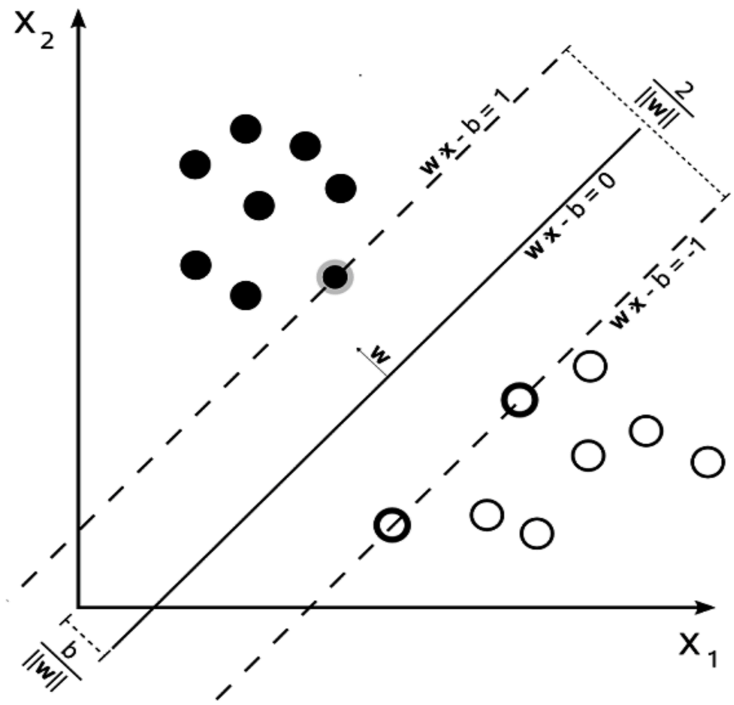
SVM 支持向量机

1. 线性svm

1.1 目标函数

二维情况下的分类问题：



考虑多维情况的二分类问题，假设存在一个超平面能够将正负样本划分开，则所有的样本点满足以下条件：

$$
\begin{aligned}
w^T x_i + b &\geq \ \ 1 \quad y_i = +1 \\
w^T x_i + b &\geq -1 \quad y_i = -1
\end{aligned}
$$

计算两个离超平面最近的正负样本的间隔距离，该样本点称为**支持向量**：

在n维空间中，分割超平面方程：

$$f(x) = w_1 x_1 + w_2 x_2 + w_3 x_3 \ldots w_n x_n + b$$

假设距离分割超平面最近距离的样本点是x_k，计算距离：

$$d = 2 * \frac{|w^{(1)}x_k^{(1)} + w^{(2)}x_k^{(2)} + w^{(3)}x_k^{(3)} \ldots + w^{(n)}x_k^{(n)} + b|}{||\vec{w}||^2} = \frac{2}{||\vec{w}||^2}$$

SVM的目的是在能够满足上述不等式的情况下，使得间隔距离最大，使得分类效果最好：

$$\max_{(w,b)} \frac{2}{||\vec{w}||^2}$$
$$s.t.\ y_i(w^T x_i + b) \geq 1\ , i = 1, 2, 3..n$$

转换成等价问题，得出目标函数：

$$\min_{(w,b)} \frac{1}{2}||\vec{w}||^2$$
$$s.t.\ y_i(w^T x_i + b) - 1 \geq 0$$

该问题带有不等式约束，可由拉格朗日乘子法求解。

1.2 拉格朗日函数

运用拉格朗日函数将不等式约束引入到目标函数中，方便求解：

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

$L(w, b, \alpha)$对α, β求极大值，就等价于原目标函数

$$\max_\alpha L(w, b, \alpha) = \begin{cases} \frac{1}{2}||\vec{w}||^2, (1 - y_i(w^T x_i + b)) < 0 \\ +\infty, \quad (1 - y_i(w^T x_i + b)) \geq 0 \end{cases}$$
$$= \begin{cases} \frac{1}{2}||\vec{w}||^2, (y_i(w^T x_i + b) - 1) \geq 0 \\ +\infty, \quad (y_i(w^T x_i + b) - 1) < 0 \end{cases}$$

---

1. 如果 $(1 - y_i(w^T x_i + b)) < 0$ ，那么 $\alpha_i(1 - y_i(w^T x_i + b))$ 一定小于等于0，为了使的$L(w, b, \alpha)$取得极大值，α_i 一定等于0，这种情况下$\max L(w, b, \alpha) = \frac{1}{2}||\vec{w}||^2$ ，且满足不等式约束。
2. 如果 $(1 - y_i(w^T x_i + b)) \geq 0$ ，那么α_i可以取任意无限大的值使得$L(w, b, \alpha)$趋于无限大

再对上式求极小，可得：

$$\min_{w,b}\max_{\alpha} L(w,b,\alpha) = \min_{w,b}\begin{cases}\frac{1}{2}||\vec{w}||^2, (y_i(w^Tx_i+b)-1)\geq 0\\ +\infty, \quad (y_i(w^Tx_i+b)-1)<0\end{cases}$$
$$=\min_{w,b}\ \frac{1}{2}||\vec{w}||^2,\quad (y_i(w^Tx_i+b)-1)\geq 0\quad (\text{原目标问题})$$

这样，就将带有不等式约束条件的优化问题，转换成了对函数$L(x,w,\alpha)$先求极大再求极小的问题，即目标问题转换成：

$$\text{目标问题等价于}:\quad \min_{w,b}\max_{\alpha} L(w,b,\alpha) = \min_{w,b}\max_{\alpha}\left(\quad \frac{1}{2}||\vec{w}||^2 + \sum_i^N \alpha_i(1-y_i(w^Tx_i+b))\quad\right),\quad \alpha_i\geq 0$$

1.3 对偶问题和KKT条件

什么是对偶问题，通俗描述，就是将复杂问题转换成简单问题求解的方法

要想求解极值问题：

$$\min_{w,b}\max_{\alpha} L(w,b,\alpha) = \min_{w,x}\max_{\alpha}\left(\quad \frac{1}{2}||\vec{w}||^2 + \sum_i^N \alpha_i(1-y_i(w^Tx_i+b))\quad\right),\quad \alpha_i\geq 0\qquad ------(1)$$

我们可以将问题转换成这样的形式求解，能够简化问题的求解过程(后续会说明SVM为什么使用对偶)：

$$\max_{\alpha}\min_{w,b} L(w,b,\alpha) = \max_{\alpha}\min_{w,x}\left(\quad \frac{1}{2}||\vec{w}||^2 + \sum_i^N \alpha_i(1-y_i(w^Tx_i+b))\quad\right),\quad \alpha_i\geq 0\qquad ------(2)$$

假设(1)式的解为w^*,b^*,α^*，式(2)的解为$w^{*d},b^{*d},\alpha^{*d}$，需证明

$$L(w^*,b^*,\alpha^*) = L(w^{*d},b^{*d},\alpha^{*d})$$

拉格朗日对偶性定理：

带不等式约束和等式约束的优化问题

$$\min_x f(x)$$
$$s.t.\ c_i(x)\leq 0, h_j(x)=0$$

其拉格朗日函数：

$$L(x,\alpha,\beta) = f(x) + \sum_i^m \alpha_i c_i(x) + \sum_j^n \beta_j h_j(x)$$

假设，原问题 $\max_{\alpha,\beta}\min_x L(x,\alpha,\beta)$ 最优解为x^*,α^*,β^*，对应的最优值为p^*

对偶问题 $\min_x\max_{\alpha,\beta} L(x,\alpha,\beta)$ 最优解为$x^{*d},\alpha^{*d},\beta^{*d}$，对应的最优值为$d^*$

定理1：

$$d^* = L(x^*, \alpha^*, \beta^*) \leq L(x^{*d}, \alpha^{*d}, \beta^{*d}) = p^*$$

定理2:

如果 1. $f(x), c_i(x)$ 为凸函数 2. $h_j(x)$ 为仿射函数 3. $c_i(x)$ 严格可行

那么:

$$p^* = d^* \quad \text{的充要条件} \quad <==> \quad KKT\text{条件}: \begin{cases} \frac{d}{dx}L(x^*, \alpha^*, \beta^*) = 0 \\ \alpha_i^* c_i^* = 0 \quad (\text{松弛互补条件}) \\ c_i^*(x) \leq 0 \\ \alpha_i^* \geq 0 \\ h_j^*(x) = 0 \end{cases}$$

在原问题中，$\frac{1}{2}||\vec{w}||^2, (y_i(w^T x_i + b) - 1)$ 均为凸函数，根据上述定理2可知，只要满足KKT条件，就可以用求解对偶问题来代替求解原问题。

综上，原问题等价为:

$$\max_{\alpha} \min_{w,b} L(w, b, \alpha) = \max_{\alpha} \min_{w,b} (\quad \frac{1}{2}||\vec{w}||^2 + \sum_i^N \alpha_i (1 - y_i(w^T x_i + b)) \quad)$$
$$\text{解必须满足}: \begin{cases} \alpha_i (1 - y_i(w^T x_i + b)) = 0 \\ (y_i(w^T x_i + b) - 1) \geq 0 \\ \alpha_i \geq 0 \end{cases}$$

1.4 求解过程

目标函数:

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

先求解:

$$\min_{w,b} L(w, b, \alpha)$$

分别对 w, b 求导,并令其为0:

$$w - \sum_i^N \alpha_i y_i x_i = 0$$
$$\sum_i^N \alpha_i y_i = 0$$

将结果带入$L(w,b,\alpha)$：

$$L(w,b,\alpha)=\frac{1}{2}(\sum_i^N\alpha_iy_ix_i)^T\cdot(\sum_i^N\alpha_iy_ix_i)-\sum_i^N\alpha_iy_i(\ (\sum_j^N\alpha_iy_ix_i)^T\cdot x_i+b\ )+\sum_i^N\alpha_i$$
$$=-\frac{1}{2}\sum_i^N\sum_j^N\alpha_i\alpha_jy_iy_jx_i^Tx_j+\sum_i^N\alpha_i$$
$$s.t.\ \sum_i^N\alpha_iy_i=0,\alpha_i\geq 0$$

现在参数只剩下α，α是一个N维的向量，要求：

$$\max_\alpha L(\alpha)$$
$$s.t.\ \sum_i^N\alpha_iy_i=0,\alpha_i\geq 0$$

最后的参数用SMO求解，文章最后会介绍。

用SMO求解不但要用到这个最终表达式，还是用到对偶问题解成立的KKT条件：

$$\begin{cases}\alpha_i(1-y_i(w^Tx_i+b))=0\\(y_i(w^Tx_i+b)-1)\geq 0\\\alpha_i\geq 0\end{cases}$$

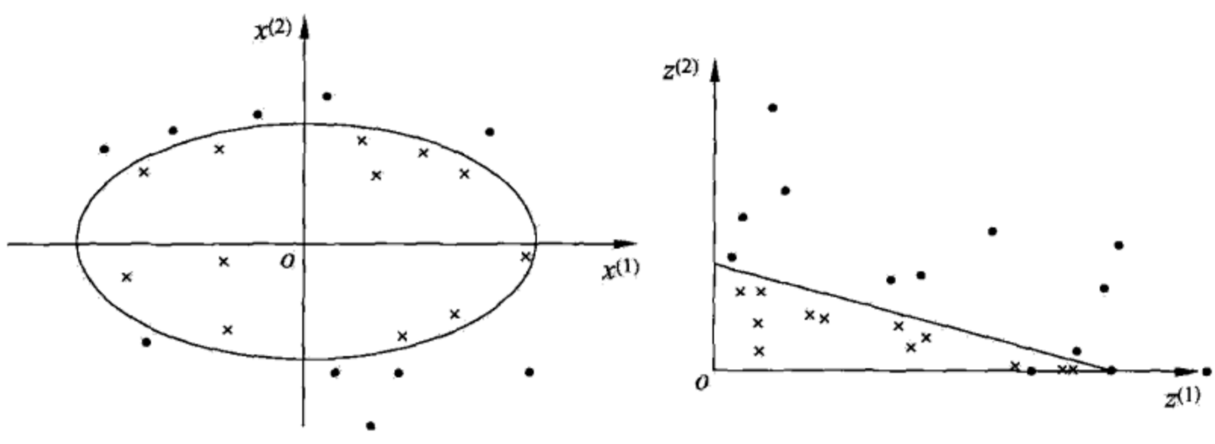
2. 非线性可分样本和核函数

接上，最后的结果：

$$L(w,b,\alpha)=-\frac{1}{2}\sum_i^N\sum_j^N\alpha_i\alpha_jy_iy_jx_i^Tx_j+\sum_i^N\alpha_i$$
$$s.t.\ \sum_i^N\alpha_iy_i=0,\alpha_i\geq 0$$

该结果来源于最初的假设，就是样本线性可分，我们用一个简单地线性超平面来分割样本集：

$$f(x)=w_1x_1+w_2x_2+w_3x_3\ldots w_nx_n+b$$



假设二维的情况，用一条直线去分割二维空间,如右图:

$$f(x)=w_1x_1+w_2x_2+b$$

如果已知的样本点是非线性可分，如左图，那么最好的分割曲线应该是椭圆状曲线:

$$f(x)=w_1x_1^2+w_2x_2^2+b$$

设 $\phi(x)$ 为映射函数

$$\text{线性可分下：}\phi_1(x)=x$$

$$\text{椭圆情况下的映射：}\phi_2(x)=x^2$$

定义函数:

$$K_1(x_1,x_2)=\phi_1(x_1)\cdot\phi_1(x_2)=x_1\cdot x_2$$

$$K_2(x_1,x_2)=\phi_2(x_1)\cdot\phi_2(x_2)=x_1^2\cdot x_2^2$$

根据上述推导，线性可分情况的解:

$$L(w,b,\alpha)=-\frac{1}{2}\sum_i^N\sum_j^N\alpha_i\alpha_jy_iy_jK_1(x_i,x_j)+\sum_i^N\alpha_i$$
$$s.t.\ \sum_i^N\alpha_iy_i=0,\alpha_i\geq 0$$

同理可得出线性不可分，椭圆曲线分割线情况下的解:

$$L(w,b,\alpha)=-\frac{1}{2}\sum_i^N\sum_j^N\alpha_i\alpha_jy_iy_jK_2(x_i,x_j)+\sum_i^N\alpha_i$$
$$s.t.\ \sum_i^N\alpha_iy_i=0,\alpha_i\geq 0$$

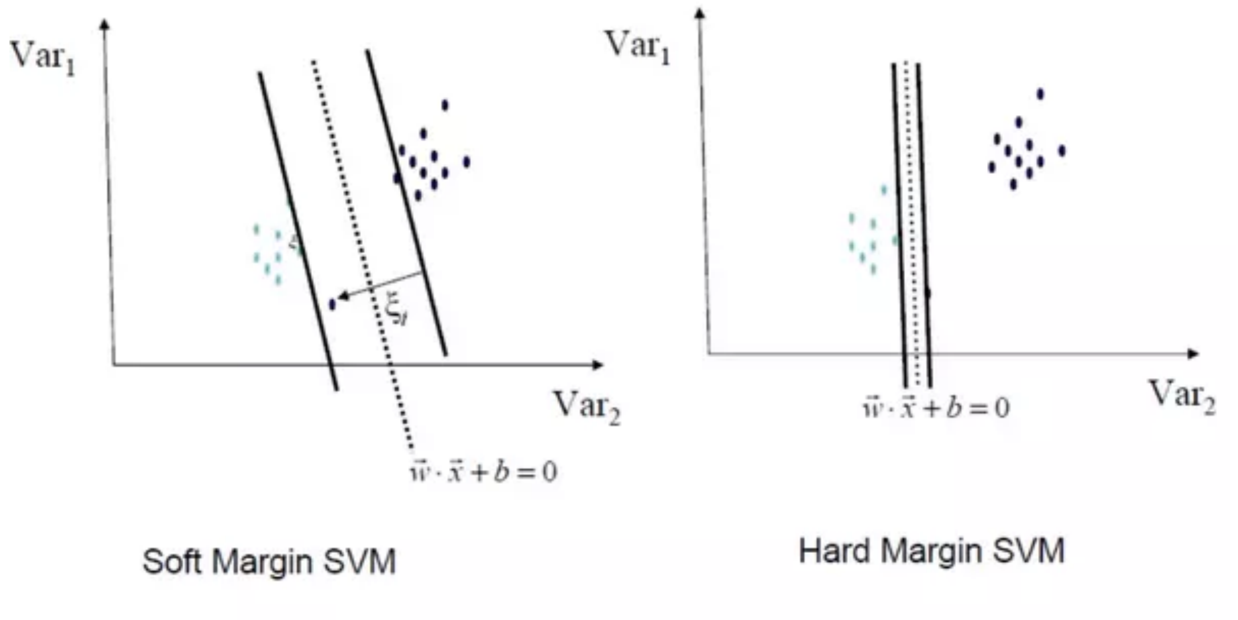
形如这种，能够将样本点映射到特定空间 的函数 $K(x_i,x_j)$ 称为核函数

常用核函数

$$K\left(\boldsymbol{x}_i,\boldsymbol{x}_j\right)=\boldsymbol{x}_i^{\mathrm{T}}\boldsymbol{x}_j$$
$$K\left(\boldsymbol{x}_i,\boldsymbol{x}_j\right)=\left(\boldsymbol{x}_i^{\mathrm{T}}\boldsymbol{x}_j\right)^d$$
$$K\left(\boldsymbol{x}_i,\boldsymbol{x}_j\right)=\exp\left(-\frac{\left\|\boldsymbol{x}_i-\boldsymbol{x}_j\right\|^2}{2\sigma^2}\right)$$
$$K\left(\boldsymbol{x}_i,\boldsymbol{x}_j\right)=\exp\left(-\frac{\left\|\boldsymbol{x}_i-\boldsymbol{x}_j\right\|}{\sigma}\right)$$
$$K\left(\boldsymbol{x}_i,\boldsymbol{x}_j\right)=\tanh\left(\beta\boldsymbol{x}_i^{\mathrm{T}}\boldsymbol{x}_j+\theta\right)$$

3 软间隔SVM

有些数据集虽然大体上是线性可分的，但会有一些点，可能是噪点或是异常点，使得求出严格的分割平面较为困难，软间隔就是为了解决这样的问题，通过放松条件，允许每个点都可以有**一定程度的越界**，引入参数 ξ_i 来表示每个样本点的越界程度，该参数称为**松弛变量**，最后通过最小化该参数使所有点的越界程度最小，即达到最好的分类效果，也容忍了一定程度的噪点问题 。



分类条件：

$$
\begin{aligned}
w^T x_i + b \geq \ \ 1-\xi_i \quad y_i = +1 \\
w^T x_i + b \geq \xi_i - 1 \quad y_i = -1
\end{aligned}
$$

优化目标：

$$
\min_{w,b,\xi} \frac{1}{2}\|w\|^2 + C\sum_{i=1}^{N}\xi_i
$$

$$
\text{s.t.} \quad y_i\left(w\cdot x_i + b\right) \geqslant 1-\xi_i, \quad \xi_i \geqslant 0
$$

C称为惩罚因子，C值得大小表征对越界的容忍程度，即惩罚力度的大小。对松弛参数的理解，可以类比在其他学习算法中的正则项，通过引入正则项来防止过拟合。如上左图，如果用硬间隔SVM，中间那个异常点将会起到支持向量的作用，那么正负样本的间隔将会非常小，这可以类比成一种过拟合。

推导过程与不带松弛参数的线性SVM类似：

写出拉格朗日方程：

$$
\begin{gathered}
L(w,b,\xi,\alpha,\mu) \equiv \frac{1}{2}\|w\|^2 + C\sum_{i=1}^{N}\xi_i - \sum_{i=1}^{N}\alpha_i\left(y_i\left(w\cdot x_i + b\right) - 1 + \xi_i\right) - \sum_{i=1}^{N}\mu_i\xi_i \\
s.t. \alpha_i \geq 0, \mu_i \geq 0
\end{gathered}
$$

原问题：

$$\min_{w,b,\xi}\max_{\alpha,\mu} L(w,b,\xi,\alpha,\mu)$$

转换成对偶问题：

$$\begin{gathered}\max_{\alpha,\mu}\min_{w,b,\xi} L(w,b,\xi,\alpha,\mu)=\min_{w,b,\xi}\max_{\alpha,\mu} L(w,b,\xi,\alpha,\mu)\\ s.t.\quad KKT\end{gathered}$$

转换成对偶问题后就可以先对w,b,ξ 求导求极小值：

$$\begin{aligned}\nabla_w L(w,b,\xi,\alpha,\mu)=w-\sum_{i=1}^N \alpha_i y_i x_i=0\\ \nabla_b L(w,b,\xi,\alpha,\mu)=-\sum_{i=1}^N \alpha_i y_i=0\\ \nabla_{\xi_i} L(w,b,\xi,\alpha,\mu)=C-\alpha_i-\mu_i=0\end{aligned}$$

回带到原函数，可以发现，正好消去了ξ,w,b

最后，又得出以下熟悉的形式

$$\begin{aligned}\min_\alpha L(w,b,\xi,\alpha,\mu)=-\frac{1}{2}\sum_{i=1}^N\sum_{j=1}^N \alpha_i\alpha_j y_i y_j\left(x_i^T x_j\right)+\sum_{i=1}^N\alpha_i\\ \text{s.t.}\quad &\textstyle\sum_{i=1}^N \alpha_i y_i=0\\ &0\leqslant\alpha_i\leqslant C\end{aligned}$$

与之前的推导结果唯一不同的是 α_i 有了上界的限制， 该限制来自于 上述对 ξ 求导的结果 $C-\alpha_i-\mu_i=0$

最后，相应的KKT条件：

$$\begin{cases}\left(y_i\left(w\cdot x_i+b\right)-1+\xi_i\right)\geqslant 0\\ \alpha_i\left(y_i\left(w\cdot x_i+b\right)-1+\xi_i\right)=0\\ \alpha_i\geqslant 0\\ \mu_i\geqslant 0\\ \xi_i\geqslant 0\end{cases}$$

4 SMO算法

SMO算法SVM的最后一步，是用于计算SVM的最后参数α的一种优化算法。

以最一般化的SVM来做SMO的计算，带软间隔，带核函数的情况：

$$\text{分割面}：f(x_i) = w\phi(x_i) + b = \sum_{j}^{N} \alpha_j y_j K(x_i, x_j) + b \qquad ---(1)$$

$$(w = \sum_{j}^{N} \alpha_j y_j \phi(x_j))$$

$$\text{优化目标}：\min_{\alpha} L(w, b, \xi, \alpha, \mu) = -\frac{1}{2} \sum_{i=1}^{N} \sum_{j=1}^{N} \alpha_i \alpha_j y_i y_j K(x_i, x_j) + \sum_{i=1}^{N} \alpha_i$$

$$\begin{aligned} \text{s.t.} \quad & \textstyle\sum_{i=1}^{N} \alpha_i y_i = 0 \\ & 0 \leqslant \alpha_i \leqslant C \end{aligned}$$

$$KKT\text{条件}：\begin{cases} (y_i (w \cdot x_i + b) - 1 + \xi_i) \geqslant 0 \\ \alpha_i (y_i (w \cdot x_i + b) - 1 + \xi_i) = 0 \\ \alpha_i \geqslant 0 \\ \mu_i \geqslant 0 \\ \xi_i \geqslant 0 \end{cases}$$

计算步骤:

每次迭代只选择N个α_i中的两个α_i 做优化，最终达到所有α收敛的效果

指定一个分类精度ε，来控制收敛的精度

1. 随机初始化所有α，b

2. 根据$f(x_i)$ 计算误差

$$E_i = f(x_i) - y_i \qquad ---(2)$$

3. 循环选择一个最不满足KKT条件的 α_v，如下选择规则：

$$\begin{gathered} \alpha_v < C \quad and \quad E_v < -\varepsilon \\ or \\ 0 < \alpha_v \quad and \quad E_v > \varepsilon \end{gathered} \qquad ---(3)$$

如果找不到，退出循环，优化结束

有些算法用随机选择的方法选择第一α_v 这样的做法收敛较慢

4. 根据选择出来的α_v 循环寻找α_w 使得 $|E_v - E_w|$ 最大

5. 计算L,H

$$if\ \ y_v == y_w$$

$$L=\max\left(0, \alpha_w+\alpha_v-C\right), \quad H=\min\left(C, \alpha_w+\alpha_v\right)$$

$$else$$

$$L=\max\left(0, \alpha_w-\alpha_v\right), \quad H=\min\left(C, C+\alpha_w-\alpha_v\right)$$

6. 更新α_w 的值

$$\alpha_w^{'}=\alpha_w^{\text{old}}+\frac{y_w\left(E_v-E_w\right)}{\eta}$$

$$\eta=K(x_v, x_v)+K(x_w, x_w)-2K(x_v, x_w) \quad (\eta \geq 0) \quad ---(4)$$

$$\alpha_w^{\text{new}}=\left\{\begin{array}{ll}H, & \alpha_w^{'}>H \\ \alpha_w^{'} & L \leqslant \alpha_w^{'} \leqslant H \\ L, & \alpha_w^{'}<L\end{array}\right. \quad ---(5)$$

7. 更新α_v的值

$$\alpha_v^{\text{new}}=\alpha_v^{\text{old}}+y_1 y_2\left(\alpha_w^{\text{old}}-\alpha_w^{\text{new}}\right) \quad ---(6)$$

8. 计算b

$$b_v^{\text{new}}=-E_v-y_v K(x_v, x_v)\left(\alpha_v^{\text{new}}-\alpha_v^{\text{old}}\right)-y_w K(x_w, x_v)\left(\alpha_w^{\text{new}}-\alpha_w^{\text{old}}\right)+b^{\text{old}}$$

$$b_w^{\text{new}}=-E_w-y_v K(x_v, x_w)\left(\alpha_v^{\text{new}}-\alpha_v^{\text{old}}\right)-y_w K(x_w, x_w)\left(\alpha_w^{\text{new}}-\alpha_w^{\text{old}}\right)+b^{\text{old}}$$

$$if\ \ 0<\alpha_v^{new}<C:$$

$$b^{new}=b_v^{new}$$

$$else\ \ if\ \ 0<\alpha_w^{new}<C:$$

$$b^{new}=b_w^{new}$$

$$else:$$

$$b^{new}=\frac{1}{2}(b_v^{new}+b_w^{new})$$

9. 跳回2

```
def SVM(X, y, C, e, maxEpoch):
```

```python
    #N是样本数，D是样本维度
    N,D = shape(X)

    #初始化alpha,b
    alphas = np.zeros(N,1)
    b = 0;

    for i in range(maxEpoch):

        for v in range(N):  #在数据集上遍历每一个alpha

            #(1)式
            #如果需要加核函数 ： fx_v = (alphas*y).T*K(x,x[v]) + b
            fx_v = (alphas*y).T*(X.dot(X[v].T)) + b

            #(2)式
            E_v  = fx_v-y[v]

            #根据(3)式规则选择alpha_v
            if ( ( y[v]*E_v < -e ) and ( alphas[v]<C ) ) or \
               ( ( y[v]*E_v >  e ) and ( alphas[v]>0 ) ):

                #根据第四点选择alpha_w
                w = -1
                E_w = -1
                tempMax = -1
                for j in range(N):
                    if j==v:
                        continue
                    fx_j = (alphas*y).T*(X.dot(X[j].T)) + b
                    E_j  = fx_j-y[j]
                    if abs(E_v-E_j) > tempMax:
                        E_w = E_j
                        w = j

                alphaIold=alphas[i].copy()  #复制下来，便于比较
                alphaJold=alphas[j].copy()


                #根据第五点计算L和H
                if(y[v]!=y[w]):
                    L=max(0, alphas[w]-alphas[v])
                    H=min(C, C+alphas[w]-alphas[v])
                else:
                    L=max(0, alphas[w]+alphas[v]-C)
                    H=min(C, alphas[w]+alphas[v])
                if L==H:
                    print('L==H')
                    continue
```

```
            #根据式4计算eta
            eta= X[i]*X[i].T + X[j]*X[j].T - 2.0*X[v]*X[w].T
            if eta<0:
                print('eta<0')
                continue


            #根据式5计算更新alpha_w
            alpha_w_old = alphas[w]
            alphas[w]+=y[w]*(E_v-E_w)/eta  #调整alphas[j]
            if alphas[w]>H:
                alphas[w]=H
            if alphas[w]<L:
                alphas[w]=L

            #如果变化很小，后面就不做了，直接下一轮更新
            if(abs(alphas[w]-alpha_w_old)<0.00001):
                print('w not moving enough')
                continue


            #根据式6计算更新alpha_v
            alpha_v_old=alphas[v]
            alphas[v]+=y[w]*y[v]*(alpha_w_old-alphas[w])  #调整alphas[i]

            #根据第八点计算b
            b_v = b-E_v-\
            y[v]*(alphas[v]-alpha_v_old)*X[v]*X[v].T-\
            y[w]*(alphas[w]-alpha_w_old)*X[w]*X[v].T

            b_w = b-E_w-\
            y[v]*(alphas[v]-alpha_v_old)*X[v]*X[w].T-\
            y[w]*(alphas[w]-alpha_w_old)*X[w]*X[w].T

            if(0<alphas[i]) and (C>alphas[i]):
                b=b_v
            elif(0<alphas[j]) and (C>alphas[j]):
                b=b_w
            else:
                b=(b_v+b_w)/2.0


    return b, alphas
```