

决策树

$$\text{Error} = \text{noise} + \text{bias} + \text{variance}$$

集成学习 $X \Rightarrow \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N x_i$

$$E((X - E(X))^2)$$

$$= \sigma^2$$

$$E\left(\frac{1}{N} \sum x_i - E(X)\right)^2$$

$$= \frac{1}{N^2} E\left(\sum x_i - NE(X)\right)^2$$

$$= \frac{1}{N^2} E\left((x_1 - E(X)) + (x_2 - E(X)) + \dots\right)^2$$

$$= \frac{1}{N^2} E\left[(x_1 - E(X))^2 + \dots + (x_N - E(X))^2\right.$$

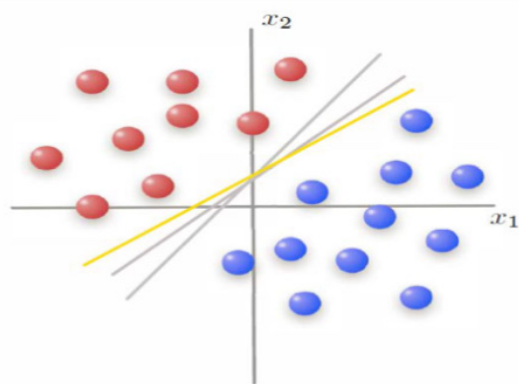
$$\left. + \sum_{i \neq j} (x_i - E(X))(x_j - E(X))\right]$$

$$= \frac{1}{N^2} \left[E(x_1 - E(X))^2 + \dots + E(x_N - E(X))^2 \right]$$

$$= \frac{1}{N^2} N \sigma^2 = \frac{\sigma^2}{N} \quad \text{方差下降}$$

SVM (max margin classifier)

Support Vector Machine



评判标准:
分界线离最近
的点越远越好

Is there an "optimal" way to separate the data?

这么多分类界面，哪个是最优的呢？

Basic problem:

Given N data point, $x_1, \dots, x_N \in \mathbb{R}^m$
 each with a label $d_i = \pm 1$
 find a hyperplane

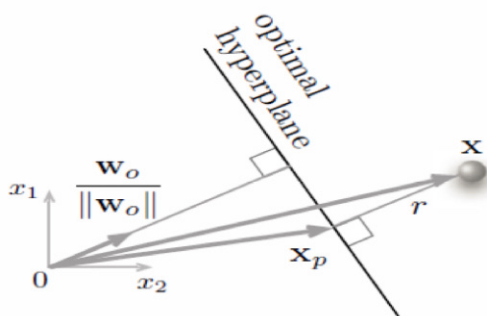
$$w^T x + b = 0 \quad (w \in \mathbb{R}^m, b \in \mathbb{R})$$

that separates data into two groups

$$\begin{cases} g(\mathbf{x}_i) = \mathbf{w}_o^T \mathbf{x}_i + b_o \geq +1 & \text{for } d_i = +1 \\ g(\mathbf{x}_i) = \mathbf{w}_o^T \mathbf{x}_i + b_o \leq -1 & \text{for } d_i = -1 \end{cases}$$

$$\Rightarrow d_i (w_o^T x_i + b_o) \geq 1$$

同时要最大化间隔 r , $\begin{cases} r \propto \frac{1}{\|w\|} \text{ (证明见ppt)} \\ w_o \perp \text{hyperplane} \end{cases}$



\Rightarrow

优化模型

Find w 和 b

$$\min: \Phi(w) = \frac{1}{2} w^T w$$

$$\text{Subject to: } d_i (w^T x_i + b) \geq 1$$

接下来用 KKT 条件化成对偶问题

KKT条件 (拉格朗日乘子推广)

<https://zhuanlan.zhihu.com/p/38163970>

① 等式约束优化

$$\begin{aligned} \min & f(x) \\ \text{s.t.} & g(x) = 0 \end{aligned}$$

$$\Rightarrow L(x, \lambda) = f(x) + \lambda g(x)$$

$$\Rightarrow \min L(x, \lambda)$$

$$\begin{cases} \nabla_x L = \nabla f + \lambda \nabla g = 0 \\ \nabla_\lambda L = g(x) = 0 \end{cases} \Rightarrow \text{求解即得 } x^*$$

② 不等式约束优化

$$\begin{aligned} \min & f(x) \\ \text{s.t.} & g(x) \leq 0 \end{aligned}$$

$$\Rightarrow L(x, \lambda) = f(x) + \lambda g(x)$$

$$\Rightarrow \begin{cases} \nabla_x L = \nabla f + \lambda \nabla g = 0 \end{cases}$$

$$g(x) \leq 0$$

$$\lambda \geq 0$$

$$\lambda g(x) = 0$$

$$\begin{aligned} \min & f(x) \\ \text{s.t.} & g(x) \geq 0 \end{aligned}$$

$$\Rightarrow L(x, \lambda) = f(x) - \lambda g(x)$$

$$\Rightarrow \begin{cases} \nabla_x f = \nabla f - \lambda \nabla g = 0 \end{cases}$$

$$g(x) \geq 0$$

$$\lambda \geq 0$$

$$\lambda g(x) = 0$$

接下来我们将约束等式 $g(x) = 0$ 推广为不等式 $g(x) \leq 0$ 。考虑这个问题

$$\begin{aligned} \min \quad & f(x) \\ \text{s.t.} \quad & g(x) \leq 0. \end{aligned}$$

约束不等式 $g(x) \leq 0$ 称为原始可行性(primal feasibility)，据此我们定义可行域(feasible region) $K = \{x \in \mathbb{R}^n | g(x) \leq 0\}$ 。假设 x^* 为满足约束条件的最佳解，分开两种情况讨论：

- (1) $g(x^*) < 0$ ，最佳解位于 K 的内部，称为内部解(interior solution)，这时约束条件是无效的(inactive)；
- (2) $g(x^*) = 0$ ，最佳解落在 K 的边界，称为边界解(boundary solution)，此时约束条件是有效的(active)。

这两种情况的最佳解具有不同的必要条件。

(1)内部解：在约束条件无效的情形下， $g(x)$ 不起作用，约束优化问题退化为无约束优化问题，因此驻点 x^* 满足 $\nabla f = 0$ 且 $\lambda = 0$ 。

(2)边界解：在约束条件有效的情形下，约束不等式变成等式 $g(x) = 0$ ，这与前述Lagrange乘数法的情况相同。我们可以证明驻点 x^* 发生于 $\nabla f \in \text{span} \nabla g$ ，换句话说，存在 λ 使得 $\nabla f = -\lambda \nabla g$ ，但这里 λ 的正负号是有其意义的。因为我们希望最小化 f ，梯度 ∇f (函数 f 在点 x 的最陡上升方向)应该指向可行域 K 的内部(因为你的最优解最小值是在边界取得的)，但 ∇g 指向 K 的外部(即 $g(x) > 0$ 的区域，因为你的约束是小于等于0)，因此 $\lambda \geq 0$ ，称为对偶可行性(dual feasibility)。

因此，不论是内部解或边界解， $\lambda g(x) = 0$ 恒成立，称为互补松弛性(complementary slackness)。整合上述两种情况，最佳解的必要条件包括Lagrangian函数 $L(x, \lambda)$ 的定常方程式、原始可行性、对偶可行性，以及互补松弛性：

优化模型 Find w 和 b

$$\begin{cases} \min: \Phi(w) = \frac{1}{2} w^T w \\ \text{Subject to: } d_i (w^T x_i + b) \geq 1 \end{cases}$$

对偶问题推导

$$\min L(w, b, \lambda) = \frac{1}{2} w^T w - \sum_i \lambda_i [d_i (w^T x_i + b) - 1]$$

$$\text{s.t.} \quad \frac{\partial L(w, b, \lambda)}{\partial w} = 0 \Rightarrow w = \sum_i \lambda_i d_i x_i$$

$$\frac{\partial L(w, b, \lambda)}{\partial b} = 0 \Rightarrow \sum_i \lambda_i d_i = 0$$

$$\begin{aligned}\lambda_i &\geq 0 \\ d_i (w^T x_i + b) &\geq 1 \\ \lambda_i [d_i (w^T x_i + b) - 1] &= 0\end{aligned}$$

$$\Rightarrow L(w, b, \lambda) = \sum_i \lambda_i - \frac{1}{2} \sum_i \sum_j \lambda_i d_i \lambda_j d_j x_i^T x_j$$

$$\text{s.t.} \quad \begin{cases} \lambda_i \geq 0 \\ \sum_i \lambda_i d_i = 0 \end{cases}$$

求解得到 λ_i, d_i 后

$$w = \sum_i \lambda_i d_i x_i$$

$$b = 1 - w^T x_i \quad (x_i \text{ 应为支撑向量且 } d_i = 1)$$

$$d_i (w^T x_i + b) = 1$$

SVM推导

$$\text{超平面} \quad w^T x + b = 0$$

$$g(x) = w^T x + b$$

$$g(x) = w^T (x - x^*)$$

$$= w^T r$$

$$g(x) = \|w\| r$$

$$r \propto \frac{1}{\|w\|}$$

$$\Rightarrow \min \quad \frac{1}{2} w^T w$$

$$\text{subject to } d_i (w^T x_i + b) \geq 1 \quad \text{for } i=1:N$$

引入拉格朗日乘子

$$\min L(w, b) = \frac{1}{2} w^T w - \sum_{i=1}^N \lambda_i (d_i (w^T x_i + b) - 1)$$

$$\begin{cases} \frac{\partial L(w, b)}{\partial w} = 0 \Rightarrow w = \sum_{i=1}^N \lambda_i d_i x_i \\ \frac{\partial L(w, b)}{\partial b} = 0 \Rightarrow \sum_{i=1}^N \lambda_i d_i = 0 \\ \lambda_i \geq 0 \quad d_i (w^T x_i + b) - 1 \geq 0 \end{cases}$$

$$\Rightarrow \quad = \frac{1}{2} \left(\sum_i \lambda_i d_i x_i^T \right) \left(\sum_j \lambda_j d_j x_j \right) + \sum_i \lambda_i - \sum_i \lambda_i d_i b - \sum_i \lambda_i d_i \left(\sum_j \lambda_j d_j x_j^T \right) x_i$$

$$\min \quad \sum_i \lambda_i - \frac{1}{2} \sum_i \sum_j \lambda_i d_i \lambda_j d_j x_i^T x_j$$

$$\begin{cases} \lambda_i \geq 0 \\ \sum_i \lambda_i d_i = 0 \end{cases}$$

在解出 λ_i 之后

$$w = \sum_i \lambda_i d_i x_i$$

$$b = \frac{1}{d_i} - w^T x_i \quad (x_i \text{ 支持向量})$$