SMO 算法

SMO 算法概述

KKT 条件

相关数学理论

1）KKT 条件的详细陈列

2）何谓“支持向量”

3）带约束的二次规划求解方法

SMO 算法概述

SMO 是由 Platt 在 1998 年提出的、针对软间隔最大化 SVM 对偶问题求解的一个算法，其基本思想很简单：在每一步优化中，挑选出诸多参数（

$$\alpha_k (k = 1, 2, \ldots, N)$$

）中的两个参数（ai、aj）作为“真正的参数”，其余参数都视为常数，从而问题就变成了类似于二次方程求最大值的问题，从而我们就能求出解析解.

具体而言，SMO 要解决的是如下对偶问题：

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

使得对

$$i = 1, \ldots, N$$、

都有

$$\sum_{i=1}^{N} \alpha_i y_i = 0、\ 0 \leq \alpha_i \leq C$$

其大致求解步骤则可以概括如下：

- 选出$\alpha_1, \alpha_2, \ldots, \alpha_N$中“最不好的”两个参数$\alpha_i$、$\alpha_j$
- 只把α_i、α_j视为参数并把其余的α_k视为常数，于是最大化$L(\alpha)$就变成了以α_i、α_j为参数的二次规划问题，从而可以直接对其进行求解；但是，注意到α_i、α_j需满足$\sum_{i=1}^{N} \alpha_i y_i = 0$和$0 \leq \alpha_i$、$\alpha_j \leq C$，所以求完解后需要检查是否满足约束；如不满足，则进行调整

KKT 条件

先来看如何选取参数。在 SMO 算法中，我们是依次选取参数的：

- 选出违反 KKT 条件最严重的样本点、以其对应的参数作为第一个参数
- 第二个参数的选取有一种比较繁复且高效的方法，但对于一个朴素的实现而言、第二个参数即使随机选取也无不可

这里就有了一个叫 KKT 条件的东西，其详细的陈列会放在文末，这里就仅简要的说明一下。具体而言，对于已有的模型f=wx+b来说，ai及其对应样本(xi,yi)的 KKT 条件为：

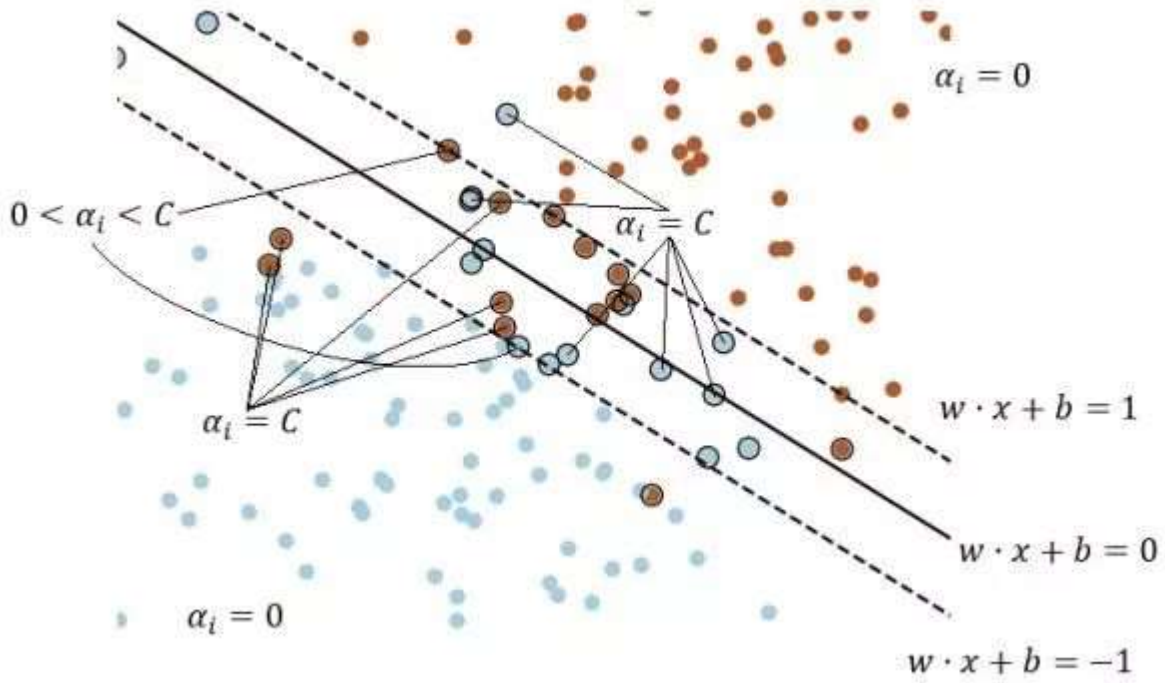
$$\begin{aligned} \alpha_i = 0 &\Leftrightarrow y_i f(x_i) > 1 \\ 0 < \alpha_i < C &\Leftrightarrow y_i f(x_i) = 1 \\ \alpha_i = C &\Leftrightarrow y_i f(x_i) < 1 \end{aligned}$$

注意我们之前提过样本到超平面的函数间隔为$y(w \cdot x + b)$，所以上述 KKT 条件可以直观地叙述为：

- $\alpha_i = 0 \Leftrightarrow$样本离**间隔超平面**比较远
- $0 < \alpha_i < C \Leftrightarrow$样本落在**间隔超平面**上
- $\alpha_i = C \Leftrightarrow$样本在**间隔超平面**以内

【注意：这里的间隔超平面**即为满足方程$y(w \cdot x + b) = 1$的平面；由于y可以取正负一两个值，所以间隔超平面会有两个——$w \cdot x + b = 1$和$w \cdot x + b = -1$。而**分类超平面**则是满足$w \cdot x + b = 0$的平面，需要将它和**间隔超平面**加以区分】**

可以以一张图来直观理解这里提到的诸多概念：



图中外面有个黑圆圈的其实就是传说中的“支持向量”，其定义会在文末给出.

那么我们到底应该如何刻画“违反 KKT 条件”这么个东西呢？从直观上来说，我们可以有这么一种简单有效的定义：

- 计算三份“差异向量” $c^{(k)} = (c_1^{(k)}, c_2^{(k)}, \dots, c_N^{(k)})^T \ \ (k = 1, 2, 3)$，其中第 k 份对应于三个 KKT 条件中的第 k 个，且 $c_i^{(k)} = y_i f(x_i) - 1 \ \ (i = 1, 2, \dots, N)$
- 针对不同的 KKT 条件，将 $c^{(k)}$ 的某些位置 $c_i^{(k)}$ 置为 0。具体而言：
  - 对第一个 KKT 条件 $\alpha_i = 0 \Leftrightarrow y_i f(x_i) > 1 \Leftrightarrow c_i^{(1)} > 0$ 而言，满足以下两种情况的 $c_i^{(1)}$ 将应该置为 0：
    - $\alpha_i > 0$ 且 $c_i^{(1)} \le 0$
    - $\alpha_i = 0$ 且 $c_i^{(1)} > 0$
  - 对第二个 KKT 条件 $0 < \alpha_i < C \Leftrightarrow y_i f(x_i) = 1 \Leftrightarrow c_i^{(2)} = 0$ 而言则是：
    - （ $\alpha_i = 0$ 或 $\alpha_i = C$ ）且 $c_i^{(2)} \neq 0$
    - $0 < \alpha_i < C$ 且 $c_i^{(2)} = 0$
  - 对第三个 KKT 条件 $\alpha_i = C \Leftrightarrow y_i f(x_i) < 1 \Leftrightarrow c_i^{(3)} < 0$ 亦同理：
    - $\alpha_i < C$ 且 $c_i^{(3)} \ge 0$
    - $\alpha_i = C$ 且 $c_i^{(3)} < 0$

最后则可以简单的将三份差异向量的平方相加来作为“损失”，从而直接选出使该损失最大的作为 SMO 的第一个参数即可。具体而言：

$$i = \arg\max_i \left\{ c_i^{(1)^2} + c_i^{(2)^2} + c_i^{(3)^2} | i = 1, 2, \ldots, N \right\}$$

第二个参数则可以简单地随机选取.

至于 SMO 算法的第二步，正如前文所说，它的本质就是一个带约束的二次规划，虽然求解过程可能会比较折腾，但其实难度不大。

相关数学理论

1）KKT 条件的详细陈列

注意到原始问题为

- $\min_{w,b,\xi} L(w,b,\xi) = \frac{1}{2}\|w\|^2 + C\sum_{i=1}^{N}\xi_i$ ，使得 $\xi^* \geq 0$、$y_i(w \cdot x_i + b) \geq 1 - \xi_i$
  （不妨称这两个约束为**原始约束**）

所以其拉格朗日算子法对应的式子为

$$L = L(w,b,\xi,\alpha,\beta) = \frac{1}{2}\|w\|^2 + C\sum_{i=1}^{N}\xi_i - \sum_{i=1}^{N}\alpha_i[y_i(w \cdot x_i + b) - 1 + \xi_i] - \sum_{i=1}^{N}\beta_i\xi_i$$

于是 KKT 条件的其中四个约束即为（不妨设最优解为 w^*、b^*、ξ^*、α^* 和 β^*）：

- $\alpha_i^* \geq 0, \beta_i^* \geq 0$（这是拉格朗日乘子法自身的要求）
- $\xi_i^* \geq 0$、$y_i(w^* \cdot x_i + b^*) - 1 + \xi_i^* \geq 0$（此即**原始约束**）
- $\alpha_i^*[y_i(w^* \cdot x_i + b^*) - 1 + \xi_i^*] = 0$（换句话说，$\alpha_i^*$ 和 $y_i(w^* \cdot x_i + b) - 1 + \xi_i^*$ 中必有一个为 0）
  - 该等式有着很好的直观：设想它们同时不为 0，则必有 $y_i(w^* \cdot x_i + b) - 1 + \xi_i^* > 0$（注意**原始约束**）、从而 $\alpha_i^*[y_i(w^* \cdot x_i + b^*) - 1 + \xi_i^*] \geq 0$，等号当且仅当 $\alpha_i = 0$ 时取得。然而由于 $\alpha_i^* \neq 0$，所以若将 α_i 取为 0、则上述 L 将会变大。换句话说，将参数 α_i 取为 0 将会使得目标函数比参数取 α_i^* 时的目标函数要大，这与 α_i^* 的最优性矛盾
- $\beta_i^*\xi_i^* = 0$（换句话说，β_i^* 和 ξ_i^* 中必有一个为 0，理由同上）

从而原始问题转为 $\min_{w,b}\max_{\alpha} L$ ；而对偶问题的实质，其实就是将原始问题 $\min_{w,b}\max_{\alpha} L$ 转为 $\max_{\alpha}\min_{w,b} L$ 。在求解 $\nabla_w L = \nabla_b L = \nabla_\xi L = 0$ 后，可以得到如下对偶问题：

- $\max_{\alpha} L(\alpha) = -\frac{1}{2}\sum_{i=1}^{N}\sum_{j=1}^{N}\alpha_i\alpha_j y_i y_j (x_i \cdot x_j) + \sum_{i=1}^{N}\alpha_i$ ，使得对 $i = 1, \ldots, N$ 、都有 $\sum_{i=1}^{N}\alpha_i y_i = 0$ 、 $0 \le \alpha_i \le C$

（虽然这些在 Python · SVM（二）· LinearSVM 中介绍过，不过为了连贯性，这里还是再介绍一遍）

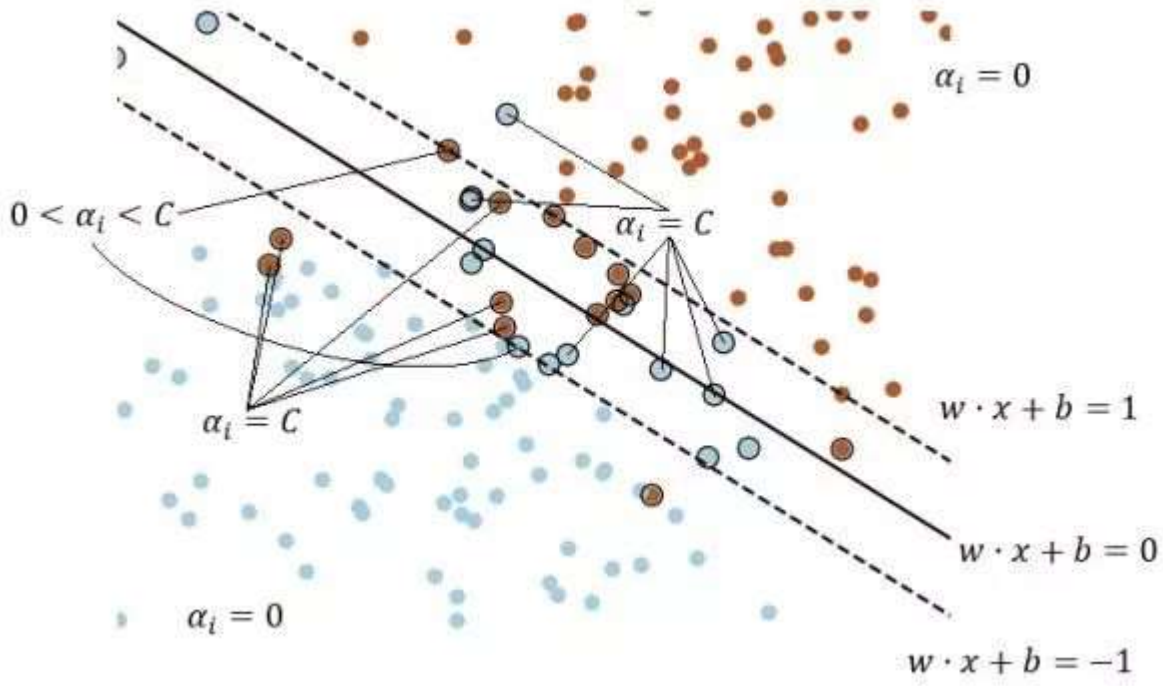
于是，最优解自然需要满足这么个条件：

$$\nabla_w L(w^*, b^*, \xi^*, \alpha^*, \beta^*) = \nabla_b L(w^*, b^*, \xi^*, \alpha^*, \beta^*) = \nabla_\xi L(w^*, b^*, \xi^*, \alpha^*, \beta^*) = 0$$

这个条件即是最后一个 KKT 条件

2）何谓“支持向量”

为方便说明，这里再次放出上文给出过的图：



图中带黑圈的样本点即是支持向量，数学上来说的话，就是对应的样本点即是支持向量。从图中不难看出，支持向量从直观上来说，就是**比较难分的样本点**

此外，支持向量之所以称之为“支持”向量，是因为在理想情况下，仅利用支持向量训练出来的模型和利用所有样本训练出来的模型是一致的。这从直观上是好理解的，粗略的证明则可以利用其定义来完成：非支持向量的样本对应着a_i=0，亦即它对最终模型——

$$f(x)=\sum_{i=1}^{N}\alpha_i y_i(x_i\cdot x)+b$$

没有丝毫贡献，所以可以直接扔掉.

3）带约束的二次规划求解方法

不妨设我们选取出来的两个参数就是和，那么问题的关键就在于如何把和相关的东西抽取出来并把其它东西扔掉.

注意到我们的对偶问题为

- $\max\limits_{\alpha} L(\alpha)=-\frac{1}{2}\sum\limits_{i=1}^{N}\sum\limits_{j=1}^{N}\alpha_i\alpha_j y_i y_j(x_i\cdot x_j)+\sum\limits_{i=1}^{N}\alpha_i$ ，使得对 $i=1,\dots,N$ 、都有 $\sum\limits_{i=1}^{N}\alpha_i y_i=0$ 、 $0\le\alpha_i\le C$

且我们在 Python · SVM（一）· 感知机 的最后介绍过 Gram 矩阵：

$$G=(x_i\cdot x_j)_{N\times N}$$

所以 L 就可以改写为 $L(\alpha)=-\frac{1}{2}\sum\limits_{i=1}^{N}\sum\limits_{j=1}^{N}\alpha_i\alpha_j y_i y_j G_{ij}+\sum\limits_{i=1}^{N}\alpha_i$

把和 α_1 、 α_2 无关的东西扔掉之后， L 可以化简为：

$$L(\alpha)=-\frac{1}{2}(G_{11}\alpha_1^2+2y_1y_2G_{12}\alpha_1\alpha_2+G_{22}\alpha_2^2)-\left(y_1\alpha_1\sum_{i=3}^{N}y_i\alpha_iG_{i1}+y_2\alpha_2\sum_{i=3}^{N}y_i\alpha_iG_{i2}\right)+(\alpha_1+\alpha_2)$$

约束条件则可以化简为对 $i=1$ 和 $i=2$ ，都有 $y_1\alpha_1+y_2\alpha_2=-\sum\limits_{i=3}^{N}y_i\alpha_i=c$ 、 $0\le\alpha_i\le C$ ，其中 c 是某个常数

而带约束的二次规划求解过程也算简单：只需先求出无约束下的最优解，然后根据约束“裁剪”该最优解即可

无约束下的求解过程其实就是求偏导并令其为 0。以 α_1 为例，注意到

$$y_1\alpha_1 + y_2\alpha_2 = c \Rightarrow \alpha_2 = \frac{c}{y_2} - \frac{y_1}{y_2}\alpha_1$$

令 $c^* = \frac{c}{y_2}$，$s = y_1 y_2$ ，则 c^* 亦是常数，且由于 y_1 、 y_2 都只能取正负 1，故不难发现

$\frac{y_2}{y_1} = \frac{y_1}{y_2} = s$ ，从而 $\alpha_2 = c^* - s\alpha_1 \Rightarrow \frac{\partial \alpha_2}{\partial \alpha_1} = -s$

于是

$$\begin{aligned}\frac{\partial L}{\partial \alpha_1} =& - G_{11}\alpha_1 - y_1 y_2 G_{12}(\alpha_2 + \alpha_1 \frac{\partial \alpha_2}{\partial \alpha_1}) - G_{22}\alpha_2 \frac{\partial \alpha_2}{\partial \alpha_1} \\ & - y_1 \sum_{i=3}^{N} y_i \alpha_i G_{i1} - y_2 \frac{\partial \alpha_2}{\partial \alpha_1} \sum_{i=3}^{N} y_i \alpha_i G_{i2} + 1 \\ =& - G_{11}\alpha_1 - sG_{12}(c^* - s\alpha_1 - \alpha_1 \cdot s) - G_{22}(c^* - s\alpha_1)\cdot(-s) \\ & - y_1 \sum_{i=3}^{N} y_i \alpha_i G_{i1} + sy_2 \sum_{i=3}^{N} y_i \alpha_i G_{i2} + \left(\frac{\partial \alpha_2}{\partial \alpha_1} + 1\right)\end{aligned}$$

考虑到 $s^2 = 1$ 、 $sy_2 = y_1$ 、Gram 矩阵是对称阵、且模型在第 k 个样本 x_k 处的输出为

$f(x_k) = \sum_{i=1}^{N} \alpha_i y_i (x_i \cdot x_k) + b = \sum_{i=1}^{N} \alpha_i y_i G_{ik} + b$ ，从而可知

$$\begin{aligned}\frac{\partial L}{\partial \alpha_1} =& - G_{11}\alpha_1 - sG_{12}c^* + 2G_{12}\alpha_1 + sG_{22}c^* - G_{22}\alpha_1 \\ & - y_1[f(x_1) - y_1\alpha_1 G_{11} - y_2\alpha_2 G_{21}] \\ & + y_1[f(x_2) - y_1\alpha_1 G_{12} - y_2\alpha_2 G_{22}] + (1 - s)\end{aligned}$$

令 $v_i = (f(x_i) - b) - y_1\alpha_1 G_{1i} - y_2\alpha_2 G_{2i}$ $(i = 1, 2)$ ，则

$$\frac{\partial L}{\partial \alpha_1} = -(G_{11} - 2G_{12} + G_{22})\alpha_1 - sc^*(G_{12} - G_{22}) - y_1(v_1 - v_2) + (1 - s)$$

于是

$$\begin{aligned}\frac{\partial L}{\partial \alpha_1} = 0 \Rightarrow \alpha_1 =& - \frac{sc^*(G_{12} - G_{22}) + y_1(v_1 - v_2) - (1 - s)}{G_{11} - 2G_{12} + G_{22}} \\ =& - \frac{y_1[y_2 c^*(G_{12} - G_{22}) + (v_1 - v_2) - (y_1 - y_2)]}{G_{11} - 2G_{12} + G_{22}}\end{aligned}$$

注意到 $c^* = s\alpha_1 + \alpha_2$ ，从而

$$y_2 c^*(G_{12} - G_{22}) = y_2(s\alpha_1 + \alpha_2)(G_{12} - G_{22}) = (y_1\alpha_1 + y_2\alpha_2)(G_{12} - G_{22})$$

令 $dG = G_{11} - 2G_{12} + G_{22}$ 、 $e_i = f(x_i) - y_i$ $(i = 1, 2)$ ，则

$$y_2 c^*(G_{12} - G_{22}) + (v_1 - v_2) - (y_2 + y_1) = \ldots = e_1 - e_2 - y_1\alpha_1 dG$$

从而

$$\alpha_1^{new,raw} = \alpha_1^{old} - \frac{y_1(e_1 - e_2)}{dG}$$

接下来就要对其进行裁剪了。注意到我们的约束为

$0 \le \alpha_i \le C$、$\alpha_1 y_1 + \alpha_2 y_2$ 为常数

所以我们需要分情况讨论 α_1 的下、上界

- 当 y_1, y_2 异号（ $y_1 y_2 = -1$ ）时，可知 $\alpha_1 - \alpha_2$ 为常数、亦即
  $\alpha_1^{new} - \alpha_2^{new} = \alpha_1^{old} - \alpha_2^{old} \Rightarrow \alpha_2^{new} = \alpha_1^{new} - (\alpha_1^{old} - \alpha_2^{old})$
  结合 $0 \le \alpha_2 \le C$，可知：
  - α_1^{new} 不应小于 $\alpha_1^{old} - \alpha_2^{old}$ ，否则 α_2 将小于 0
  - α_1^{new} 不应大于 $C + \alpha_1^{old} - \alpha_2^{old}$ ，否则 α_2 将大于 C
- 当 y_1, y_2 同号（ $y_1 y_2 = 1$ ）时，可知 $\alpha_1 + \alpha_2$ 为常数、亦即
  $\alpha_1^{new} + \alpha_2^{new} = \alpha_1^{old} + \alpha_2^{old} \Rightarrow \alpha_2^{new} = (\alpha_1^{old} + \alpha_2^{old}) - \alpha_1^{new}$
  结合 $0 \le \alpha_2 \le C$，可知：
  - α_1^{new} 不应小于 $\alpha_1^{old} + \alpha_2^{old} - C$ ，否则 α_2 将大于 C
  - α_1^{new} 不应大于 $\alpha_1^{old} + \alpha_2^{old}$ ，否则 α_2 将小于 0

作者：**射命丸咲**

GitHub 地址：
https://github.com/carefree0910/MachineLearning/blob/master/e_SVM/SVM.py#L17