# 大数据导论
# Introduction to Big Data

## 线性支持向量机分类方法

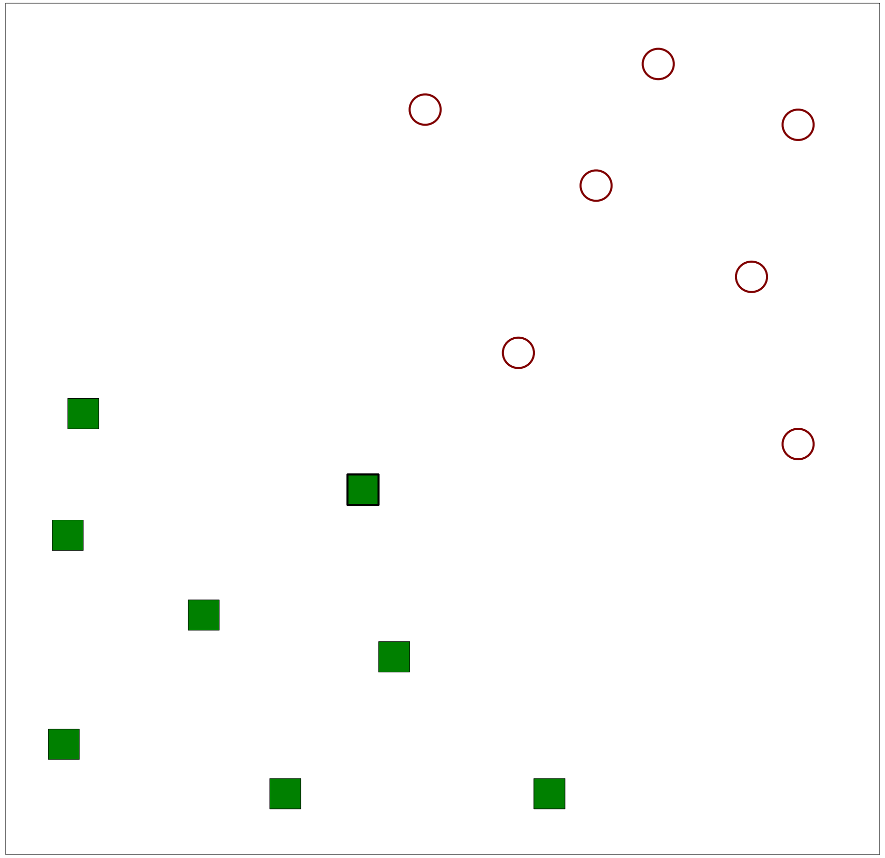

叶允明
计算机科学与技术学院
哈尔滨工业大学（深圳）

# 目录

- 支持向量机的基本思想
- 线性支持向量机

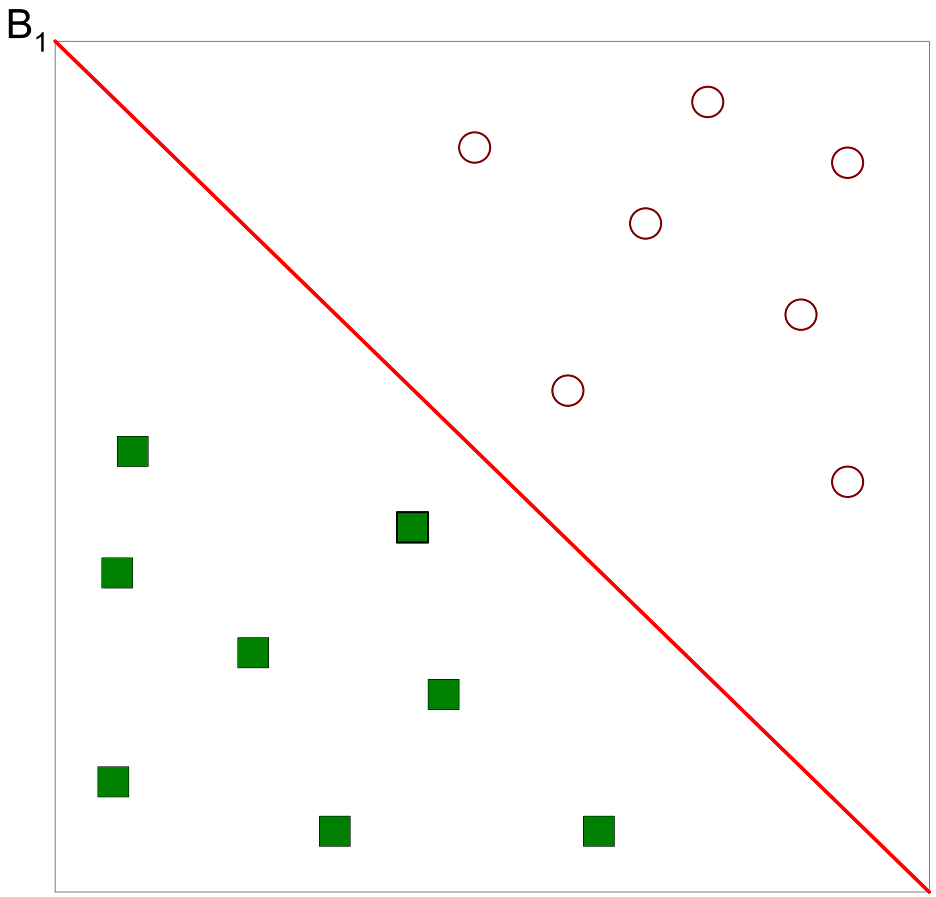
# 支持向量机的基本思想

# 支持向量机（Support Vector Machine，SVM）

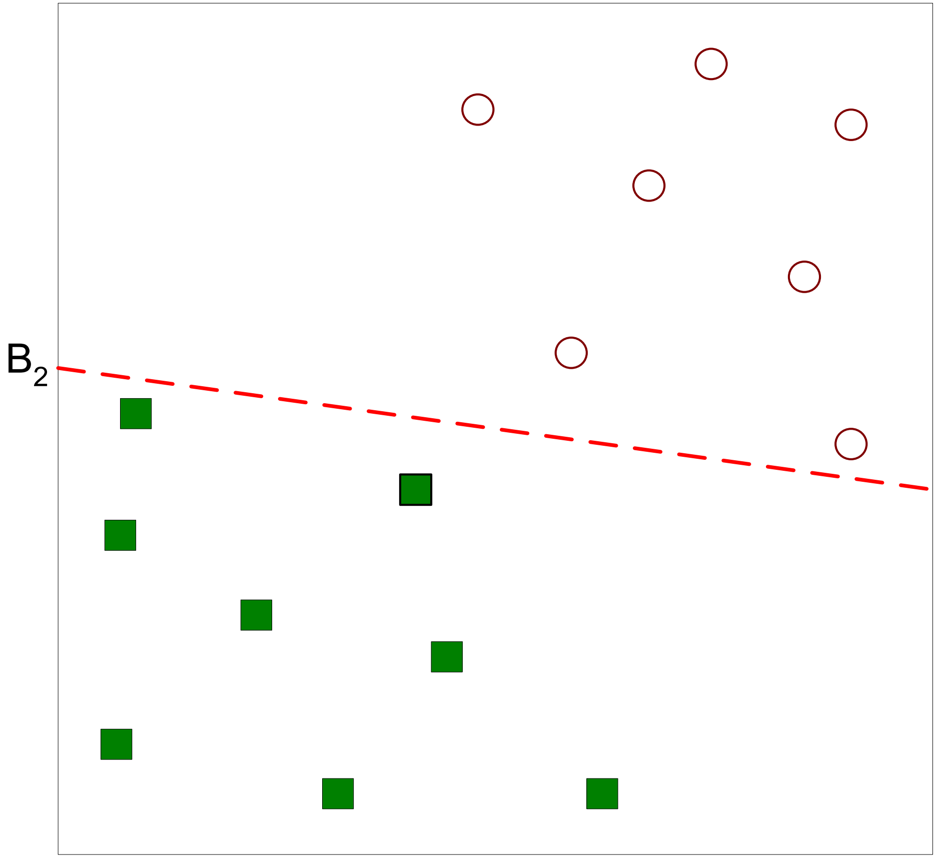


- Find a linear hyperplane (decision boundary) that will separate the data

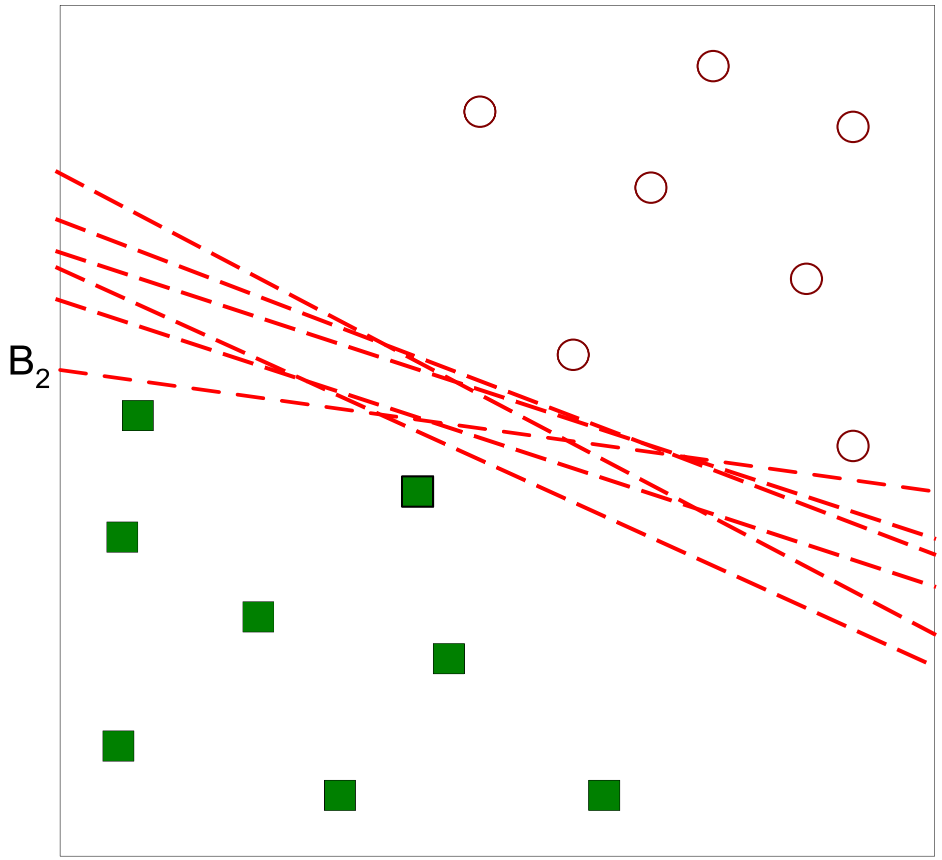
- One Possible Solution



- Another possible solution

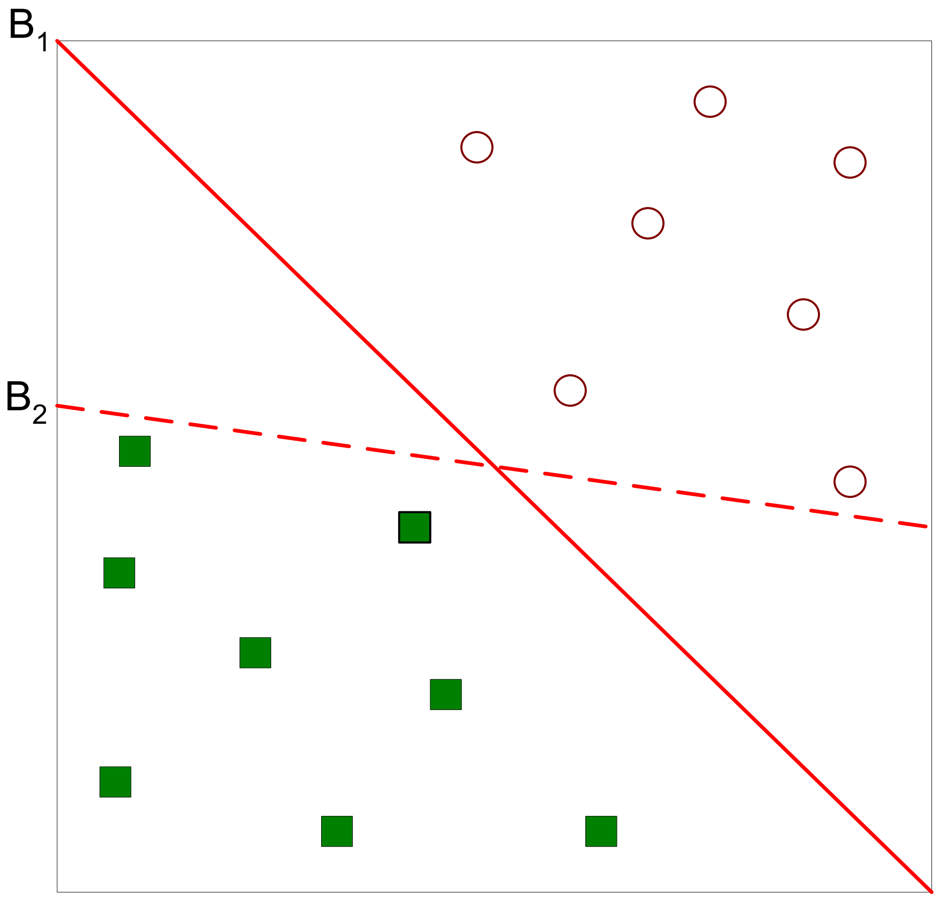


- Many possible solutions

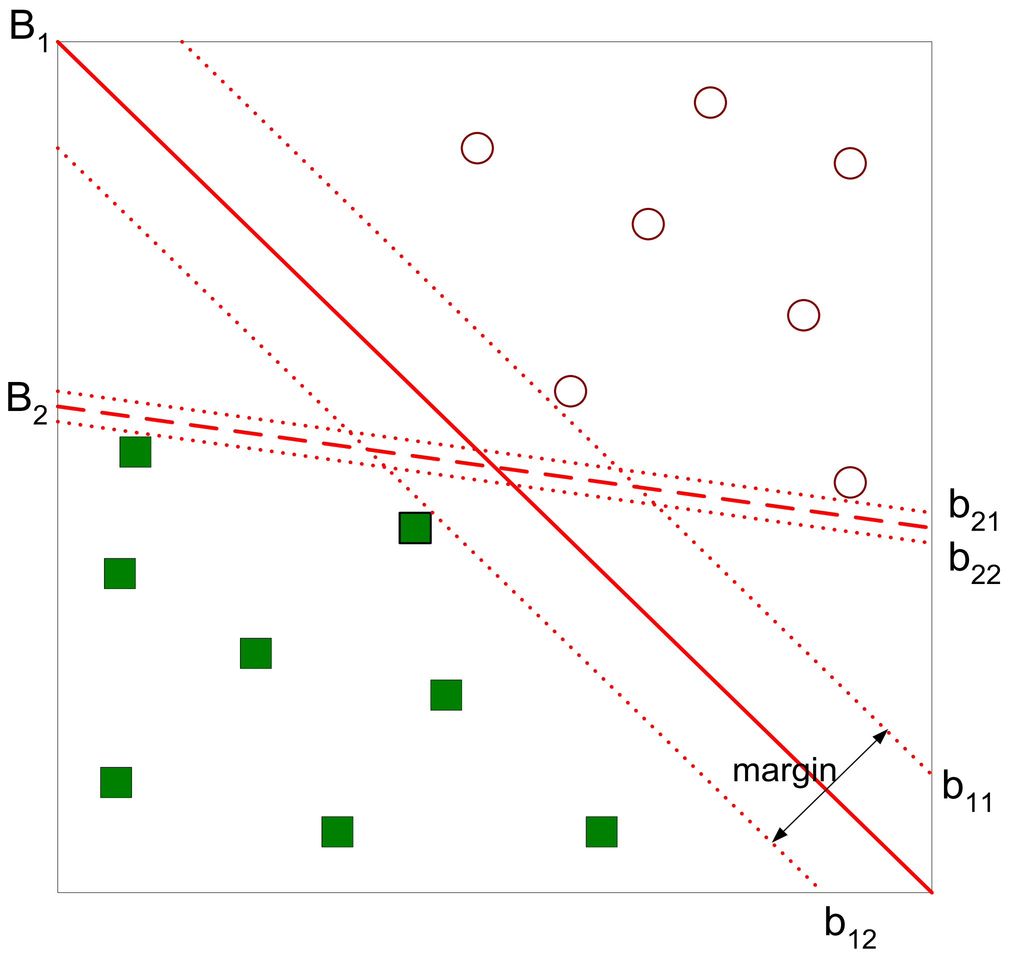


- **Which one is better? B1 or B2?**

- **How do you define better?**

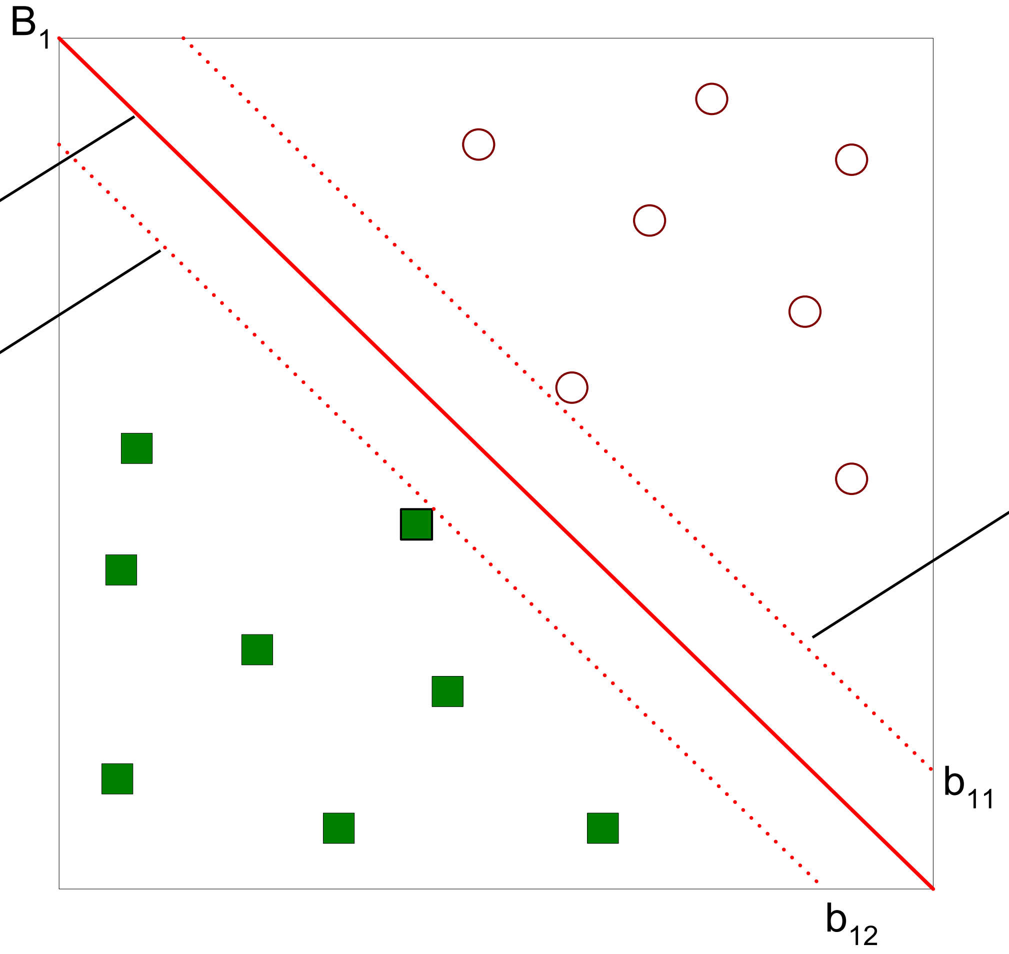


- Find hyperplane maximizes the margin => B1 is better than B2




More robust decision with larger margin!

# Support Vector Machine




$$\vec{w} \bullet \vec{x} + b = 0$$

$$\vec{w} \bullet \vec{x} + b = -1$$

$$\vec{w} \bullet \vec{x} + b = +1$$

$$f(\vec{x}) = \begin{cases} 1 & \text{if } \vec{w} \bullet \vec{x} + b \geq 1 \\ -1 & \text{if } \vec{w} \bullet \vec{x} + b \leq -1 \end{cases}$$

$$\text{Margin} = \frac{2}{\|\vec{w}\|}$$

# 硬间隔线性支持向量机

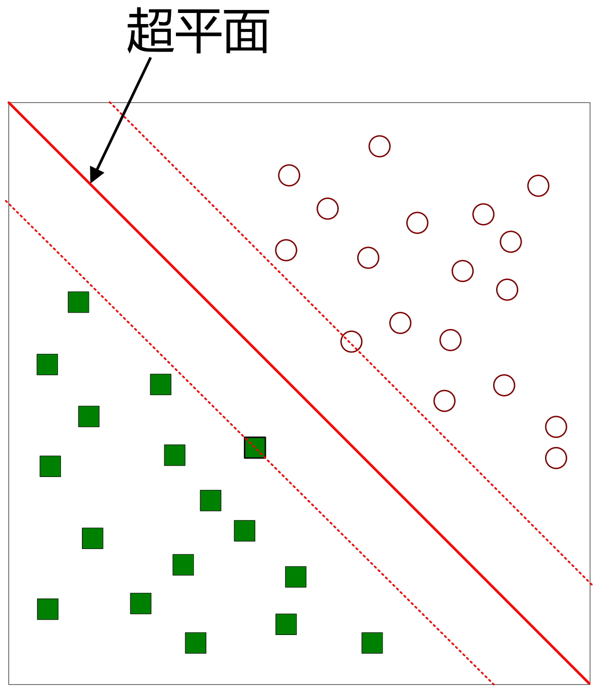
# 定义

- **超平面（hyperplane）**

$$\boldsymbol{w}^T\boldsymbol{x} + b = 0$$

$\boldsymbol{w} = (w_1, w_2, \dots, w_n)$代表超平面的法向量

$b$ 代表原点到超平面的距离




- **线性可分数据集**
  - 数据集 $D = \{(\boldsymbol{x}_1, y_1), (\boldsymbol{x}_2, y_2), \dots, (\boldsymbol{x}_m, y_m)\}$, $\boldsymbol{x}_i \in \mathbb{R}^n$, $y_i$ $\{\mathbf{-1}, \mathbf{1}\}$
  - 存在一个**超平面**能将$D$中的正负样本**严格地划分**到两侧
  - 这样的超平面称为：**分隔超平面**（separating hyperplane）

# 模型学习问题

对于线性可分训练数据集 $D=\{(\boldsymbol{x}_1,y_1),(\boldsymbol{x}_2,y_2),\ldots,(\boldsymbol{x}_m,y_m)\}, \boldsymbol{x}_i\in\mathbb{R}^n, y_i\ \{-1,1\}$

**学习目标是**找到一个分隔超平面 $\boldsymbol{w}^T\boldsymbol{x}+b=0$使其满足：

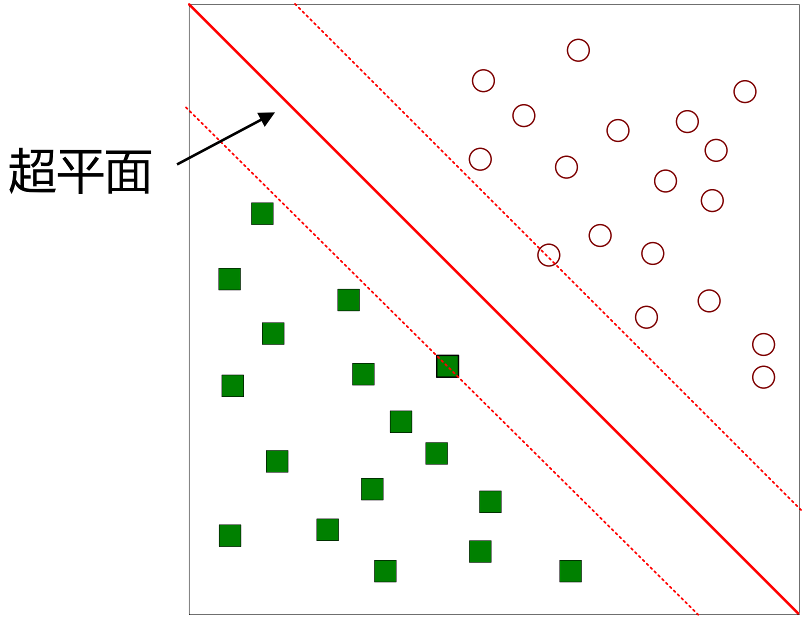
- 正确划分所有数据：

$$\left.\begin{array}{l}\boldsymbol{w}^T\boldsymbol{x}_i+b>0,\ \ y_i=\mathbf{1}\\ \boldsymbol{w}^T\boldsymbol{x}_i+b<0,\ \ y_i=\mathbf{-1}\end{array}\right\}\quad y_i(\boldsymbol{w}^T\boldsymbol{x}_i+b)>0$$

- 间隔（margin）最大:

$$<\boldsymbol{w}^*,\boldsymbol{b}^*>=\max_{\boldsymbol{w},b}\ \mathrm{margin}(\boldsymbol{w},b)$$

$$\mathrm{margin}(\boldsymbol{w},b)=\min_{i=1,\ldots,m}\ \mathrm{distance}(\boldsymbol{x}_i,<\boldsymbol{w},b>)$$

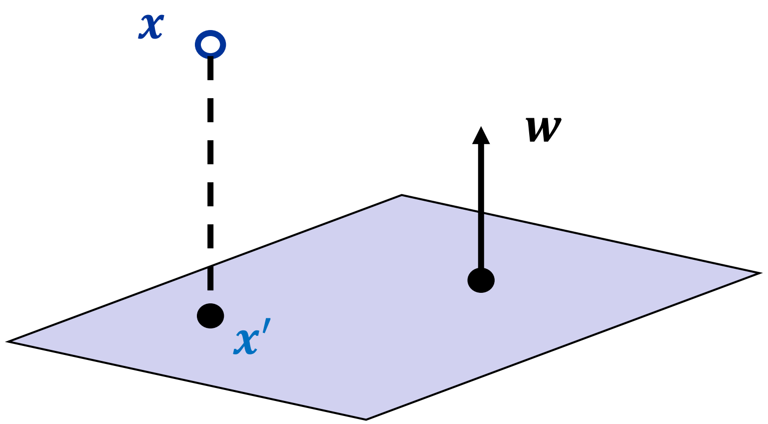


# 点到超平面的距离

- **定理** $n$维欧几里得空间中，点 $\boldsymbol{x} \in \mathbb{R}^n$ 到超平面 $\boldsymbol{w}^T\boldsymbol{x} + b = 0$的距离为：

$$\|\boldsymbol{w}\| = \sqrt{w_1^2 + w_2^2 + \cdots + w_n^2}$$

$$d = \frac{\left|\boldsymbol{w}^T\boldsymbol{x} + b\right|}{\|\boldsymbol{w}\|}$$



# 模型学习问题（续）

- 对于线性可分的训练数据集$D=\{(\boldsymbol{x}_1,y_1),(\boldsymbol{x}_2,y_2),\dots,(\boldsymbol{x}_m,y_m)\},\boldsymbol{x}_i\in\mathbb{R}^n,y_i\ \{-1,1\}$;
- 超平面$\boldsymbol{w}^T\boldsymbol{x}+b=0$ 的间隔可以定义为：

$$\text{margin}\,(\boldsymbol{w},b)=\min_{i=1,2,\dots,m}\frac{\left|\boldsymbol{w}^T\boldsymbol{x}_i+b\right|}{\|\boldsymbol{w}\|}=\min_{i=1,2,\dots,m}\frac{1}{\|\boldsymbol{w}\|}y_i(\boldsymbol{w}^T\boldsymbol{x}_i+b)$$

原问题可改写：

$$\underbrace{<\boldsymbol{w}^*,\boldsymbol{b}^*>=\max_{\boldsymbol{w},b}\ \text{margin}(\boldsymbol{w},b)\qquad y_i\left(\boldsymbol{w}^T\boldsymbol{x}_i+b\right)>0}$$

$$<\boldsymbol{w}^*,\boldsymbol{b}^*>=\max_{\boldsymbol{w},b}\ \min_{i=1,2,\dots,m}\frac{1}{\|\boldsymbol{w}\|}y_i(\boldsymbol{w}^T\boldsymbol{x}_i+b)$$

$$\text{s.t.}\quad y_i\left(\boldsymbol{w}^T\boldsymbol{x}_i+b\right)>0,\qquad i=1,2,\dots,m$$

# 问题化简的目标

**原问题:**

$$\max_{\boldsymbol{w},b} \quad \min_{i=1,2,\ldots,m} \quad \frac{1}{\|\boldsymbol{w}\|} y_i(\boldsymbol{w}^{\boldsymbol{T}}\boldsymbol{x_i} + b)$$

$$\text{s.t.} \quad y_i\left(\boldsymbol{w}^{\boldsymbol{T}}\boldsymbol{x_i} + b\right) > 0, \qquad i = 1,2,\ldots,m$$

**二次规划问题:**

$$\min_{\boldsymbol{u}} \quad \frac{1}{2}\boldsymbol{u}^{\boldsymbol{T}}\boldsymbol{Q}\boldsymbol{u} + \boldsymbol{p}^{\boldsymbol{T}}\boldsymbol{u}$$

$$\text{s.t.} \quad \boldsymbol{a}_i^{\boldsymbol{T}}\boldsymbol{u} \geq c_i, \quad i = 1,2,\ldots,M$$

$$\boldsymbol{Q} \in \mathbb{R}^{N\times N}, \ \boldsymbol{u} \in \mathbb{R}^{N}, \ \boldsymbol{a_i} \in \mathbb{R}^{N}, \ \boldsymbol{p} \in \mathbb{R}^{N}, \ c_i \in \mathbb{R}$$

# 问题化简

**原问题：**

$$\max_{w,b} \quad \boxed{\min_{i=1,2,\ldots,m} \quad \frac{1}{\|\boldsymbol{w}\|} y_i(\boldsymbol{w}^T \boldsymbol{x}_i + b)}$$

$$\text{s.t.} \quad y_i\left(\boldsymbol{w}^T \boldsymbol{x}_i + b\right) > 0, \qquad i = 1,2,\ldots,m$$

- 不妨设：

$$\min_{i=1,2,\ldots,m} \quad y_i(\boldsymbol{w}^T \boldsymbol{x}_i + b) \;= 1$$

- 则原问题可以**化简**为以下有约束优化问题：

$$\max_{\boldsymbol{w},b} \quad \frac{1}{\|\boldsymbol{w}\|}$$

$$\text{s.t.} \quad \min_{i=1,2,\ldots,m} \quad y_i(\boldsymbol{w}^T \boldsymbol{x}_i + b) \;= 1 \quad \Longrightarrow \quad y_i(\boldsymbol{w}^T \boldsymbol{x}_i + b) \geq 1, i = 1,2,\ldots,m$$

**问题：**

$$\max_{\boldsymbol{w}\ b} \quad \frac{1}{\|\boldsymbol{w}\|}$$

$$\text{s.t.} \quad y_i\left(\boldsymbol{w}^T\boldsymbol{x}_i + b\right) \geq 1, \qquad i = 1,2,\ldots,m$$

- 可进一步转化为：

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

$$\text{s.t.} \quad y_i\left(\boldsymbol{w}^T\boldsymbol{x}_i + b\right) \geq 1, \qquad i = 1,2,\ldots,m$$

最终可得：

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

$$\text{s.t.} \quad y_i\left(\boldsymbol{w}^T\boldsymbol{x}_i + b\right) \geq 1, \qquad i = 1,2,\ldots,m$$

# 问题求解

标准问题

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

$$\text{s.t.} \quad y_i\left(\boldsymbol{w}^T\boldsymbol{x}_i + b\right) \geq 1, \qquad i = 1,2,\dots,m$$

凸二次规划问题

$$\min_{\boldsymbol{u}} \quad \frac{1}{2}\boldsymbol{u}^T\boldsymbol{Q}\boldsymbol{u} + \boldsymbol{p}^T\boldsymbol{u}$$

$$\text{s.t.} \quad \boldsymbol{a}_i^T\boldsymbol{u} \geq c_i, \qquad i = 1,2,\dots,M$$

$$\boldsymbol{Q} \in \mathbb{R}^{N\times N}, \ \boldsymbol{u} \in \mathbb{R}^N, \ \boldsymbol{a}_i \in \mathbb{R}^N, \ \boldsymbol{p} \in \mathbb{R}^N, \ c_i \in \mathbb{R}$$

- 标准问题是标准凸二次规划问题。代入凸二次规划形式，可得：

$$\boldsymbol{u} = \begin{bmatrix} b \\ \boldsymbol{w} \end{bmatrix}; \quad \boldsymbol{Q} = \begin{bmatrix} \mathbf{0} & \mathbf{0}_n^T \\ \mathbf{0}_n & \boldsymbol{I}_{n\times n} \end{bmatrix}; \quad \boldsymbol{p} = \mathbf{0}_{n+1}; \quad \boldsymbol{a}_i^T = y_i\begin{bmatrix} 1 & \boldsymbol{x}_i^T \end{bmatrix}; \quad c_i = 1; \quad M = m$$

# 硬间隔线性支持向量机标准问题的学习算法

**输入**：线性可分数据集$D=\{(\boldsymbol{x}_1,y_1),(\boldsymbol{x}_2,y_2),\dots,(\boldsymbol{x}_m,y_m)\},\boldsymbol{x}_i\in\mathbb{R}^n,y_i\ \{-1,1\}$

**输出**：硬间隔最大化分离超平面和分类决策函数

- 第一步，构造并求解约束最优化问题

$$\min_{\boldsymbol{w},b}\quad \frac{1}{2}\boldsymbol{w}^T\boldsymbol{w}$$
$$\text{s.t.}\quad y_i\left(\boldsymbol{w}^T\boldsymbol{x}_i+b\right)\geq 1,\qquad i=1,2,\dots,m$$

- 第二步，返回硬间隔最大化的分隔超平面$\boldsymbol{w}^{*T}\boldsymbol{x}+b^*=0$和分类决策函数$f(\boldsymbol{x})=\operatorname{sign}(\boldsymbol{w}^{*T}\boldsymbol{x}+b^*)$

- 从线性可分数据集当中学习到**硬间隔（hard margin）最大化**的分离超平面及相应分类决策函数的过程称为**硬间隔线性支持向量机**，这里的**硬间隔**是指所有数据点都可以严格分开。
- 根据间隔最大化思想，硬间隔最大化分离超平面是唯一存在的。

# 存在问题

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

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

凸二次规划问题：

- $n+1$个变量 $(b \in \mathbb{R},\ \boldsymbol{w} \in \mathbb{R}^n)$
- $m$个约束条件

- 算法存在的问题
  - 计算复杂度依赖于参数$\boldsymbol{w}$的维度，也就是特征空间的维度$n$。
  - 因为特征工程或非线性映射的缘故，特征空间的维度往往非常大，特别是在特征维度大于样本数量 $(n > m)$时，这会大大增加计算量。
  - 解决方法：将原问题转换成**对偶问题**，可以让计算复杂度不依赖于特征空间维度

原问题：

- $n+1$个变量
- $m$个约束条件

对偶问题：

- $m$个变量
- $m$个约束条件

# 问题转换的基本思路

**原问题**：

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

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

$$h_j(\boldsymbol{x}) = 0, j = 1,2,\dots,l$$

引入广义**拉格朗日函数**：

$$\boldsymbol{L}(\boldsymbol{x},\boldsymbol{\alpha},\boldsymbol{\beta})$$

$$= f(\boldsymbol{x}) + \sum_{i=1}^{k} \alpha_i c_i(\boldsymbol{x}) + \sum_{\mathrm{j}=1}^{l} \beta_i h_i(\boldsymbol{x})$$

**对偶问题**：

$$\max_{\boldsymbol{\alpha},\boldsymbol{\beta}} \quad \min_{\boldsymbol{x}} \boldsymbol{L}(\boldsymbol{x},\boldsymbol{\alpha},\boldsymbol{\beta})$$

$$\text{s.t.} \quad \alpha_i \ge 0, i = 1,2,\dots,k$$

# 问题转换

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

$$\text{s.t.} \quad y_i\left(\boldsymbol{w}^T\boldsymbol{x}_i + b\right) \geq 1, \qquad i = 1,2,\dots,m$$

利用拉格朗日乘子向量 $\boldsymbol{\lambda} = [\lambda_i], \lambda_i \geq 0, i = 1,2,\dots,m$

构建原问题的拉格朗日函数为：

$$\boldsymbol{L}(\boldsymbol{w}, b, \boldsymbol{\lambda}) = \frac{1}{2}\boldsymbol{w}^T\boldsymbol{w} + \sum_{i=1}^{m} \lambda_i(1 - y_i(\boldsymbol{w}^T\boldsymbol{x}_i + b))$$

利用拉格朗日函数，原问题就等价于以下min-max问题：

$$\min_{\boldsymbol{w},b}\left(\max_{\boldsymbol{\lambda}:\lambda_i\geq 0} \boldsymbol{L}(\boldsymbol{w}, b, \boldsymbol{\lambda})\right) = \min_{\boldsymbol{w},b}(\infty, \frac{1}{2}\boldsymbol{w}^T\boldsymbol{w})$$

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

在$(\boldsymbol{w}, b)$给定的情况下，对于任何$\boldsymbol{\lambda}: \lambda_i \geq 0$，都有

$$\max_{\boldsymbol{\lambda}:\lambda_i\geq 0} \boldsymbol{L}(\boldsymbol{w}, b, \boldsymbol{\lambda}) \geq \boldsymbol{L}(\boldsymbol{w}, b, \boldsymbol{\lambda})$$

故对于任何$\boldsymbol{w}, b, \boldsymbol{\lambda}: \lambda_i \geq 0$，都有

$$\min_{\boldsymbol{w},b} \left( \max_{\boldsymbol{\lambda}:\lambda_i\geq 0} \boldsymbol{L}(\boldsymbol{w}, b, \boldsymbol{\lambda}) \right) \geq \min_{\boldsymbol{w},b} \boldsymbol{L}(\boldsymbol{w}, b, \boldsymbol{\lambda})$$

$$\Rightarrow \underbrace{\min_{\boldsymbol{w},b} \left( \max_{\boldsymbol{\lambda}:\lambda_i\geq 0} \boldsymbol{L}(\boldsymbol{w}, b, \boldsymbol{\lambda}) \right)}^{p^*} \geq \boxed{\overbrace{\max_{\boldsymbol{\lambda}:\lambda_i\geq 0} \left( \min_{\boldsymbol{w},b} \boldsymbol{L}(\boldsymbol{w}, b, \boldsymbol{\lambda}) \right)}^{d^*}}$$

拉格朗日对偶问题

- 设原问题的最优值为$p^*$，对偶问题的最优值为$d^*$
  - 若$p^* \geq d^*$，则两个问题的关系是**弱**对偶性
  - 若$p^* = d^*$，则两个问题的关系是**强**对偶性
- 若原问题满足以下条件（Slater条件），则原问题与对偶问题有强对偶性
  - ✓ 原问题是凸问题
  - ✓ 原问题有解
  - ✓ 原问题的约束条件是线性约束条件

$$\min_{\boldsymbol{w},b} \left( \max_{\boldsymbol{\lambda}:\lambda_i\geq 0} \left( \frac{1}{2}\boldsymbol{w}^T\boldsymbol{w} + \sum_{i=1}^{m} \lambda_i(1 - y_i(\boldsymbol{w}^T\boldsymbol{x}_i + b)) \right) \right)$$

- SVM原问题满足上述条件，故$\boldsymbol{p}^* = \boldsymbol{d}^*$，**对偶问题的解就是原问题的解，**我们解决对偶问题即可

# 对偶问题简化

$$\max_{\boldsymbol{\lambda}:\lambda_i\geq 0}\left(\min_{\boldsymbol{w},b}\boxed{\frac{1}{2}\boldsymbol{w}^T\boldsymbol{w}+\sum_{i=1}^{m}\lambda_i(1-y_i(\boldsymbol{w}^T\boldsymbol{x}_i+b))}\right)\quad \boldsymbol{L}(\boldsymbol{w},b,\boldsymbol{\lambda})$$

- $(\boldsymbol{w},b)$要满足$\boldsymbol{L}(\boldsymbol{w},b,\boldsymbol{\lambda})$最小，则对应梯度应为0，即：

➢ $\frac{\partial \boldsymbol{L}(\boldsymbol{w},b,\boldsymbol{\lambda})}{\partial b}=0=-\sum_{i=1}^{m}\lambda_i y_i$，将$\sum_{i=1}^{m}\lambda_i y_i=0$ 加到对偶问题的条件中：

$$\max_{\boldsymbol{\lambda}:\lambda_i\geq 0;\sum\lambda_i y_i=0}\left(\min_{\boldsymbol{w},b}\frac{1}{2}\boldsymbol{w}^T\boldsymbol{w}+\sum_{i=1}^{m}\lambda_i(1-y_i(\boldsymbol{w}^T\boldsymbol{x}_i))-\sum_{i=1}^{m}\lambda_i y_i\cdot b\right)$$

$$\Rightarrow\max_{\boldsymbol{\lambda}:\lambda_i\geq 0;\sum\lambda_i y_i=0}\left(\min_{\boldsymbol{w},b}\frac{1}{2}\boldsymbol{w}^T\boldsymbol{w}+\sum_{i=1}^{m}\lambda_i(1-y_i(\boldsymbol{w}^T\boldsymbol{x}_i))\right)$$

➢ $\frac{\partial \boldsymbol{L}(\boldsymbol{w},b,\boldsymbol{\lambda})}{\partial \boldsymbol{w}}=\boldsymbol{0}=\boldsymbol{w}-\sum_{i=1}^{m}\lambda_i y_i\boldsymbol{x}_i$，同样将$\boldsymbol{w}=\sum_{i=1}^{m}\lambda_i y_i\boldsymbol{x}_i$ 加到对偶问题的条件中，

$$\Rightarrow\max_{\boldsymbol{\lambda}:\lambda_i\geq 0;\sum\lambda_i y_i=0;\boldsymbol{w}=\sum\lambda_i y_i\boldsymbol{x}_i}\left(\min_{\boldsymbol{w},b}\frac{1}{2}\boldsymbol{w}^T\boldsymbol{w}+\sum_{i=1}^{m}\lambda_i-\boldsymbol{w}^T\boldsymbol{w}\right)$$

展开

$$\Rightarrow\max_{\boldsymbol{\lambda}:\lambda_i\geq 0;\sum\lambda_i y_i=0;\boldsymbol{w}=\sum\lambda_i y_i\boldsymbol{x}_i}\left(\min_{\boldsymbol{w},b}-\frac{1}{2}\left\|\sum_{i=1}^{m}\lambda_i y_i\boldsymbol{x}_i\right\|^2+\sum_{i=1}^{m}\lambda_i\right)\Rightarrow\boxed{\max_{\boldsymbol{\lambda}:\lambda_i\geq 0;\sum\lambda_i y_i=0;\boldsymbol{w}=\sum\lambda_i y_i\boldsymbol{x}_i}-\frac{1}{2}\left\|\sum_{i=1}^{m}\lambda_i y_i\boldsymbol{x}_i\right\|^2+\sum_{i=1}^{m}\lambda_i}$$

最终需求解的对偶问题

# KKT条件

$$\boxed{\max_{\lambda:\lambda_i\geq 0;\sum\lambda_i y_i=0;\boldsymbol{w}=\sum\lambda_i y_i\boldsymbol{x}_i} -\frac{1}{2}\left\|\sum_{i=1}^{m}\lambda_i y_i\boldsymbol{x}_i\right\|^2+\sum_{i=1}^{m}\lambda_i}$$

总结一下，$(\boldsymbol{w},b,\boldsymbol{\lambda})$ 是原问题与对偶问题最优解的充要条件是$(\boldsymbol{w},b,\boldsymbol{\lambda})$满足下面的Karush-Kuhn-Tucker（KKT）条件：

- 满足原问题的约束条件： $y_i\left(\boldsymbol{w}^T\boldsymbol{x}_i+b\right)\geq 1,\ i=1,2,\dots,m$
- 满足对偶问题约束条件： $\lambda_i\geq 0$
- 满足对偶问题优化条件：
  - $\frac{\partial L(\boldsymbol{w},b,\boldsymbol{\lambda})}{\partial b}=0=-\sum_{i=1}^{m}\lambda_i y_i$，即$\sum_{i=1}^{m}\lambda_i y_i=0$
  - $\frac{\partial L(\boldsymbol{w},b,\boldsymbol{\lambda})}{\partial \boldsymbol{w}}=\boldsymbol{0}=\boldsymbol{w}-\sum_{i=1}^{m}\lambda_i y_i\boldsymbol{x}_i$，即$\boldsymbol{w}=\sum_{i=1}^{m}\lambda_i y_i\boldsymbol{x}_i$
- 满足原问题的优化条件：将原问题转换成 minmax问题时，$\boxed{\lambda_i\left(1-y_i\left(\boldsymbol{w}^T\boldsymbol{x}_i+b\right)\right)=0}$

对偶互补条件

# 求解对偶问题

$$\max_{\lambda:\lambda_i\geq 0;\sum\lambda_i y_i=0;\boldsymbol{w}=\sum\lambda_i y_i \boldsymbol{x}_i} -\frac{1}{2}\left\|\sum_{i=1}^{m}\lambda_i y_i \boldsymbol{x}_i\right\|^2+\sum_{i=1}^{m}\lambda_i$$

改写上述问题：最大化转换为最小化（取负号）

$$\min_{\boldsymbol{\lambda}} \quad \frac{1}{2}\left\|\sum_{i=1}^{m}\lambda_i y_i \boldsymbol{x}_i\right\|^2-\sum_{i=1}^{m}\lambda_i$$

展开

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

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

$$\lambda_i\geq 0, \qquad i=1,2,\dots,m$$

这仍是一个凸二次规划的问题

$m$个变量（$\boldsymbol{\lambda}\in\mathbb{R}^m$）

$m+1$个约束条件

二次规划问题：

$$\min_{\boldsymbol{u}} \quad \frac{1}{2}\boldsymbol{u}^T\boldsymbol{Q}\boldsymbol{u}+\boldsymbol{p}^T\boldsymbol{u}$$

$$\text{s.t.} \quad \boldsymbol{a}_i^T\boldsymbol{u}\geq c_i, \qquad i=1,2,\dots,M$$

$\boldsymbol{Q}\in\mathbb{R}^{N\times N}$，$\boldsymbol{u}\in\mathbb{R}^N$，$\boldsymbol{a}_i\in\mathbb{R}^N$，$\boldsymbol{p}\in\mathbb{R}^N$，$c_i\in\mathbb{R}$

等号转换成两条不等式

$$\sum_{i=1}^{m}\lambda_i y_i\geq 0$$
$$-\sum_{i=1}^{m}\lambda_i y_i\geq 0$$

- 代入凸二次规划形式，可得：

$$\boldsymbol{u}=\boldsymbol{\lambda};\ \boldsymbol{Q}=\left[q_{ij}=y_i y_j\boldsymbol{x}_i^T\boldsymbol{x}_j\right]_{m\times m};\ \boldsymbol{p}=-\boldsymbol{1}_m;$$

$\boldsymbol{e}_i\in\mathbb{R}^m$是第i行为1的单位向量

$$\boxed{\boldsymbol{a}_{\geq}=\boldsymbol{y}=[y_i]_m;c_{\geq}=0;\boldsymbol{a}_{\leq}=-\boldsymbol{y};c_{\leq}=0;}\ \boldsymbol{a}_i=\boldsymbol{e}_i;c_i=0;$$

- 由于$\boldsymbol{Q}$可能比较大，实际应用中需利用专为SVM设计的方法解上述问题，得最优解 $\boldsymbol{\lambda}$

# 求解对偶问题

- 在求得最优解$\boldsymbol{\lambda}^* = [\lambda_i^*]$后

(KKT) 条件:

- $y_i(\boldsymbol{w}^T\boldsymbol{x_i} + b) \geq 1,\ i = 1,2,\dots,m$
- $\lambda_i \geq 0$
- $\sum_{i=1}^m \lambda_i y_i = 0; \boldsymbol{w} = \sum_{i=1}^m \lambda_i y_i \boldsymbol{x}_i$
- $\lambda_i\left(1 - y_i(\boldsymbol{w}^T\boldsymbol{x}_i + b)\right) = 0$ (对偶互补条件)

- 可以利用KKT条件求得原问题的最优解$\boldsymbol{w}^*$和$b^*$

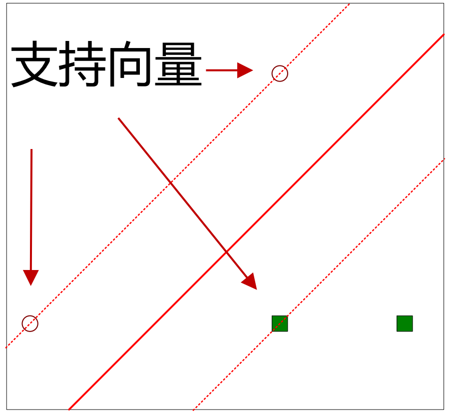
➢ $\boldsymbol{w}^* = \sum_{i=1}^m \lambda_i^* y_i \boldsymbol{x_i}$

➢ 利用对偶互补条件，如果某个$j$ 使得$\lambda_{\boldsymbol{j}}^* > 0$，则$1 - y_j(\boldsymbol{w^*}^T\boldsymbol{x}_j + b) = 0$，左右两边乘以$y_j$后可得:

$$b^* = y_j - \boldsymbol{w^*}^T\boldsymbol{x}_j$$

- 最后我们可以得到最终的分类决策函数的对偶形式为

$$f(x) = \mathrm{sign}(\boldsymbol{w^*}^T\boldsymbol{x} + b^*)$$



# 硬间隔线性SVM对偶问题的学习算法

**输入**：线性可分数据集$D=\{(\boldsymbol{x}_1,y_1),(\boldsymbol{x}_2,y_2),\dots,(\boldsymbol{x}_m,y_m)\},\boldsymbol{x}_i\in\mathbb{R}^n,y_i\ \{-1,1\}$

**输出**：硬间隔最大化分离超平面和分类决策函数

- 第一步，构造带约束的凸二次规划问题，并求解得到最优解$\boldsymbol{\lambda}^*=[\lambda_i^*](i=1,2,\dots,m)$

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

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

$$\lambda_i\geq 0,\qquad i=1,2,\dots,m$$

- 第二步，计算对偶问题对应的最优解$\boldsymbol{w}^*$，并任意选择$\boldsymbol{\lambda}^*$的一个正分量$\lambda_j^*>0$，以求解$b^*$

$$\boldsymbol{w}^*=\sum_{i=1}^{m}\lambda_i^* y_i\boldsymbol{x}_i$$

$$b^*=y_j-\boldsymbol{w}^{*T}\boldsymbol{x}_j$$

- 第三步，返回硬间隔最大化分离超平面$\boldsymbol{w}^{*T}\boldsymbol{x}+b^*=0$和分类决策函数$f(x)=\text{sign}(\boldsymbol{w}^{*T}\boldsymbol{x}+b^*)$

# 硬间隔线性SVM的两种学习算法对比

- 原问题学习算法

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

$$\text{s.t.} \quad y_i\left(\boldsymbol{w}^T\boldsymbol{x_i} + b\right) \geq 1, \qquad i = 1,2,\dots,m$$

- 对偶问题学习算法

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

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

$$\lambda_i \geq 0, \qquad i = 1,2,\dots,m$$