例的改变$\boldsymbol{w}$和b，函数间隔会相应变化。

例如：当$2\boldsymbol{w}$和$2b$，超平面并没有改变，但函数间隔却成为原来的 2 倍。

最大间隔

几何间隔： 给定训练数据集$\boldsymbol{T}$和超平面$(\boldsymbol{w}, b)$，

- ✓ 超平面$(\boldsymbol{w}, b)$关于样本$(\boldsymbol{x_i}, y_i)$的几何间隔定义为

$$\gamma_i = y_i\left(\frac{\boldsymbol{w}}{\|\boldsymbol{w}\|} \cdot \boldsymbol{x_i} + \frac{b}{\|\boldsymbol{w}\|}\right)$$

参数w和b成比例地改变（超平面没有改变），几何间隔不变。

- ✓ 超平面$(\boldsymbol{w}, b)$关于训练数据集$\boldsymbol{T}$的几何间隔为

$$\gamma = \min_{i=1,\cdots N} \gamma_i$$

即所有样本点$(\boldsymbol{x_i}, y_i)$的几何间隔的最小值. 函数间隔和几何间隔有如下关系：

$$\gamma = \frac{\hat{\gamma}}{\|w\|}$$

最大间隔

最大几何间隔

几何间隔最大的分离超平面问题如下：

$$\max_{\boldsymbol{w},b} \quad \gamma$$

$$s.t. \quad y_i\left(\frac{\boldsymbol{w}}{\|\boldsymbol{w}\|}\cdot x_i+\frac{b}{\|\boldsymbol{w}\|}\right)\geq\gamma\,, \quad i=1,2,\cdots,N$$

根据几何间隔和函数间隔的关系，可将问题改写为：

$$\max_{\boldsymbol{w},b} \quad \frac{\hat{\gamma}}{\|\boldsymbol{w}\|}$$

$$s.t. \quad y_i(\boldsymbol{w}\cdot\boldsymbol{x_i}+b)\geq\hat{\gamma}\,, \quad i=1,2,\cdots,N$$

最大间隔

等价的问题：

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

$$s.t.\ \ y_i(\boldsymbol{w}\cdot\boldsymbol{x_i}+b)-1\geq 0\,,\quad i=1,2,\cdots,N$$

函数间隔 $\hat{\gamma}$ 的取值并不影响最优化问题的解。事实上，假设将$\boldsymbol{w}$和b按比例改变为$\lambda\boldsymbol{w}$和λb，这时函数间隔成为 $\lambda\hat{\gamma}$ 。函数间隔的这一改变对上面最优化问题的不等式约束没有影响，对目标函数的优化也没有影响，也就是说，它产生一个等价的最优化问题，这样就可以取$\hat{\gamma}=1$。最大化$\frac{1}{\|\boldsymbol{w}\|}$和最小化$\frac{1}{2}\|\boldsymbol{w}\|^2$是等价的。

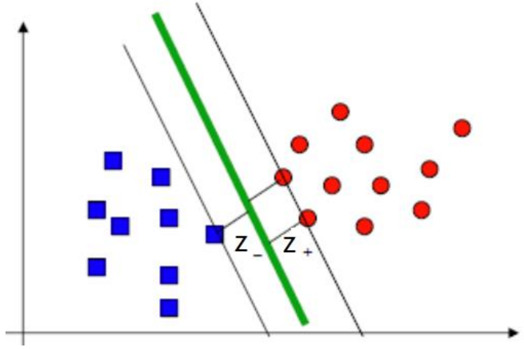
非线性 SVM

最大间隔

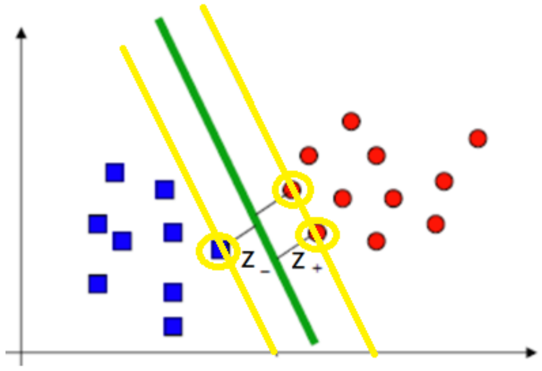
支撑向量（SV）： 支撑最小距离最大化的样本

支撑超平面: 通过支持向量，平行于分类面的超平面

间隔： 支撑向量到分类面的距离



支持向量机学习的基本想法是求解能够正确划分训练数据集并且几何间隔最大的分离超平面。



对偶问题

每一个不等式约束引进一个拉格朗日乘子$\alpha_i \geq 0, i = 1,2,\cdots,N$，定义拉格朗日函数：

$$L(w,b,\alpha)=\frac{1}{2}\|w\|^2-\sum_{i=1}^{N}\alpha_i y_i(w\cdot x_i+b)+\sum_{i=1}^{N}\alpha_i$$

原始问题的对偶问题是极大极小拉格朗日函数问题：

$$\max_{\alpha} Q_d(\alpha) = \max_{\alpha}\min_{w,b} L(w,b,\alpha)$$

非线性 SVM

对偶问题

（1） 求$\min_{w,b} L(w,b,\alpha)$

将拉格朗日函数$\boldsymbol{L}(\boldsymbol{w},b,\alpha)$分别对$\boldsymbol{w},b$求偏导数并令其等于 0

$$\nabla_w L(w,b,\alpha) = w - \sum_{i=1}^{N} \alpha_i y_i x_i = 0$$

$$\nabla_b L(w,b,\alpha) = \sum_{i=1}^{N} \alpha_i y_i = 0$$

$$\Longrightarrow$$

$$w = \sum_{i=1}^{N} \alpha_i y_i x_i$$

$$\sum_{i=1}^{N} \alpha_i y_i = 0$$

将上述两式代入拉格朗日函数，即得

非线性 SVM

对偶问题

$$L(w,b,\alpha)=\frac{1}{2}\sum_{i=1}^{N}\sum_{j=1}^{N}\alpha_i\alpha_j y_i y_j (x_i \cdot x_j)-\sum_{i=1}^{N}\alpha_i y_i\left(\left(\sum_{j=1}^{N}\alpha_j y_j x_j\right)\cdot x_i+b\right)+\sum_{i=1}^{N}\alpha_i$$

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

即

$$\min_{w,b} L(w,b,\alpha)=-\frac{1}{2}\sum_{i=1}^{N}\sum_{j=1}^{N}\alpha_i\alpha_j y_i y_j (x_i \cdot x_j)+\sum_{i=1}^{N}\alpha_i$$

非线性 SVM

对偶问题

（2） 对偶问题是求$\min\limits_{\boldsymbol{w},b} L(\boldsymbol{w},b,\alpha)$对$\alpha$的极大

$$\max_{\alpha} \ -\frac{1}{2}\sum_{i=1}^{N}\sum_{j=1}^{N}\alpha_i\alpha_j y_i y_j (x_i \cdot x_j) + \sum_{i=1}^{N}\alpha_i$$

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

$$\alpha_i \geqslant 0, \quad i = 1,2,\cdots,N$$

$\Rightarrow$

$$\min_{\alpha} \quad \frac{1}{2}\sum_{i=1}^{N}\sum_{j=1}^{N}\alpha_i\alpha_j y_i y_j (x_i \cdot x_j) - \sum_{i=1}^{N}\alpha_i$$

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

$$\alpha_i \geqslant 0, \quad i = 1,2,\cdots,N$$

公式①

问题的求解

原始问题：

$$\min_{x \in \mathbf{R}^n} f(x)$$

$$\text{s.t.} \quad c_i(x) \leqslant 0, \quad i = 1,2,\cdots,k$$

$$h_j(x) = 0, \quad j = 1,2,\cdots,l$$

假设函数$f(\boldsymbol{x})$和$c_i(\boldsymbol{x})$是凸函数，$h_j(\boldsymbol{x})$是仿射函数，并且不等式约束$c_i(\boldsymbol{x})$是严格可行的。

KKT 条件（$\boldsymbol{x}^*$和α^*，β^*分别是原始问题和对偶问题的解的充分必要条件）： $\boldsymbol{x}^*$，α^*，β^*满足以下

$$\nabla_x L(\boldsymbol{x}^*, \alpha^*, \beta^*) = 0$$

$$\alpha_i^* c_i(\boldsymbol{x}^*) = 0, \qquad i = 1,2,\cdots,k$$

$$c_i(\boldsymbol{x}^*) \leq 0, \qquad i = 1,2,\cdots,k$$

$$\alpha_i^* \geq 0, \qquad i = 1,2,\cdots,k$$

$$h_j(\boldsymbol{x}^*) = 0, \qquad i = 1,2,\cdots,k$$

问题的求解

根据 KKT 条件成立，求解原始最优化问题的解w^*, b^*

设$\boldsymbol{\alpha}^* = (\alpha_1^*, \alpha_2^*, \cdots, \alpha_l^*)^T$是对偶最优化问题（公式①）的解，根据 KKT 条件成立则

$$\nabla_w L(w^*, b^*, \alpha^*) = w^* - \sum_{i=1}^{N} \alpha_i^* y_i x_i = 0$$

$$\nabla_b L(w^*, b^*, \alpha^*) = -\sum_{i=1}^{N} \alpha_i^* y_i = 0$$

$$\alpha_i^*(y_i(w^* \cdot x_i + b^*) - 1) = 0, \quad i = 1, 2, \cdots, N$$

$$y_i(w^* \cdot x_i + b^*) - 1 \geqslant 0, \quad i = 1, 2, \cdots, N$$

$$\alpha_i^* \geqslant 0, \quad i = 1, 2, \cdots, N$$

非线性 SVM

问题的求解

由此得

$$w^* = \sum_i \alpha_i^* y_i x_i$$

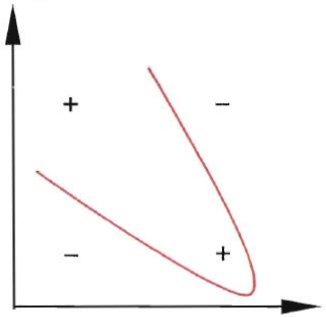
其中至少有一个$\alpha_j^* > 0$（用反证法，假设$\alpha^* = 0$，那么可知$\boldsymbol{w}^* = \boldsymbol{0}$，而$\boldsymbol{w}^* = \boldsymbol{0}$不是原始最优化问题的解，产生矛盾），对此 j 有

$$y_j(w^* \cdot x_j + b^*) - 1 = 0 \quad \xrightarrow[y_j^2 = 1]{} \quad b^* = y_j - \sum_{i=1}^{N} \alpha_i^* y_i (x_i \cdot x_j)$$

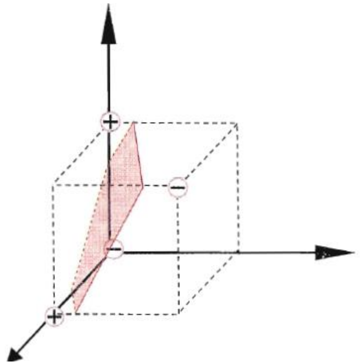
非线性 SVM

核函数方法

非线性映射



$x \mapsto \phi(x)$



扩展的线性模型 $f(x) = w^{\mathrm{T}}\phi(x) + b$ ⇨

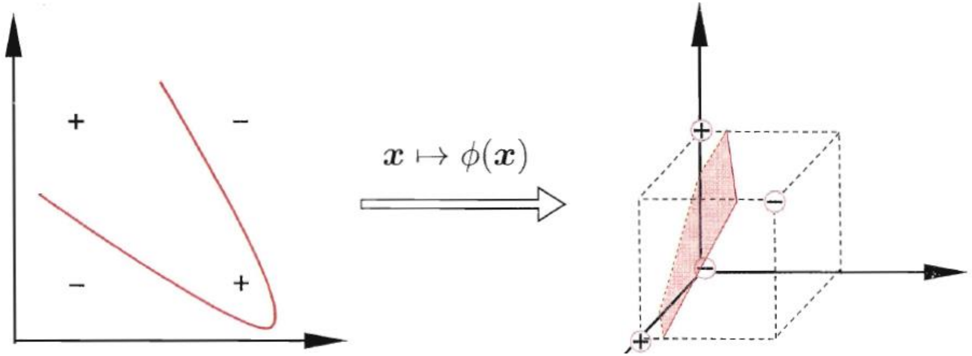
$$w = \sum_{i=1}^{m} \alpha_i \phi(x_i)$$

$$\begin{aligned} f(\boldsymbol{x}) &= \boldsymbol{w}^{\mathrm{T}}\phi(\boldsymbol{x}) + b \\ &= \sum_{i=1}^{m} \alpha_i \phi(\boldsymbol{x}_i)^{\mathrm{T}}\phi(\boldsymbol{x}) + b \end{aligned}$$

非线性 SVM

核函数方法

非线性映射



扩展的线性模型 $f(\boldsymbol{x}) = \boldsymbol{w}^{\mathrm{T}}\phi(\boldsymbol{x}) + b$

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

$$\begin{aligned} f(\boldsymbol{x}) &= \boldsymbol{w}^{\mathrm{T}}\phi(\boldsymbol{x}) + b \\ &= \sum_{i=1}^{m} \alpha_i \phi(\boldsymbol{x}_i)^{\mathrm{T}}\phi(\boldsymbol{x}) + b \\ &= \sum_{i=1}^{m} \alpha_i \kappa(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{x}_i) + b \end{aligned}$$

核函数方法:避免直接求非线性映射，由核函数替代内积运算

$$\kappa(\boldsymbol{x}_i, \boldsymbol{x}_j) = \langle \phi(\boldsymbol{x}_i), \phi(\boldsymbol{x}_j) \rangle = \phi(\boldsymbol{x}_i)^{\mathrm{T}}\phi(\boldsymbol{x}_j)$$

核函数方法

定理 (核函数) 令 $\mathcal{X}$ 为输入空间, $\kappa(\cdot,\cdot)$ 是定义在 $\mathcal{X}\times\mathcal{X}$ 上的对称函数, 则 κ 是核函数当且仅当对于任意数据 $D=\{\boldsymbol{x}_1,\boldsymbol{x}_2,\ldots,\boldsymbol{x}_m\}$, "核矩阵" (kernel matrix) $\mathbf{K}$ 总是半正定的:

$$\mathbf{K}=\begin{bmatrix}\kappa(\boldsymbol{x}_1,\boldsymbol{x}_1) & \cdots & \kappa(\boldsymbol{x}_1,\boldsymbol{x}_j) & \cdots & \kappa(\boldsymbol{x}_1,\boldsymbol{x}_m)\\ \vdots & \ddots & \vdots & \ddots & \vdots\\ \kappa(\boldsymbol{x}_i,\boldsymbol{x}_1) & \cdots & \kappa(\boldsymbol{x}_i,\boldsymbol{x}_j) & \cdots & \kappa(\boldsymbol{x}_i,\boldsymbol{x}_m)\\ \vdots & \ddots & \vdots & \ddots & \vdots\\ \kappa(\boldsymbol{x}_m,\boldsymbol{x}_1) & \cdots & \kappa(\boldsymbol{x}_m,\boldsymbol{x}_j) & \cdots & \kappa(\boldsymbol{x}_m,\boldsymbol{x}_m)\end{bmatrix}.$$

定理 表明, 只要一个对称函数所对应的核矩阵半正定, 它就能作为核函数使用. 事实上, 对于一个半正定核矩阵, 总能找到一个与之对应的映射 ϕ. 换言之, 任何一个核函数都隐式地定义了一个称为"再生核希尔伯特空间" (Reproducing Kernel Hilbert Space, 简称 RKHS)的特征空间.

核函数方法

常用核函数

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

非线性 SVM

核函数方法

核函数化 SVM

线性 SVM

$$\min_{\alpha} \quad \frac{1}{2}\sum_{i,j=1}^{n} \alpha_i\alpha_j y_i y_j x_i^\top x_j - \sum_{i=1}^{n}\alpha_i$$

$$s.t. \quad \alpha_i \geq 0 \quad i = 1 \ldots n$$

$$\sum_{i=1}^{n} \alpha_i y_i = 0$$

决策函数：

$$f(x) = \sum_{i=1}^{n} \alpha_i y_i x_i^\top x + b$$

$\Rightarrow$

非线性 SVM

$$\min_{\alpha} \quad \frac{1}{2}\sum_{i,j=1}^{n} \alpha_i\alpha_j y_i y_j\, k(x_i, x_j) - \sum_{i=1}^{n}\alpha_i$$

$$s.t. \quad \alpha_i \geq 0 \quad i = 1 \ldots n$$

$$\sum_{i=1}^{n} \alpha_i y_i = 0$$

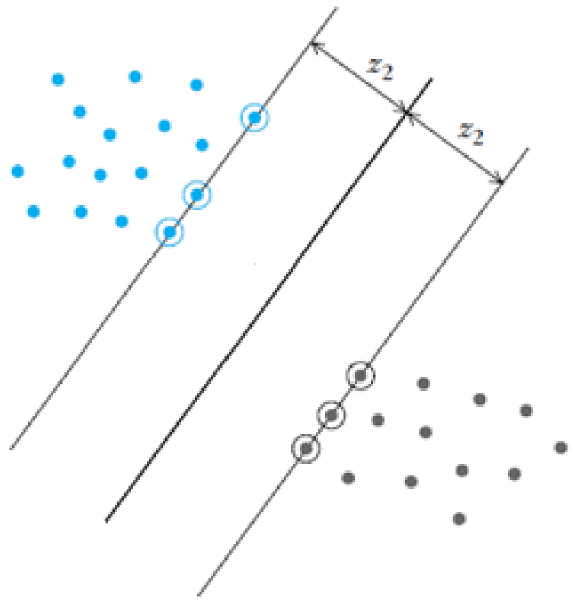
决策函数：

$$f(x) = \sum_{i=1}^{n} \alpha_i y_i\, k(x_i, x_j) + b$$

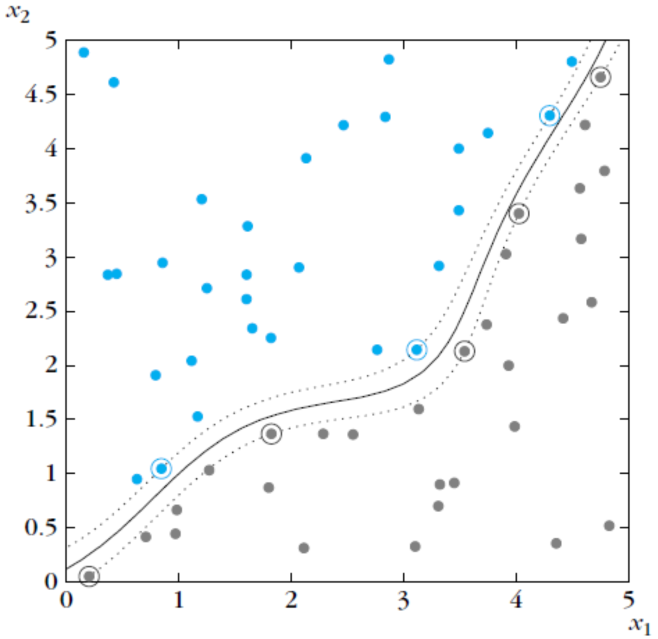
非线性 SVM

核函数方法

核函数化 SVM



线性 SVM 决策界



非线性 SVM 决策界

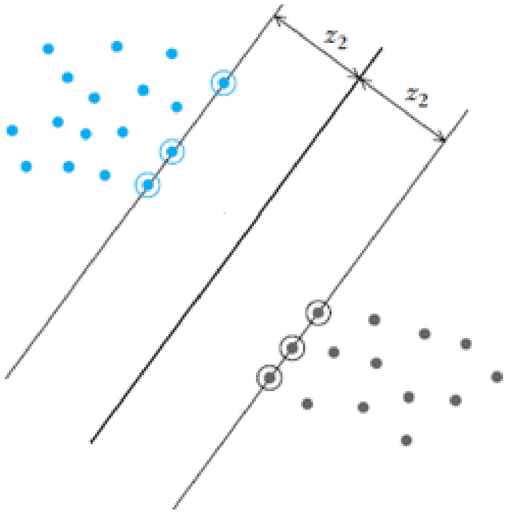
非线性 SVM

SVM 算法

硬间隔 SVM

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

$$s.t \quad y_i\left(w^T x_i+b\right)-1\geq 0, \quad \mathrm{i}=1,2,\ldots l$$



硬间隔 SVM 对偶问题：

$$\min_{\alpha} \quad \frac{1}{2}\sum_{i=1}^{l}\sum_{j=1}^{l} y_i y_j \alpha_i \alpha_j K(x_i, x_j) - \sum_{j=1}^{l}\alpha_j$$

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

$$\alpha_i \geqslant 0, \quad i=1,\cdots,l\,.$$

(1)解对偶问题，得 $\boldsymbol{\alpha}=(\alpha_1,\ldots\alpha_l)^{\mathrm{T}}$

(2)求 w, b:

$$\boldsymbol{w}=\sum_{i=1}^{l} y_i \alpha_{\mathrm{i}} \boldsymbol{x}_i$$

$$y_j\left(w^T x_j+b\right)-1=0, j\in\{j|\alpha_j>0\} \;\Rightarrow\; b=y_j-\sum_{i=1}^{l} y_i\alpha_i k(\boldsymbol{x}_i,\boldsymbol{x}_j), \quad j\in\{j|\alpha_j>0\}$$

(3)决策函数 $f(\boldsymbol{x})=\mathrm{sgn}(\sum_{i=1}^{l}\alpha_{\mathrm{i}} y_i k(x_i,x_j)+b)$

SVM 算法

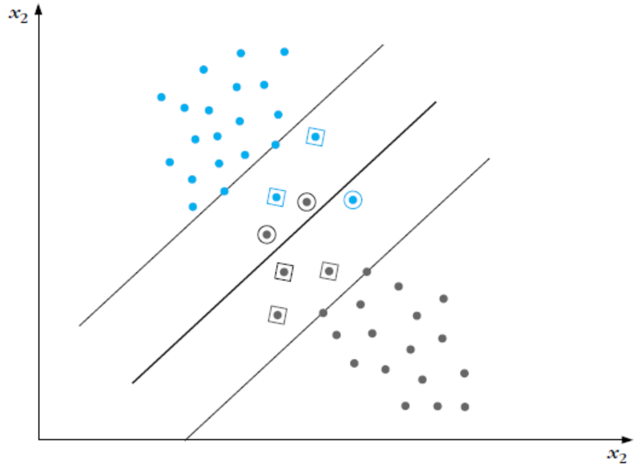
软间隔 SVM

$$\min_{\mathbf{w}\in\mathcal{H},b\in\mathbf{R},\xi\in\mathbf{R}^l} \quad \frac{1}{2}\|\mathbf{w}\|^2 + C\sum_{i=1}^{l}\xi_i$$

$$\text{s.t.} \quad y_i((\mathbf{w}\cdot\mathbf{x}_i)+b) \geqslant 1-\xi_i\,,\; i=1,\cdots,l\,,$$

$$\xi_i \geqslant 0\,,\; i=1,\cdots,l.$$

$$C>0$$



软间隔 SVM 对偶问题

$$\min_{\alpha} \quad \frac{1}{2}\sum_{i=1}^{l}\sum_{j=1}^{l} y_i y_j \alpha_i \alpha_j K(x_i, x_j) - \sum_{j=1}^{l}\alpha_j$$

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

$$0 \leqslant \alpha_i \leqslant C,\quad i=1,\cdots,l\,.$$

(1)解对偶问题，得 $\boldsymbol{\alpha}=(\alpha_1,\ldots\alpha_l)^{\mathrm{T}}$

(2)求 w, b

$$\boldsymbol{w}=\sum_{i=1}^{l} y_i\alpha_i\boldsymbol{x}_i$$

$$b=y_j-\sum_{i=1}^{l} y_i\alpha_i k(\boldsymbol{x}_i,\boldsymbol{x}_j),\quad j\in\{j|0<\alpha_j<C\}$$

(3)决策函数 $f(\boldsymbol{x})=\mathrm{sgn}(\sum_{i=1}^{l}\alpha_i y_i k(x_i,x_j)+b)$

本章小结

掌握

1. 决策树
2. 集成学习

了解

1. 最近邻
2. SVM
3. 核函数方法

参考文献

1. 机器学习，周志华，清华大学，2016.
2. 统计学习方法，李航，清华大学，2012.
3. 模式识别（第二版），边肇祺，张学工等,清华大学出版社，2000.1
4. 数据挖掘中的新方法-支持向量机，邓乃扬，田英杰。