宿題 2

(1)

二つの超平面

$$\text{平面 1:}\quad \boldsymbol{w}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{x} - b = 1 \tag{1}$$
$$\text{平面 2:}\quad \boldsymbol{w}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{x} - b = -1 \tag{2}$$

の間のマージンが

$$\frac{2}{||\boldsymbol{w}||} \tag{3}$$

であることを示す。

それぞれ平面 1，平面 2 上にあり，かつその差分ベクトルがその二平面に垂直であるような 2 点 $\boldsymbol{x}_1$，$\boldsymbol{x}_2$ を考える。つまり，

$$\boldsymbol{w}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{x}_1 - b = 1 \tag{4}$$
$$\boldsymbol{w}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{x}_2 - b = -1 \tag{5}$$
$$\boldsymbol{m} = \boldsymbol{x}_1 - \boldsymbol{x}_2 = k\boldsymbol{w} \qquad (k \in \mathbb{R}_{\neq 0}) \tag{6}$$

これらより，

$$\begin{aligned} \boldsymbol{w}^{\mathrm{T}}(\boldsymbol{x}_1 - \boldsymbol{x}_2) &= \boldsymbol{w}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{m} && (7)\\ &= \boldsymbol{w}^{\mathrm{T}} \cdot k\boldsymbol{w} && (8)\\ &= k||\boldsymbol{w}||^2 && (9)\\ &= 2 && (10) \end{aligned}$$

となる。よって，

$$k = \frac{2}{||\boldsymbol{w}||^2} \tag{11}$$
$$\boldsymbol{m} = k\boldsymbol{w} = \frac{2}{||\boldsymbol{w}||^2}\boldsymbol{w} \tag{12}$$

となるから，結局，二平面の間のマージン $||\boldsymbol{m}||$ は，

$$||\boldsymbol{m}|| = \frac{2}{||\boldsymbol{w}||} \tag{13}$$

となる。

(2)

ソフトマージン SVM の主形式

$$\arg\min_{\boldsymbol{w},\ b,\ \boldsymbol{\xi}} \left\{ \frac{1}{2}||\boldsymbol{w}||^2 + C\sum_i^n \xi_i \right\} \tag{14}$$

subject to

$$y_i(\boldsymbol{w}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{x}_i - b) \geq 1 - \xi_i \tag{15}$$

$$\xi \geq 0 \tag{16}$$

から，双対形式を導く。

一般に，主問題

$$f^* = \min_{x \in \Xi} f(\boldsymbol{x}) \tag{17}$$

subject to

$$\boldsymbol{g}(\boldsymbol{x}) = \boldsymbol{0} \tag{18}$$

$$\boldsymbol{h}(\boldsymbol{x}) \leq \boldsymbol{0} \tag{19}$$

に対する Lagrange 関数は，

$$L(\boldsymbol{x},\ \boldsymbol{\lambda},\ \boldsymbol{\mu}) = f(\boldsymbol{x}) + \boldsymbol{\lambda}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{g}(\boldsymbol{x}) + \boldsymbol{\mu}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{h}(\boldsymbol{x}) \tag{20}$$

となり，Lagrange 双対問題は，

$$f^* = \max_{\boldsymbol{\lambda},\ \boldsymbol{\mu}} \inf{}_{\boldsymbol{x} \in \boldsymbol{X}} L(\boldsymbol{x},\ \boldsymbol{\lambda},\ \boldsymbol{\mu}) \tag{21}$$

subject to

$$\boldsymbol{\mu} \geq \boldsymbol{0} \tag{22}$$

となる。また，相補性条件より，

$$\boldsymbol{\mu} \odot \boldsymbol{h} = \boldsymbol{0} \tag{23}$$

が成立する。ここで，$\odot$ は要素ごとの積を表す。

これを今回の条件に適用すると，Lagrange 関数は，

$$L(\boldsymbol{w},\ b,\ \boldsymbol{\alpha},\ \boldsymbol{\beta}) = \frac{1}{2}||\boldsymbol{w}||^2 + C\sum_i^n \xi_i - \sum_i^n \alpha_i \left\{ y_i(\boldsymbol{w}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{x}_i - b) - 1 + \xi_i \right\} - \sum_i^n \beta_i \xi_i \tag{24}$$

subject to

$$\boldsymbol{\alpha} \geq \boldsymbol{0} \tag{25}$$

$$\boldsymbol{\beta} \geq \boldsymbol{0} \tag{26}$$

$$\alpha_i \left\{ y_i(\boldsymbol{w}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{x}_i - b) - 1 + \xi_i \right\} = 0 \tag{27}$$

$$\beta_i \xi_i = 0 \tag{28}$$

L の $\boldsymbol{w}$, b, $\boldsymbol{\xi}$ による偏微分を考える。

$$\frac{\partial L}{\partial \boldsymbol{w}} = \boldsymbol{w} - \sum_i^n \alpha_i y_i \boldsymbol{x}_i = \boldsymbol{0} \tag{29}$$

$$\hat{\boldsymbol{w}} = \sum_i^n \alpha_i y_i \boldsymbol{x}_i \tag{30}$$

また，

$$\frac{\partial L}{\partial b} = \sum_i^n \alpha_i y_i = 0 \tag{31}$$

また，

$$\frac{\partial L}{\partial \xi_i} = C - \alpha_i - \beta_i = 0 \tag{32}$$

から，

$$\alpha_i + \beta_i = C \tag{33}$$

式 (24) の Lagrange 関数を，式 (30)，(31)，(33) を用いて変形する。

$$\begin{aligned}
L(\boldsymbol{w},\ b,\ \boldsymbol{\alpha},\ \boldsymbol{\beta}) &= \frac{1}{2}||\boldsymbol{w}||^2 + C\sum_i^n \xi_i - \sum_i^n \alpha_i \{y_i(\boldsymbol{w}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{x}_i - b) - 1 + \xi_i\} - \sum_i^n \beta_i \xi_i & (34)\\
&= \frac{1}{2}||\boldsymbol{w}||^2 - \boldsymbol{w}^{\mathrm{T}}\sum_i^n \alpha_i y_i \boldsymbol{x}_i + +b\sum_i^n \alpha_i y_i \sum_i^n \alpha_i + \sum_i^n (C - \alpha_i - \beta_i)\xi_i & (35)\\
&= \frac{1}{2}||\sum_i^n \alpha_i y_i \boldsymbol{x}_i||^2 - \sum_j^n \alpha_j y_j \boldsymbol{x}_j^{\mathrm{T}} \sum_i^n \alpha_i y_i \boldsymbol{x}_i + \sum_i^n \alpha_i & (36)\\
&= \sum_i^n \alpha_i - \frac{1}{2}\sum_{i,j}^n \alpha_i \alpha_j y_i y_j \boldsymbol{x}_i^{\mathrm{T}} \boldsymbol{x}_j & (37)
\end{aligned}$$

よって，$\boldsymbol{w}$, $\boldsymbol{\xi}$, $\boldsymbol{\beta}$ が Lagrange 関数から消去されたので，結局，

$$L(\boldsymbol{\alpha}) = \sum_i^n \alpha_i - \frac{1}{2}\sum_{i,j}^n \alpha_i \alpha_j y_i y_j \boldsymbol{x}_i^{\mathrm{T}} \boldsymbol{x}_j \tag{38}$$

$$\boldsymbol{\alpha} = \arg\max_{\boldsymbol{\alpha}} L(\boldsymbol{\alpha}) \tag{39}$$

が解くべき問題となる。また，式 (25)，(26)，(33) から，

$$0 \le \alpha_i \le C \tag{40}$$

$$0 \le \beta_i \le C \tag{41}$$

なので，式 (31) と合わせて，制約は，

$$0 \le \alpha_i \le C \tag{42}$$

$$\sum_i^n \alpha_i y_i = 0 \tag{43}$$

となる。