

SVM 的数学推导和 Python 实现

赵新锋

2021 年 7 月 20 日

摘要

支持向量机 (support vector machines, SVM) 是一种分类模型, 该模型在特征空间中求解间隔最大的分类超平面。当训练数据近似线性可分时, 可以通过增加软间隔学习一个线性分类器。当线性不可分时, 利用核技巧, 隐式的将特征空间映射到高维特征空间, 从而达到线性可分。使用序列最小最优化算法 (SMO), 可以快速求解模型的参数。

关键词: 支持向量机; SVM; SMO; 矩阵运算; 矩阵求导; numpy; sklearn.

目录

1 数学推导与 python 实现	1
1.1 SVM 简介	1
1.2 最大间隔分类超平面	1
1.3 求解拉格朗日对偶问题	2
1.4 软间隔	3
1.5 核函数	5
1.6 序列最小最优化算法 SMO	6

1 数学推导与 python 实现

1.1 SVM 简介

当训练数据线性可分，可以得到一个线性超平面 $x \cdot w + b = 0$ ，将在超平面上方的归为正类，将在超平面下方的归为负类。当数据点与超平面距离越远时，表示分类的确定性越高，这样虽然线性分类的超平面可能有无数多个，但是我们可以找到一个所有点距离超平面最大的一个超平面。相应的决策函数为：

$$f(x) = \text{sign}(x \cdot w^* + b^*)$$

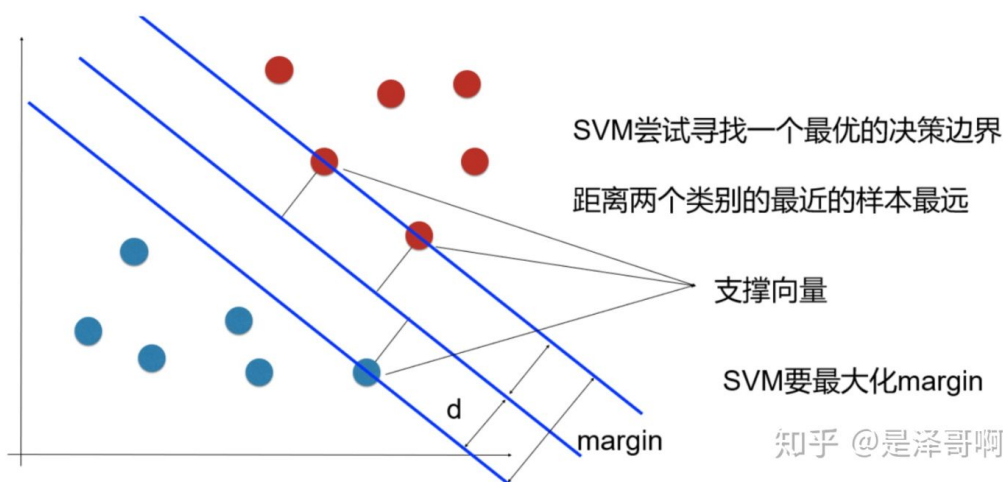


图 1: SVM 线性可分

1.2 最大间隔分类超平面

$x_i^T \cdot w_0 + b_0$ 为正时, y_i 为正, 当 $x_i^T \cdot w_0 + b_0$ 为负时, y_i 为负, 则可以定义 $\frac{y_i \cdot (x_i^T \cdot w_0 + b_0)}{\|w_0\|}$ 为几何间隔, 表示数据点距离超平面的距离。模型最终会找到一个参数为 w_0 和 b_0 的分离超平面, 所有点距离超平面的距离都大于等于 d , 将距离正好等于 d 的数据点称之为支持向量。

$$\begin{aligned} \arg \max_{w_0, b_0} d &= \frac{y_0 \cdot (x_0^T \cdot w_0 + b_0)}{\|w_0\|} \\ \text{s.t. } \frac{y_i \cdot (x_i^T \cdot w_0 + b_0)}{\|w_0\|} &\geq d \end{aligned} \quad (1)$$

将 w_0 和 b_0 进行一定比例的缩放

$$\begin{aligned} w &= \frac{w_0}{y_0 \cdot (x_0^T \cdot w_0 + b_0)} \\ b &= \frac{b_0}{y_0 \cdot (x_0^T \cdot w_0 + b_0)} \end{aligned}$$

可以将 (1) 式化简为：

$$\begin{aligned}\arg \max_w d &= \frac{1}{\|w\|} \\ \Leftrightarrow \arg \min_w d &= \|w\| \\ \Leftrightarrow \arg \min_w d &= \frac{1}{2} w^T \cdot w\end{aligned}\tag{2}$$

$$\text{s.t. } y_i \cdot (x_i^T \cdot w + b) \geq 1\tag{3}$$

将(2) 和 (3) 利用拉格朗日乘数法，获得拉格朗日原始问题形式：

$$\begin{aligned}\arg \min_{w,b} \max_{\alpha} L(w,b,\alpha) &= \frac{1}{2} w^T \cdot w - \alpha^T \cdot (y \odot (X \cdot w + b) - 1) \\ &= \frac{1}{2} w^T \cdot w - (\alpha \odot y)^T \cdot (X \cdot w + b) + \alpha^T \cdot \mathbf{1}^m \\ &= \frac{1}{2} w^T \cdot w - (\alpha \odot y)^T \cdot (X \cdot w + b) + \mathbf{1}^T \cdot \alpha\end{aligned}\tag{4}$$

当满足 KTT 条件时，拉格朗日对偶问题的解等价于(4) 的解：

$$\arg \max_{\alpha} \min_{w,b} L(w,b,\alpha) = \frac{1}{2} w^T \cdot w - (\alpha \odot y)^T \cdot (X \cdot w + b) + \mathbf{1}^T \cdot \alpha\tag{5}$$

1.3 求解拉格朗日对偶问题

首先求 L 以 w、b 为参数的极小值，通过求微分得到偏导数形式。

$$\begin{aligned}dL &= \frac{1}{2} tr[(dw)^T \cdot w + w^T \cdot dw] - (\alpha \odot y)^T \cdot (X dw) \\ &\quad - (\mathbf{1}^T \cdot (\alpha \odot y))^T \cdot db \\ &\quad - (d\alpha)^T \cdot (y \odot (X \cdot w + b) - 1)] \\ &= tr[w^T dw - (X^T \cdot (\alpha \odot y))^T dw - (\alpha \odot y)^T \cdot db - (y \odot (X \cdot w + b) - 1)^T d\alpha]\end{aligned}$$

从而得到 w、b 偏导数，并令偏导数为 0。

$$\begin{aligned}\frac{\partial L}{\partial w} &= w - X^T \cdot (\alpha \odot y) = \mathbf{0} \\ \frac{\partial L}{\partial b} &= -\mathbf{1}^T \cdot (\alpha \odot y) = -y^T \cdot \alpha = 0\end{aligned}$$

推导出如下关系：

$$w = X^T \cdot (\alpha \odot y)\tag{6}$$

$$y^T \cdot \alpha = 0\tag{7}$$

将(6)式和 (7)式代入(5)式中,

$$\begin{aligned}
\arg \max_{\alpha} L(w, b, \alpha) &= \frac{1}{2}(\alpha \odot y)^T \cdot X \cdot X^T \cdot (\alpha \odot y) \\
&\quad - (\alpha \odot y)^T \cdot X \cdot X^T \cdot (\alpha \odot y) \\
&\quad - (\alpha \odot y)^T \cdot b^m \\
&\quad + \mathbf{1}^T \cdot \alpha \\
&= -\frac{1}{2}(\alpha \odot y)^T \cdot X \cdot X^T \cdot (\alpha \odot y) + (\alpha \odot y)^T \cdot b + \mathbf{1}^T \cdot \alpha \\
&= -\frac{1}{2}(\alpha \odot y)^T \cdot X \cdot X^T \cdot (\alpha \odot y) + \mathbf{1}^T \cdot \alpha
\end{aligned}$$

去除负号, 将极大转换成极小形式:

$$\begin{aligned}
\arg \min_{\alpha} L(w, b, \alpha) &= \frac{1}{2}(\alpha \odot y)^T \cdot X \cdot X^T \cdot (\alpha \odot y) - \mathbf{1}^T \cdot \alpha \\
\text{s.t. } &y^T \cdot \alpha = 0
\end{aligned} \tag{8}$$

为了使拉格朗日对偶问题的解与原始问题解相同, 需要同时满足 KKT 条件:

$$\begin{aligned}
\frac{\partial L}{\partial w} &= 0 \\
\frac{\partial L}{\partial b} &= 0 \\
\alpha \odot (y \odot (X \cdot w + b) - 1) &= \mathbf{0}^m \\
y \odot (X \cdot w + b) - 1 &\geq \mathbf{0}^m \\
\alpha &\geq \mathbf{0}^m
\end{aligned}$$

1.4 软间隔

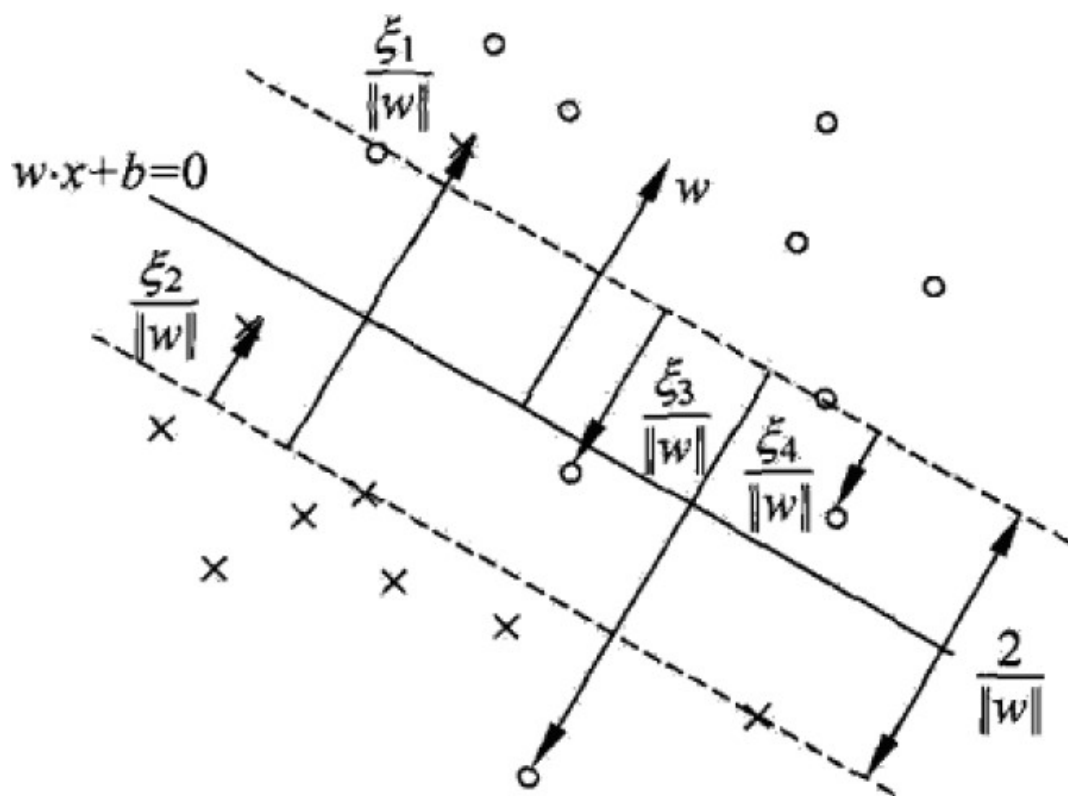
当训练数据近似线性可分, 有些异常点或噪声点导致无法找到分离超平面, 可以对每个数据点加一个松弛变量 ξ_i , 从而让所有数据点均满足约束。

加入软间隔参数, 每个向量点距离分类超平面距离增加 ξ_i , 同时增加一个惩罚系数 C, 代入(5)新形式如下:

$$\begin{aligned}
\arg \min_w d &= \frac{1}{2}w^T \cdot w + C \cdot \mathbf{1}^m \cdot \xi \\
\text{s.t. } &y_i \cdot (x_i^T \cdot w + b) \geq 1 - \xi_i \\
&\xi_i \geq 0
\end{aligned}$$

将其转换为拉格朗日对偶形式:

$$L(w, b, \xi, \alpha, \mu) = \frac{1}{2}w^T \cdot w + C \cdot \mathbf{1}^T \cdot \xi - \alpha^T \cdot (y \odot (X \cdot w + b) - 1 + \xi) - \mu^T \cdot \xi \tag{9}$$



软间隔的支持向量

图 2: SVM 软间隔

求得对于 w 、 b 、 ξ 的偏导并令其为 0:

$$\begin{aligned}\frac{\partial L}{\partial w} &= w - X^T \cdot (\alpha \odot y) = \mathbf{0} \\ \frac{\partial L}{\partial b} &= -1^T \cdot (\alpha \odot y) = -y^T \cdot \alpha = 0 \\ \frac{\partial L}{\partial \xi} &= C - \alpha - u = \mathbf{0}\end{aligned}$$

代入 (9) 式中:

$$\begin{aligned}\arg \max_{\alpha} L(\alpha) &= -\frac{1}{2}(\alpha \odot y)^T \cdot X \cdot X^T \cdot (\alpha \odot y) + \mathbf{1}^m \cdot \alpha \\ \text{s.t. } &y^T \cdot \alpha = 0 \\ &C - \alpha - \mu = \mathbf{0} \\ &\alpha_i \geq 0 \\ &\mu_i \geq 0\end{aligned}$$

$C - \alpha - u = \mathbf{0}$ 、 $\alpha_i \geq 0$ 、 $u_i \geq 0$ 约束可以化简为:

$$\begin{aligned}\arg \min_{\alpha} L(\alpha) &= \frac{1}{2}(\alpha \odot y)^T \cdot X \cdot X^T \cdot (\alpha \odot y) - \mathbf{1}^m \cdot \alpha \\ \text{s.t. } &y^T \cdot \alpha = 0 \\ &0 \leq \alpha_i \leq C \Leftrightarrow \mathbf{0}^m \leq \alpha \leq \mathbf{C}^m\end{aligned} \tag{10}$$

为了使拉格朗日对偶问题的解与原始问题解相同, 需要同时满足 KKT 条件:

$$\begin{aligned}\frac{\partial L}{\partial w} &= 0 \\ \frac{\partial L}{\partial b} &= 0 \\ \frac{\partial L}{\partial \xi} &= 0 \\ \alpha \odot (y \odot (X \cdot w + b) - 1 + \xi) &= \mathbf{0}^m \\ y \odot (X \cdot w + b) - 1 + \xi &\geq \mathbf{0}^m \\ \alpha &\geq \mathbf{0}^m \\ \mu \odot \xi &= \mathbf{0}^m \\ \xi &\geq \mathbf{0}^m \\ \mu &\geq \mathbf{0}^m\end{aligned}$$

1.5 核函数

近似线性可分用软间隔方式解决, 然而当训练数据是非线性数据, 会出现无法在原特征空间找到分离超平面。可以使用一个非线性变换, 将数据从原特征空间映射到更高

维的新空间，然后在新空间中寻找线性分类超平面，这种方法被称为核技巧。观察 (10) 式中计算 $X \cdot X^t$ ，即需要计算 $x_i \cdot x_i$ 内积。将核技巧应用到 SVM，定义核函数为：

$$K(x, z) = \phi(x) \cdot \phi(z)$$

即将原来的向量内积，改成先让向量映射到新空间，然后再求内积。核技巧的另外一个优点是，不需要显示的定義 ϕ 而是直接计算出 $\phi(x) \cdot \phi(z)$ 的结果，以高斯核函数为例：

$$K(x, z) = \exp\left(-\frac{\|x - z\|^2}{2\sigma^2}\right)$$

则 (10) 式利用核技巧转化为：

$$\begin{aligned} \arg \min_{\alpha} L(\alpha) &= \frac{1}{2}(\alpha \odot y)^T \cdot K(X, X) \cdot (\alpha \odot y) - \mathbf{1}^m \cdot \alpha \\ \text{s.t. } &y^T \cdot \alpha = 0 \\ &\mathbf{0}^m \leq \alpha \leq \mathbf{C}^m \\ &\alpha \odot (y \odot (X \cdot w + b) - 1 + \xi) = \mathbf{0}^m \\ &y \odot (X \cdot w + b) - 1 + \xi \geq \mathbf{0}^m \\ &\alpha \geq \mathbf{0}^m \\ &\mu \odot \xi = \mathbf{0}^m \\ &\xi \geq \mathbf{0}^m \\ &\mu \geq \mathbf{0}^m \end{aligned} \quad (11)$$

1.6 序列最小最优化算法 SMO

支持向量机的拉格朗日对偶问题是一个凸二次规划问题，具有全局最优解，序列最小最优化算法即 SMO 算法，是高效求解支持向量机解的一种算法。其基本思路是，如果所有变量都满足了 KTT 条件，那么就求得了问题的解。SMO 算法过程如下：

- 选择两个变量，如 α_1, α_2 ，固定其他变量，那么原问题就变成了两个变量的二次优化问题。
- 由于有约束 $y^T \cdot \alpha = 0$ 的存在，选择了两个变量，实际上自由变量只有一个。
- 求解两个变量的最优解，迭代直到所有变量满足 KTT 条件。
- 迭代求解使用的解析方法，效率高

当选择两个变量，如 α_1, α_2 时，将其他变量看做常数：

$$\begin{aligned} \arg \min_{\alpha} L(\alpha) &= \frac{1}{2}(\alpha \odot y)^T \cdot K(X, X) \cdot (\alpha \odot y) - \mathbf{1}^m \cdot \alpha \\ &= \frac{1}{2} \sum_{i=1}^m \sum_{j=1}^m \alpha_i \alpha_j y_i y_j K(x_i, x_j) - \sum_{i=1}^m \alpha_i \end{aligned}$$

则上式子去除不包含 α_1, α_2 的项后化简为:

$$\begin{aligned}
\arg \min_{\alpha_1, \alpha_2} W(\alpha_1, \alpha_2) &= \frac{1}{2} K_{11} a_1^2 + y_1 y_2 K_{12} a_1 a_2 + \frac{1}{2} K_{22} a_2^2 \\
&\quad + y_1 a_1 \sum_{i=3}^m y_i a_i K_{i1} \\
&\quad + y_2 a_2 \sum_{i=3}^m y_i a_i K_{i2} \\
&\quad - (a_1 + a_2) \\
&= \frac{1}{2} K_{11} a_1^2 + y_1 y_2 K_{12} a_1 a_2 + \frac{1}{2} K_{22} a_2^2 \\
&\quad + y_1 a_1 \left(\sum_{i=1}^m y_i a_i^{old} K_{i1} - y_1 a_1^{old} K_{11} - y_2 a_2^{old} K_{12} \right) \\
&\quad + y_2 a_2 \left(\sum_{i=1}^m y_i a_i^{old} K_{i2} - y_1 a_1^{old} K_{12} - y_2 a_2^{old} K_{22} \right) \\
&\quad - (a_1 + a_2) \\
&= \frac{1}{2} K_{11} a_1^2 + y_1 y_2 K_{12} a_1 a_2 + \frac{1}{2} K_{22} a_2^2 \\
&\quad + y_1 a_1 ((y \odot a^{old})^T \cdot K(X, x_1) - y_1 a_1^{old} K_{11} - y_2 a_2^{old} K_{12}) \\
&\quad + y_2 a_2 ((y \odot a^{old})^T \cdot K(X, x_2) - y_1 a_1^{old} K_{12} - y_2 a_2^{old} K_{22}) \\
&\quad - (a_1 + a_2)
\end{aligned}$$

利用约束 s.t. $y^T \cdot \alpha = 0$ 得到:

$$\begin{aligned}
a_1 y_1 + a_2 y_2 &= a_1^{old} y_1 + a_2^{old} y_2 = \zeta \\
a_1 &= y_1 (\zeta - a_2 y_2) = a_1^{old} + a_2^{old} y_1 y_2 - a_2 y_1 y_2
\end{aligned}$$

将 a_1 代入:

$$\begin{aligned}
\arg \min_{\alpha_2} W(\alpha_2) &= \frac{1}{2} K_{11} (y_1 (\zeta - a_2 y_2))^2 + y_1 y_2 K_{12} y_1 (\zeta - a_2 y_2) a_2 + \frac{1}{2} K_{22} a_2^2 \\
&\quad + y_1 y_1 (\zeta - a_2 y_2) ((y \odot a^{old})^T \cdot K(X, x_1) - y_1 a_1^{old} K_{11} - y_2 a_2^{old} K_{12}) \\
&\quad + y_2 a_2 ((y \odot a^{old})^T \cdot K(X, x_2) - y_1 a_1^{old} K_{12} - y_2 a_2^{old} K_{22}) \\
&\quad - (y_1 (\zeta - a_2 y_2) + a_2)
\end{aligned}$$

针对 a_2 求导，并令导数为 0:

$$\begin{aligned}
\frac{\partial W}{\partial a_2} &= K_{11}y_2(a_2y_2 - \zeta) + K_{12}(y_2\zeta - 2a_2) + K_{22}a_2 \\
&\quad - y_2((y \odot a^{old})^T \cdot K(X, x_1) - y_1a_1^{old}K_{11} - y_2a_2^{old}K_{12}) \\
&\quad + y_2((y \odot a^{old})^T \cdot K(X, x_2) - y_1a_1^{old}K_{12} - y_2a_2^{old}K_{22}) \\
&\quad + y_1y_2 - 1 \\
&= a_2(K_{11} - 2K_{12} + K_{22}) \\
&\quad - K_{11}y_2(y_1a_1^{old} + y_2a_2^{old}) + K_{12}y_2(y_1a_1^{old} + y_2a_2^{old}) \\
&\quad + y_2((y \odot a^{old})^T \cdot K(X, x_2) - (y \odot a^{old})^T \cdot K(X, x_1)) \\
&\quad + y_1y_2a_1^{old}K_{11} + a_2^{old}K_{12} - y_1y_2a_1^{old}K_{12} - a_2^{old}K_{22} \\
&\quad + y_1y_2 - 1 \\
&= a_2(K_{11} - 2K_{12} + K_{22}) \\
&\quad + y_2((y \odot a^{old})^T \cdot K(X, x_2) - (y \odot a^{old})^T \cdot K(X, x_1)) \\
&\quad - a_2^{old}(K_{11} - 2K_{12} + K_{22}) \\
&\quad + y_1y_2 - 1 \\
&= a_2(K_{11} - 2K_{12} + K_{22}) \\
&\quad + y_2((y \odot a^{old})^T \cdot K(X, x_2) - y_2 - ((y \odot a^{old})^T \cdot K(X, x_1) - y_1)) \\
&\quad - a_2^{old}(K_{11} - 2K_{12} + K_{22}) \\
&= 0
\end{aligned}$$

则可以推得:

$$a_2^{new, unclip} = a_2^{old} + \frac{y_2(((\alpha \odot y)^T \cdot K(X, x_1) - y_1) - ((\alpha \odot y)^T \cdot K(X, x_2) - y_2))}{(K_{11} - 2K_{12} + K_{22})} \quad (12)$$

考虑到 $w = X^T \cdot (a \odot y)$ 令 $g(x) = w^T \cdot x + b = (a \odot y)^T \cdot X \cdot x + b$ ，将内积转换成核函数形式，并且定义函数 E_i 为函数 $g(x)$ 与 y_i 的误差值:

$$\begin{aligned}
E_i &= g(x_i) - y_i = (a \odot y)^T \cdot K(X, x_i) + b - y_i \\
\eta &= K_{11} - 2K_{12} + K_{22}
\end{aligned}$$

则 (12) 式得到未经剪辑的 a_2 解为:

$$a_2^{new, unclip} = a_2^{old} + \frac{y_2(E_1 - E_2)}{\eta} \quad (13)$$

因为有约束 $a_1y_1 + a_2y_2 = \zeta = a_1^{old}y_1 + a_2^{old}y_2$ 并且 $0 \leq a_i \leq C$ ，下面讨论 a_2 的上限下限 $L \leq a_2 \leq H$ ，当 $y_1 \neq y_2$ 时:

$$\begin{aligned}
a_2 - a_1 &= a_2^{old} - a_1^{old} \\
L &= \max(0, a_2^{old} - a_1^{old}) \\
H &= \min(C, C + a_2^{old} - a_1^{old})
\end{aligned}$$

当 $y_1 = y_2$ 时:

$$\begin{aligned} a_2 + a_1 &= a_2^{old} + a_1^{old} \\ L &= \max(0, a_2^{old} + a_1^{old} - C) \\ H &= \min(C, a_2^{old} + a_1^{old}) \end{aligned}$$

则 a_2 经剪辑后解为:

$$a_2^{new} = \begin{cases} H, & a_2^{new, unclip} > H \\ a_2^{new, unclip}, & L \leq a_2^{new, unclip} \leq H \\ L, & a_2^{new, unclip} < L \end{cases}$$

对于偏置 b , 由于 KTT 条件约束有:

$$\alpha \odot (y \odot (X \cdot w + b) - 1) = \mathbf{0}^m$$

对于任一 $a_i > 0$ 有 $(a^{old} \odot y))^T \cdot K(X, x_i) + b = y_i$ 整理后得到, 当 $0 \leq a_1 \leq C$ 时:

$$\begin{aligned} b_1^{new} &= y_1 - (a^{new} \odot y))^T \cdot K(X, x_1) \\ &= y_1 - (a^{old} \odot y))^T \cdot K(X, x_1) + a_1^{old} y_1 K_{11} + a_2^{old} y_2 K_{12} - a_1^{new} y_1 K_{11} - a_2^{new} y_2 K_{12} \end{aligned}$$

当 $0 \leq a_2 \leq C$ 时:

$$\begin{aligned} b_2^{new} &= y_2 - (a^{new} \odot y))^T \cdot K(X, x_2) \\ &= y_2 - (a^{old} \odot y))^T \cdot K(X, x_2) + a_1^{old} y_1 K_{12} + a_2^{old} y_2 K_{22} - a_1^{new} y_1 K_{12} - a_2^{new} y_2 K_{22} \end{aligned}$$

若 a_1 、 a_2 都满足条件, 那么 $b_1^{new} = a_2^{new}$ 。

当所有 a_i 满足 KTT 条件时, 模型得解。

End!!