

SVM的参数推导.

Step 1: 定义分类超平面 $A: w^T x + b = 0$,
可得法向量 w , 单位法向量为 $\frac{w}{\|w\|}$.

$$\text{边界超平面: } \begin{cases} w^T x + b = 1 \\ w^T x + b = -1 \end{cases} \Rightarrow \text{归一化后: } \begin{cases} w^T x + b = 1 \\ w^T x + b = -1 \end{cases}$$

$$\text{设置=分类标签: } \begin{cases} y_i = 1, \text{ 则 } w^T x_i + b \geq 1 \\ y_i = -1, \text{ 则 } w^T x_i + b \leq -1 \end{cases} \Rightarrow y_i (w^T x_i + b) \geq 1$$

Step 2: 边界超平面 $A_1: w^T x + b = 1$ 上任意一点 x_0 到 A 的距离 $d_1 = \frac{w^T x_0 + b}{\|w\|} = \frac{1}{\|w\|}$.

\therefore 间隔 $\text{margin} = \frac{2}{\|w\|}$, 要间隔最大化, 即求 w 的最小值,

极值问题转化: $f(w) = \frac{1}{2} \|w\|^2$, 加入平方是为了方便计算. 和求模长.

$$\therefore \text{SVM} \rightarrow \text{最优化问题: } \begin{cases} \min_{w, b} \frac{1}{2} \|w\|^2 \\ y_i (w^T x_i + b) \geq 1, \quad i = 1, 2, \dots, N. \end{cases}$$

Step 3: 把最优化问题化为拉格朗日函数形态

$$L(w, b, \alpha) = \frac{1}{2} \|w\|^2 - \sum_{i=1}^N \alpha_i (y_i (w^T x_i + b) - 1) \quad (\alpha_i \geq 0)$$

$$\therefore \text{目标函数: } \min_{w, b} \max_{\alpha} L(w, b, \alpha), \quad (\alpha_i \geq 0)$$

把函数第二部分当作惩罚项, 则:

若 $y_i (w^T x_i + b) > 1$ 时, $L(w, b, \alpha)$ 最大化, 则 $\alpha = 0$.
若 $y_i (w^T x_i + b) < 1$ 时, $L(w, b, \alpha)$ 最大化, 则 $\alpha = +\infty$, 此时惩罚过大, 则整体无法取到最小值.

Step 4: 化简 $L(w, b, \alpha)$.

$$L(w, b, \alpha) = \frac{1}{2} \|w\|^2 - \sum_{i=1}^N \alpha_i (y_i (w^T x_i + b) - 1)$$

$$= \frac{1}{2} \|w\|^2 - \sum_{i=1}^N (\alpha_i y_i w^T x_i + \alpha_i y_i b - \alpha_i)$$

$$= \frac{1}{2} w^T \cdot w - \sum_{i=1}^N (\alpha_i y_i w^T x_i) - \sum_{i=1}^N (\alpha_i y_i b) + \sum_{i=1}^N \alpha_i$$

要求极值, 先对参数 w 和 b 求偏导.

$$\frac{\partial L}{\partial w} = w - \sum_{i=1}^N \alpha_i y_i x_i = 0 \Rightarrow w = \sum_{i=1}^N \alpha_i y_i x_i$$

$$\frac{\partial L}{\partial b} = - \sum_{i=1}^N \alpha_i y_i = 0 \Rightarrow \sum_{i=1}^N \alpha_i y_i = 0$$

结果中带有未知参数 α , 因此无法快速求解.

Step 5: 引入拉格朗日对偶函数.

$$L(x, \alpha) = f(x) + \sum_{i=1}^q \alpha_i h_i(x), \quad \text{且对偶差} \Delta = \min_x L(x, \alpha) - \max_{\alpha} g(\alpha)$$

$$\text{且对偶差: } \Delta = \min_x L(x, \alpha) - \max_{\alpha} g(\alpha)$$

$$\text{强对偶关系需 KKT 条件: } \begin{cases} \frac{\partial L}{\partial x_i} = 0, \quad \forall i = 1, 2, \dots, d \\ h_i(x) \leq 0, \quad \forall i = 1, 2, \dots, q \\ \alpha_i \geq 0, \quad \forall i = 1, 2, \dots, q \\ \alpha_i h_i(x) = 0, \quad \forall i = 1, 2, \dots, q \end{cases}$$

对于第四个条件: 即 $\alpha_i (w^T x_i + b) - 1 = 0$,

若 x_i 在边界超平面上: 则 $(w^T x_i + b) - 1 = 0$, 即假设两个边界中的一个, 此时 x_i 也叫支持向量, 否则则 α_i 必须为 0,

因此也满足

Step 6. 进行转换:

由 Step 5 可知: 已满足强对偶关系, 则 $\Delta = 0$.

$$\Rightarrow \min_{w, b} \max_{\alpha_i \geq 0} L(w, b, \alpha) = \max_{\alpha_i \geq 0} g(\alpha)$$

由 $L(w, b, \alpha)$ 对 w, b 参数求导为 0, 即求最小值, 代入可得:

$$L(w, b, \alpha) = \frac{1}{2} w^T \cdot w - w^T \cdot \left(\sum_{i=1}^N \alpha_i y_i x_i \right) - b \left(\sum_{i=1}^N \alpha_i y_i \right) + \sum_{i=1}^N \alpha_i$$

$$= \frac{1}{2} w^T \cdot w - w^T \cdot w - 0 + \sum_{i=1}^N \alpha_i$$

$$= -\frac{1}{2} w^T \cdot w + \sum_{i=1}^N \alpha_i, \quad \text{再次代入, 将 } w \text{ 求有两个不同的样本点.}$$

$$= -\frac{1}{2} \left(\sum_{i=1}^N \alpha_i y_i x_i \right)^T \cdot \left(\sum_{j=1}^N \alpha_j y_j x_j \right) + \sum_{i=1}^N \alpha_i$$

$$= -\frac{1}{2} \left(\sum_{i=1}^N \alpha_i y_i x_i^T \right) \cdot \left(\sum_{j=1}^N \alpha_j y_j x_j \right) + \sum_{i=1}^N \alpha_i$$

$$= -\frac{1}{2} \sum_{i,j=1}^N \alpha_i y_i x_i^T \cdot \alpha_j y_j x_j + \sum_{i=1}^N \alpha_i$$

再把矩阵相乘转为内积形式: $\therefore L_d = \sum_{i=1}^N \alpha_i - \frac{1}{2} \sum_{i,j=1}^N \alpha_i \alpha_j y_i y_j X_i \cdot X_j$.
 此时 L_d 就是只含参数 α 的关于 $L(w, b, \alpha)$ 的对偶函数 $g(\alpha)$,
 且 $L_d = \min_{w, b} L(w, b, \alpha)$.

$$i) \min_{w, b} \max_{\alpha_i \geq 0} L(w, b, \alpha) = \max_{\alpha_i \geq 0} g(\alpha) = \max_{\alpha_i \geq 0} \min_{w, b} L(w, b, \alpha)$$

$$ii) \text{目标函数变为 } \max_{\alpha_i \geq 0} \left(\sum_{i=1}^N \alpha_i - \frac{1}{2} \sum_{i,j=1}^N \alpha_i \alpha_j y_i y_j X_i \cdot X_j \right)$$

从而可以解出 α , 再代入 $w = \sum_{i=1}^N \alpha_i y_i X_i$, 可求出 w .
 再代入分类超平面 $w^T x + b = 0$, 可求出 b .

$$i) \text{得出决策函数 } f(x\text{-test}) = \text{sign}(w^T \cdot x\text{-test} + b) \\ = \text{sign}\left(\sum_{i=1}^N \alpha_i y_i X_i \cdot x\text{-test} + b\right).$$

$$\therefore \text{对于二分类问题: } \text{sign}(h) = \begin{cases} 1, & h > 0 \\ -1, & h < 0 \end{cases}$$