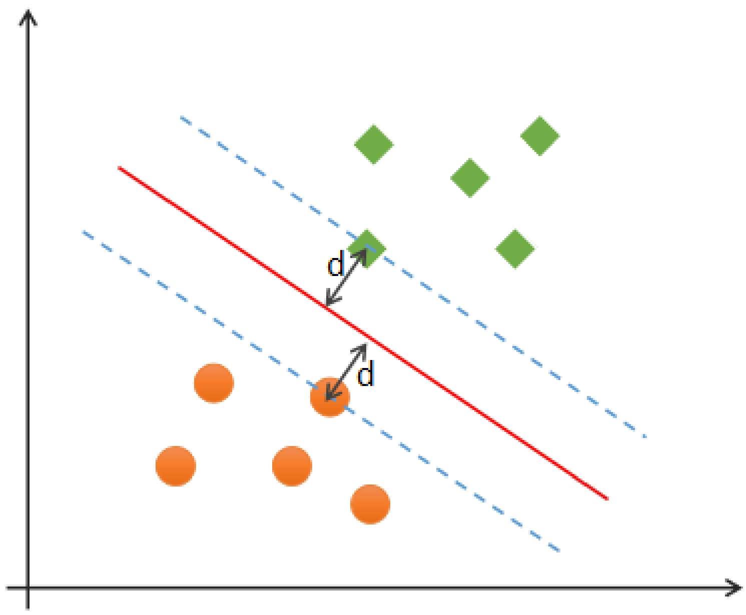
一、支持向量机

1. 基本概念

1）什么是支持向量机

支持向量机（Support Vector Machines）是一种二分类模型，在机器学习、计算机视觉、数据挖掘中广泛应用，主要用于解决数据分类问题，它的目的是寻找一个超平面来对样本进行分割，分割的原则是间隔最大化（即数据集的边缘点到分界线的距离d最大，如下图），最终转化为一个凸二次规划问题来求解。通常SVM用于二元分类问题，对于多元分类可将其分解为多个二元分类问题，再进行分类。所谓“支持向量”，就是下图中虚线穿过的边缘点。支持向量机就对应着能将数据正确划分并且间隔最大的直线（下图中红色直线）。

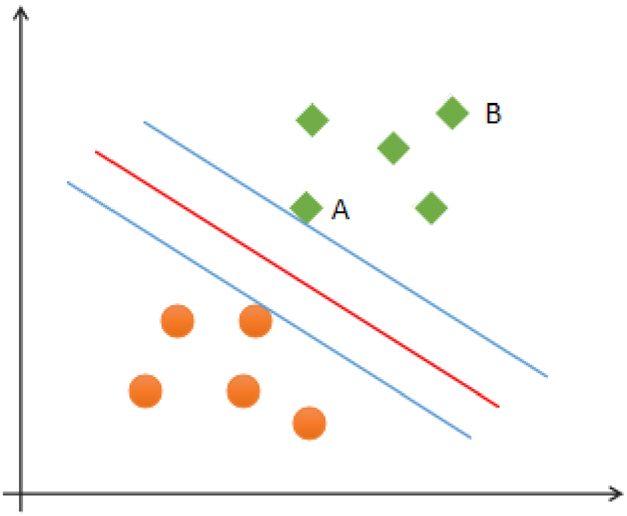


2）超平面

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

其中，$x = (x_1; x_2; ...; x_n)$，$w = (w_1; w_2; ...; w_n)$，b为偏置项.

3）函数间隔与几何间隔



如图中的A，B两个样本点，B点被预测为正类的确信度要大于A点，所以SVM的目标是寻找一个超平面，使得离超平面较近的异类点之间能有更大的间隔，即不必考虑所有样本点，只需让求得的超平面使得离它近的点间隔最大

一个点距离分类超平面的远近可以表示分类预测的准确程度，那么在 $w \cdot x + b = 0$ 时， $|w \cdot x + b|$ 就能表示 x距离超平面的远近，而此时 y 的符号是否一致可以表示分类是否正确。于是函数间隔就可以写成:

$$\hat{\gamma}_i = y_i(w \cdot x_i + b)$$

超平面与所有数据集的间隔就是所有样本点的函数间隔的最小值($\gamma = min\hat{\gamma}_i$,在这个间隔内，任意一个超平面都可以把数据集正确分类)。

不过只有函数间隔存在一个问题，只要成比例的改变 w 和 b （比如变成 $2w$和 $2b$），超平面不会改变，但是函数间隔却变成了原来的2倍。即有必要对 w 加一些约束，如规范化:

$$||w|| = 1$$

如此可以使得函数间隔(*分类边界与离它最近的数据点之间的距离*)是确定的，此时函数间隔就变成了几何间隔(*指数据点到超平面的有符号距离 *):

$$\gamma_i = y_i(\frac{w}{||w||} \cdot x_i + \frac{b}{||w||})$$

同样，超平面与所有数据集的间隔就是所有样本点的函数间隔的最小值 $\gamma = min\hat{\gamma}_i$

4）间隔最大化

可分离超平面有无穷多个，但是几何间隔最大的分离超平面是唯一的，在线性可分的情况下，这种间隔称为硬间隔（近似线性可分的情况下为软间隔）。

求解间隔最大的超平面可以表示为如下约束问题：(γ表示间隔)

$$\max_{w,b} \quad \gamma$$
$$s.t \quad y_i(\frac{w}{||w||} \cdot x_i + \frac{b}{||w||}) \geq \gamma, \quad i=1,2,...,n$$

基于几何间隔和函数间隔的关系，上式可以改写为：

$$\max_{w,b} \quad \frac{\gamma}{||w||}$$
$$s.t \quad y_i(w \cdot x_i + b) \geq \hat{\gamma}, \quad i=1,2,...,n$$

因为函数间隔的倍数不会改变超平面，所以我们可以取 $\hat{\gamma}=1$,，同时最大化 $\frac{1}{||w||}$ 和最小化 $\frac{1}{2}||w||^2$等价。 所以上式还可以进一步改写：

$$\min_{w,b} \quad \frac{1}{2}||w||^2$$
$$s.t \quad y_i(w \cdot x_i + b) - 1 \geq 0, \quad i=1,2,...,n$$

目标函数式二次函数 可求解得最优解 w^*, b^* 由此得最优分离超平面:

$$w^* \cdot x + b^* = 0$$

5）SVM最优边界要求

SVM寻找最优边界时，需满足以下几个要求：

（1）正确性：对大部分样本都可以正确划分类别；

（2）安全性：支持向量，即离分类边界最近的样本之间的距离最远；

（3）公平性：支持向量与分类边界的距离相等；

（4）简单性：采用线性方程（直线、平面）表示分类边界，也称分割超平面。如果在原始维度中无法做线性划分，那么就通过升维变换，在更高维度空间寻求线性分割超平面. 从低纬度空间到高纬度空间的变换通过核函数进行。

6）线性可分与线性不可分

① 线性可分

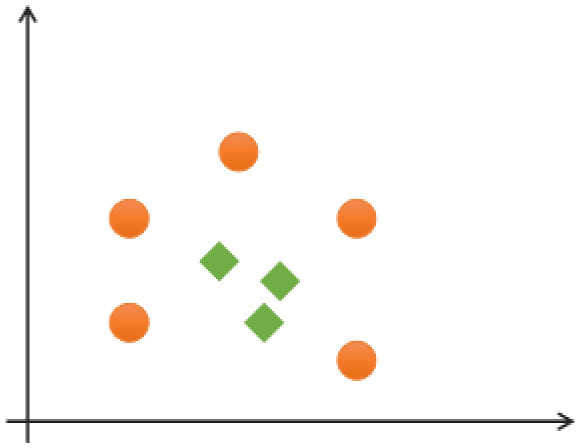
如果一组样本能使用一个线性函数将样本正确分类，称这些数据样本是线性可分的。那么什么是线性函数呢？在二维空间中就是一条直线，在三维空间中就是一个平面，以此类推，如果不考虑空间维数，这样的线性函数统称为超平面。

② 线性不可分

如果一组样本，无法找到一个线性函数将样本正确分类，则称这些样本线性不可分。以下是一个一维线性不可分的示例：

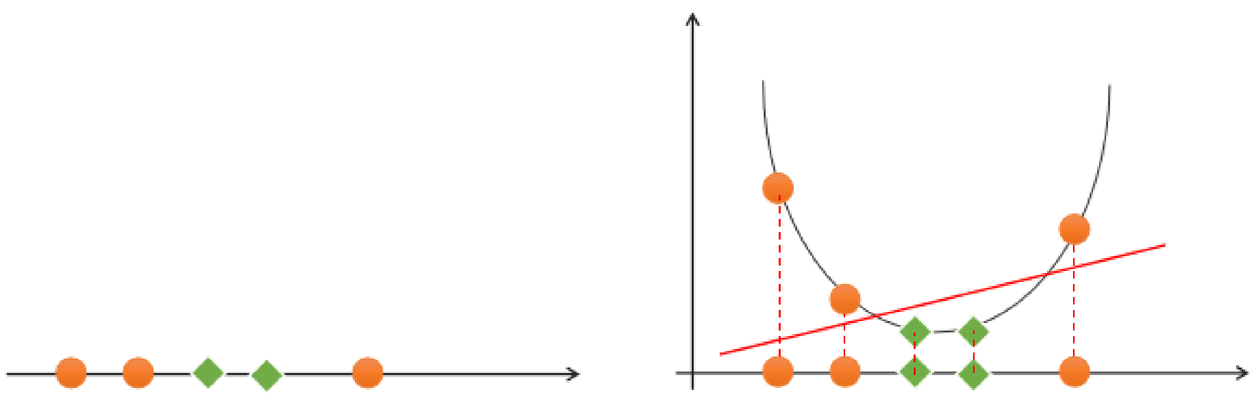
一维线性不可分

以下是一个二维不可分的示例：

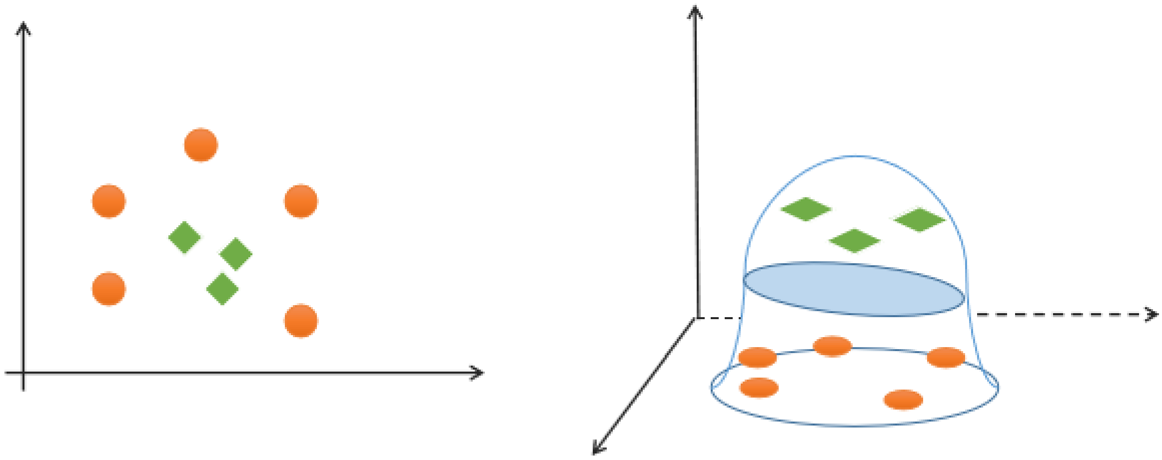


二维线性不可分

对于该类线性不可分问题，可以通过升维，将低纬度特征空间映射为高纬度特征空间，实现线性可分，如下图所示：



一维空间升至二维空间实现线性可分



二维空间升至三维空间实现线性可分

那么如何实现升维？这就需要用到核函数。

2. 核函数

通过名为核函数的特征变换，增加新的特征，使得低纬度线性不可分问题变维高纬度线性可分问题。

1）线性核函数

线性核函数（Linear）表示不通过核函数进行升维，仅在原始空间寻求线性分类边界，主要用于线性可分问题。

$$K(x,\ y) = x \cdot y$$

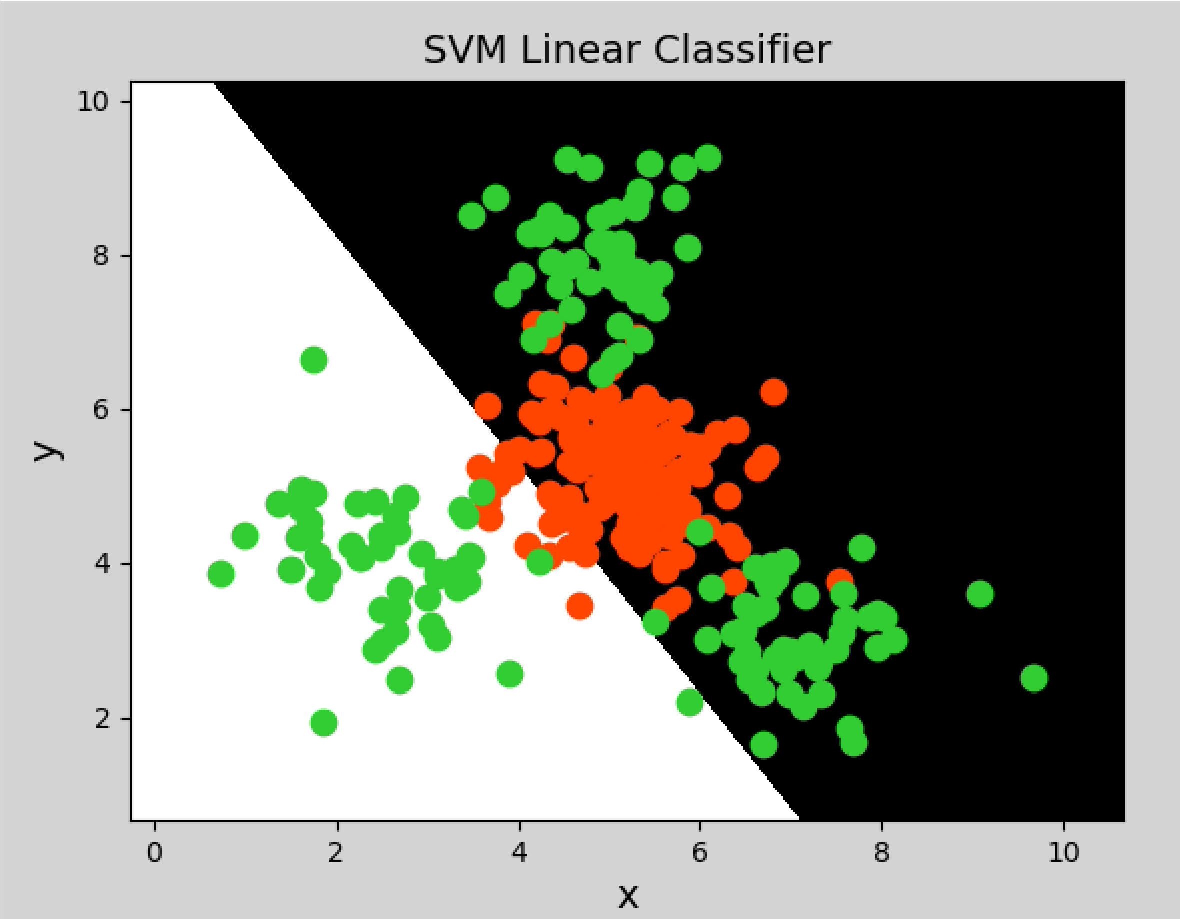
示例代码：

```
import sklearn.svm as svm

model = svm.SVC(kernel="linear")  # 线性核函数

model.fit(x, y)
```

```
# 支持向量机示例
import numpy as np
import sklearn.model_selection as ms
import sklearn.svm as svm
import sklearn.metrics as sm
import matplotlib.pyplot as mp

x, y = [], []
with open("../data/multiple2.txt", "r") as f:
    for line in f.readlines():

        data = [float(substr) for substr in line.split(",")]
```

```
    x.append(data[:-1])  # 输入
    y.append(data[-1])  # 输出

# 列表转数组
x = np.array(x)
y = np.array(y, dtype=int)

# 线性核函数支持向量机分类器
model = svm.SVC(kernel="linear")  # 线性核函数
# model = svm.SVC(kernel="poly", degree=3)  # 多项式核函数
# print("gamma:", model.gamma)
# 径向基核函数支持向量机分类器
# model = svm.SVC(kernel="rbf",
#                 gamma=0.01,  # 概率密度标准差
#                 C=200)  # 概率强度
model.fit(x, y)

# 计算图形边界
l, r, h = x[:, 0].min() - 1, x[:, 0].max() + 1, 0.005
b, t, v = x[:, 1].min() - 1, x[:, 1].max() + 1, 0.005

# 生成网格矩阵
grid_x = np.meshgrid(np.arange(l, r, h), np.arange(b, t, v))
flat_x = np.c_[grid_x[0].ravel(), grid_x[1].ravel()]  # 合并
flat_y = model.predict(flat_x)  # 根据网格矩阵预测分类
grid_y = flat_y.reshape(grid_x[0].shape)  # 还原形状

mp.figure("SVM Classifier", facecolor="lightgray")
mp.title("SVM Classifier", fontsize=14)

mp.xlabel("x", fontsize=14)
mp.ylabel("y", fontsize=14)
mp.tick_params(labelsize=10)
mp.pcolormesh(grid_x[0], grid_x[1], grid_y, cmap="gray")

C0, C1 = (y == 0), (y == 1)
mp.scatter(x[C0][:, 0], x[C0][:, 1], c="orangered", s=80)
mp.scatter(x[C1][:, 0], x[C1][:, 1], c="limegreen", s=80)
mp.show()
```

绘制图形：



2）多项式核函数

多项式核函数（Polynomial Kernel）用增加高次项特征的方法做升维变换，当多项式阶数高时复杂度会很高，其表达式为：

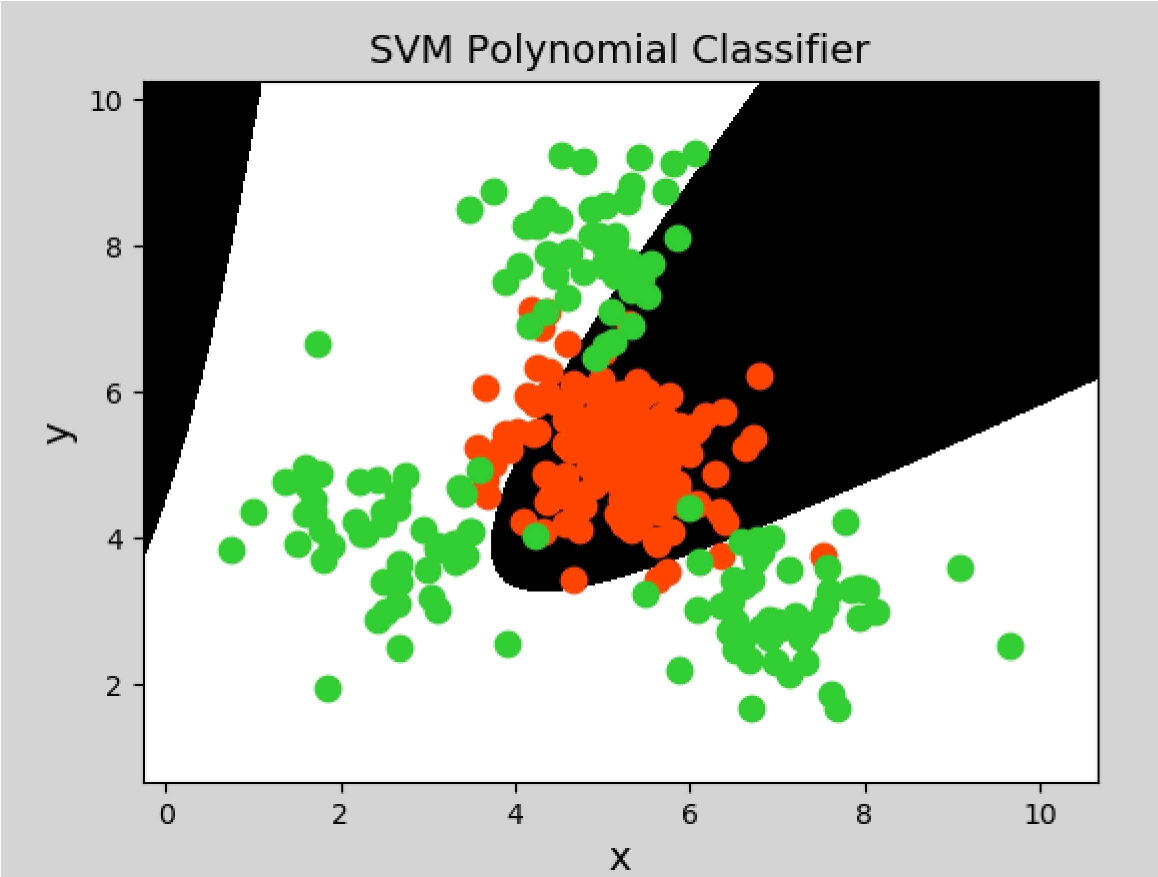
$$K(x,\ y) = (\alpha x^T \cdot y + c)^d$$

其中，α表示调节参数，d表示最高次项次数，c为可选常数。

示例代码（将上一示例中创建支持向量机模型改为一下代码即可）：

```
model = svm.SVC(kernel="poly", degree=3) # 多项式核函数
```

生成图像：



3）径向基核函数

径向基核函数（Radial Basis Function Kernel）具有很强的灵活性，应用很广泛。与多项式核函数相比，它的参数少，因此大多数情况下，都有比较好的性能。在不确定用哪种核函数时，可优先验证高斯核函数。由于类似于高斯函数，所以也称其为高斯核函数。表达式如下：

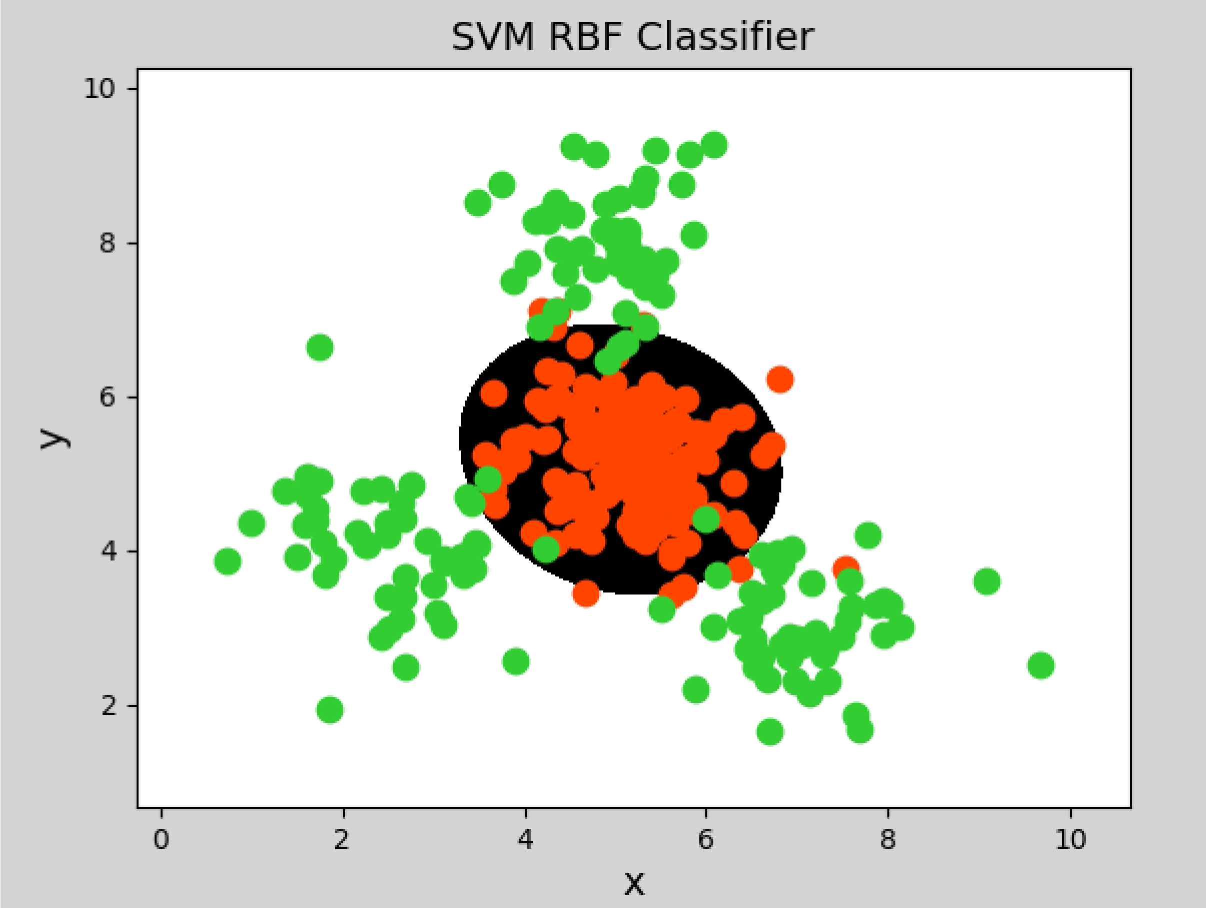
$$K(x,y) = exp(-\gamma||x-y||^2)$$
$$\gamma = \frac{1}{2\alpha^2}$$

其中，α^2越大，高斯核函数变得越平滑，即得到一个随输入x变化较缓慢，模型的偏差和方差大，泛化能力差，容易过拟合。α^2越小，高斯核函数变化越剧烈，模型的偏差和方差越小，模型对噪声样本比较敏感。

示例代码（将上一示例中分类器模型改为如下代码即可）：

```
# 径向基核函数支持向量机分类器
model = svm.SVC(kernel="rbf",
          gamma=0.01, # 概率密度标准差
          C=600) # 概率强度，该值越大对错误分类的容忍度越小，分类精度越高，但泛化能力越差；该值越小，对错误分类容忍度越大，但泛化能力强
```

生成图像：



3. 总结

（1）支持向量机是二分类模型

（2）支持向量机通过寻找最优线性模型作为分类边界

（3）边界要求：正确性、公平性、安全性、简单性

（4）可以通过核函数将线性不可分转换为线性可分问题，核函数包括：线性核函数、多项式核函数、径向基核函数

（5）支持向量机适合少量样本的分类