

给定数据集

$$D = \left\{ \left(\vec{x}_1, y_1 \right), \left(\vec{x}_2, y_2 \right), \dots, \left(\vec{x}_m, y_m \right) \right\}, y_i \in \{-1, +1\}$$

划分超平面：

$$\vec{w}^T \vec{x} + b = 0 \quad (6.1)$$

正确分类的划分超平面的约束：

$$\begin{cases} \vec{w}^T \vec{x} + b \geq +1, & y_i = +1; \\ \vec{w}^T \vec{x} + b \leq -1, & y_i = -1 \end{cases} \quad (6.3)$$

异类支持向量的“间隔”margin：

$$\gamma = \frac{2}{\|\vec{w}\|} \quad (6.4)$$

要使间隔最大：

$$\max_{\vec{w}, b} = \frac{1}{2} \|\vec{w}\|^2 \quad (6.5)$$

$$s. t. \ y_i (\vec{w}^T \vec{x}_i + b) \geq 1, \ i = 1, 2, \dots, m$$

等价于(SVM基本型)：

$$\min_{\vec{w}, b} \frac{1}{2} \|\vec{w}\|^2 \quad (6.6)$$

$$s. t. \ y_i (\vec{w}^T \vec{x} + b) \geq 1, \ i = 1, 2, \dots, m$$

解得超平面模型：

$$f(x) = \vec{w}^T \vec{x} + b \quad (6.7)$$

SVM基本型的拉格朗日对偶问题：

$$SVM \equiv \min_{\vec{w}, b} (\max_{\alpha > 0} \mathcal{L}(\vec{w}, b, \vec{\alpha}))$$

$$\mathcal{L}(\vec{w}, b, \vec{\alpha}) = \frac{1}{2} \|\vec{w}\|^2 + \sum_{i=1}^m \alpha_i (1 - y_i (\vec{w}^T \vec{x} + b)) \quad (6.8)$$

求偏导：

$$\vec{w} = \sum \alpha_i y_i \vec{x}_i \quad (6.9)$$

$$0 = \sum \alpha_i y_i \quad (6.10)$$

代入6.8得到对偶问题：

$$\begin{aligned} \max_{\vec{\alpha}} \quad & \sum \alpha_i - \frac{1}{2} \sum \sum \alpha_i \alpha_j y_i y_j x_i^T x_j \\ \text{s. t.} \quad & \sum \alpha_i y_i = 0, \\ & \alpha_i \geq 0, \quad i = 1, 2, \dots, m \end{aligned} \quad (6.11)$$

原样本空间非线性可分，于是将样本映射到高维空间，高维特征空间中的划分超平面模型：

$$f(\vec{x}) = \vec{w}^T \phi(\vec{x}) + b \quad (6.19)$$

特征空间中SVM基本型：

$$\begin{aligned} \min_{\vec{w}, b} \quad & \frac{1}{2} \|\vec{w}\|^2 \\ \text{s. t.} \quad & y_i f(\vec{x}) = y_i (\vec{w}^T \phi(\vec{x}) + b) \geq 1, \quad i = 1, 2, \dots, m \end{aligned} \quad (6.20)$$

其对偶问题为：

$$\begin{aligned} \max_{\vec{\alpha}} \quad & \sum \alpha_i - \frac{1}{2} \sum \sum \alpha_i \alpha_j y_i y_j \phi(\vec{x}_i)^T \phi(\vec{x}_j) \\ \text{s. t.} \quad & \sum \alpha_i y_i = 0, \\ & \alpha_i \geq 0, \quad i = 1, 2, \dots, m \end{aligned} \quad (6.21)$$

定义核函数，其计算在低维空间 X ：

$$\kappa(\vec{x}_i, \vec{x}_j) = \phi(\vec{x}_i)^T \phi(\vec{x}_j)$$

于是，式（6.21）可写为：

$$\begin{aligned} \max_{\vec{\alpha}} \quad & \sum \alpha_i - \frac{1}{2} \sum \sum \alpha_i \alpha_j y_i y_j \kappa(\vec{x}_i, \vec{x}_j) \\ \text{s. t.} \quad & \sum \alpha_i y_i = 0, \\ & \alpha_i \geq 0, \quad i = 1, 2, \dots, m \end{aligned} \quad (6.23)$$

求解后即可得到模型（支持向量展式）：

$$\begin{aligned} f(\vec{x}) &= \vec{w}^T \phi(\vec{x}) + b \\ &= \sum \alpha_i y_i \phi(\vec{x}_i)^T \phi(\vec{x}) + b \\ &= \sum \alpha_i y_i \kappa(\vec{x}_i, \vec{x}) + b \end{aligned} \quad (6.24)$$

常用核函数的选择：

$$\text{线性核: } \kappa(\vec{x}_i, \vec{x}_j) = \vec{x}_i^T \vec{x}_j$$

$$\text{多项式核: } \kappa(\vec{x}_i, \vec{x}_j) = (\vec{x}_i^T \vec{x}_j)^d, d \geq 1$$

$$\text{高斯核 / RBF核: } \exp\left(-\frac{\|\vec{x}_i - \vec{x}_j\|^2}{2\sigma^2}\right), \sigma > 0$$

$$\text{拉普拉斯核: } \exp\left(-\frac{\|\vec{x}_i - \vec{x}_j\|}{\sigma}\right), \sigma > 0$$

软间隔SVM，允许某些样本不满足约束 $y_i(\vec{w}^T \vec{x}_i + b) \geq 1$ ，优化目标可写为：

$$\min_{\vec{w}, b} \frac{1}{2} \|\vec{w}\|^2 + C \sum \ell_{0/1}(y_i(\vec{w}^T \vec{x}_i + b) - 1) \quad (6.29)$$

$C > 0$ 是正则化常数， $\ell_{0/1}$ 是“0/1损失函数”： $\ell_{0/1}(z) = \begin{cases} 1, & \text{if } z < 0; \\ 0, & \text{otherwise} \end{cases}$

当C无穷大时，若要实现目标使最小化（间隔最大化），只有所有样本均满足约束，此时6.29等价于6.6；所以，若要允许一些样本不满足约束，C必须取有限值。

损失函数的“替代损失”：

$$\text{hinge损失: } \ell_{\text{hinge}}(z) = \max(0, 1 - z);$$

$$\text{指数损失: } \ell_{\text{exp}}(z) = \exp(-z);$$

$$\text{logistic loss: } \ell_{\log}(z) = \log(1 + \exp(-z))$$

若采用hinge损失，式（6.29）变为：

$$\min_{\vec{w}, b} = \frac{1}{2} \|\vec{w}\|^2 + C \sum \max(0, 1 - y_i(\vec{w}^T \vec{x}_i + b)) \quad (6.34)$$

将损失部分定义为“松弛变量(slack variables)” $\xi_i \geq 0$,

软间隔SVM可重写为：

$$\begin{aligned} \min_{\vec{w}, b} &= \frac{1}{2} \|\vec{w}\|^2 + C \sum \xi_i \\ \text{s. t. } &y_i(\vec{w}^T \vec{x}_i + b) \geq 1 - \xi_i \\ &\xi_i \geq 0, i = 1, 2, \dots, m \end{aligned} \quad (6.35)$$

每个样本都有一个对应的松弛变量 ξ_i ，用以表征该样本不满足约束的程度。

若样本被正确划分，即满足约束，那么该样本对应的 $\xi_i = 0$ ，上式等于SVM基本型(6.6)

(6.35) 的拉格朗日函数：

$$\mathcal{L}(\vec{w}, b, \vec{\alpha}, \vec{\xi}, \vec{\mu}) = \frac{1}{2} \|\vec{w}\|^2 + C \sum \xi_i + \sum \alpha_i \left(1 - \xi_i - y_i (\vec{w}^T \vec{x}_i + b) \right) + \sum \mu_i \xi_i \quad (6.36)$$

求偏导代入，得到 (6.35) 的对偶问题：

$$\begin{aligned} \max_{\vec{\alpha}} \quad & \sum \alpha_i - \frac{1}{2} \sum \sum \alpha_i \alpha_j y_i y_j \vec{x}_i^T \vec{x}_j \\ \text{s. t.} \quad & \sum \alpha_i y_i = 0, \\ & 0 \leq \alpha_i \leq C, \quad i = 1, 2, \dots, m \end{aligned} \quad (6.40)$$

与 (6.11) 唯一差别是约束不同