## Hilbertrum med Reproducerande Kärnor

Oscar Granlund

21 augusti 2018

# Sammanfattning

Testtesttesttesttest

## Kapitel 1

## Stödvektormaskiner (SVM)

# 1.1 Klassificering med hjälp av separerande hyperplan

INTRODUKTION OM VARFÖR KLASSIFICERING, EXEMPEL MED SPAM-FILTER

**Definition 1.1.1.** Ett klassificeringsproblem är ett problem var man utgående från en mängd observationspar (träningsdata) ( $\mathbf{x}_i, y_i$ ),  $\mathbf{x}_i \in \mathbb{R}^p$ ,  $y_i \in$  $\{-1, 1\}$ ,  $i = 1, \ldots, N$ , försöker hitta en regel  $g : \mathbb{R}^p \longmapsto \{-1, 1\}$  sådan att  $g(\mathbf{x}_i) = y_i$  för så många träningspar ( $\mathbf{x}_i, y_i$ ) som möjligt.

Inom statistiken och maskininlärningen finns många olika metoder för att försöka lösa klassificeringsproblem, till exempel med hjälp av regressionsmodeller eller klusteranalys. I detta kapitel behandlas en metod där en affin mängd med dimensionen p-1 används för att definiera en regel som klassificerar observationerna  $\mathbf{x}_i$  i klasserna  $y_i \in \{-1, 1\}$  genom separering.

**Definition 1.1.2.** Ett hyperplan i ett vektorrum med dimensionen p är ett underrum med dimensionen p-1, i figur 1.1 illustreras ett separerande hyperplan för fallet p=2. Klassificeringsregeln g för separerande hyperplan blir  $g(\mathbf{x}_i) = \text{sign}(\mathbf{x}_i^{\mathsf{T}}\boldsymbol{\beta} + \beta_0)$  där mängden  $\{\mathbf{x} : \mathbf{x}^{\mathsf{T}}\boldsymbol{\beta} + \beta_0 = 0\}$ , med  $\mathbf{x}, \ \boldsymbol{\beta} \in \mathbb{R}^p$ , definierar ett hyperplan parametriserad av  $\boldsymbol{\beta}$  och  $\beta_0$ .

Sats 1.1.1. Ett hyperplan definierat som den affina mängden  $L = \{\mathbf{x} : f(\mathbf{x}) = \mathbf{x}^{\mathsf{T}}\boldsymbol{\beta} + \beta_0 = 0\}$  har följande egenskaper [1]:

1.  $\beta$  är en normalvektor till L och kan normaliseras genom

$$\widehat{oldsymbol{eta}} = rac{oldsymbol{eta}}{\|oldsymbol{eta}\|}.$$

- 2.  $\mathbf{x}_0^{\mathsf{T}}\boldsymbol{\beta} = -\beta_0$  för alla  $\mathbf{x}_0$  i L.
- 3. Det signerade avståndet från en punkt  $\mathbf{x}$  till hyperplanet L,  $\mathbf{d}^{\pm}(\mathbf{x}, L)$ , ges av

$$(\mathbf{x} - \mathbf{x}_0)^{\mathsf{T}} \widehat{\boldsymbol{\beta}} = \frac{1}{\|\boldsymbol{\beta}\|} (\mathbf{x}^{\mathsf{T}} \boldsymbol{\beta} + \beta_0)$$
  
=  $\frac{1}{\|f'(\mathbf{x})\|} f(\mathbf{x}).$ 

Bevis.

1. Låt  $\mathbf{x}_1$  och  $\mathbf{x}_2$  vara två punkter i L. Då gäller att  $f(\mathbf{x}_1) = f(\mathbf{x}_2) = 0$  och

$$0 = f(\mathbf{x}_1) - f(\mathbf{x}_2)$$
  
=  $\mathbf{x}_1^{\mathsf{T}} \boldsymbol{\beta} + \beta_0 - \mathbf{x}_2^{\mathsf{T}} \boldsymbol{\beta} - \beta_0$   
=  $(\mathbf{x}_1 - \mathbf{x}_2)^{\mathsf{T}} \boldsymbol{\beta}$ 

alltså uppfyller  $\beta$  kravet för normalvektorer och  $\hat{\beta} := \frac{\beta}{\|\beta\|}$  är den normaliserade normalvektorn till hyperplanet L.

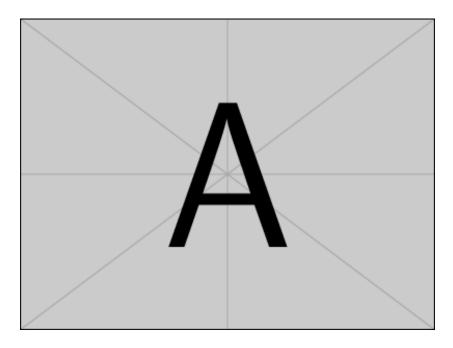
- 2. Låt  $\mathbf{x}_0$  vara en punkt i L. Då gäller att  $f(\mathbf{x}_0) = \mathbf{x}_0^{\mathsf{T}} \boldsymbol{\beta} + \beta_0 = 0$  alltså är  $\mathbf{x}_0^{\mathsf{T}} \boldsymbol{\beta} = -\beta_0$ .
- 3. Låt  $\mathbf{x}_0$  vara en punkt i hyperplanet L. Då är avståndet från hyperplanet till punkten  $\mathbf{x}$  lika med längden av projektionen av vektorn  $(\mathbf{x} \mathbf{x}_0)$  på hyperplanets normaliserade normal  $\hat{\beta}$ ,  $\operatorname{comp}_{\hat{\boldsymbol{\beta}}}(\mathbf{x} \mathbf{x}_0)$ . Vi får alltså att

$$\begin{split} \mathbf{d}^{\pm}(\mathbf{x}, L) &= \mathrm{comp}_{\widehat{\boldsymbol{\beta}}}(\mathbf{x} - \mathbf{x}_0) = \underline{\underline{(\mathbf{x} - \mathbf{x}_0)^{\mathsf{T}} \widehat{\boldsymbol{\beta}}}} \\ &= \frac{1}{\|\boldsymbol{\beta}\|} (\mathbf{x}^{\mathsf{T}} \boldsymbol{\beta} - \mathbf{x}_0^{\mathsf{T}} \boldsymbol{\beta}) = \underline{\frac{1}{\|\boldsymbol{\beta}\|} (\mathbf{x}^{\mathsf{T}} \boldsymbol{\beta} + \boldsymbol{\beta}_0)} \end{split}$$

och om man noterar att  $f(\mathbf{x}) = \mathbf{x}^{\intercal} \boldsymbol{\beta} + \beta_0$  och  $f'(\mathbf{x}) = \boldsymbol{\beta}$  så fås även att

$$\frac{1}{\|\boldsymbol{\beta}\|}(\mathbf{x}^{\mathsf{T}}\boldsymbol{\beta} + \boldsymbol{\beta}_0) = \frac{1}{\|f'(\mathbf{x})\|}f(\mathbf{x}).$$

Observation. Definitionen  $L = \{ \mathbf{x} : f(\mathbf{x}) = \mathbf{x}^{\mathsf{T}} \boldsymbol{\beta} + \beta_0 = 0 \}$  för hyperplanet L är inte entydig.



Figur 1.1: 20 datapunkter med ett separerande hyperplan (linje) där klassen y = 1 har färgats blå och klassen y = -1 har färgats orange.

Orsak. Betrakta hyperplanen  $L_1 = \{\mathbf{x} : f(\mathbf{x}) = \mathbf{x}^{\mathsf{T}}\boldsymbol{\beta} + \beta_0 = 0\}$  och  $L_2 = \{\mathbf{x} : g(\mathbf{x}) = \mathbf{x}^{\mathsf{T}}(-\boldsymbol{\beta}) + (-\beta_0) = 0\}$ . Eftersom att  $g(\mathbf{x}) = -f(\mathbf{x})$  så gäller att om  $\mathbf{x}_0$  tillhör  $L_1$  så tillhör  $\mathbf{x}_0$  även  $L_2$ . Betrakta vidare hyperplanet  $L_3 = \{\mathbf{x} : h(\mathbf{x}) = \frac{\mathbf{x}^{\mathsf{T}}\boldsymbol{\beta}}{\|\boldsymbol{\beta}\|} + \frac{\beta_0}{\|\boldsymbol{\beta}\|} = 0\}$ . Om  $\mathbf{x}_0$  då tillhör  $L_1$  så tillhör  $\mathbf{x}_0$  även  $L_3$  eftersom att  $h(\mathbf{x}) = \frac{f(\mathbf{x})}{\|\boldsymbol{\beta}\|} = 0$ .

Observation. För att få entydiga hyperplan för klassificering kan man lägga till villkor. Om man kräver att  $\|\boldsymbol{\beta}\| = 1$  och  $y_i(\mathbf{x}_i^{\mathsf{T}}\boldsymbol{\beta} + \beta_0) \geq 0$  för alla  $i = 1, \ldots, N$ , där  $y_i$  är klasserna i klassificeringsproblemet, så får man en entydig definition av hyperplanet där vektorn  $\boldsymbol{\beta}$  "pekar mot" klassen där  $y_i = 1$  och  $\beta_0$  anger det signerade avståndet (i relation till vart  $\boldsymbol{\beta}$  pekar) från origo till hyperplanet.

Orsak. De extra villkoren gör att man inte längre kan göra manipulationerna som påvisade icke-entydigheten. Om man sätter  $\mathbf{x} = \bar{0}$  så får man med hjälp av sats 1.1.1 att avståndet från origo till planet är lika med  $\frac{1}{\|\beta\|}(\mathbf{x}^{\mathsf{T}}\boldsymbol{\beta} + \beta_0) = \beta_0$ .

**Definition 1.1.3.** Ett klassificeringsproblem kallas *linjärt separabelt* om det existerar ett hyperplan  $L = \{ \mathbf{x} : f(\mathbf{x}) = \mathbf{x}^{\mathsf{T}} \boldsymbol{\beta} + \beta_0 = 0 \}$  som separerar mängderna.

Sats 1.1.2. För ett hyperplan  $L = \{\mathbf{x} : f(\mathbf{x}) = \mathbf{x}^{\mathsf{T}}\boldsymbol{\beta} + \beta_0 = 0, \ y_i f(\mathbf{x}_i) \geq 0, \ i = 1, \ldots, \ N, \ \|\boldsymbol{\beta}\| = 1\}$  som separerar två klasser gäller att

$$y_i(\mathbf{x}_i^{\mathsf{T}}\boldsymbol{\beta} + \beta_0) > 0 \tag{1.1}$$

för alla  $i = 1, \ldots, N$ .

Bevis. Ifall ett klassificeringsproblem är linjärt separabelt så ligger alla observationer  $y_i$  på rätt sida av hyperplanet definierat genom  $\mathbf{x}^{\mathsf{T}}\boldsymbol{\beta} + \beta_0$ ; eller så ligger alla observationer på fel sida av hyperplanet. Vilket betyder att ifall  $y_i = 1$  så är  $\mathbf{x}_i^{\mathsf{T}}\boldsymbol{\beta} + \beta_0 > 0$  och om  $y_i = -1$  så är  $\mathbf{x}_i^{\mathsf{T}}\boldsymbol{\beta} + \beta_0 < 0$ . Detta betyder att  $y_i(\mathbf{x}_i^{\mathsf{T}}\boldsymbol{\beta} + \beta_0) > 0$ . Ifall  $\mathbf{x}_i^{\mathsf{T}}\boldsymbol{\beta} + \beta_0 = 0$  är problemet inte linjärt separabelt.

**Exempel 1.1.1.** Låt träningsdataparen vara ([2, 2] $^{\mathsf{T}}$ , 1), ([1, 2] $^{\mathsf{T}}$ , -1). Då är

$$L_1 = \{ \mathbf{x} \in \mathbb{R}^2 : \mathbf{x}^{\mathsf{T}} \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix} - 1.5 = 0 \}$$

och

$$L_2 = \{ \mathbf{x} \in \mathbb{R}^2 : \mathbf{x}^{\mathsf{T}} \begin{bmatrix} \sqrt{2} \\ \sqrt{2} \end{bmatrix} - 3.5\sqrt{2} = 0 \}$$

två separerande hyperplan (linjer i detta fall).

Bevis. För  $L_1$ :

$$y_1(\mathbf{x}_1^{\mathsf{T}} \begin{bmatrix} 1\\0 \end{bmatrix} - 1.5) = [2, \ 2]^{\mathsf{T}} \begin{bmatrix} 1\\0 \end{bmatrix} - 1.5 = 0.5 > 0$$

och

$$y_2(\mathbf{x}_2^{\mathsf{T}} \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix} - 1.5) = -1([1, \ 2]^{\mathsf{T}} \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix} - 1.5) = (-1)(-0.5) = 0.5 > 0.$$

Och för  $L_2$ :

$$y_1(\mathbf{x}_1^{\mathsf{T}} \begin{bmatrix} \sqrt{2} \\ \sqrt{2} \end{bmatrix} - 3.5\sqrt{2}) = [2, \ 2]^{\mathsf{T}} \begin{bmatrix} \sqrt{2} \\ \sqrt{2} \end{bmatrix} - 3.5\sqrt{2} = 0.5\sqrt{2} > 0$$

och

$$y_2(\mathbf{x}_2^{\intercal} \begin{bmatrix} \sqrt{2} \\ \sqrt{2} \end{bmatrix} - 3.5\sqrt{2}) = -1([1, \ 2]^{\intercal} \begin{bmatrix} \sqrt{2} \\ \sqrt{2} \end{bmatrix} - 3.5\sqrt{2}) = (-1)(-0.5\sqrt{2}) = 0.5\sqrt{2} > 0$$

4

Observation. Hyperplan kan konstrueras enkelt genom att man i  $\mathbb{R}^p$  väljer p stycken punkter  $\mathbf{x}_i$  som man vill att planet ska gå igenom och sedan löser ekvationssystemet  $X\boldsymbol{\beta} = -\boldsymbol{\beta}_0$  där X är en matris där raderna består av punkterna  $\mathbf{x}_i$ ,  $i = 1, \ldots, p$  och  $\boldsymbol{\beta}_0$  är en vektor av värdena  $\boldsymbol{\beta}_0$ .

Som syns i exempel 1.1.1 så kan det finnas många separerande hyperplan ifall ett klassificeringsproblem är linjärt separabelt och frågan är ju då vilket av alla separerande hyperplan man borde välja.

### 1.2 Optimala separerande hyperplan

Inom statistiken finns många olika sätt att anpassa en modell till data och dessa sätt kan ofta visas vara ekvivalenta med något optimeringsproblem, till exempel maximum likelihood-metoden (ML-metoden) för linjär regression som kan visas vara ekvivalent med minstakvadratmetoden. Dessa optimeringsproblem kan oftast ändras genom att man lägger till eller tar bort termer i objektivfunktionen eller ändrar på kraven.

För separerande hyperplan kommer vi att behandla ett optimeringsproblem som är utformat så att det kortaste avståndet från hyperplanet till de närmaste träningspunkterna från vardera klass maximeras [?]. Med andra ord fås följande optimeringsproblem

$$\max_{\widehat{\boldsymbol{\beta}},\beta_0,\|\widehat{\boldsymbol{\beta}}\|=1} C$$
så att 
$$y_i(\mathbf{x}_i^{\mathsf{T}}\widehat{\boldsymbol{\beta}} + \beta_0) \ge C, \quad i = 1,\dots, N$$
(1.2)

där C kallas marginalen och betecknar avståndet från hyperplanet till de närmaste punkterna.

Observation. Ifall alla punkter är rätt klassificerade så anger  $y_i(\mathbf{x}_i^{\mathsf{T}}\widehat{\boldsymbol{\beta}} + \beta_0)$  det absoluta avståndet mellan hyperplanet och punkten  $\mathbf{x}_i$ .

Förhoppningen är här att man genom att välja det separerande hyperplan som befinner sig så långt som möjligt från båda klasserna hittar ett hyperplan som även generaliserar till ny data så bra som möjligt. Dessutom kommer vi också se att detta är ett sätt att unikt välja ett separerande hyperplan.

För att se att optimeringsproblemet (1.2) är konvext, det vill säga har en unik lösning, måst vi skriva om det något. Vi börjar med att gör oss av med kravet  $\|\hat{\beta}\| = 1$  genom att byta ut kraven

$$y_i(\mathbf{x}_i^{\mathsf{T}}\widehat{\boldsymbol{\beta}} + \beta_0) \ge C, \quad i = 1, \dots, N$$

mot kraven

$$y_i \left( \mathbf{x}_i^{\mathsf{T}} \frac{\boldsymbol{\beta}}{\|\boldsymbol{\beta}\|} + \frac{\beta_1}{\|\boldsymbol{\beta}\|} \right) = \frac{1}{\|\boldsymbol{\beta}\|} y_i (\mathbf{x}_i^{\mathsf{T}} \boldsymbol{\beta} + \beta_1) \ge C, \quad i = 1, \dots, N$$

eller ekvivalent

$$y_i(\mathbf{x}_i^{\mathsf{T}}\boldsymbol{\beta} + \beta_1) \geq C \|\boldsymbol{\beta}\|, \quad i = 1, \dots, N.$$

där man alltså valt en av de andra representationerna för samma hyperplan genom att skala om  $\hat{\beta}$  och  $\beta_0$ . Vidare kan C elimineras genom att man väljer  $C = \frac{1}{\|\beta\|}$  och får

$$y_i(\mathbf{x}_i^{\mathsf{T}}\boldsymbol{\beta} + \beta_1) > 1, \quad i = 1, \dots, N$$

och eftersom att  $C = \frac{1}{\|\beta\|}$  ökar när  $\|\beta\|$  minskar är maximering av C ekvivalent med minimering av  $\|\beta\|$  så vi får optimeringsproblemet

$$\min_{\boldsymbol{\beta}, \beta_1} \quad \|\boldsymbol{\beta}\|$$
så att  $y_i(\mathbf{x}_i^{\mathsf{T}}\boldsymbol{\beta} + \beta_1) \ge 1, \quad i = 1, \dots, N.$ 

Därefter görs ännu en kvadratisk transformering av  $kostfunktionen \|\boldsymbol{\beta}\|$  alltså man noterar att  $\operatorname{argmin}_{\boldsymbol{\beta},\beta_1} \|\boldsymbol{\beta}\| = \operatorname{argmin}_{\boldsymbol{\beta},\beta_1} \frac{1}{2} \|\boldsymbol{\beta}\|^2$ . Med andra ord har vi ett optimeringsproblem av en kvadratisk funktion med linjära krav alltså ett konvext optimeringsproblem där lösningar existerar.

Observation. För två vektorer  $\mathbf{a}$  och  $\mathbf{b}$  i  $\mathbb{R}^n$  kan produkten  $\mathbf{a}^{\mathsf{T}}\mathbf{b}$  uttryckas som den normala inre produkten  $\langle \mathbf{a}, \mathbf{b} \rangle$  i  $\mathbb{R}^n$ . Detta kommer att komma till nytta i kapitel 2 där konvexiteten för en utvidgning av det linjära problemet utforskas.

Ovanstående resonemang ger alltså ett bevis för sats 1.2.1.

Sats 1.2.1. Låt  $\hat{\beta}$ ,  $\beta \in \mathbb{R}^p$  och  $\beta_0$ ,  $\beta_1 \in \mathbb{R}$ . Då är optimeringsproblemet

$$\begin{aligned} & \max_{\widehat{\boldsymbol{\beta}},\beta_0,\|\widehat{\boldsymbol{\beta}}\|=1} & C \\ & \text{så att} & y_i(\mathbf{x}_i^{\intercal}\widehat{\boldsymbol{\beta}}+\beta_0) \geq C, \quad i=1,\dots,N \end{aligned}$$

konvext och ekvivalent med optimeringsproblemet

$$\min_{\boldsymbol{\beta}, \beta_1} \quad \frac{1}{2} \|\boldsymbol{\beta}\|^2$$
så att  $y_i(\mathbf{x}_i^{\mathsf{T}} \boldsymbol{\beta} + \beta_1) \ge 1, \quad i = 1, \dots, N$ 

ifall träningsdatan  $(\mathbf{x}_i, y_i)$  är sådant att klassificeringsproblemet är linjärt separabelt.

Vidare ger observationen ovan ett till ekvivalent optimeringsproblem:

Korollarium 1.2.2. Optimeringsproblemen i sats 1.2.1 är ekvivalenta med optimeringsproblemet

$$\min_{\boldsymbol{\beta}, \beta_1} \quad \frac{1}{2} \langle \boldsymbol{\beta}, \boldsymbol{\beta} \rangle$$
  
så att  $y_i (\langle \mathbf{x}_i, \boldsymbol{\beta} \rangle + \beta_1) \ge 1, \quad i = 1, \dots, N$ 

för samma krav.

Bevis. Normen  $\|\boldsymbol{\beta}\| = (\boldsymbol{\beta}^{\mathsf{T}}\boldsymbol{\beta})^{\frac{1}{2}}$  kan uttryckas som  $\langle \boldsymbol{\beta}, \boldsymbol{\beta} \rangle^{\frac{1}{2}}$  alltså är  $\frac{1}{2}\|\boldsymbol{\beta}\|^2 = \frac{1}{2}\langle \boldsymbol{\beta}, \boldsymbol{\beta} \rangle$ . Resten följer från observationen.

Framställningen i korollarium 1.2.2 används i många källor, bland annat i den ursprungliga framställningen för stödvektormaskinen och är en av de mer generella framställningarna för optimeringsproblemet som stödvektormaskinen bygger på.

#### 1.2.1 Primala och duala problem

För att hitta alla extrempunkter till ett optimeringsproblem, det vill säga lösa ett konvext optimeringsproblem, används Lagrangemultiplikatorer. Den primala Lagrangefunktionen  $L_P$  för optimeringsproblemet

$$\min_{\boldsymbol{\beta}, \beta_1} \quad \frac{1}{2} \|\boldsymbol{\beta}\|^2$$
så att  $y_i(\mathbf{x}_i^{\mathsf{T}} \boldsymbol{\beta} + \beta_1) > 1, \quad i = 1, \dots, N$ 

ges då av

$$L_{P} = \frac{1}{2} \|\boldsymbol{\beta}\|^{2} - \sum_{i=1}^{N} \lambda_{i} \left( y_{i} \left( \mathbf{x}_{i}^{\mathsf{T}} \boldsymbol{\beta} + \beta_{1} \right) - 1 \right)$$
 (1.3)

som ska minimeras med avseende på  $\beta$  och  $\beta_1$ .

För att minimera  $L_P$  sätter vi derivatorna med avseende på elementen  $[\boldsymbol{\beta}]_j$  av  $\boldsymbol{\beta}$  och  $\beta_1$  till 0, det vill säga vi får följande relationer:

$$D_{[\beta]_{j}}(L_{P}) = D_{[\beta]_{j}}\left(\frac{1}{2}\boldsymbol{\beta}^{\mathsf{T}}\boldsymbol{\beta}\right) - D_{[\beta]_{j}}\left(\sum_{i=1}^{N}\left(\lambda_{i}y_{i}\left(\mathbf{x}_{i}^{\mathsf{T}}\boldsymbol{\beta}\right) + \lambda_{i}y_{i}\beta_{1} - \lambda_{i}\right)\right)$$

$$= D_{[\beta]_{j}}\left(\frac{1}{2}\sum_{k=1}^{p}\left[\boldsymbol{\beta}\right]_{k}^{2}\right) - \sum_{i=1}^{N}D_{[\beta]_{j}}\left(\lambda_{i}y_{i}\left(\sum_{k=1}^{p}\left[\mathbf{x}_{i}\right]_{k}\left[\boldsymbol{\beta}\right]_{k}\right) + \lambda_{i}y_{i}\beta_{1} - \lambda_{i}\right)$$

$$= [\boldsymbol{\beta}]_{j} - \sum_{i=1}^{N}D_{[\beta]_{j}}\left(\sum_{k=1}^{p}\lambda_{i}y_{i}\left[\mathbf{x}_{i}\right]_{k}\left[\boldsymbol{\beta}\right]_{k}\right) + 0$$

$$= [\boldsymbol{\beta}]_{j} - \sum_{i=1}^{N}\lambda_{i}y_{i}\left[\mathbf{x}_{i}\right]_{j}$$

$$(1.4)$$

 $d\ddot{a}r \ j = 1, \dots p \ och$ 

$$D_{\beta_1}(L_P) = D_{\beta_1} \left( -\sum_{i=1}^N \lambda_i y_i \beta_1 \right) = -\sum_{i=1}^N \lambda_i y_i.$$

Vidare kan 1.4 skrivas om som derivatan med avseende på hela  $\boldsymbol{\beta}$  eftersom att  $[D_{\boldsymbol{\beta}}(L_p)]_j = D_{[\boldsymbol{\beta}]_j}(L_p)$ . Efter att man tar i beaktande kraven att  $D_{\boldsymbol{\beta}}(L_p) = \mathbf{0}$  och  $D_{\beta_1}(L_p) = 0$  fås följande krav:

$$\beta = \sum_{i=1}^{N} \lambda_i y_i \mathbf{x}_i \tag{1.5}$$

$$0 = \sum_{i=1}^{N} \lambda_i y_i. \tag{1.6}$$

Efter omskrivning av  $\|\boldsymbol{\beta}\|^2$  som  $\boldsymbol{\beta}^{\mathsf{T}}\boldsymbol{\beta}$  ger insättning av kraven 1.5 och 1.6 i  $L_P$  följande duala problem

$$\begin{split} L_D = & \frac{1}{2} \left( \sum_{i=1}^{N} \lambda_i y_i \mathbf{x}_i \right)^{\mathsf{T}} \left( \sum_{j=1}^{N} \lambda_j y_j \mathbf{x}_j \right) \\ & - \sum_{i=1}^{N} \lambda_i \left( y_i \left( \mathbf{x}_i^{\mathsf{T}} \left( \sum_{j=1}^{N} \lambda_j y_j \mathbf{x}_j \right) + \beta_1 \right) - 1 \right) \\ = & \frac{1}{2} \sum_{i=1}^{N} \lambda_i y_i \mathbf{x}_i^{\mathsf{T}} \left( \sum_{j=1}^{N} \lambda_j y_j \mathbf{x}_j \right) \\ & - \sum_{i=1}^{N} \lambda_i y_i \mathbf{x}_i^{\mathsf{T}} \left( \sum_{j=1}^{N} \lambda_j y_j \mathbf{x}_j \right) - \beta_1 \sum_{i=1}^{N} \lambda_i y_i + \sum_{i=1}^{N} \lambda_i \\ = & - \frac{1}{2} \sum_{i=1}^{N} \sum_{j=1}^{N} \lambda_i \lambda_j y_i y_j \mathbf{x}_i^{\mathsf{T}} \mathbf{x}_j + \sum_{i=1}^{N} \lambda_i \\ & = - \frac{1}{2} \sum_{i=1}^{N} \sum_{j=1}^{N} \lambda_i \lambda_j y_i y_j \mathbf{x}_i^{\mathsf{T}} \mathbf{x}_j + \sum_{i=1}^{N} \lambda_i \\ \end{split}$$

som ska maximeras med avseende på  $\lambda_i$ ,  $i=1,\ldots,N$ , och kravet

$$\lambda_i \ge 0, \ i = 1, \dots, N. \tag{1.7}$$

Uträkningarna och kravet  $\lambda_i \geq 0$ ,  $i=1,\ldots,N$ , kan motiveras genom Karush-Kuhn-Tucker kraven för konvexa problem, det vill säga kraven 1.5, 1.6 och 1.7 samt kravet

$$\lambda_i \left( y_i \left( \mathbf{x}_i^{\mathsf{T}} \boldsymbol{\beta} + \beta_1 \right) - 1 \right) = 0, \ i = 1, \dots$$
 (1.8)

Observation. Kraven 1.5 till 1.8 säger något om hurudan den optimala lösningen  $(\beta, \beta_1)$  måste vara;

- Krav 1.5 säger att vektorn  $\boldsymbol{\beta}$  är en linjär kombination av vektorerna  $\mathbf{x}_i, i = 1, \dots, N$ .
- Ifall  $\lambda_i > 0$  så ger krav 1.8 att  $y_i(\mathbf{x}_i^{\mathsf{T}}\boldsymbol{\beta} + \beta_1) = 1$  vilket enligt det ursprungliga optimeringsproblemet 1.2 ska tolkas som att punkten  $\mathbf{x}_i$  ligger på avståndet C från det separerande hyperplanet, det vill säga punkten  $\mathbf{x}_i$  är en av de punkter som ligger närmast det separerande hyperplanet.
- Ifall  $y_i(\mathbf{x}_i^{\mathsf{T}}\boldsymbol{\beta} + \beta_1) > 1$  så är  $\lambda_i = 0$  och punkten  $\mathbf{x}_i$  är inte en av de punkter som ligger närmast det separerande hyperplanet.
- Parametern  $\beta_1$  kan bestämmas genom att man utnyttjar relationen  $y_i(\mathbf{x}_i^{\mathsf{T}}\boldsymbol{\beta} + \beta_1) = 1$  för någon av de punkter där  $\lambda_i > 0$ .

Baserat på de tre tidigare slutsatserna kan vi vidare dra slutsatsen att  $\beta$  inte bara är en linjär kombination av träningsdatan  $\mathbf{x}_i$  utan en linjär kombination av endast de punkter  $\mathbf{x}_i$  som ligger på randen av området på avståndet  $\pm C$  från det optimala separerande hyperplanet. Dessa punkter kallas stödvektorer.

Kvar finns också möjligheten att  $\lambda_i = 0$  och  $y_i (\mathbf{x}_i^{\mathsf{T}} \boldsymbol{\beta} + \beta_1) = 1$ . Detta implicerar att åtminstone p+1 stycken punkter med  $y_i (\mathbf{x}_i^{\mathsf{T}} \boldsymbol{\beta} + \beta_1) = 1$  existerar och vidare ligger dessa punkter  $\mathbf{x}_i$  på samma p-dimensionella hyperplan. Detta betyder att vilken som helst av punkterna kan skrivas som en linjär kombination av de andra punkterna. Existensen av en entydig lösning till optimeringsproblemet kan alltså inte garanteras men sannolikheten att de punkter som ligger närmast det optimala separerande hyperplanet ligger på samma hyperplan är mycket liten, speciellt om man tar datorernas begränsade värderymd i beaktande.

#### 1.3 Det oseparabla fallet

Antag att träningsdatan  $(\mathbf{x}_i, y_i)$  inte är linjärt separabelt, det vill säga det existerar inte något hyperplan  $\{\mathbf{x}: f(\mathbf{x}) = \mathbf{x}^{\mathsf{T}}\boldsymbol{\beta} + \beta_1\}$  med  $y_i(\mathbf{x}_i^{\mathsf{T}}\boldsymbol{\beta} + \beta_1) > 0$  för alla träningspar  $(\mathbf{x}_i, y_i), i = 1, \ldots, N$ . Träningsdata som inte är linjärt separabelt leder till att optimeringsproblemet 1.2 samt optimeringsproblemen i sats 1.2.1 inte är lösbara.

# 1.4 En enkel utvidgning med olinjära faktorer?

Visa att problemet lösbart

## Kapitel 2

## Hilbertrumteori, reproducerande kärnor

Varför utvidga fakoterna?

### 2.1 Grundläggande teori

Bevis av Mercers villkor för positivsemidefinita ekvationer/operatorer.

### 2.2 SVM som exempel

Något exempel. Introducera SVM för regression?

## Litteraturförteckning

[1] Hastie Trevor, Robert Tibshirani, and Jerome Friedman. *The elements of statistical learning : data mining, inference, and prediction.* Springer series in statistics. Springer New York Inc., 2001.