



温州大学
WENZHOU UNIVERSITY

机器学习-第九章 支持向量机

黄海广 副教授

2021年05月

本章目录

2

01 支持向量机概述

02 线性可分支持向量机

03 线性支持向量机

04 线性不可分支持向量机

1.支持向量机概述

3

01 支持向量机概述

02 线性可分支持向量机

03 线性支持向量机

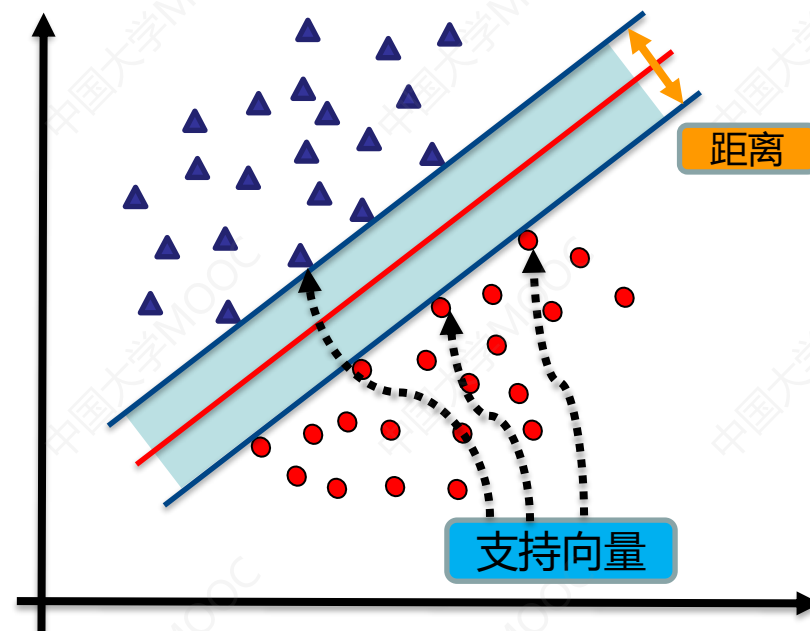
04 线性不可分支持向量机

1.支持向量机概述

4

支持向量机（Support Vector Machine, SVM） 是一类按监督学习（supervised learning）方式对数据进行二元分类的广义线性分类器（generalized linear classifier），其决策边界是对学习样本求解的最大边距超平面（maximum-margin hyperplane）。

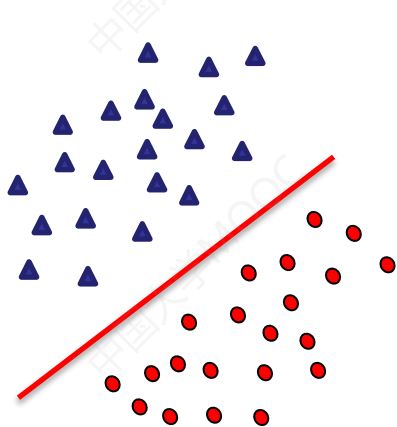
与逻辑回归和神经网络相比，支持向量机，在学习复杂的非线性方程时提供了一种更为清晰，更加强大的方式。



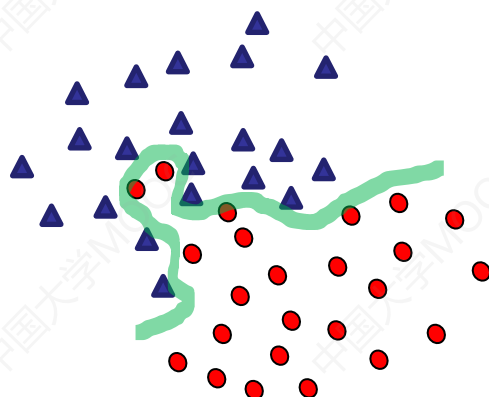
1.支持向量机概述

5

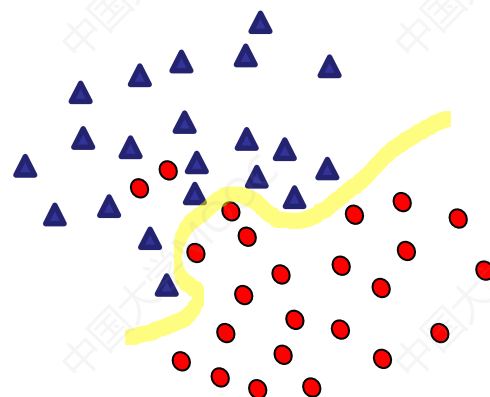
硬间隔、软间隔和非线性 SVM



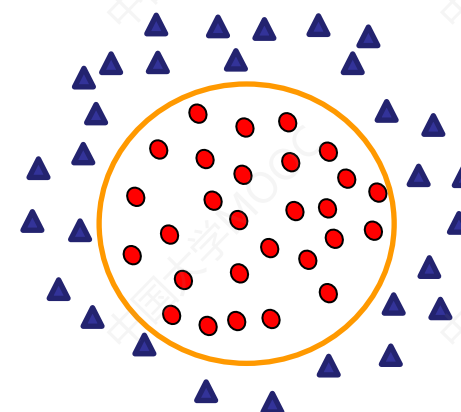
线性可分



硬间隔



软间隔



线性不可分

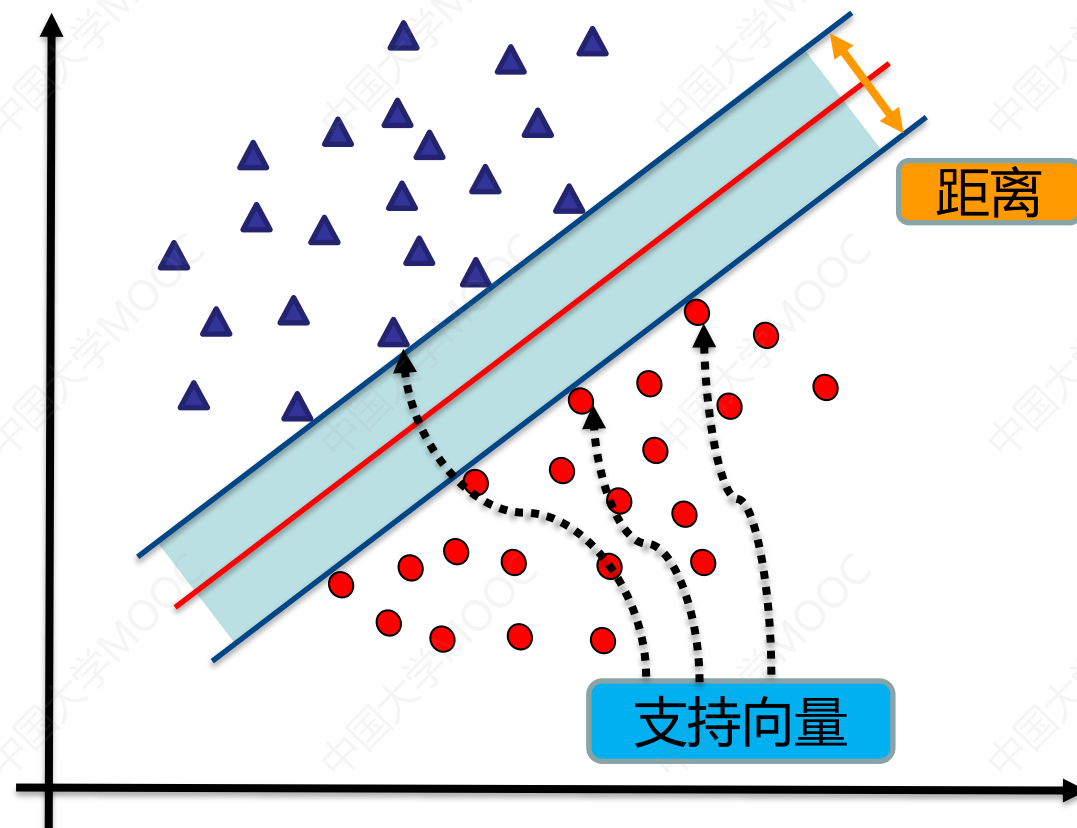
假如数据是完全的线性可分的，那么学习到的模型可以称为硬间隔支持向量机。换个说法，硬间隔指的就是完全分类准确，不能存在分类错误的情况。软间隔，就是允许一定量的样本分类错误。

1.支持向量机概述

6

算法思想

找到集合边缘上的若干数据（称为支持向量（Support Vector）），用这些点找出一个平面（称为决策面），使得支持向量到该平面的距离最大。



1.支持向量机概述

7

背景知识

任意超平面可以用下面这个线性方程来描述：

$$w^T x + b = 0$$

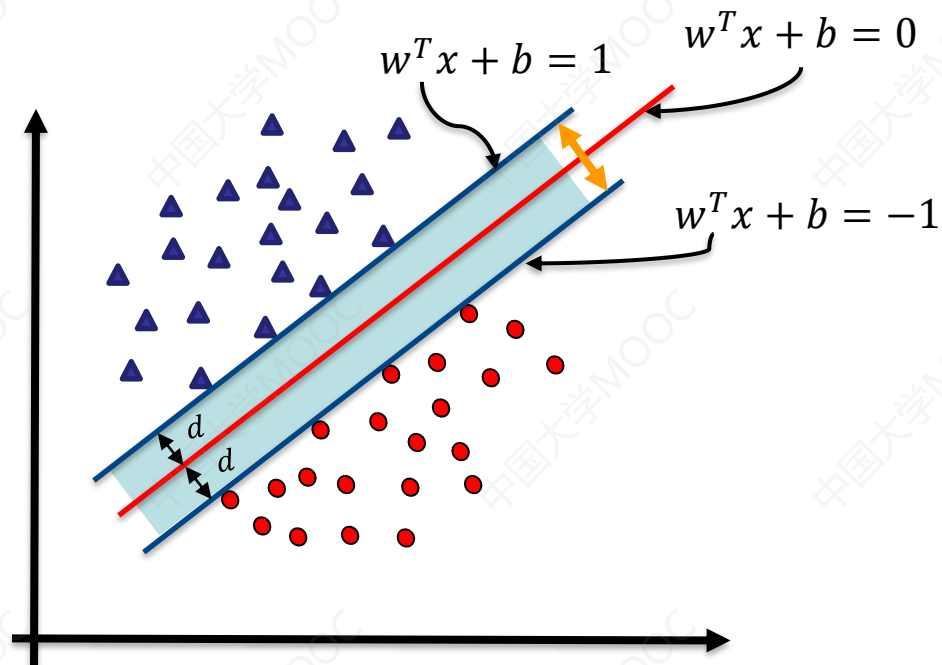
二维空间点 (x, y) 到直线 $Ax + By + C = 0$ 的距离公式是：

$$\frac{|Ax + By + C|}{\sqrt{A^2 + B^2}}$$

扩展到 n 维空间后，点 $x = (x_1, x_2 \dots x_n)$ 到超平面

$$w^T x + b = 0 \text{ 的距离为: } \frac{|w^T x + b|}{\|w\|}$$

$$\text{其中 } \|w\| = \sqrt{w_1^2 + \dots + w_n^2}$$



如图所示，根据支持向量的定义我们知道，支持向量到超平面的距离为 d ，其他点到超平面的距离大于 d 。每个支持向量到超平面的距离可以写

$$\text{为: } d = \frac{|w^T x + b|}{\|w\|}$$

1.支持向量机概述

8

背景知识

如图所示，根据支持向量的定义我们知道，支持向量到超平面的距离为 d ，其他点到超平面的距离大于 d 。

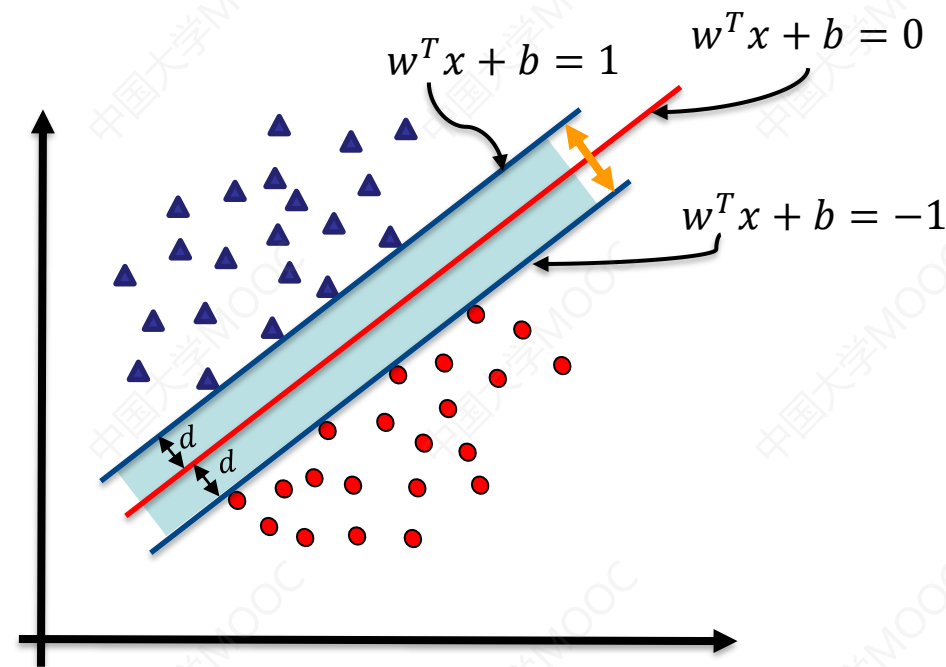
于是我们有这样的公式：故：

$$\begin{cases} \frac{w^T x + b}{\|w\|} \geq d & y = 1 \\ \frac{w^T x + b}{\|w\|} \leq -d & y = -1 \end{cases}$$

我们暂且令 d 为 1（之所以令它等于 1，是为了方便推导和优化，且这样做对目标函数的优化没有影响），

将两个方程合并，我们可以简写为： $y(w^T x + b) \geq 1$

至此我们就可以得到最大间隔超平面的上下两个超平面： $d = \frac{|w^T x + b|}{\|w\|}$



2.线性可分支持向量机

9

01 支持向量机概述

02 线性可分支持向量机

03 线性支持向量机

04 线性不可分支持向量机

2.线性可分支持向量机

10

背景知识

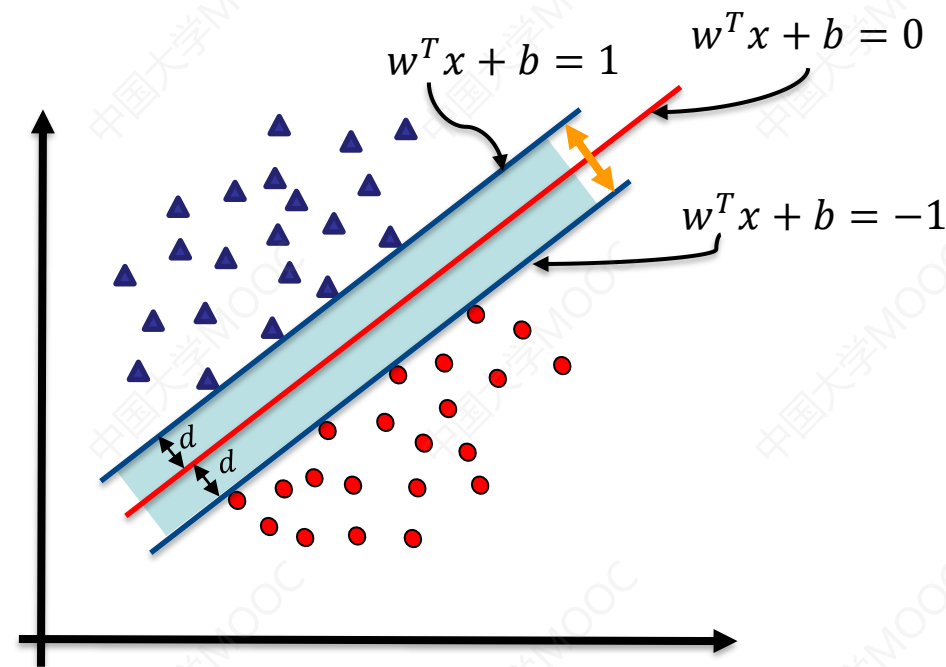
点到面的距离公式

$$d = \frac{|Ax_0 + By_0 + Cz_0 + D|}{\sqrt{A^2 + B^2 + C^2}}$$

$$y(w^T x + b) \geq 1 \quad d = \frac{|w^T x + b|}{\|w\|}$$

$$y(w^T x + b) = |w^T x + b|$$

支持向量机的最终目的是最大化 d



2. 支持向量机求解

11

函数间隔: $d^* = y_i(w^T x + b)$

几何间隔: $d = \frac{y(w^T x + b)}{\|w\|}$, 当数据被正确分类时, 几何间隔就是点到超平面的距离

为了求几何间隔最大, SVM基本问题可以转化为求解: ($\frac{d^*}{\|w\|}$ 为几何间隔, d^* 为函数间隔)

$$\max_{w,b} \frac{d^*}{\|w\|}$$

(subject to) $y_i(w^T x_i + b) \geq d^*, i = 1, 2, \dots, m$

2.支持向量机求解

12

①转化为凸函数:

先令 $d^* = 1$, 方便计算 (参照衡量, 不影响评价结果)

$$\max_{w,b} \frac{1}{\|w\|}$$

$$s.t. \ y_i(w^T x_i + b) \geq 1, \ i = 1, 2, \dots, m$$

再将 $\max_{w,b} \frac{1}{\|w\|}$ 转化成 $\min_{w,b} \frac{1}{2} \|w\|^2$ 求解凸函数, 1/2是为了求导之后方便计算。

$$\min_{w,b} \frac{1}{2} \|w\|^2$$

$$s.t. \ y_i(w^T x_i + b) \geq 1, \ i = 1, 2, \dots, m$$

2.支持向量机求解

13

②用拉格朗日乘子法和KKT条件求解最优值：

$$\min_{w,b} \frac{1}{2} \|w\|^2$$

$$s.t. -y_i(w^T x_i + b) + 1 \leq 0, i = 1, 2, \dots, m$$

整合成： $L(w, b, \alpha) = \frac{1}{2} \|w\|^2 + \sum_{i=1}^m \alpha_i (-y_i(w^T x_i + b) + 1)$ 其中 α 为拉格朗日乘子

推导：

根据Karush-Kuhn-Tucker (KKT) 条件：

$$\frac{\partial}{\partial w} L(w, b, \alpha) = w - \sum_{i=1}^m \alpha_i y_i x_i = 0, w = \sum_{i=1}^m \alpha_i y_i x_i$$

$$\frac{\partial}{\partial b} L(w, b, \alpha) = \sum_{i=1}^m \alpha_i y_i = 0$$

2.支持向量机求解

14

$$w = \sum_{i=1}^m \alpha_i y_i x_i \quad \sum_{i=1}^m \alpha_i y_i = 0$$

代入 $L(w, b, \alpha)$

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

2.支持向量机求解

15

$$w = \sum_{i=1}^m \alpha_i y_i x_i \quad \sum_{i=1}^m \alpha_i y_i = 0$$

再把max问题转成min问题:

添加负号

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

$$s. t. \sum_{i=1}^m \alpha_i y_i = 0,$$

$$\alpha_i \geq 0, i = 1, 2, \dots, m$$

得到最优解 $\alpha^* = (\alpha_1^*, \alpha_2^*, \dots, \alpha_m^*)^T$

解出后, 代入超平面模型也就是:

$$y = w^{*T} x + b^* = \sum_{i=1}^m \alpha_i^* y_i (x_i \cdot x_j) + b^*, \text{ 可得 } b^* = y - \sum_{i=1}^m \alpha_i^* y_i (x_i \cdot x_j), \quad w^* = \sum_{i=1}^m \alpha_i^* y_i x_i$$

以上为SVM对偶问题的对偶形式

3.线性支持向量机

16

01 支持向量机概述

02 线性可分支持向量机

03 线性支持向量机

04 线性不可分支持向量机

3.线性支持向量机

17

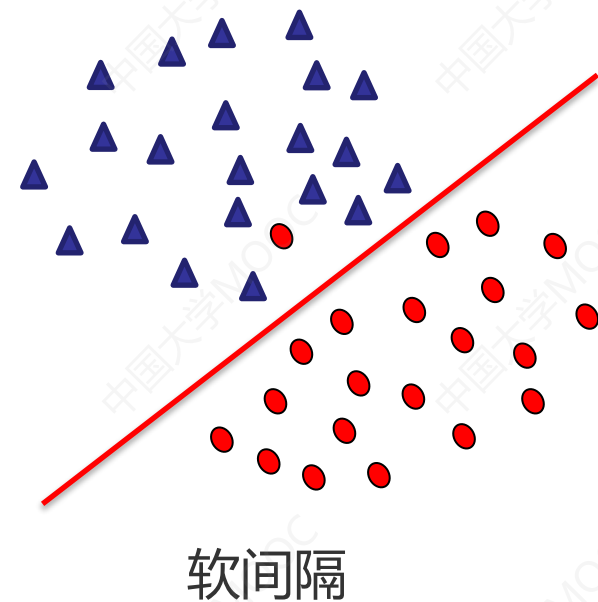
若数据线性不可分，则可以引入松弛变量 $\xi \geq 0$ ，使函数间隔加上松弛变量大于等于1，则目标函数：

$$\min_{w,b,\xi} \frac{1}{2} \|w\|^2 + C \sum_{i=1}^m \xi_i \quad s.t. \quad y_i(w^T x_i + b) \geq 1 - \xi_i$$

对偶问题：

$$\begin{aligned} \max_{\alpha} \quad & \sum_{i=1}^m \alpha_i - \frac{1}{2} \sum_{i,j=1}^m \alpha_i \alpha_j y_i y_j (x_i \cdot x_j) = \min_{\alpha} \quad \frac{1}{2} \sum_{i,j=1}^m \alpha_i \alpha_j y_i y_j (x_i \cdot x_j) - \sum_{i=1}^m \alpha_i \\ s.t. \quad & C \geq \alpha_i \geq 0, i = 1, 2, \dots, m \quad \sum_{i=1}^m \alpha_i y_i = 0 \end{aligned}$$

C 为惩罚参数， C 值越大，对分类的惩罚越大。跟线性可分求解的思路一致，同样这里先用拉格朗日乘子法得到拉格朗日函数，再求其对偶问题。



3.线性支持向量机

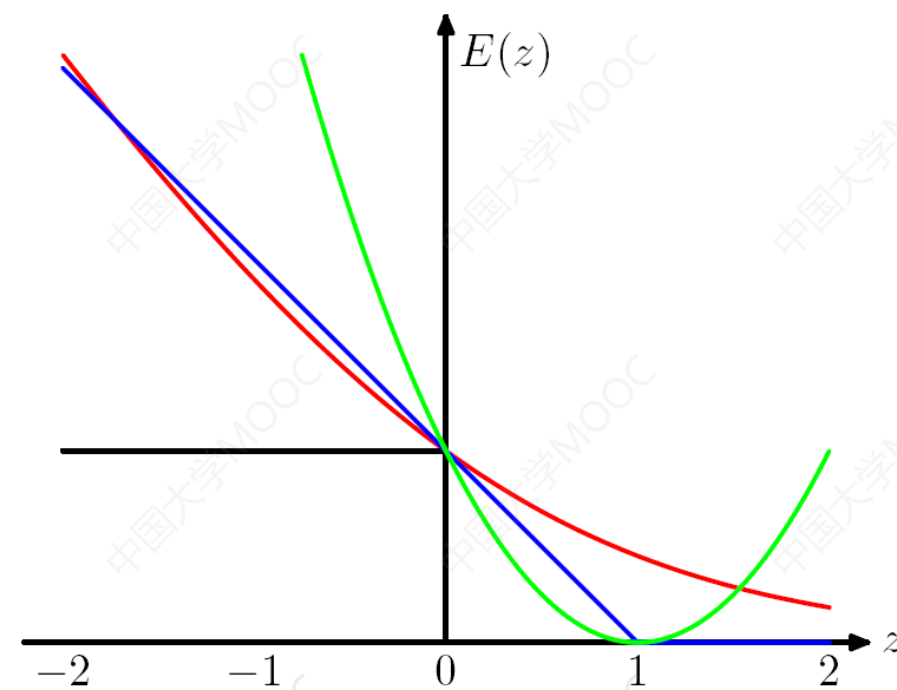
18

ξ 为"松弛变量"

$$\xi_i = \max(0, 1 - y_i(w \cdot x_i + b))$$

即hinge损失函数。每一个样本都有一个对应的松弛变量，表征该样本不满足约束的程度。

绿色的线为 square loss
蓝色的线为 hinge loss
红色的线为负 log loss



损失函数hinge loss

3.线性支持向量机

19

求解原始最优化问题的解 w^* 和 b^* ，得到线性支持向量机，其分离超平面为

$$w^{*T}x + b^* = 0$$

分类决策函数为： $f(x) = \text{sign}(w^{*T}x + b^*)$

线性可分支持向量机的解 w^* 唯一，但 b^* 不唯一。对偶问题是

$$\min_{\alpha} \frac{1}{2} \sum_{i=1}^m \sum_{j=1}^m \alpha_i \alpha_j y_i y_j (x_i \cdot x_j) - \sum_{i=1}^m \alpha_i$$

$$s. t. \quad \sum_{i=1}^m \alpha_i y_i = 0$$

$$0 \leq \alpha_i \leq C, \quad i = 1, 2, \dots, m$$

3.线性支持向量机

20

解出后，代入超平面模型：

$$w^{*T}x + b^* = 0$$

可得

$$b^* = y_i - \sum_{i=1}^m \alpha_i^* y_i (x_i \cdot x_j)$$

$$w^* = \sum_{i=1}^m \alpha_i^* y_i x_i$$

其中： $0 < \alpha_i^* < C$

4.线性不可分支持向量机

21

01 支持向量机概述

02 线性可分支持向量机

03 线性支持向量机

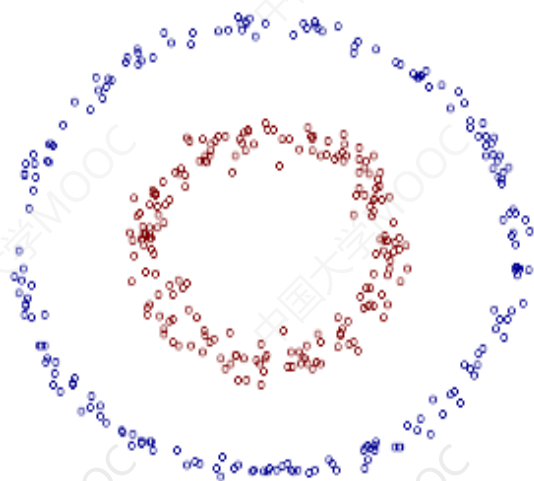
04 线性不可分支持向量机

4.线性不可分支持向量机

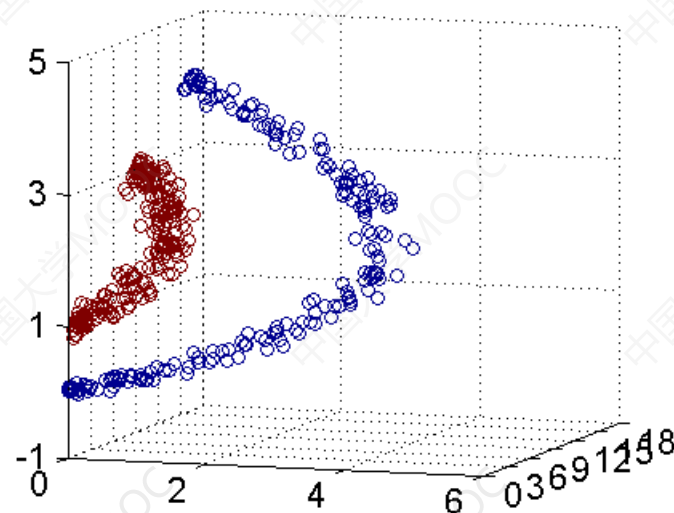
22

核技巧

在低维空间计算获得高维空间的计算结果，满足高维，才能在高维下线性可分。我们需要引入一个新的概念：**核函数**。它可以将样本从原始空间映射到一个更高维的特质空间中，使得样本在新的空间中线性可分。这样我们就可以使用原来的推导来进行计算，只是所有的推导是在新的空间，而不是在原来的空间中进行，即用核函数来替换当中的内积。



线性不可分



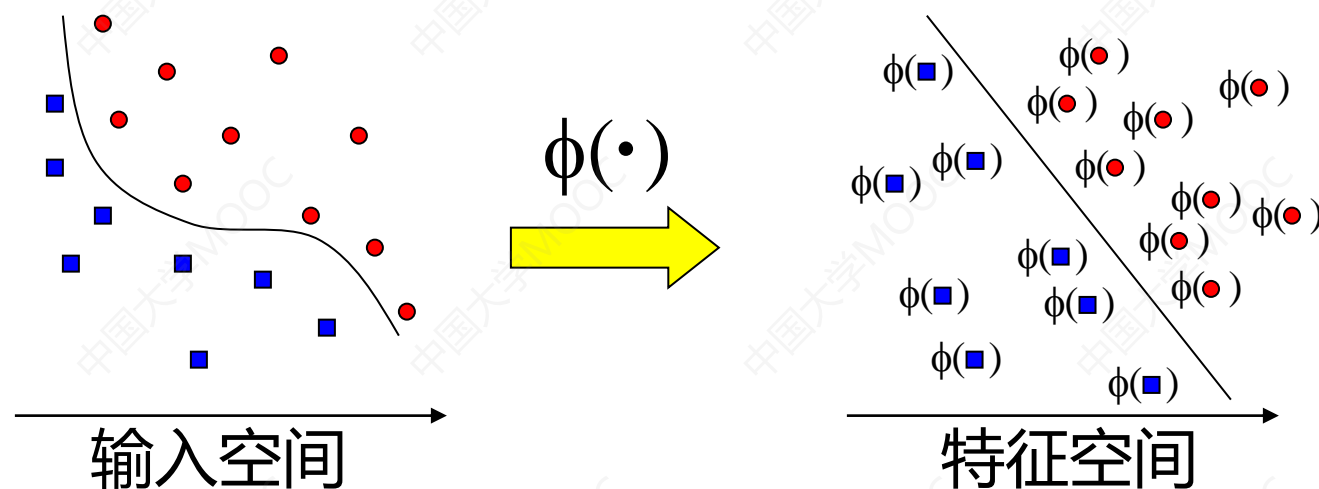
高维下线性可分

4.线性不可分支持向量机

23

核技巧

用核函数来替换原来的内积。



即通过一个非线性转换后的两个样本间的内积。具体地， $K(x, z)$ 是一个核函数，或正定核，意味着存在一个从输入空间到特征空间的映射，对于任意空间输入的 x, z 有：

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

4.线性不可分支持向量机

24

在线性支持向量机学习的对偶问题中，用核函数 $K(x, z)$ 替代内积，求解得到的就是非线性支持向量机

$$f(x) = \text{sign} \left(\sum_{i=1}^N \alpha_i^* y_i K(x, x_i) + b^* \right)$$

4.线性不可分支持向量机

25

常用核函数有：

线性核函数

$$K(x_i, x_j) = x_i^T x_j$$

多项式核函数

$$K(x_i, x_j) = (x_i^T x_j)^d$$

高斯核函数

$$K(x_i, x_j) = \exp\left(-\frac{\|x_i - x_j\|^2}{2\gamma^2}\right)$$

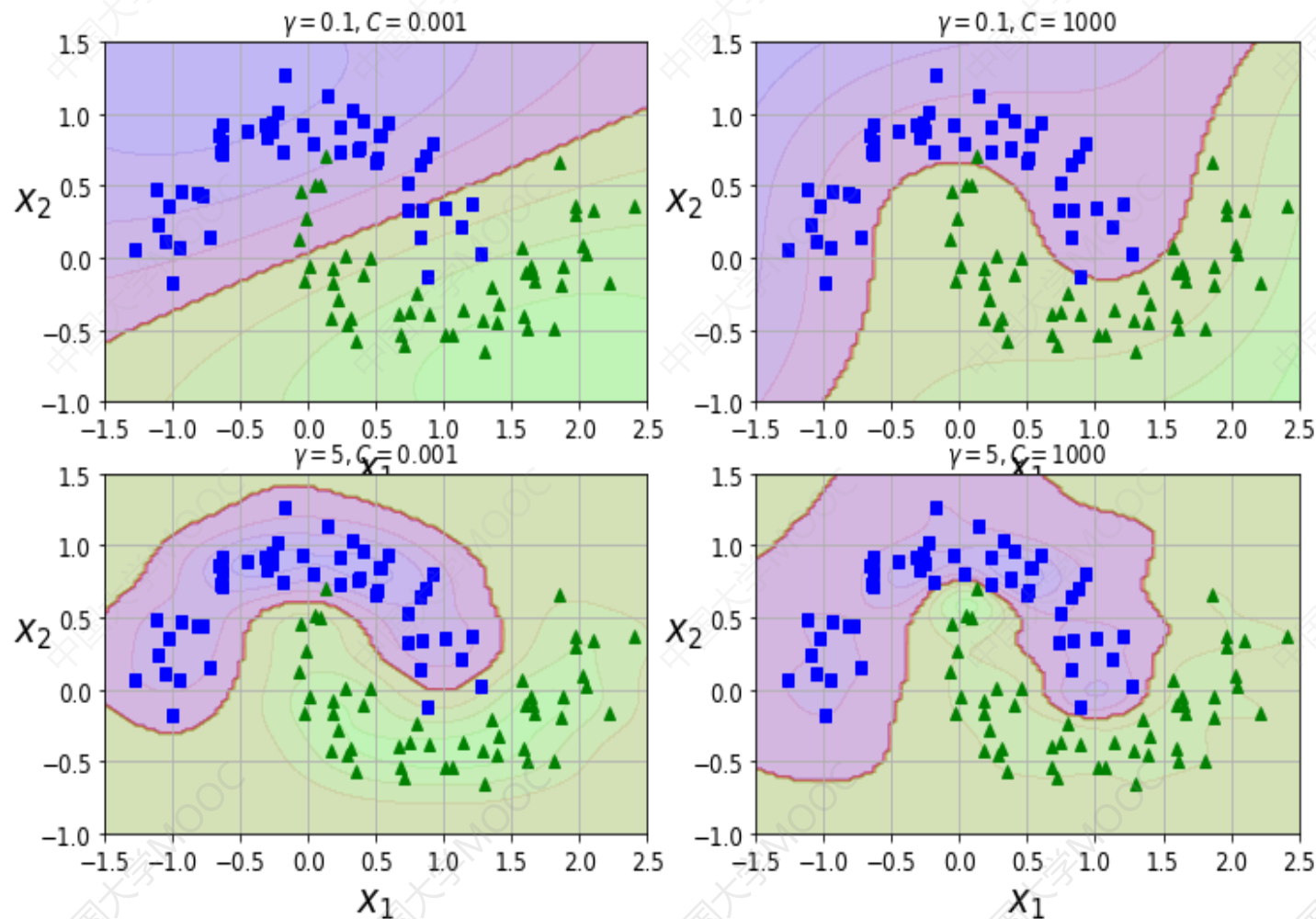
这三个常用的核函数中,只有高斯核函数是需要调参的。

4.线性不可分支持向量机

26

SVM的超参数

γ 越大，支持向量越少， γ 值越小，支持向量越多。
其中 C 是惩罚系数，即对误差的宽容度。 C 越高，说明越不能容忍出现误差，容易过拟合。 C 越小，容易欠拟合。



总结

27

下面是一些SVM普遍使用的准则：

n 为特征数， m 为训练样本数。

(1)如果相较于 m 而言， n 要大许多，即训练集数据量不够支持我们训练一个复杂的非线性模型，我们选用逻辑回归模型或者不带核函数的支持向量机。

(2)如果 n 较小，而且 m 大小中等，例如 n 在 1-1000 之间，而 m 在10-10000之间，使用高斯核函数的支持向量机。

(3)如果 n 较小，而 m 较大，例如 n 在1-1000之间，而 m 大于50000，则使用支持向量机会非常慢，解决方案是创造、增加更多的特征，然后使用逻辑回归或不带核函数的支持向量机。

参考文献

28

1. 《统计学习方法》，清华大学出版社，李航著，2019年出版
2. 《机器学习》，清华大学出版社，周志华著，2016年出版
3. Christopher M. Bishop, Pattern Recognition and Machine Learning, Springer-Verlag, 2006

谢 谢!

