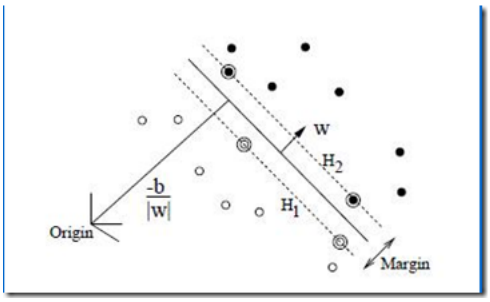
支持向量机（SVM）的详细推导过程及注解

更新时间：2018-03-03 21:51:01

我是搬运工：http://my.oschina.net/wangguolongnk/blog/111353

支持向量机的原理很简单，就是VC维理论和最小化结构风险。在阅读相关论文的时候，发现很多文 章都语焉不详，就连《A Tutorial on Support Vector Machines for Pattern Recognition》这篇文章对拉格朗日条件极值问题的对偶变换都只是一笔带过，让很多人觉得很困惑。下面我将就SVM对线性可分的情况作详尽的推 导。



如上图所示，有一堆训练数据的正负样本，标记为：$\{x_i, y_i\},\ i=1,\cdots,l,\ \ y_i\in\{-1,1\}, x_i\in R^d$，假设有一个超平面H：$w\cdot x+b=0$，可以把这些样本正确无误地分割开来，同时存在两个平行于H的超平面H1和H2：

$$w\cdot x+b=1$$
$$w\cdot x+b=-1$$

使离H最近的正负样本刚好分别落在H1和H2上，这样的样本就是支持向量。那么其他所有的训练样本都将位于H1和H2之外，也就是满足如下约束：

$$\begin{aligned} w\cdot x_i + b \ge 1 \quad for \quad y_i = 1 \\ w\cdot x_i + b \le -1 \quad for \quad y_i = -1 \end{aligned}$$

写成统一的式子就是：

$$y_i(w\cdot x_i + b) - 1 \ge 0$$ （1）

而超平面H1和H2的距离可知为：

$$Margin = 2/\|w\|$$

SVM的任务就是寻找这样一个超平面H把样本无误地分割成两部分，并且使H1和H2的距离最大。要找到这样的超平面，只需最大化间隔Margin，也就是最小化$\|w\|^2$。于是可以构造如下的条件极值问题：

$$\begin{cases} \min \|w\|^2/2 \\ s.t. \quad y_i(w\cdot x_i + b) - 1 \ge 0 \end{cases}$$ （2）

对于不等式约束的条件极值问题，可以用拉格朗日方法求解。而拉格朗日方程的构造规则是：用约束方程乘以非负的拉格朗日系数，然后再从目标函数中减去。于是得到拉格朗日方程如下：

$$L(w,b,\alpha_i) = \frac{1}{2}\|w\|^2 - \sum_{i=1}^{l}\alpha_i\left(y_i(w\cdot x_i + b) - 1\right) = \frac{1}{2}\|w\|^2 - \sum_{i=1}^{l}\alpha_i y_i(w\cdot x_i + b) + \sum_{i=1}^{l}\alpha_i$$ （3）

其中：

$$\alpha_i \ge 0$$ （4）

那么我们要处理的规划问题就变为：

$$\min_{w,b}\max_{\alpha_i\ge 0} L(w,b,\alpha_i)$$ （5）

上式才是严格的不等式约束的拉格朗日条件极值的表达式。对于这一步的变换，很多文章都没有多做表述，或者理解有偏差，从而影响了读者后续的推演。在此我将详细地一步步推导，以解困惑。

（5）式是一个凸规划问题，其意义是先对α求偏导，令其等于0消掉α，然后再对w和b求L的最小值。要直接求解（5）式是有难度的，通过消去拉格朗日系数来化简方程，对我们的问题无济于事。所幸这个问题可以通过拉格朗日对偶问题来解决，为此我们把（5）式做一个等价变换：

$$\min_{w,b}\max_{\alpha_i\ge 0} L(w,b,\alpha_i) = \max_{\alpha_i\ge 0}\min_{w,b} L(w,b,\alpha_i)$$

上式即为对偶变换，这样就把这个凸规划问题转换成了对偶问题：

$$\max_{\alpha_i\ge 0}\min_{w,b} L(w,b,\alpha_i)$$ （6）

其意义是：原凸规划问题可以转化为先对w和b求偏导，令其等于0消掉w和b，然后再对α求L的最大值。下面我们就来求解（6）式，为此我们先计算w和b的偏导数。由（3）式有：

$$\begin{aligned}\frac{\partial L(w,b,\alpha_i)}{\partial w} &= w-\sum_{i=1}^{l}\alpha_i y_i x_i\\ \frac{\partial L(w,b,\alpha_i)}{\partial b} &= -\sum_{i=1}^{l}\alpha_i y_i\end{aligned} \quad (7)$$

为了让L在w和b上取到最小值，令（7）式的两个偏导数分别为0，于是得到：

$$\begin{aligned}w &= \sum_{i=1}^{l}\alpha_i y_i x_i\\ \sum_{i=1}^{l}\alpha_i y_i &= 0\end{aligned} \quad (8)$$

将（8）代回（3）式，可得：

$$\begin{aligned}\min_{w,b} L(w,b,\alpha_i) &= \frac{1}{2}\|w\|^2 - w\cdot\sum_{i=1}^{l}\alpha_i y_i x_i - b\sum_{i=1}^{l}\alpha_i y_i + \sum_{i=1}^{l}\alpha_i\\ &= \frac{1}{2}\|w\|^2 - w\cdot w - b\cdot 0 + \sum_{i=1}^{l}\alpha_i\\ &= \sum_{i=1}^{l}\alpha_i - \frac{1}{2}\|w\|^2\\ &= \sum_{i=1}^{l}\alpha_i - \frac{1}{2}\sum_{i=1}^{l}\sum_{j=1}^{l}\alpha_i\alpha_j y_i y_j (x_i\cdot x_j)\end{aligned} \quad (9)$$

再把（9）代入（6）式有：

$$\max_{\alpha_i\ge 0}\min_{w,b} L(w,b,\alpha_i) = \max_{\alpha_i\ge 0}\left\{\sum_{i=1}^{l}\alpha_i - \frac{1}{2}\sum_{i=1}^{l}\sum_{j=1}^{l}\alpha_i\alpha_j y_i y_j (x_i\cdot x_j)\right\} \quad (10)$$

考虑到（8）式，我们的对偶问题就变为：

$$\begin{cases}\max\limits_{\alpha_i}\left\{\sum_{i=1}^{l}\alpha_i - \frac{1}{2}\sum_{i=1}^{l}\sum_{j=1}^{l}\alpha_i\alpha_j y_i y_j (x_i\cdot x_j)\right\}\\ \quad s.t.\ \ \sum_{i=1}^{l}\alpha_i y_i = 0\\ \quad\quad\ \ \alpha_i \ge 0\end{cases} \quad (11)$$

上式这个规划问题可以直接从数值方法计算求解。

需要指出的一点是，（2）式的条件极值问题能够转化为（5）式的凸规划问题，其中隐含着一个约束，即：

$$\alpha_i\left(y_i\left(w\cdot x_i+b\right)-1\right)=0 \quad (12)$$

这个约束是这样得来的，如果（2）和（5）等效，必有：

$$\max_{\alpha_i\ge 0} L(w,b,\alpha_i) = \frac{1}{2}\|w\|^2$$

把（3）式代入上式中，得到：

$$\begin{aligned}\frac{1}{2}\|w\|^2 &= \max_{\alpha_i\ge 0}\left\{\frac{1}{2}\|w\|^2 - \sum_{i=1}^{l}\alpha_i\left(y_i\left(w\cdot x_i+b\right)-1\right)\right\}\\ &= \frac{1}{2}\|w\|^2 - \min_{\alpha_i\ge 0}\left\{\sum_{i=1}^{l}\alpha_i\left(y_i\left(w\cdot x_i+b\right)-1\right)\right\}\end{aligned}$$

化简得到：

$$\boxed{\min_{\alpha_i \geq 0}\left\{\sum_{i=1}^{l}\alpha_i\left(y_i\left(w\cdot x_i+b\right)-1\right)\right\}=0} \quad (13)$$

又因为约束（1）式和（4）式，有：

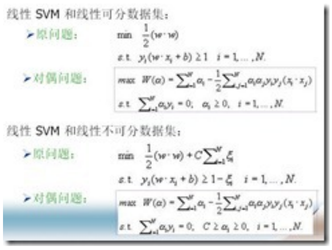
$$\boxed{\alpha_i\left(y_i\left(w\cdot x_i+b\right)-1\right)\geq 0}$$

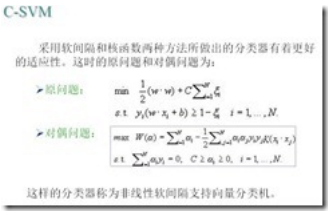
所以要使（13）式成立，只有令：$\alpha_i\left(y_i\left(w\cdot x_i+b\right)-1\right)=0$，由此得到（12）式的约束。该约束的意义是：如果一个样本是支持向量，则其对应的拉格朗日系数非零；如果一个样本不是支持向量，则其对应的拉格朗日系数一定为0。由此可知大多数拉格朗日系数都是0。

一旦我们从（11）式求解出所有拉格朗日系数，就可以通过（8）式的

$$\boxed{w=\sum_{i=1}^{l}\alpha_i y_i x_i}$$

计算得到最优分割面H的法向量w。而分割阈值b也可以通过（12）式的约束用支持向量计算出来。这样我们就找到了最优的H1和H2，这就是我们训练出来的SVM。





此文链接：http://makaidong.com/JustForCS/0/636469_3428618.html
转载请注明出处：支持向量机（SVM）的详细推导过程及注解

来源：马开东云搜索（电话：15110131480 微信：makaidongzi QQ：1130122167 微信公众号：makaidong-com）

欢迎分享本文，转载请保留出处！