支持向量机

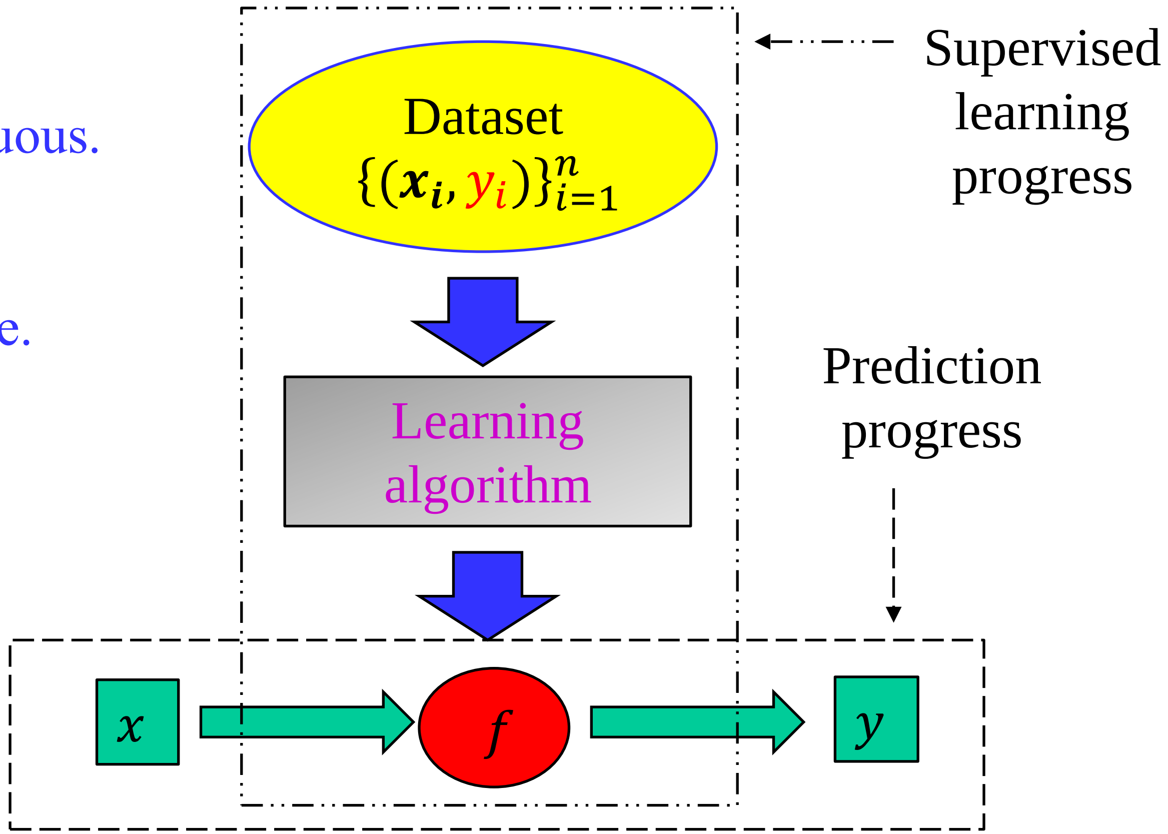
黄晟
huangsheng@cqu.edu.cn
办公室：信息大楼B701

监督学习（ Supervised Learning ）

Learning with a teacher

Regression:
y_i's are continuous.

Classification:
y_i's are discrete.

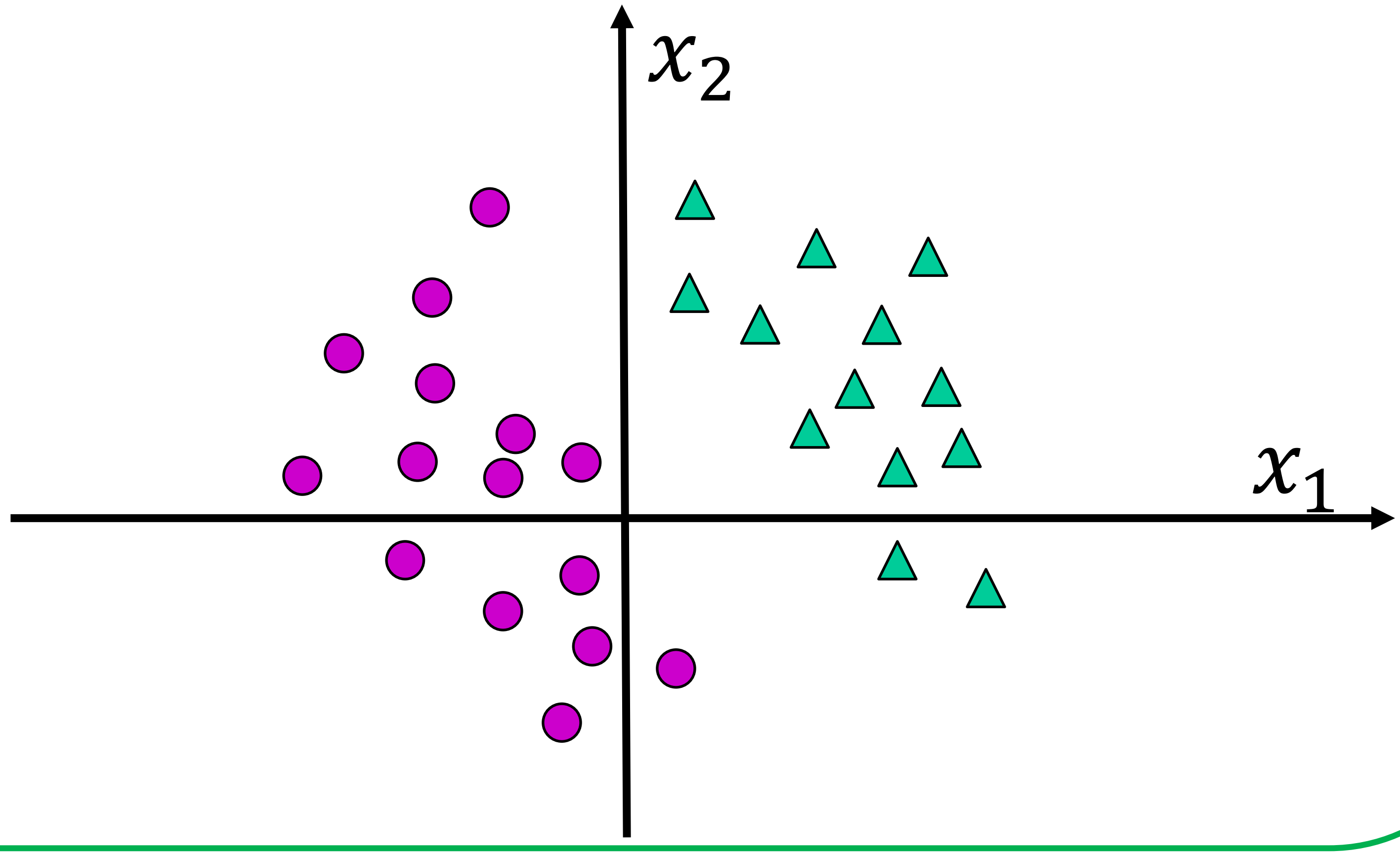


5.1 SVM模型

黄晟
huangsheng@cqu.edu.cn
办公室：信息大楼B701

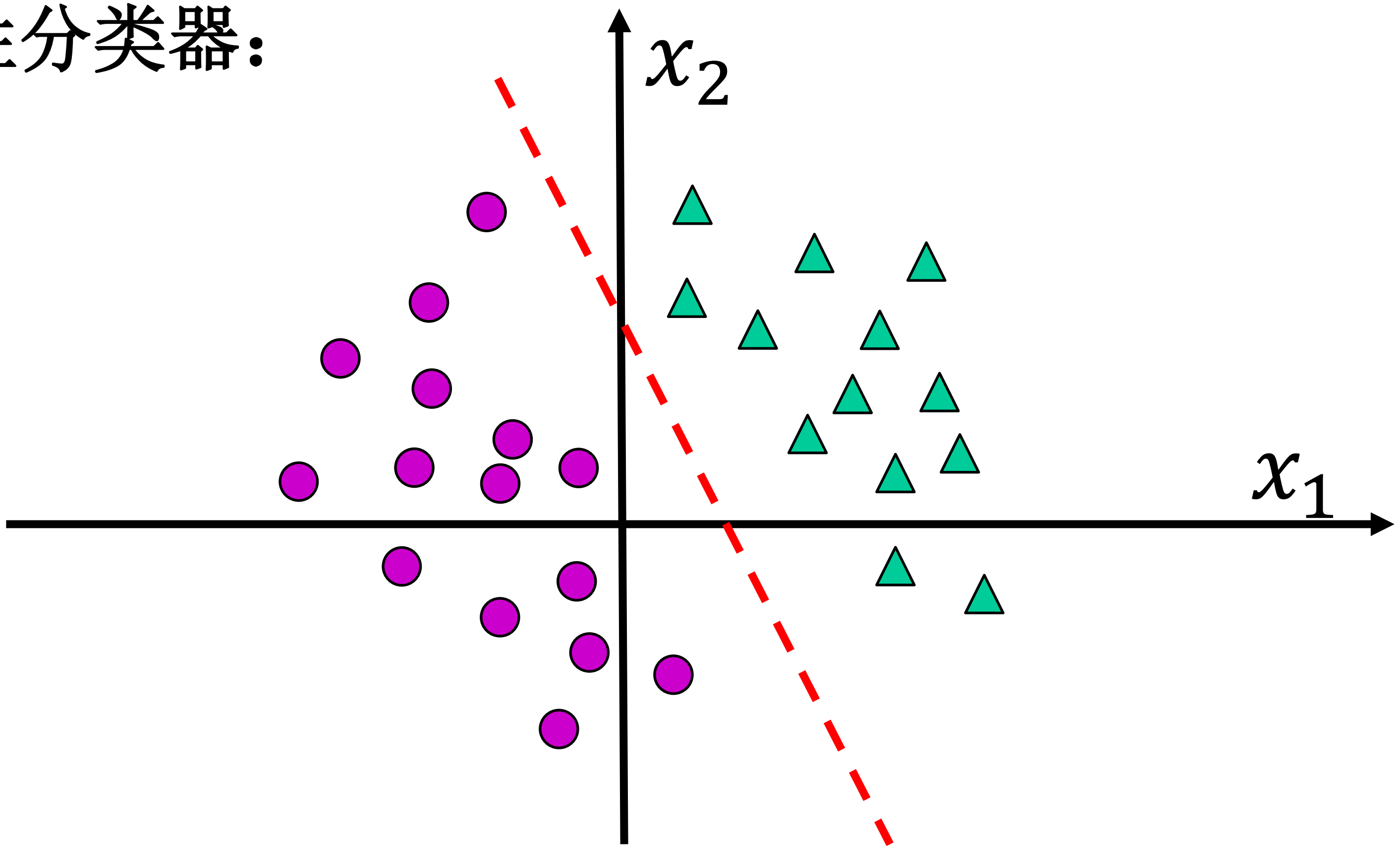
二分类（Binary Classification）

给定训练集 $\{(\boldsymbol{x}_i, \boldsymbol{y}_i)\}_{i=1}^{n}$,寻求合适的分类器?

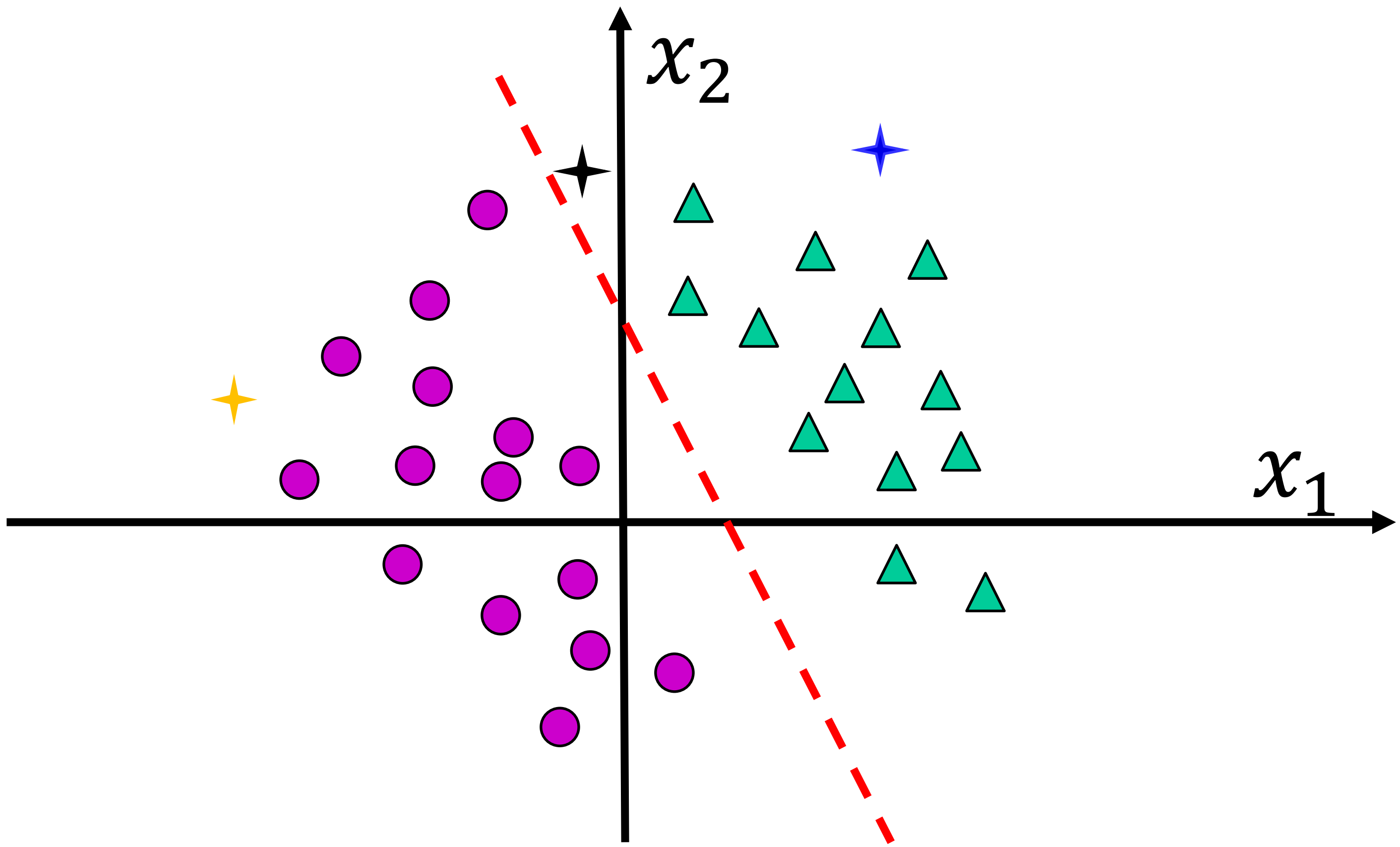


归纳（Induction）

线性分类器：



演绎（Deduction）



问题？

数据点✦,✦ 在直线上方，为正样本。

数据点✦ 在直线下方，为负样本。

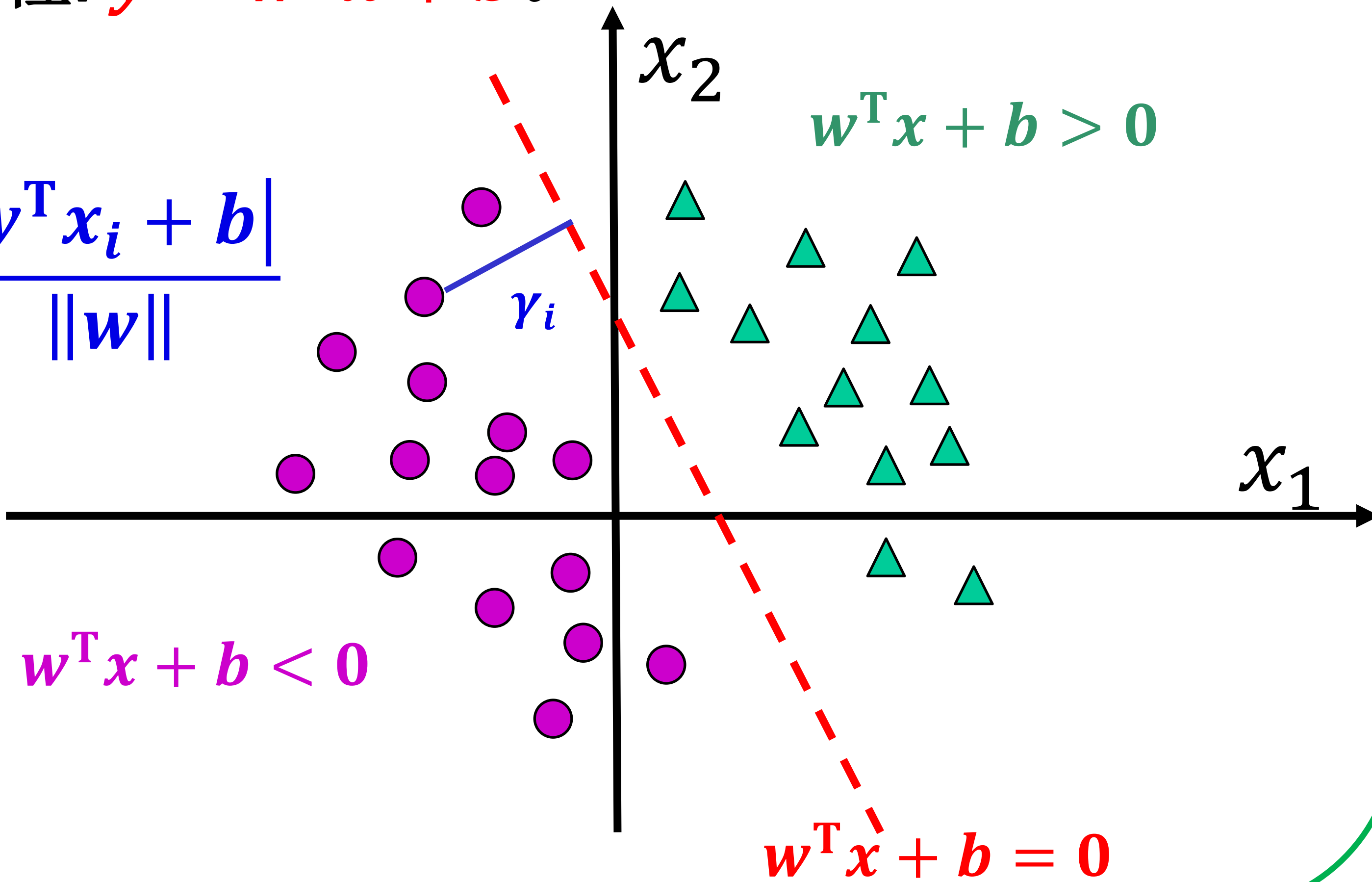
数据点✦ ✦都被判定为正样本，但是置信程度（confident）不同。

主观上说，离分类边界远的样本的置信度高，而离分类边界近的样本置信度低。

点的超平面距离

直线方程: $y = w^{\mathrm{T}}x + b$。

$$\gamma_i = \frac{|w^{\mathrm{T}}x_i + b|}{\|w\|}$$



间隔（Margin）

考虑输出变量 $\boldsymbol{y_i} \in \{-\mathbf{1}, \mathbf{1}\}$。

$$\boldsymbol{\gamma_i} = \frac{|\boldsymbol{w}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{x_i} + \boldsymbol{b}|}{\|\boldsymbol{w}\|} = \frac{\boldsymbol{y_i}(\boldsymbol{w}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{x_i} + \boldsymbol{b})}{\|\boldsymbol{w}\|}$$

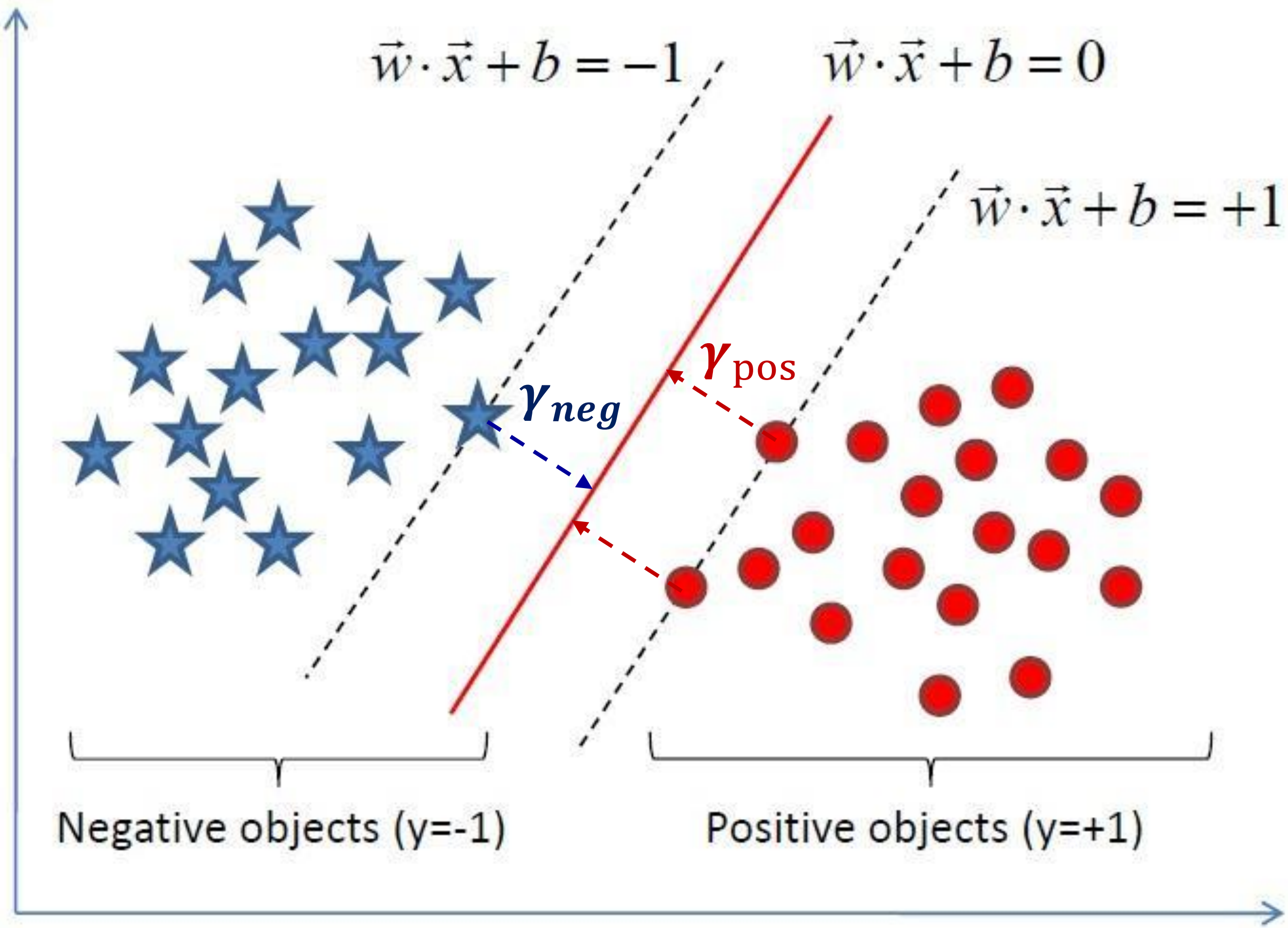
定义数据集 $\{(\boldsymbol{x_i}, \boldsymbol{y_i})\}_{\boldsymbol{i=1}}^{\boldsymbol{n}}$ 关于直线 $\boldsymbol{y} = \boldsymbol{w}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{x} + \boldsymbol{b}$ 的间隔为：

$$\boldsymbol{\gamma} = \min_{i=1,\dots,n} \boldsymbol{\gamma_i}$$

$\boldsymbol{\gamma}$ 表示所有数据点到直线的最短距离。

间隔（Margin）

- SVM思想——最大化分类间隔$\gamma = \gamma_{neg} = \gamma_{pos}$



间隔最大化（Maximum Margin）

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

$$\text{s.t.} \quad \frac{y_i(w^{\mathrm{T}} x_i + b)}{\|w\|} \geq \gamma$$

我们希望找到最大的分类间隔 γ，使得对于所有数据点$\{(x_i, y_i)\}_{i=1}^{n}$到超平面的距离至少是 γ。

问题：给定数据点和直线，γ可以被唯一确定，换句话说 γ 仅依赖于变量 w, b 的选择。能否把 γ 消去？

支持向量机

为了便于求解，可以对$\boldsymbol{w}, \boldsymbol{b}$进行适当缩放，使得 $\boldsymbol{\gamma} = \frac{\mathbf{1}}{\|\boldsymbol{w}\|}$，进而使得所有样本点满足$\boldsymbol{y}_{\boldsymbol{i}}(\boldsymbol{w}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{x}_{\boldsymbol{i}} + \boldsymbol{b}) \geq \mathbf{1}$，

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

$$\mathbf{s.t.} \quad \boldsymbol{y}_{\boldsymbol{i}}(\boldsymbol{w}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{x}_{\boldsymbol{i}} + \boldsymbol{b}) \geq \mathbf{1}$$

等价于

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

$$\mathbf{s.t.} \quad \boldsymbol{y}_{\boldsymbol{i}}(\boldsymbol{w}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{x}_{\boldsymbol{i}} + \boldsymbol{b}) \geq \mathbf{1}$$

支持向量机

支持向量机（**Support Vector Machine**）

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

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

- **满足 $\boldsymbol{y_i}(\boldsymbol{w}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{x_i} + \boldsymbol{b}) = \mathbf{1}$ 的样本被称为支持向量。**
- **SVM是一个凸的带不等式约束的凸二次规划问题。**

支持向量

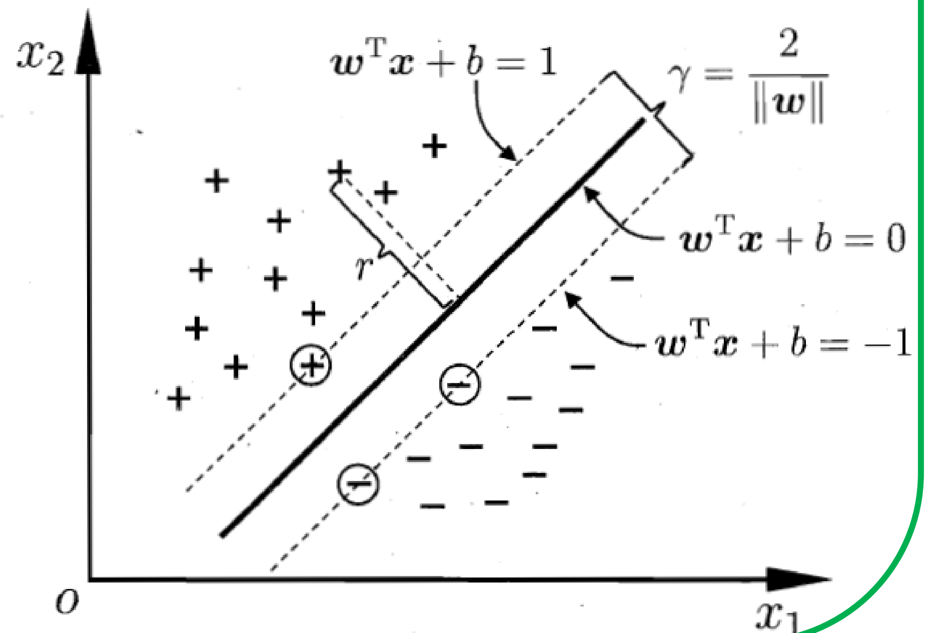
分离超平面：$\boldsymbol{w}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{x}+\boldsymbol{b}=\mathbf{0}$

间隔边界：$\boldsymbol{w}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{x}+\boldsymbol{b}=\pm\mathbf{1}$

支持向量：

$\boldsymbol{y}_i(\boldsymbol{w}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{x}_i+\boldsymbol{b})-\mathbf{1}=0$

- 在间隔边界上。



支持向量机小结

支持向量机的基本思想是寻找两类样本之间最中间的超平面。

支持向量机的目的是使划分平面对于样本的扰动容忍性好。

逻辑回归算法是基于全部样本的二分类器：考虑全部样本的平均似然性。--任课教师

支持向量机算法是基于部分样本的二分类器：考虑部分靠近边界的支持向量。--辅导员

6.2　拉格朗日乘子法

拉格朗日乘子法

考虑约束优化问题：

$$\min_{x\in\mathbb{R}^d} \quad f(x)$$

$$\text{s.t.} \quad g_i(x) \le 0 \qquad i = 1, \ldots, n$$

拉格朗日函数(Lagrange function)：

$$\mathcal{L}(x, \lambda) = f(x) + \sum_{i=1}^{n} \lambda_i g_i(x)$$

其中 $\lambda_i \ge 0$ 是拉格朗日乘子(Lagrange multiplier).

拉格朗日乘子法

约束优化问题：

$$\min_{\boldsymbol{x}\in\mathbb{R}^d} \boxed{\boldsymbol{f}(\boldsymbol{x}) \quad \mathbf{s.t.} \quad \boldsymbol{g_i}(\boldsymbol{x}) \le \mathbf{0} \qquad \boldsymbol{i} = \mathbf{1}, \ldots, \boldsymbol{n}}$$

红框内模型等价于下列极大问题的解：

$$\max_{\boldsymbol{\lambda}\ge 0} \mathcal{L}(\boldsymbol{x},\boldsymbol{\lambda}) = \boldsymbol{f}(\boldsymbol{x}) + \sum_{\boldsymbol{i}=\mathbf{1}}^{\boldsymbol{n}} \boldsymbol{\lambda_i}\, \boldsymbol{g_i}(\boldsymbol{x})$$

若对于某个 $\boldsymbol{i}$， $\boldsymbol{g_i}(\boldsymbol{x}) > \mathbf{0}$, 则 $\max\limits_{\boldsymbol{\lambda}\in\mathbb{R}^{\boldsymbol{m}}} \mathcal{L}(\boldsymbol{x},\boldsymbol{\lambda}) = +\infty$

若对于所有 $\boldsymbol{i}$， $\boldsymbol{g_i}(\boldsymbol{x}) \le \mathbf{0}$, 则 $\max\limits_{\boldsymbol{\lambda}\in\mathbb{R}^{\boldsymbol{m}}} \mathcal{L}(\boldsymbol{x},\boldsymbol{\lambda}) = \boldsymbol{f}(\boldsymbol{x})$

$$\min\ \max_{\boldsymbol{\lambda}\ge 0} \mathcal{L}(\boldsymbol{x},\boldsymbol{\lambda}) := \min\big(+\infty, \boldsymbol{f}(\boldsymbol{x})\big) = \boldsymbol{f}(\boldsymbol{x})$$

拉格朗日乘子法

约束优化问题：

$$\min_{\boldsymbol{x}\in\mathbb{R}^d} \quad \boldsymbol{f}(\boldsymbol{x})$$

$$\textbf{s.t.} \quad \boldsymbol{g_i}(\boldsymbol{x}) \leq \boldsymbol{0} \qquad \boldsymbol{i} = \boldsymbol{1}, \dots, \boldsymbol{n}$$

等价于极大极小问题：

$$\min_{\boldsymbol{x}\in\mathbb{R}^d} \max_{\boldsymbol{\lambda}\geq 0} \mathcal{L}(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{\lambda})$$

其中：$\mathcal{L}(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{\lambda}) = \boldsymbol{f}(\boldsymbol{x}) + \sum_{\boldsymbol{i}=\boldsymbol{1}}^{\boldsymbol{n}} \boldsymbol{\lambda_i} \boldsymbol{g_i}(\boldsymbol{x})$

拉格朗日乘子法

极大极小问题（Primal Problem）：

$$\boldsymbol{p} = \min_{\boldsymbol{x}\in\mathbb{R}^{\boldsymbol{d}}} \max_{\boldsymbol{\lambda}\geq 0} \mathcal{L}(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{\lambda})$$

极小极大问题（Dual Problem）：

$$\boldsymbol{d} = \max_{\boldsymbol{\lambda}\geq 0} \min_{\boldsymbol{x}\in\mathbb{R}^{\boldsymbol{d}}} \mathcal{L}(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{\lambda})$$

其中P问题的最优解和D问题的最优解成对出现

拉格朗日乘子法

原问题和对偶问题等价的充分必要条件被称作KKT条件（ Karush-Kuhn-Tucher）：

$$\begin{cases} \nabla_x \mathcal{L}(x, \lambda) = 0 \\ \lambda^{\mathrm{T}} g(x) = 0 \\ \lambda \geq 0 \\ g(x) \leq 0 \end{cases}$$

拉格朗日乘子法小结

- 拉格朗日乘子法是求解约束优化问题常用的方法之一，其基本思想是求解与之等价的无约束对偶问题。
- 较之原问题来说，对偶问题可能更方便求解
- 较之原问题来说，对偶问题也可能更有意义

6.3 SVM对偶模型

支持向量机

支持向量机（SVM）

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

$$\text{s.t.} \quad 1-\boldsymbol{y_i}(\boldsymbol{w}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{x_i}+\boldsymbol{b}) \leq 0 \quad \boldsymbol{i}=1,\dots,\boldsymbol{n}$$

- 变量: $\boldsymbol{w}=(\boldsymbol{w}_1,\boldsymbol{w}_2,\dots,\boldsymbol{w}_d)^{\mathrm{T}}$， $\boldsymbol{b}$
- 约束: n 个不等式约束。
- 数据：$\boldsymbol{x_i} \in \mathbb{R}^d$, $\boldsymbol{y_i} \in \{-1,1\}$ $\quad \boldsymbol{i}=1,\dots,\boldsymbol{n}$

对偶问题

极小极大问题（Dual Problem）：

$$\boldsymbol{d} = \max_{\boldsymbol{\lambda} \geq 0} \min_{\boldsymbol{w}, \boldsymbol{b}} \mathcal{L}(\boldsymbol{w}, \boldsymbol{b}, \boldsymbol{\lambda})$$

其中，

$$\mathcal{L}(\boldsymbol{w}, \boldsymbol{b}, \boldsymbol{\lambda}) = \frac{\mathbf{1}}{\mathbf{2}} \|\boldsymbol{w}\|^2 + \sum_{\boldsymbol{i}=\mathbf{1}}^{\boldsymbol{n}} \boldsymbol{\lambda}_{\boldsymbol{i}} \left(\mathbf{1} - \boldsymbol{y}_{\boldsymbol{i}}(\boldsymbol{w}^{\mathrm{T}} \boldsymbol{x}_{\boldsymbol{i}} + \boldsymbol{b})\right)$$

极小问题： $\min_{\boldsymbol{w},\boldsymbol{b}} \mathcal{L}(\boldsymbol{w},\boldsymbol{b},\boldsymbol{\lambda})$

$$\min_{\boldsymbol{w},\boldsymbol{b}} \frac{1}{2}\|\boldsymbol{w}\|^2 + \sum_{i=1}^{n} \lambda_i \left(1 - y_i(\boldsymbol{w}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{x}_i + b)\right)$$

$$\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \boldsymbol{w}} = \boldsymbol{w} - \sum_{i=1}^{n} \lambda_i y_i \boldsymbol{x}_i\,; \qquad \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial b} = -\sum_{i=1}^{n} \lambda_i y_i$$

$$\boldsymbol{w} = \sum_{i=1}^{n} \lambda_i y_i \boldsymbol{x}_i; \qquad \sum_{i=1}^{n} \lambda_i y_i = 0$$

极小问题： $\min_{\boldsymbol{w},b} \mathcal{L}(\boldsymbol{w}, b, \boldsymbol{\lambda})$

把$\boldsymbol{w} = \sum_{i=1}^{n} \lambda_i y_i \boldsymbol{x}_i$代入拉格朗日函数有：

$$\min_{\boldsymbol{w},b} \mathcal{L}(\boldsymbol{w}, b, \boldsymbol{\lambda})$$

$$= \frac{1}{2}\|\boldsymbol{w}\|^2 + \sum_{i=1}^{n} \lambda_i \left(1 - y_i(\boldsymbol{w}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{x}_i + b)\right)$$

$$= \frac{1}{2}\left\|\sum_{i=1}^{n} \lambda_i y_i \boldsymbol{x}_i\right\|^2 + \sum_{i=1}^{n} \lambda_i \left[1 - y_i\left(\left(\sum_{j=1}^{n} \lambda_j y_j \boldsymbol{x}_j^{\mathrm{T}}\right)\boldsymbol{x}_i + b\right)\right]$$

$$= \sum_{i=1}^{n} \lambda_i - \frac{1}{2}\sum_{i=1}^{n}\sum_{j=1}^{n} \lambda_i \lambda_j y_i y_j \boldsymbol{x}_i^{\mathrm{T}} \boldsymbol{x}_j - \sum_{i=1}^{n} \lambda_i y_i b$$

$$= \sum_{i=1}^{n} \lambda_i - \frac{1}{2}\sum_{i=1}^{n}\sum_{j=1}^{n} \lambda_i \lambda_j y_i y_j \boldsymbol{x}_i^{\mathrm{T}} \boldsymbol{x}_j$$

极小极大问题

极小极大问题（Dual Problem）：

$$\boldsymbol{d} = \max_{\lambda \geq 0} \ \min_{\boldsymbol{w},\boldsymbol{b}} \mathcal{L}(\boldsymbol{w}, \boldsymbol{b}, \boldsymbol{\lambda})$$

把 $\min_{\boldsymbol{w},\boldsymbol{b}} \mathcal{L}(\boldsymbol{w}, \boldsymbol{b}, \lambda)$代入上述问题有

$$\max_{\lambda \geq 0} \ \sum_{i=1}^{n} \lambda_i - \frac{1}{2} \sum_{i=1}^{n} \sum_{j=1}^{n} y_i y_j \boldsymbol{x}_i^{\mathrm{T}} \boldsymbol{x}_j \lambda_i \lambda_j$$

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

对偶问题

SVM 对偶问题：

$$\min_{\lambda} \quad \frac{1}{2}\sum_{i=1}^{n}\sum_{j=1}^{n} y_i y_j x_i^{\mathrm{T}} x_j \lambda_i \lambda_j - \sum_{i=1}^{n} \lambda_i$$

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

$$\lambda_i \geq 0 \qquad i = 1, \ldots, n$$

变量： $\lambda = (\lambda_1, \lambda_2, \ldots, \lambda_n)^{\mathrm{T}}$

约束：1 个等式约束，n 个不等式约束。

数据： $x_i^{\mathrm{T}} x_j \in \mathbb{R}, \quad y_i y_j \in \{-1, 1\} \quad i = 1, \ldots, n$

KKT 条件

KKT 条件：

$$\begin{cases} w - \sum_{i=1}^{n} \lambda_i y_i x_i = 0 \\ \sum_{i=1}^{n} \lambda_i y_i = 0 \\ \lambda_i [y_i (w^{\mathrm{T}} x_i + b) - 1] = 0 \\ \lambda_i \geq 0 \\ y_i (w^{\mathrm{T}} x_i + b) - 1 \geq 0 \end{cases}$$

支持向量 $\lambda_i \neq 0$

对于任意的数据点 x_i，我们有 $\lambda_i = 0$ 或者 $y_i(w^{\mathrm{T}}x_i + b) - 1 = 0$.

- $\lambda_i = 0$：

  对偶问题中变量 λ_i 不在求和中出现。

- $y_i(w^{\mathrm{T}}x_i + b) - 1 = 0$：

  x_i 是一个支持向量，$b = y_i - w^{\mathrm{T}}x_i$

求解分类平面

SVM 对偶问题：

$$\min_{\lambda} \quad \frac{1}{2}\sum_{i=1}^{n}\sum_{j=1}^{n} y_i y_j x_i^{\mathrm{T}} x_j \lambda_i \lambda_j - \sum_{i=1}^{n} \lambda_i$$

$$\mathrm{s.t.} \quad \sum_{i=1}^{n} \lambda_i y_i = 0$$

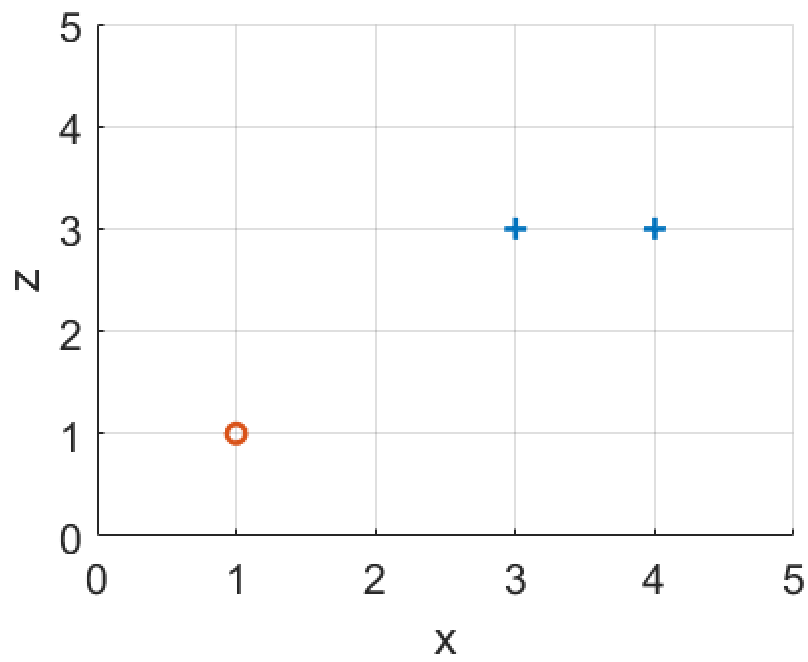
$$\lambda_i \geq 0 \qquad i = 1, \dots, n$$

$$w = \sum_{i=1}^{n} \lambda_i y_i x_i, \qquad b = y_j - w^{\mathrm{T}} x_j$$

$$f(x) = w^{\mathrm{T}} x + b = \left(\sum_{i=1}^{n} \lambda_i y_i x_i^{\mathrm{T}}\right)(x - x_j) + y_j$$

例子

假设正例点是 $\boldsymbol{x}_1=(3,3)^{\mathrm{T}}$, $\boldsymbol{x}_2=(4,3)^{\mathrm{T}}$, 负例点是 $\boldsymbol{x}_3=(1,1)^{\mathrm{T}}$。试利用支持向量机算法求出分类超平面。



例子

解：$x_1=(3,3)^{\mathrm{T}}, x_2=(4,3)^{\mathrm{T}}$， $x_3=(1,1)^{\mathrm{T}}$。

$y_1=1,\qquad y_2=1,\qquad y_3=-1$。

计算向量内积，

$$K=\begin{pmatrix} K_{11} & K_{12} & K_{13} \\ K_{21} & K_{22} & K_{23} \\ K_{31} & K_{32} & K_{33} \end{pmatrix}=\begin{pmatrix} 18 & 21 & 6 \\ 21 & 25 & 7 \\ 6 & 7 & 2 \end{pmatrix}$$

计算目标函数，

$$\sum_{i=1}^{n}\sum_{j=1}^{n} y_i y_j x_i^{\mathrm{T}} x_j \lambda_i \lambda_j$$

$$=18\lambda_1^2+25\lambda_2^2+2\lambda_3^2+42\lambda_1\lambda_2-12\lambda_1\lambda_3-14\lambda_2\lambda_3$$

例子

$$\min_{\lambda}\ 9\lambda_1^2+\frac{25}{2}\lambda_2^2+\lambda_3^2+21\lambda_1\lambda_2-6\lambda_1\lambda_3-7\lambda_2\lambda_3-\sum_{i=1}^{3}\lambda_i$$

$$\text{s.t.}\quad \lambda_1+\lambda_2-\lambda_3=0,\quad \lambda_i\geq 0\quad i=1,\dots,3$$

令 $\lambda_3=\lambda_1+\lambda_2$，代入上式有

$$\min_{\lambda}\ 4\lambda_1^2+\frac{13}{2}\lambda_2^2+10\lambda_1\lambda_2-2\lambda_1-2\lambda_2$$

$$\text{s.t.}\quad \lambda_i\geq 0\quad i=1,2$$

例子

二次规划问题：

$$\min_{\lambda} \quad 4\lambda_1^2 + \frac{13}{2}\lambda_2^2 + 10\lambda_1\lambda_2 - 2\lambda_1 - 2\lambda_2$$

$$\text{s.t.} \qquad \lambda_i \geq 0 \qquad i = 1, 2$$

目标函数分别对 λ_1 和 λ_2 求导有

$$8\lambda_1 + 10\lambda_2 - 2 = 0 \qquad 10\lambda_1 + 13\lambda_2 - 2 = 0$$

求解得到： $\lambda_1 = \frac{3}{2}, \quad \lambda_2 = -1$

此时 λ_2 不满足约束，最优解在边界出取得。

例子

当 $\lambda_1=0$，$\lambda_2=\frac{2}{13}$，目标函数值是 $-\frac{2}{13}$。

当 $\lambda_2=0$，$\lambda_1=\frac{1}{4}$，目标函数值是 $-\frac{1}{4}$。

当 $\lambda_2=0$，$\lambda_1=\frac{1}{4}$ 时取得最小值，$\lambda_3=\lambda_1+\lambda_2=\frac{1}{4}$

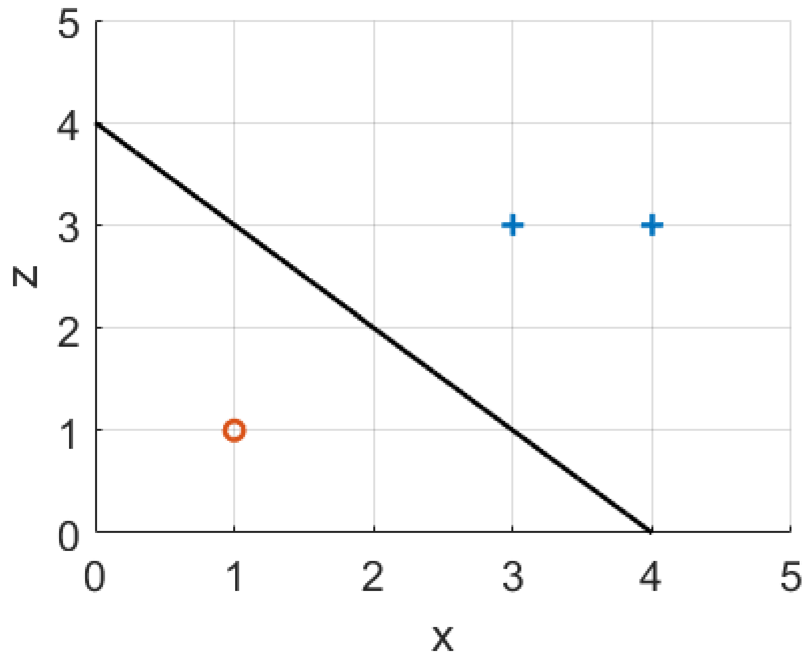
$$w=\sum_{i=1}^{n}\lambda_i y_i x_i=\frac{1}{4}x_1+0-\frac{1}{4}x_3=(\frac{1}{2},\frac{1}{2})^{\mathrm{T}}$$

$$b=y_j-\sum_{i=1}^{n}\lambda_i y_i x_i^{\mathrm{T}} x_j=1-\frac{1}{4}\times 18+\frac{1}{4}\times 6=-2$$

分离超平面为：$\frac{1}{2}x+\frac{1}{2}z-2=0$

例子

假设正例点是 $\boldsymbol{x}_1 = (3,3)^{\mathrm{T}}$, $\boldsymbol{x}_2 = (4,3)^{\mathrm{T}}$, 负例点是 $\boldsymbol{x}_3 = (1,1)^{\mathrm{T}}$。试利用支持向量机算法求出分类超平面。



原始问题?

假设正例点是 $\boldsymbol{x}_1=(3,3)^{\mathrm{T}}$, $\boldsymbol{x}_2=(4,3)^{\mathrm{T}}$, 负例点是 $\boldsymbol{x}_3=(1,1)^{\mathrm{T}}$。试利用支持向量机算法求出分类超平面。

$$\min_{w,b} \quad \frac{1}{2}(w_1^2+w_2^2)$$

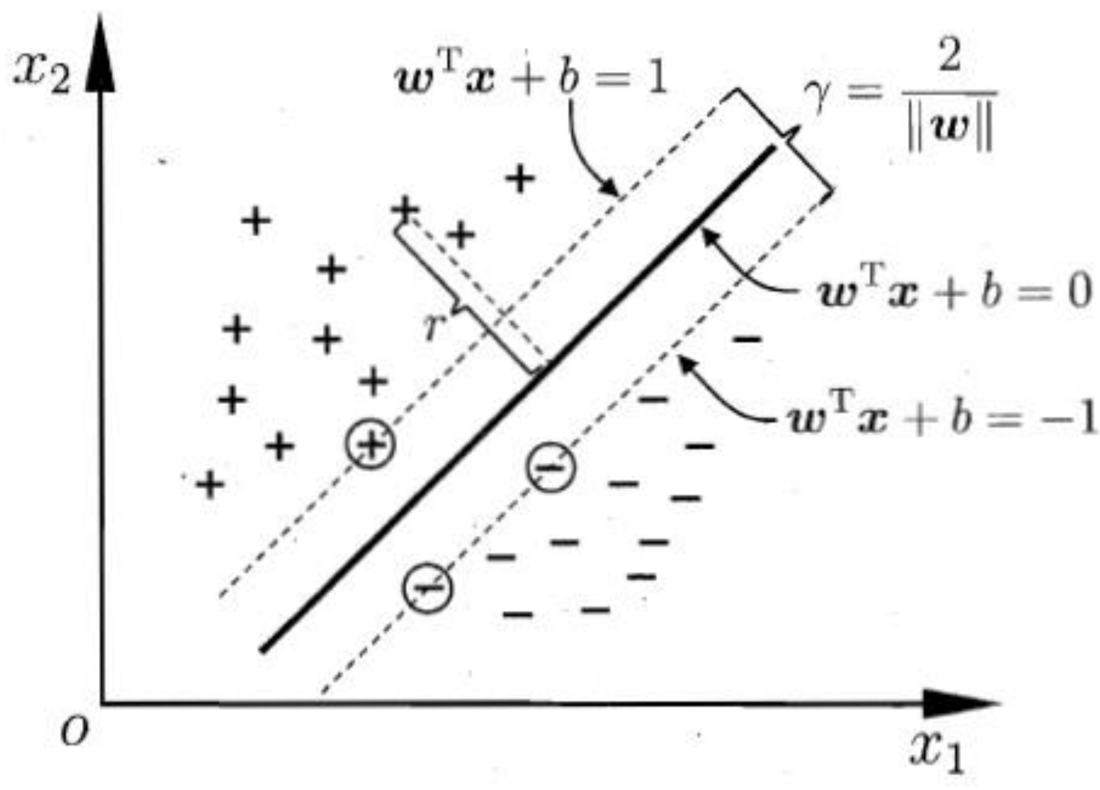
$$\begin{aligned}
\text{s.t.} \quad & 1-(3w_1+3w_2+b)\le 0\\
& 1-(4w_1+3w_2+b)\le 0\\
& 1+(\ w_1+\ w_2+b)\le 0
\end{aligned}$$

SVM对偶模型小结

- 我们可以利用拉格朗日乘子法得到SVM的对偶模型。
- 对偶模型更能反映该问题的特点，只有支持向量才对优化问题起作用。
- 求解对偶模型的比求解原问题简单，计算复杂度更低。

6.4 软间隔SVM

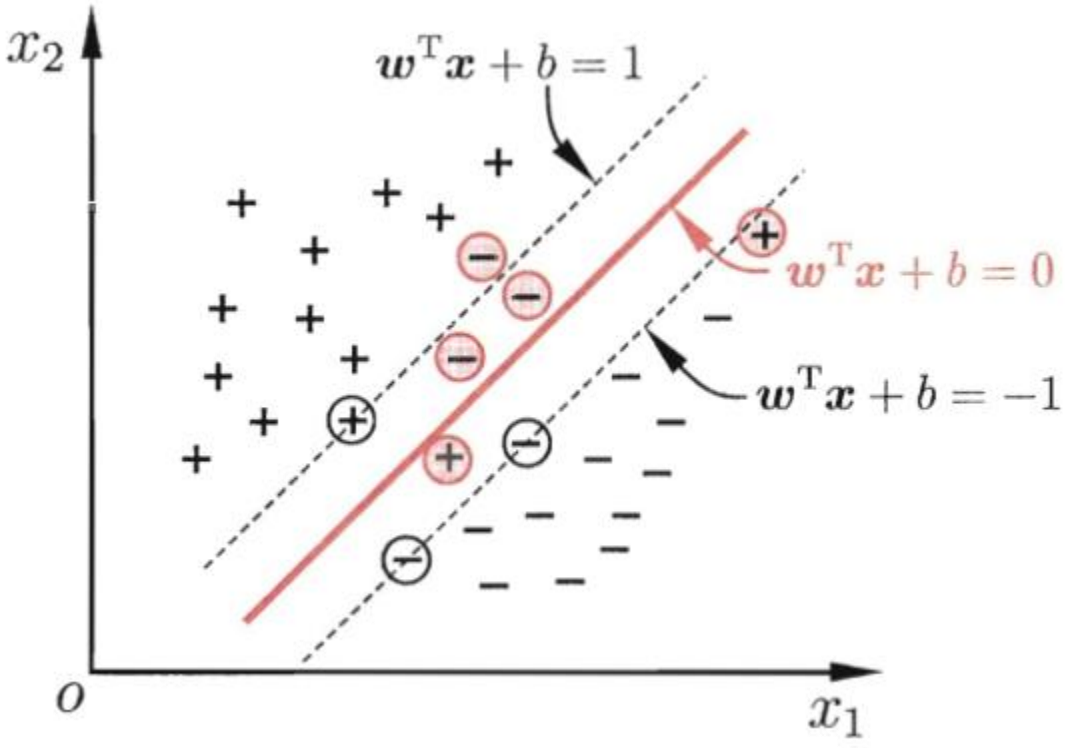
SVM图例



x_2
$\boldsymbol{w}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{x} + b = 1$
$\gamma = \frac{2}{\|\boldsymbol{w}\|}$
r
$\boldsymbol{w}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{x} + b = 0$
$\boldsymbol{w}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{x} + b = -1$
O
x_1

软间隔SVM

大部分数据线性可分，但存在一些outliers。



软间隔SVM

软间隔支持向量机（SVM）

$$\min_{\boldsymbol{w},\boldsymbol{b},\boldsymbol{\xi}} \frac{1}{2}\|\boldsymbol{w}\|^2 + \boldsymbol{C}\sum_{\boldsymbol{i}=1}^{\boldsymbol{n}} \boldsymbol{\xi}_{\boldsymbol{i}}$$

$$\mathbf{s.t.} \quad \boldsymbol{y}_{\boldsymbol{i}}(\boldsymbol{w}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{x}_{\boldsymbol{i}} + \boldsymbol{b}) \geq \mathbf{1} - \boldsymbol{\xi}_{\boldsymbol{i}} \quad \boldsymbol{i} = \mathbf{1}, \ldots, \boldsymbol{n}$$

$$\boldsymbol{\xi}_{\boldsymbol{i}} \geq 0 \qquad \boldsymbol{i} = \mathbf{1}, \ldots, \boldsymbol{n}$$

- 变量: $\boldsymbol{w}, \boldsymbol{b}, \boldsymbol{\xi}_{\boldsymbol{i}}$(松弛变量)
- 约束: 2n 个不等式约束。
- 数据： $\boldsymbol{x}_{\boldsymbol{i}} \in \mathbb{R}^{\boldsymbol{d}}$, $\boldsymbol{y}_{\boldsymbol{i}} \in \{-\mathbf{1}, \mathbf{1}\}$ $\quad \boldsymbol{i} = \mathbf{1}, \ldots, \boldsymbol{n}$

对偶问题

极小极大问题（Dual Problem）：

$$\boldsymbol{d} = \max_{\boldsymbol{\lambda},\boldsymbol{\mu}\geq 0} \min_{\boldsymbol{w},\boldsymbol{b},\boldsymbol{\xi}} \mathcal{L}(\boldsymbol{w},\boldsymbol{b},\boldsymbol{\xi},\boldsymbol{\lambda},\boldsymbol{\mu})$$

其中，

$$\mathcal{L}(\boldsymbol{w},\boldsymbol{b},\boldsymbol{\xi},\boldsymbol{\lambda},\boldsymbol{\mu})$$

$$= \frac{1}{2}\|\boldsymbol{w}\|^2 + \boldsymbol{C}\sum_{i=1}^{n}\xi_i - \sum_{i=1}^{n}\mu_i\,\xi_i$$

$$+ \sum_{i=1}^{n}\lambda_i\left(1 - \xi_i - y_i(\boldsymbol{w}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{x}_i + \boldsymbol{b})\right)$$

极小问题 $\min_{w,b,\xi} \mathcal{L}(w, b, \xi, \lambda, \mu)$

$$\min_{w,b,\xi} \quad \frac{1}{2}\|w\|^2 + C\sum_{i=1}^{n}\xi_i - \sum_{i=1}^{n}\mu_i\,\xi_i$$

$$+ \sum_{i=1}^{n}\lambda_i\left(1 - \xi_i - y_i(w^{\mathrm{T}}x_i + b)\right)$$

$$\frac{\partial\mathcal{L}}{\partial w} = w - \sum_{i=1}^{n}\lambda_i\,y_i x_i \quad \Longrightarrow \quad w = \sum_{i=1}^{n}\lambda_i\,y_i x_i$$

$$\frac{\partial\mathcal{L}}{\partial b} = -\sum_{i=1}^{n}\lambda_i\,y_i \quad \Longrightarrow \quad 0 = \sum_{i=1}^{n}\lambda_i\,y_i$$

$$\frac{\partial\mathcal{L}}{\partial \xi_i} = C - \lambda_i - \mu_i \quad \Longrightarrow \quad C = \lambda_i + \mu_i$$

极小问题 $\min_{\boldsymbol{w},\boldsymbol{b},\boldsymbol{\xi}} \mathcal{L}(\boldsymbol{w},\boldsymbol{b},\boldsymbol{\xi},\boldsymbol{\lambda},\boldsymbol{\mu})$

把$\boldsymbol{w} = \sum_{i=1}^{n} \lambda_i y_i \boldsymbol{x}_i$代入拉格朗日函数有：

$$\min_{\boldsymbol{w},\boldsymbol{b},\boldsymbol{\xi}} \mathcal{L}(\boldsymbol{w},\boldsymbol{b},\boldsymbol{\xi},\boldsymbol{\lambda},\boldsymbol{\mu})$$

$$= \frac{1}{2}\|\boldsymbol{w}\|^2 + C\sum_{i=1}^{n} \xi_i + \sum_{i=1}^{n} \lambda_i \left(1 - \xi_i - y_i(\boldsymbol{w}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{x}_i + b)\right) - \sum_{i=1}^{n} \mu_i \xi_i$$

$$= \sum_{i=1}^{n} \lambda_i - \frac{1}{2}\sum_{i=1}^{n}\sum_{j=1}^{n} y_i y_j \boldsymbol{x}_i^{\mathrm{T}} \boldsymbol{x}_j \lambda_i \lambda_j + \sum_{i=1}^{n}(C - \lambda_i - \mu_i)\,\xi_i$$

$$= \sum_{i=1}^{n} \lambda_i - \frac{1}{2}\sum_{i=1}^{n}\sum_{j=1}^{n} y_i y_j \boldsymbol{x}_i^{\mathrm{T}} \boldsymbol{x}_j \lambda_i \lambda_j$$

因此，SVM和软间隔SVM的对偶问题有相同的目标函数！

极小极大问题

极小极大问题（Dual Problem）：

$$\boldsymbol{d} = \max_{\boldsymbol{\lambda} \geq 0} \min_{\boldsymbol{w},\boldsymbol{b}} \mathcal{L}(\boldsymbol{w}, \boldsymbol{b}, \boldsymbol{\lambda})$$

把 $\min\limits_{\boldsymbol{w},\boldsymbol{b},\boldsymbol{\xi}} \mathcal{L}(\boldsymbol{w}, \boldsymbol{b}, \boldsymbol{\xi}, \boldsymbol{\lambda}, \boldsymbol{\mu})$代入上述问题有

$$\max_{\lambda,\mu \geq 0} \sum_{i=1}^{n} \lambda_i - \frac{1}{2} \sum_{i=1}^{n} \sum_{j=1}^{n} y_i y_j x_i^{\mathrm{T}} x_j \lambda_i \lambda_j$$

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

$$\lambda_i + \mu_i = C \qquad i = 1, \ldots, n$$

对偶问题

软间隔SVM 对偶问题：

$$\min_{\lambda} \quad \frac{1}{2}\sum_{i=1}^{n}\sum_{j=1}^{n} y_i y_j x_i^{\mathrm{T}} x_j \lambda_i \lambda_j - \sum_{i=1}^{n} \lambda_i$$

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

$$\lambda_i + \mu_i = C \qquad i = 1, \dots, n$$

$$\lambda_i \geq 0 \qquad i = 1, \dots, n$$

$$\mu_i \geq 0 \qquad i = 1, \dots, n$$

注意，后面三个条件等价于 $0 \leq \lambda_i \leq C$

对偶问题

软间隔SVM 对偶问题：

$$\min_{\lambda} \quad \frac{1}{2}\sum_{i=1}^{n}\sum_{j=1}^{n} y_i y_j x_i^{\mathrm{T}} x_j \lambda_i \lambda_j - \sum_{i=1}^{n} \lambda_i$$

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

$$0 \le \lambda_i \le C \qquad i = 1, \dots, n$$

变量：$\lambda = (\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_n)^{\mathrm{T}}$

约束：1 个等式约束，n 个不等式约束。

数据：$x_i^{\mathrm{T}} x_j \in \mathbb{R}, \quad y_i y_j \in \{-1, 1\} \quad i = 1, \dots, n$

KKT 条件

KKT 条件：

$$
\left\{\begin{array}{c}
\boldsymbol{w}-\sum \boldsymbol{\lambda}_i \boldsymbol{y}_i \boldsymbol{x}_i=\mathbf{0} \\
\sum \boldsymbol{\lambda}_i \boldsymbol{y}_i=\mathbf{0} \\
\boldsymbol{\lambda}_i+\boldsymbol{\mu}_i=\boldsymbol{C} \\
\boldsymbol{\lambda}_i\left(\boldsymbol{y}_i(\boldsymbol{w}^{\mathrm{T}} \boldsymbol{x}_i+\boldsymbol{b})-\mathbf{1}+\boldsymbol{\xi}_i\right)=\mathbf{0} \\
\boldsymbol{\mu}_i \boldsymbol{\xi}_i=\mathbf{0} \\
\boldsymbol{\lambda}_i \geq \mathbf{0} \\
\boldsymbol{\mu}_i \geq \mathbf{0} \\
\boldsymbol{y}_i(\boldsymbol{w}^{\mathrm{T}} \boldsymbol{x}_i+\boldsymbol{b})-\mathbf{1}+\boldsymbol{\xi}_i \geq \mathbf{0} \\
\boldsymbol{\xi}_i \geq \mathbf{0}
\end{array}\right.
\Rightarrow
\left\{\begin{array}{c}
\boldsymbol{w}-\sum \boldsymbol{\lambda}_i \boldsymbol{y}_i \boldsymbol{x}_i=\mathbf{0} \\
\sum \boldsymbol{\lambda}_i \boldsymbol{y}_i=\mathbf{0} \\
\boldsymbol{\lambda}_i\left(\boldsymbol{y}_i(\boldsymbol{w}^{\mathrm{T}} \boldsymbol{x}_i+\boldsymbol{b})-\mathbf{1}+\boldsymbol{\xi}_i\right)=\mathbf{0} \\
(\boldsymbol{C}-\boldsymbol{\lambda}_i) \boldsymbol{\xi}_i=\mathbf{0} \\
\mathbf{0} \leq \boldsymbol{\lambda}_i \leq \boldsymbol{C} \\
\boldsymbol{y}_i(\boldsymbol{w}^{\mathrm{T}} \boldsymbol{x}_i+\boldsymbol{b})-\mathbf{1}+\boldsymbol{\xi}_i \geq \mathbf{0} \\
\boldsymbol{\xi}_i \geq \mathbf{0}
\end{array}\right.
$$

支持向量

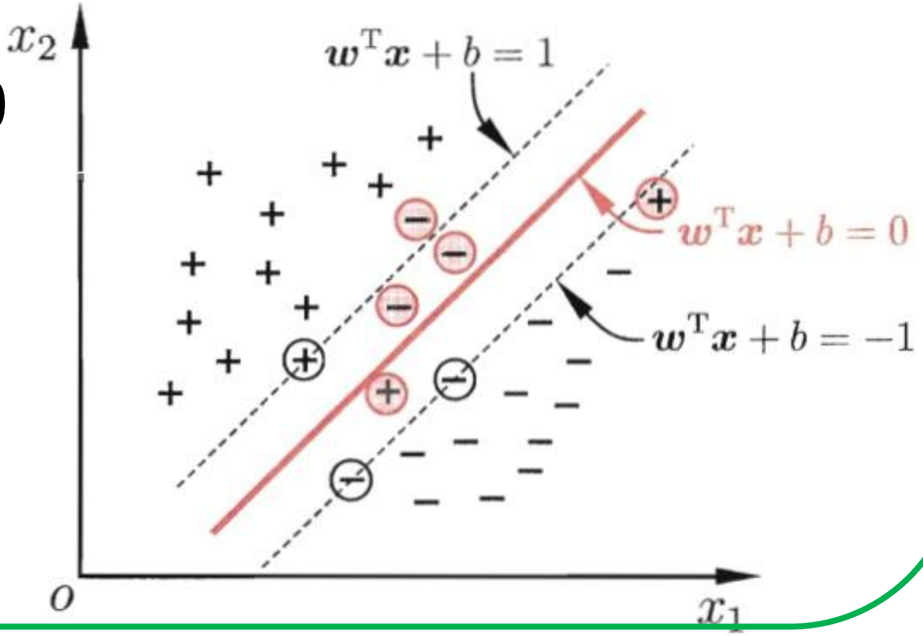
分离超平面：$\boldsymbol{w}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{x}+\boldsymbol{b}=\mathbf{0}$

间隔边界：　$\boldsymbol{w}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{x}+\boldsymbol{b}=\pm\mathbf{1}$

支持向量：

$\boldsymbol{y}_i(\boldsymbol{w}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{x}_i+\boldsymbol{b})-\mathbf{1}\leq 0$

- 间隔边界上。
- 间隔边界间。
- 分类错误点。



支持向量 $\lambda_i \neq 0$

- 若 $\lambda_i < C$，则 $\xi_i = 0, x_i$ 落在间隔边界上。
- 若 $\lambda_i = C$，$0 < \xi_i < 1$时，x_i 落在间隔边界和分离超平面之间。
- 若 $\lambda_i = C$，$\xi_i = 1$时, x_i 落在分离超平面上。
- 若 $\lambda_i = C$，$\xi_i > 1$时，x_i 落在分离超平面另外一侧。

当$C \to +\infty$时

支持向量机（SVM）

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

$$\text{s.t.} \quad y_i(w^{\mathrm{T}} x_i + b) \geq 1 \qquad i = 1, \dots, n$$

软间隔支持向量机（SVM）

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

$$\text{s.t.} \quad y_i(w^{\mathrm{T}} x_i + b) \geq 1 - \xi_i \quad i = 1, \dots, n$$

$$\xi_i \geq 0 \qquad i = 1, \dots, n$$

当$C \to +\infty$时

SVM 对偶问题：

$$\min_{\lambda} \quad \frac{1}{2}\sum_{i=1}^{n}\sum_{j=1}^{n} y_i y_j x_i^{\mathrm{T}} x_j \lambda_i \lambda_j - \sum_{i=1}^{n} \lambda_i$$

$$\mathrm{s.t.} \quad \sum_{i=1}^{n} \lambda_i y_i = 0$$

$$0 \le \lambda_i \le +\infty \quad i = 1, \ldots, n$$

软间隔SVM 对偶问题：

$$\min_{\lambda} \quad \frac{1}{2}\sum_{i=1}^{n}\sum_{j=1}^{n} y_i y_j x_i^{\mathrm{T}} x_j \lambda_i \lambda_j - \sum_{i=1}^{n} \lambda_i$$

$$\mathrm{s.t.} \quad \sum_{i=1}^{n} \lambda_i y_i = 0$$

$$0 \le \lambda_i \le C \quad i = 1, \ldots, n$$

软间隔SVM

软间隔支持向量机（SVM）

$$\min_{\boldsymbol{w},\boldsymbol{b},\boldsymbol{\xi}} \ \frac{1}{2}\|\boldsymbol{w}\|^2 + \boldsymbol{C}\sum_{i=1}^{n}\boldsymbol{\xi}_i$$

$$\text{s.t.} \ \ \boldsymbol{y}_i(\boldsymbol{w}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{x}_i + \boldsymbol{b}) \geq \mathbf{1} - \boldsymbol{\xi}_i \quad \boldsymbol{i} = \mathbf{1}, \ldots, \boldsymbol{n}$$

$$\xi_i \geq 0 \qquad \boldsymbol{i} = \mathbf{1}, \ldots, \boldsymbol{n}$$

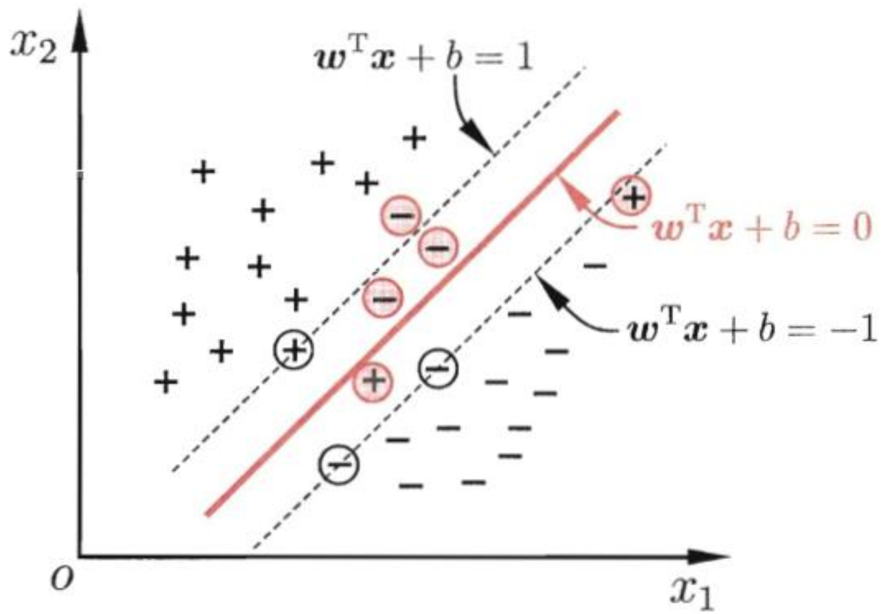
显然，$\xi_i \geq \max\left(\mathbf{0}, \mathbf{1} - \ \boldsymbol{y}_i(\boldsymbol{w}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{x}_i + \boldsymbol{b})\right)$

$$\min_{\boldsymbol{w},\boldsymbol{b}} \ \frac{\mathbf{1}}{\mathbf{2}}\|\boldsymbol{w}\|^2 + \boldsymbol{C}\sum_{i=1}^{n}[\mathbf{1} - \ \boldsymbol{y}_i(\boldsymbol{w}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{x}_i + \boldsymbol{b})]_+$$

软间隔SVM

$$\min_{w,b} \quad \frac{1}{2}\|w\|^2 + C\sum_{i=1}^{n}[1 - \ y_i(w^{\mathrm{T}}x_i + b)]_+$$

$[1 - \ y_i(w^{\mathrm{T}}x_i + b)]_+$：对支持向量$x_i$到其对应的间隔平面距离的惩罚。



软间隔SVM

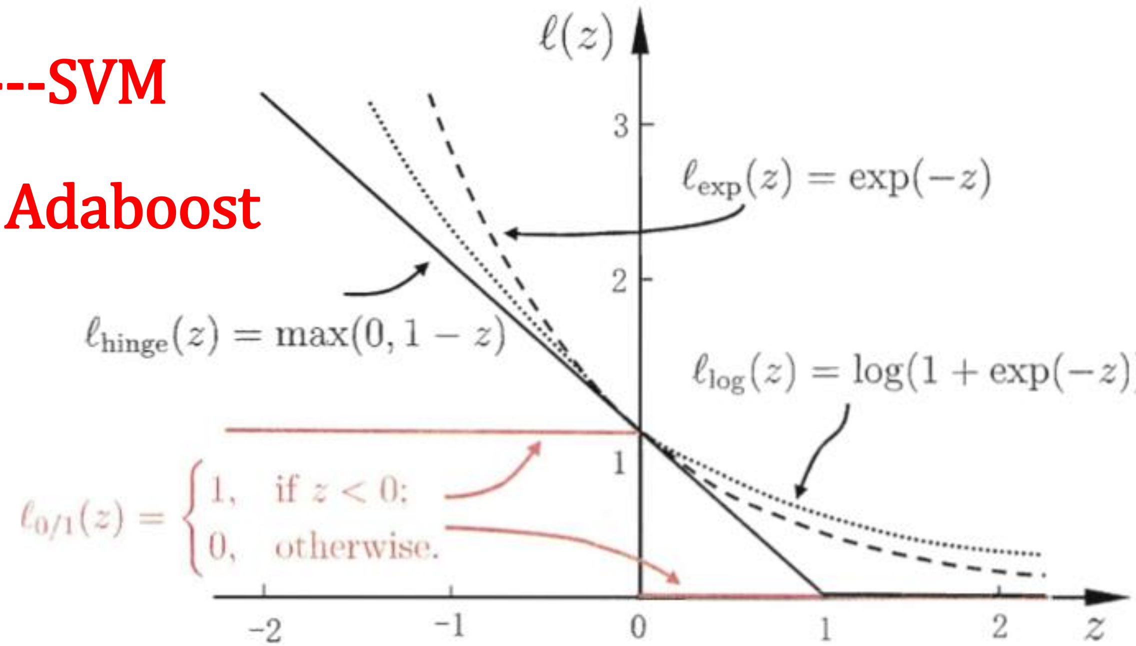
监督学习任务模型：

$$\min_{f} \sum_{i=1}^{n} \ell(f(x_i), y_i) + \alpha\Omega(f)$$

- $\ell(f(x_i), y_i)$为误差项，衡量预测值与真实值的误差。
- $\Omega(f)$为正则项，提供了关于f的先验信息，防止过拟合。
- α是正则参数，为了平衡两项的大小。

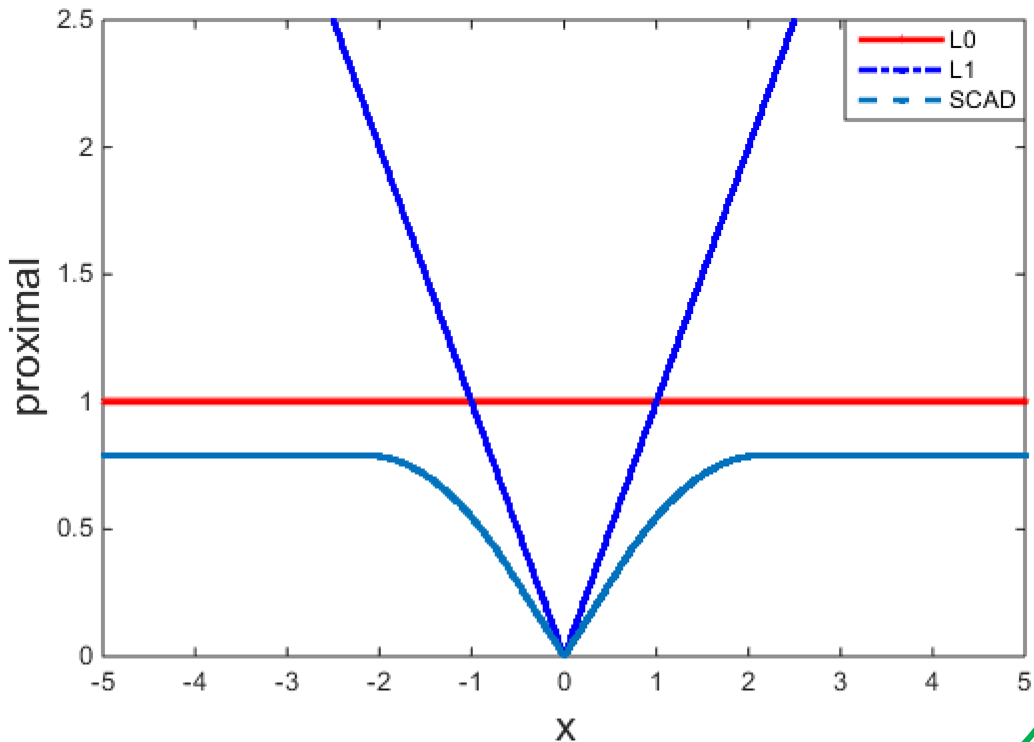
损失函数：$\ell(f(x_i), y_i)$

- 0/1 loss ---非凸非连续
- Log loss --- LR
- Hinge loss ---SVM
- Exp loss --- Adaboost



正则项 $\Omega(f)$

- L0 范数---$\|w\|_0$是w中非零元的个数
- L1 范数---$\|w\|_1 = \sum_j |w_j|$
- L2范数 ---凸连续
- SCAD函数



软间隔SVM小结

- 软间隔SVM可以对有outlier的数据分类。
- 软间隔SVM对偶模型与SVM对偶模型非常相似，可以用相同算法求解。
- 软间隔SVM模型可以看作是最小化hinge损失函数的正则化模型。
- 当参数C趋向无穷大时，软间隔SVM退化成普通的SVM。

6.5 SMO算法

SMO算法

SMO(Sequential Minimal Optimization):

$$\min_{\lambda} \quad \frac{1}{2}\sum_{i=1}^{n}\sum_{j=1}^{n} y_i y_j x_i^{\mathrm{T}} x_j \lambda_i \lambda_j - \sum_{i=1}^{n} \lambda_i$$

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

$$0 \le \lambda_i \le C \qquad i = 1, \dots, n$$

SMO的两个部分：

- 解析地求解两个变量二次规划问题。
- 启发式地选择变量。

SMO算法

固定其他变量，仅考虑 λ_i 和 λ_j 时，目标函数：

$$\frac{1}{2}\sum_{i=1}^{n}\sum_{j=1}^{n} y_i y_j \boldsymbol{x}_i^{\mathrm{T}} \boldsymbol{x}_j \lambda_i \lambda_j - \sum_{i=1}^{n} \lambda_i$$

$$= \frac{1}{2}(\boldsymbol{x}_i^{\mathrm{T}} \boldsymbol{x}_i)\lambda_i^2 + \frac{1}{2}\left(\boldsymbol{x}_j^{\mathrm{T}} \boldsymbol{x}_j\right)\lambda_j^2 + \left(y_i y_j \boldsymbol{x}_i^{\mathrm{T}} \boldsymbol{x}_j\right)\lambda_i\lambda_j - \lambda_i$$

$$- \lambda_j + \left(\sum_{k\neq i,j}^{n} y_i y_k \boldsymbol{x}_i^{\mathrm{T}} \boldsymbol{x}_k \lambda_k\right)\lambda_i + \left(\sum_{k\neq i,j}^{n} y_j y_k \boldsymbol{x}_j^{\mathrm{T}} \boldsymbol{x}_k \lambda_k\right)\lambda_j$$

约束：

$$y_i\lambda_i + y_j\lambda_j = -\sum_{k\neq i,j}^{n} y_k\lambda_k,$$

SMO算法

$$\min_{\lambda_i,\lambda_j} \quad \frac{1}{2}K_{ii}\lambda_i^2 + \frac{1}{2}K_{jj}\lambda_j^2 + c_{ij}\lambda_i\lambda_j + c_i\lambda_i + c_j\lambda_j$$

$$\text{s.t.} \quad y_i\lambda_i + y_j\lambda_j = c, \qquad 0 \le \lambda_i, \lambda_j \le C$$

其中:

$$K_{ii} = x_i^{\mathrm{T}} x_i \qquad K_{jj} = x_j^{\mathrm{T}} x_j$$

$$c_{ij} = y_i y_j K_{ij} \qquad \mathrm{c} = -\sum_{k\neq i,j}^{n} y_k\lambda_k$$

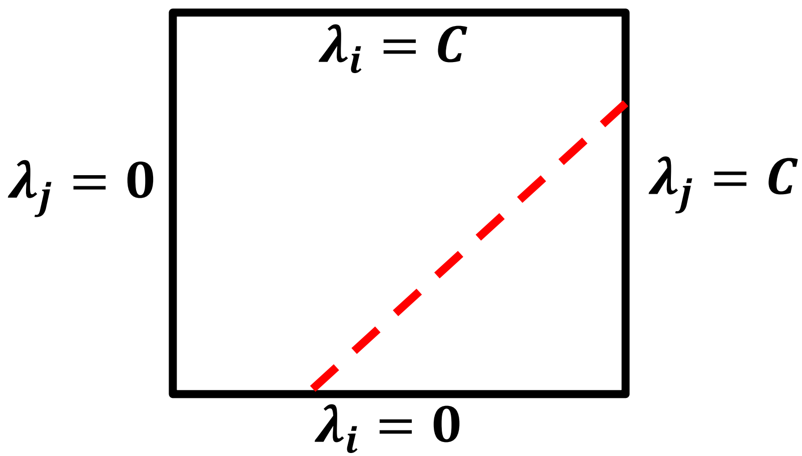
$$c_i = \sum_{k\neq i,j}^{n} y_i y_k x_i^{\mathrm{T}} x_k \lambda_k - 1 \quad c_j = \sum_{k\neq i,j}^{n} y_j y_k x_j^{\mathrm{T}} x_k \lambda_k - 1$$

SMO算法

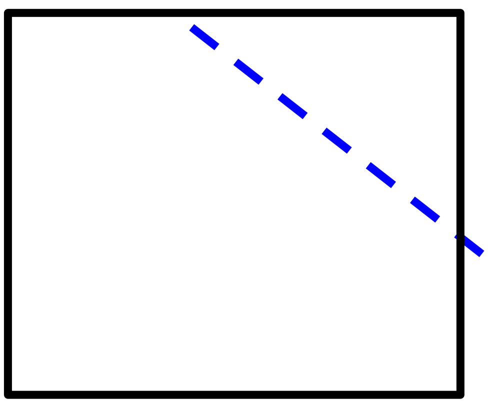
$$\min_{\lambda_i,\lambda_j} \quad \frac{1}{2}K_{ii}\lambda_i^2 + \frac{1}{2}K_{jj}\lambda_j^2 + c_{ij}\lambda_i\lambda_j + c_i\lambda_i + c_j\lambda_j$$

$$\mathbf{s.t.} \quad y_i\lambda_i + y_j\lambda_j = c, \qquad 0 \le \lambda_i, \lambda_j \le C$$

约束：



$y_i \neq y_j \Rightarrow \lambda_i - \lambda_j = c$



$y_i = y_j \Rightarrow \lambda_i + \lambda_j = c$

SMO算法

$$\min_{\lambda_i,\lambda_j} \quad \frac{1}{2}K_{ii}\lambda_i^2 + \frac{1}{2}K_{jj}\lambda_j^2 + c_{ij}\lambda_i\lambda_j + c_i\lambda_i + c_j\lambda_j$$

$$\text{s.t.} \quad y_i\lambda_i + y_j\lambda_j = c\,, \qquad 0 \le \lambda_i, \lambda_j \le C$$

- 令 $\lambda_j = y_j(c - y_i\lambda_i)$ 代入上述方程，求解关于 λ_i 的单变量二次优化问题。

$$\min_{0\le\lambda_i\le C} \quad \frac{1}{2}K_{ii}\lambda_i^2 + \frac{1}{2}K_{jj}(c - y_i\lambda_i)^2 + c_{ij}\lambda_i y_j(c - y_i\lambda_i) + c_i\lambda_i + c_j y_j(c - y_i\lambda_i)$$

- 并验证 $\lambda_j = y_j(c - y_i\lambda_i)$ 是否在区间$[0, C]$,否则最小值在边界处求得。

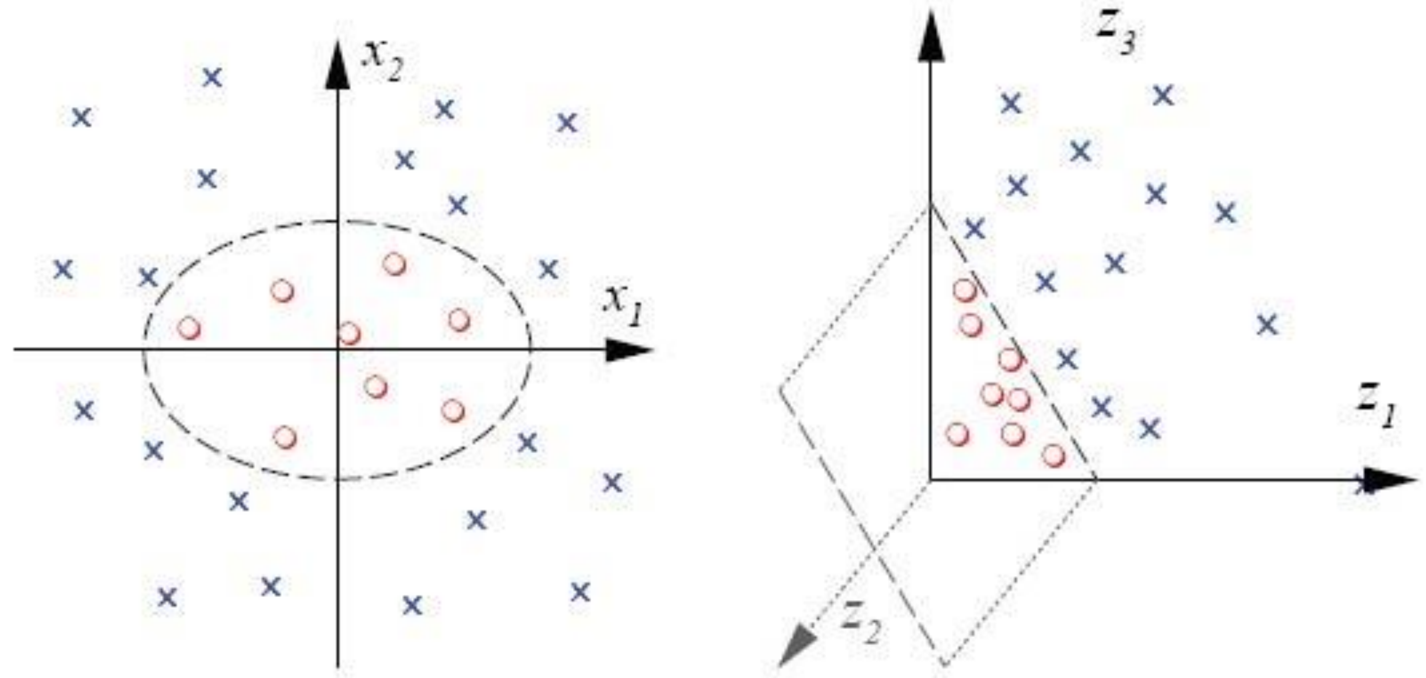
SMO算法小结

- 序列极小化优化算法（SMO）是求解SVM模型最高效的算法。
- SMO每次迭代解两个变量的二次优化问题，其最优解可以显式表达。
- SMO利用了启发式算法根据数据点违反KKT条件的大小选取需要迭代的变量。

6.6 核化SVM

非线性SVM

非线性可分数据：



解决方案

对于非线性可分的数据$\{x_i\}_{i=1}^{n}$，尝试找到一个非线性映射 ϕ，使得数据$\{\phi(x_i)\}_{i=1}^{n}$在新的空间（通常为高维空间）是线性可分的，然后再使用线性SVM进行分类。

椭圆方程： $w_1(x^{(1)})^2+w_2(x^{(2)})^2+b=0$

直线方程： $w_1x^{(1)}+w_2x^{(2)}+b=0$

特征空间SVM

支持向量机（SVM）

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

$$\text{s.t.} \quad 1 - y_i(\boldsymbol{w}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{\phi}(\boldsymbol{x}_i) + b) \le 0 \qquad i = 1, \dots, n$$

SVM 对偶问题：

$$\min_{\boldsymbol{\lambda}} \quad \frac{1}{2}\sum_{i=1}^{n}\sum_{j=1}^{n} y_i y_j \boldsymbol{\phi}(\boldsymbol{x}_i)^T \boldsymbol{\phi}(\boldsymbol{x}_j)\lambda_i \lambda_j - \sum_{i=1}^{n}\lambda_i$$

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

$$\lambda_i \ge 0 \qquad i = 1, \dots, n$$

核技巧（Kernel Trick）

然而，对于任意给定数据寻找合适的非线性映射 $\boldsymbol{\phi}$ 是不现实的，而且内积$\boldsymbol{\phi}(\boldsymbol{x}_i)^{\mathrm{T}}\boldsymbol{\phi}(\boldsymbol{x}_j)$的计算代价太大。

定义核函数（**Kernel Function**）：

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

这样，$\boldsymbol{\phi}$ 可以隐式地由核函数表示出来，而且内积的计算也变得更加容易。

特征空间SVM

SVM 对偶问题：

$$\min_{\lambda} \quad \frac{1}{2}\sum_{i=1}^{n}\sum_{j=1}^{n} y_i y_j \kappa(x_i, x_j)\lambda_i \lambda_j - \sum_{i=1}^{n} \lambda_i$$

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

$$\lambda_i \geq 0 \qquad i = 1, \ldots, n$$

分割超平面：

$$f(x) = w^{\mathrm{T}}\phi(x) + b = \sum_{i=1}^{n} \lambda_i y_i \phi(x_i)^{\mathrm{T}}\phi(x) + b$$

$$= \sum_{i=1}^{n} \lambda_i y_i \kappa(x, x_i) + b$$

如何选择核函数

定理6.1（核函数） 令 χ 为输入空间，$\boldsymbol{\kappa}(\cdot,\cdot)$是定义在 $\chi \times \chi$上的对称函数，则 $\boldsymbol{\kappa}$ 是核函数当且仅当对于任意数据 $D=\{\boldsymbol{x}_1, \boldsymbol{x}_2, \ldots, \boldsymbol{x}_n\}$，核矩阵**(Kernel matrix)** $\boldsymbol{K}$ 总是半正定的**:**

$$\boldsymbol{K} = \begin{bmatrix} \boldsymbol{\kappa}(\boldsymbol{x}_1, \boldsymbol{x}_1) & \cdots & \boldsymbol{\kappa}(\boldsymbol{x}_1, \boldsymbol{x}_n) \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ \boldsymbol{\kappa}(\boldsymbol{x}_n, \boldsymbol{x}_1) & \cdots & \boldsymbol{\kappa}(\boldsymbol{x}_n, \boldsymbol{x}_n) \end{bmatrix}$$

- 给定核函数 $\boldsymbol{\kappa}$，其对应的核矩阵$\boldsymbol{K}$是对称半正定的
- 给定核矩阵$\boldsymbol{K}$，总能找到一个与之对应的核函数$\boldsymbol{\kappa}$

核函数

常见的核函数（核矩阵对称半正定）：

名称	表达式
线性核	$\boldsymbol{\kappa}(\boldsymbol{x}_i, \boldsymbol{x}_j) = \boldsymbol{x}_i^{\mathrm{T}} \boldsymbol{x}_j$
多项式核	$\boldsymbol{\kappa}(\boldsymbol{x}_i, \boldsymbol{x}_j) = (\boldsymbol{x}_i^{\mathrm{T}} \boldsymbol{x}_j)^d$
高斯核	$\boldsymbol{\kappa}(\boldsymbol{x}_i, \boldsymbol{x}_j) = \exp(-\frac{\lVert \boldsymbol{x}_i - \boldsymbol{x}_j \rVert^2}{2\sigma^2})$
拉普拉斯核	$\boldsymbol{\kappa}(\boldsymbol{x}_i, \boldsymbol{x}_j) = \exp(-\frac{\lVert \boldsymbol{x}_i - \boldsymbol{x}_j \rVert}{\sigma})$
Sigmoid 核	$\boldsymbol{\kappa}(\boldsymbol{x}_i, \boldsymbol{x}_j) = \tanh(\beta \boldsymbol{x}_i^T \boldsymbol{x}_j + \theta)$

核函数

- 若 κ_1 和 κ_2 为核函数，则对于任意正数γ_1、γ_2，其线性组合

$$\gamma_1\kappa_1 + \gamma_2\kappa_2$$

也是核函数。

- 若 κ_1 和 κ_2 为核函数，则核函数的直积

$$\kappa_1 \otimes \kappa_2(x, z) = \kappa_1(x, z)\,\kappa_2(x, z)$$

也是核函数。

- 若κ_1为核函数，则对于任意函数g

$$\kappa(x, z) = g(x)\kappa_1(x, z)\,g(z)$$

也是核函数。

非线性SVM

对偶问题：

$$\min_{\lambda} \quad \frac{1}{2}\sum_{i=1}^{n}\sum_{j=1}^{n} y_i y_j \boldsymbol{x}_i^{\mathrm{T}} \boldsymbol{x}_j \lambda_i \lambda_j - \sum_{i=1}^{n} \lambda_i$$

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

$$0 \le \lambda_i \le C \qquad i = 1, \dots, n$$

非线性SVM

对偶问题：

$$\min_{\lambda} \quad \frac{1}{2}\sum_{i=1}^{n}\sum_{j=1}^{n} y_i y_j K_{ij} \lambda_i \lambda_j - \sum_{i=1}^{n} \lambda_i$$

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

$$0 \le \lambda_i \le C \qquad i = 1, \ldots, n$$

- Step 1: 选取合适的核函数，求出矩阵K。
- Step 2: 应用SMO算法求解对偶问题。

核化SVM小结

- 核技巧是处理非线性分布数据处理问题最常见的方法之一。
- 核技巧最早出线在SVM模型中，随后在许多机器学习领域都有应用。。
- 核化SVM的效果主要取决于核函数的选取。

6.7 支持向量回归

支持向量回归

- 线性回归问题：寻找最佳直线（超平面），使得预测值$f(x_i)$和真实标签的均方误差尽量小。
- 支持向量机思想：寻找最佳直线（超平面），使得数据点到直线的间隔尽可能的大。
- 如何结合两者呢？

支持向量回归

支持向量机（SVM）

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

$$\text{s.t.} \quad 1 - \boldsymbol{y_i}(\boldsymbol{w}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{x_i} + \boldsymbol{b}) \le 0 \quad \boldsymbol{i} = 1, \dots, \boldsymbol{n}$$

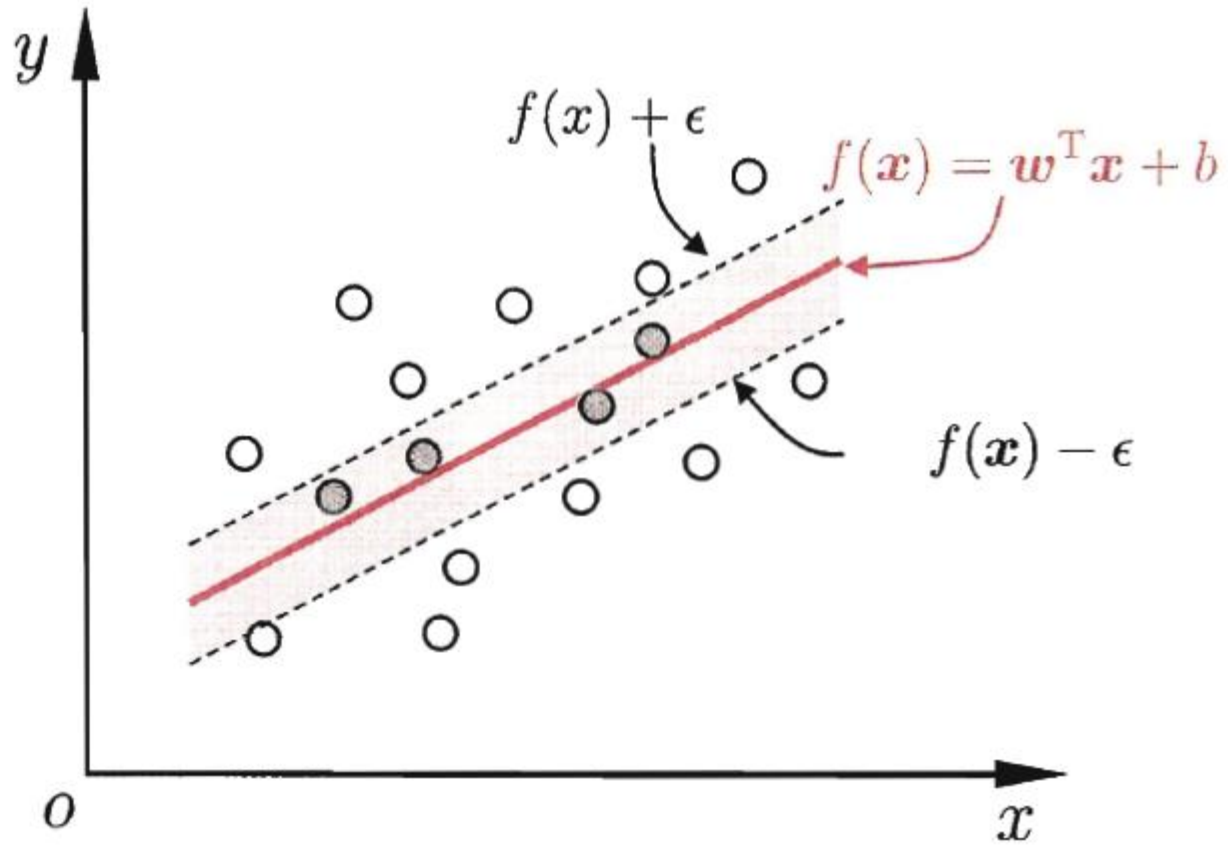
支持向量回归（SVR）

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

$$\text{s.t.} \quad |\boldsymbol{y_i} - (\boldsymbol{w}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{x_i} + \boldsymbol{b})| \le \boldsymbol{\epsilon} \quad \boldsymbol{i} = 1, \dots, \boldsymbol{n}$$

即所有点的真实值$\boldsymbol{y_i}$都落在$\boldsymbol{f}(\boldsymbol{x_i})$的$\boldsymbol{\epsilon}$邻域内。

支持向量回归



y
$f(x)+\epsilon$
$f(\boldsymbol{x})=\boldsymbol{w}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{x}+b$
$f(\boldsymbol{x})-\epsilon$
o
x

支持向量回归

支持向量回归（SVR）

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

$$\mathbf{s.t.}\ \ |\boldsymbol{y_i} - (\boldsymbol{w}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{x_i} + \boldsymbol{b})| \le \boldsymbol{\epsilon} \quad \boldsymbol{i} = \mathbf{1}, \dots, \boldsymbol{n}$$

罚模型形式：

$$\min_{\boldsymbol{w},\boldsymbol{b}} \ \frac{1}{2}\|\boldsymbol{w}\|^2 + \boldsymbol{C}\sum_{\boldsymbol{i}=1}^{\boldsymbol{n}} \ell_{\boldsymbol{\epsilon}}(\boldsymbol{y_i} - (\boldsymbol{w}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{x_i} + \boldsymbol{b}))$$

其中

$$\ell_{\boldsymbol{\epsilon}}(\boldsymbol{z}) = \begin{cases} \mathbf{0} & \boldsymbol{if} \quad |\boldsymbol{z}| \le \boldsymbol{\epsilon} \\ |\boldsymbol{z}| - \boldsymbol{\epsilon} & \boldsymbol{otherwise} \end{cases}$$

支持向量回归

支持向量回归（SVR）

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

$$\text{s.t.} \quad |y_i - (w^{\mathrm{T}} x_i + b)| \le \epsilon \quad i = 1, \ldots, n$$

软间隔支持向量回归（SVR）

$$\min_{w,b,\xi,\eta} \quad \frac{1}{2}\|w\|^2 + C\sum_{i=1}^{n}(\xi_i + \eta_i)$$

$$\text{s.t.} \quad y_i - (w^{\mathrm{T}} x_i + b) \le \epsilon + \xi_i \qquad i = 1, \ldots, n$$

$$-y_i + (w^{\mathrm{T}} x_i + b) \le \epsilon + \eta_i \qquad i = 1, \ldots, n$$

$$\xi_i, \eta_i \ge 0 \qquad i = 1, \ldots, n$$

练习题

- 求解P38页中的原始SVM优化问题。

  提示：matlab function: quadprog.
- 利用SMO算法求解例子中的问题。

  提示：SVM工具包---LIBSVM
- 在同一人工（或下载）数据集上比较 逻辑回归与支持向量机分类精度。
- 在SMO中，假设选定需要更新的变量为 λ_i 和 λ_j，试求 λ_i 和 λ_j的更新公式。