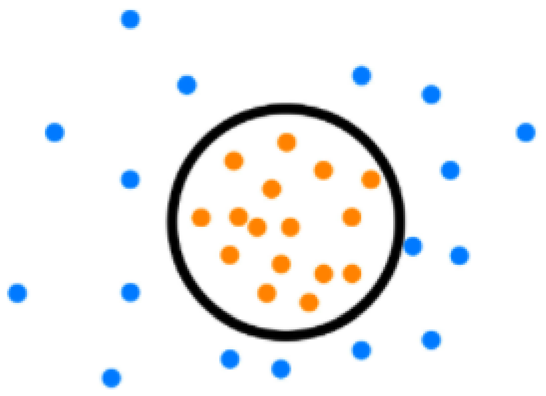
OneClassSVM



- 算法思想
    - 找到一个超球面，球面中心为a, 半径为R 使得所有正常样本在球面内，同时球面尽可能的小

  此时目标函数与约束条件为：

$$\min_{R,a} R^2$$
$$s.t. \ \|\mathbf{x}_i - \mathbf{a}\|^2 \le R^2$$

    - 由于一般情况下不能通过球面将正常样本和非正常样本完全分开，因此如果球面内包含所有正常样本，则可能包含更多的非正常样本。因此给样本点 x_i引入松弛条件 ξ_i ,允许部分正常样本点在球面之外，同时对松弛距离在目标函数加入惩罚项，C为惩罚系数,C>0 ,根据需要人为设定。

      此时目标函数与约束条件为：

$$\min_{R,a} R^2 + C\sum_i \xi_i$$
$$s.t. \ \|\mathbf{x}_i - \mathbf{a}\|^2 \le R^2 + \xi_i, \quad \xi_i \ge 0 \quad \forall i$$

- 求解步骤
    1. 通过拉格朗日乘子法转化将条件极值转化为无约束极值

       拉格朗日函数如下：

$$\begin{aligned} L(R, \mathbf{a}, \alpha_i, \gamma_i, \xi_i) = & R^2 + C\sum_i \xi_i \\ & - \sum_i \alpha_i \left\{ R^2 + \xi_i - \left(\|\mathbf{x}_i\|^2 - 2\mathbf{a} \cdot \mathbf{x}_i + \|\mathbf{a}\|^2 \right) \right\} - \sum \gamma_i \xi_i \end{aligned}$$

$\alpha_i >= 0$， $\gamma_i >= 0$,对拉格朗日函数求最大值的条件等价于原条件极值的条件。此时原问题转化为先对拉格朗 日函数求最大值再求最小值即：

$$\min_{R,a,\xi}\max_{\alpha,\gamma} L \tag{1}$$

2. 转化为对偶问题求解

$$\min_{R,a,\xi}\max_{\alpha,\gamma} L = \max_{\alpha,\gamma}\min_{R,a,\xi} L \tag{2}$$

根据 $\min\limits_{R,a,\xi} L$ 求偏导

$$\begin{aligned}
\frac{\partial L}{\partial R} = 0: &\quad \sum_i \alpha_i = 1 \\
\frac{\partial L}{\partial \mathbf{a}} = 0: &\quad \mathbf{a} = \frac{\sum_i \alpha_i \mathbf{x}_i}{\sum_i \alpha_i} = \sum_i \alpha_i \mathbf{x}_i \\
\frac{\partial L}{\partial \xi_i} = 0: &\quad C - \alpha_i - \gamma_i = 0
\end{aligned}$$

将等式代入L得到：

$$L = \sum_i \alpha_i \left(\mathbf{x}_i \cdot \mathbf{x}_i\right) - \sum_{i,j} \alpha_i \alpha_j \left(\mathbf{x}_i \cdot \mathbf{x}_j\right)$$

此时目标函数和约束条件如下：约束条件由求偏导的第三条等式可得

$$\max_{\alpha} \sum_i \alpha_i \left(\mathbf{x}_i \cdot \mathbf{x}_i\right) - \sum_{i,j} \alpha_i \alpha_j \left(\mathbf{x}_i \cdot \mathbf{x}_j\right) \text{ subject to } 0 \le \alpha_i \le C$$

此时仅有 α 未知 可根据二次规划求解 α，然后根据 α 和求偏导第三条等式得到 γ ,根据 α 和第二条求偏导等式得到 a

根据KTT条件即原来的约束条件乘以拉格朗日乘数等于零即

$$\begin{aligned}
&\gamma_i \xi_i = 0 \\
&||x_i - a||^2 - R^2 - \xi_i = 0
\end{aligned} \tag{3}$$

分别得到 ξ_i 和 R

- 最终结果即为超球面$(x-a)^2 <= R$