SVM 的数学推导和 Python 实现

赵新锋

2021 年 7 月 12 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。

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 分类超平面

简单说明如下：

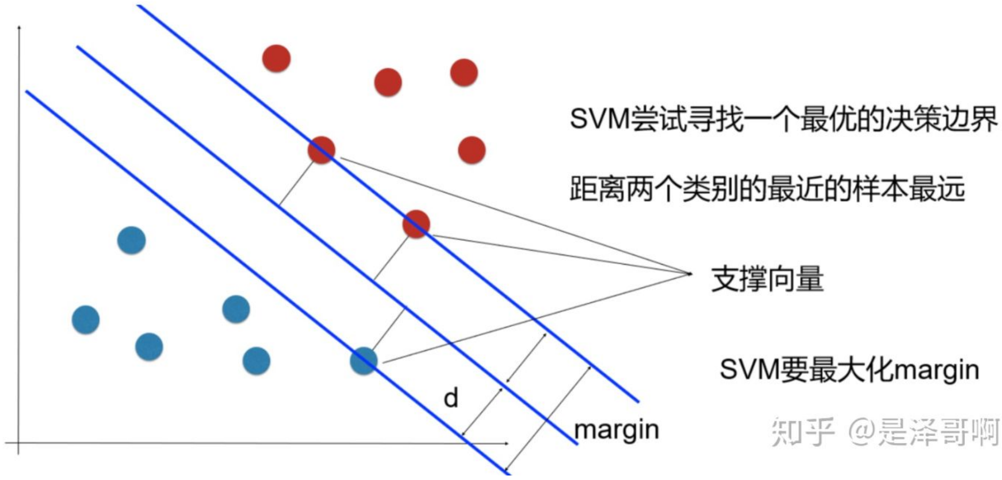


图 1: SVM 线性可分

1.2 公式推导

过程表示如下：

$$\underset{w_0}{\arg\max}\ d = \frac{y_0 \cdot (x_0^T \cdot w_0 + b_0)}{\|w_0\|} \tag{1}$$

$$\text{s.t.}\quad \frac{y_i \cdot (x_i^T \cdot w_0 + b_0)}{\|w_0\|} \geq d$$

将 w_0 和 b_0 进行一定比例的缩放

$$w = \frac{w_0}{y_0 \cdot (x_0^T \cdot w_0 + b_0)}$$

$$b = \frac{b_0}{y_0 \cdot (x_0^T \cdot w_0 + b_0)}$$

可以将 (1) 式化简为：

$$\underset{w}{\arg\max}\ d = \frac{1}{\|w\|}$$

$$\iff \underset{w}{\arg\min}\ d = \|w\|$$

$$\iff \underset{w}{\arg\min}\ d = \frac{1}{2} w^T \cdot w \tag{2}$$

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

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，(4) 等价于拉格朗日对偶问题:

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

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。

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

从而得到 w、b 偏导数，并令偏导数为 0。

$$\begin{aligned}\frac{\partial L}{\partial w}&=w-X^T\cdot(\alpha\odot y)=\mathbf{0}\\ \frac{\partial L}{\partial b}&=-\alpha\odot y=\mathbf{0}\end{aligned}\tag{6}$$

推导出如下等式和约束：

$$w=X^T\cdot(\alpha\odot y)\tag{7}$$

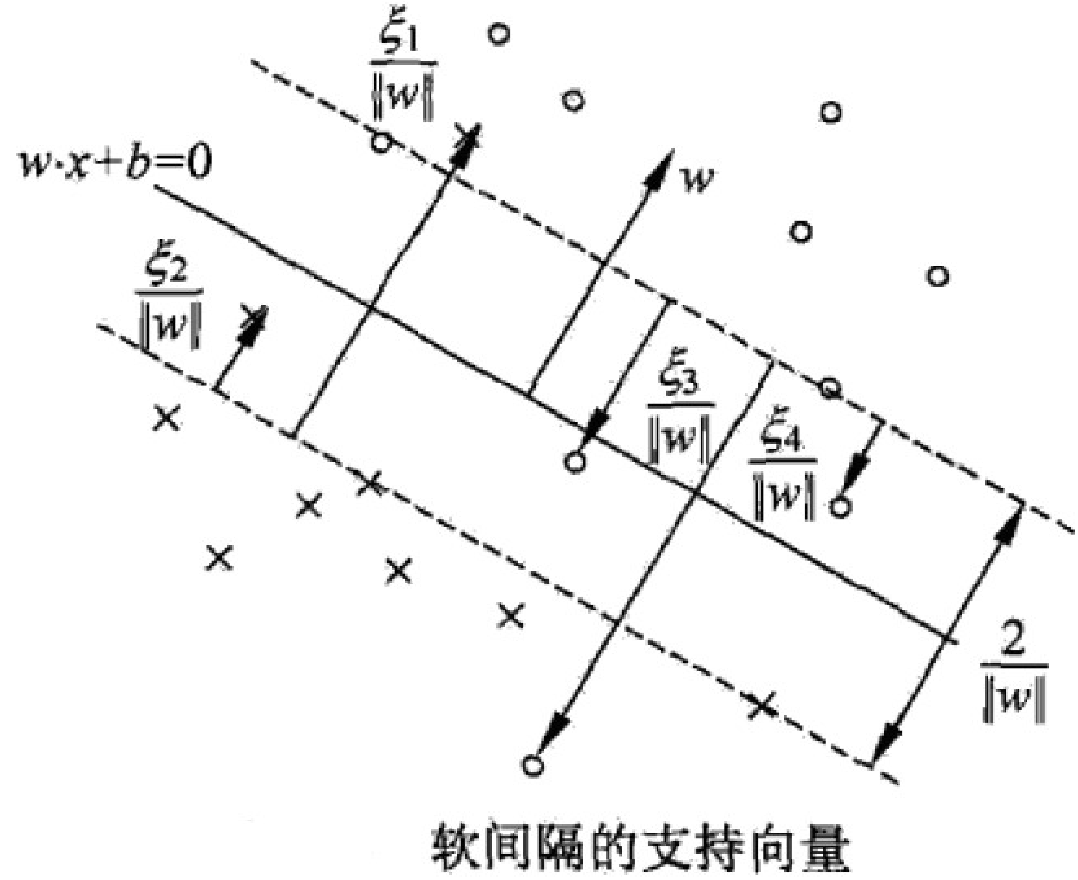
$$\alpha\odot y=\mathbf{0}\tag{8}$$

将(7)式和 (8)式代入(5)式中，

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

去除符号，将极大转换成极小形式：

$$\begin{aligned}\arg\min_{\alpha}L(w,b,\alpha)&=\frac{1}{2}(\alpha\odot y)^T\cdot X^T\cdot X\cdot(\alpha\odot y)\\ \text{s.t.}\quad\alpha\odot y&=\mathbf{0}\end{aligned}\tag{9}$$



$\frac{\xi_1}{\|w\|}$
$w \cdot x+b=0$
w
$\frac{\xi_2}{\|w\|}$
$\frac{\xi_3}{\|w\|}$
$\frac{\xi_4}{\|w\|}$
$\frac{2}{\|w\|}$
软间隔的支持向量

图 2: SVM 软间隔

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:

$$L(w,b,\xi,\alpha,u)=\frac{1}{2}w^T\cdot w+C\cdot\xi^T\cdot\mathbf{1}^m-\alpha^T\cdot(y\odot(X\cdot w+b)-1)-u^T\cdot\xi \tag{10}$$

求得对于 w、b、ξ 的偏导并令其为 0:

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

代入 (10) 式中:

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

End!!