7 支持向量机

Support Vector Machine

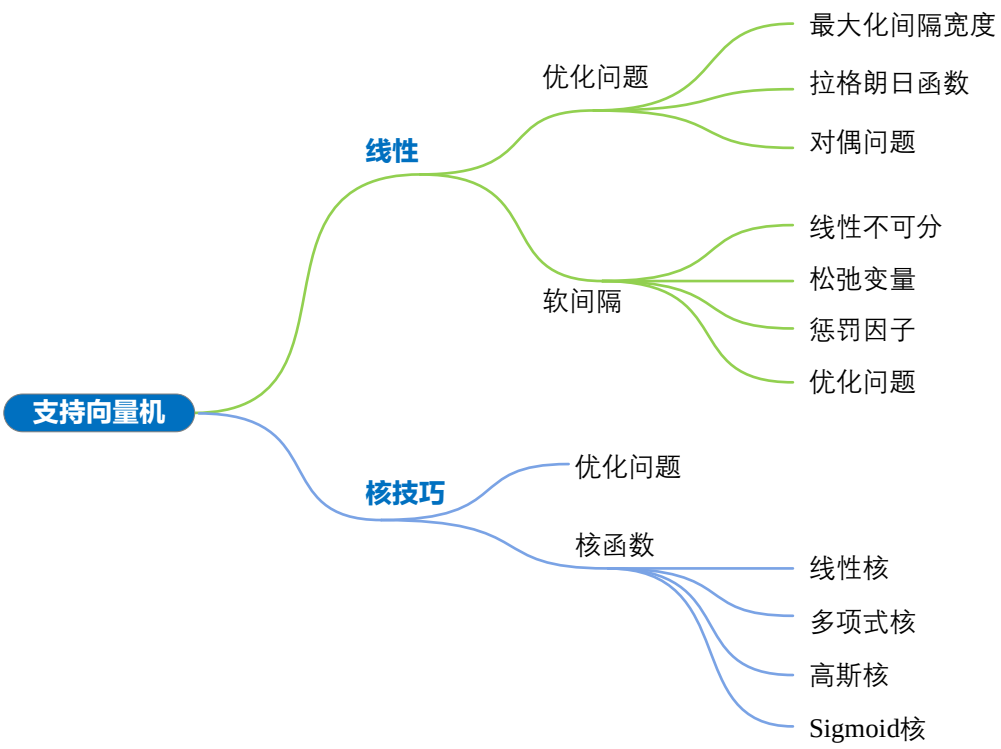
间隔最大化，支持向量确定决策边界

没有什么比精巧理论更实用的了。

Nothing is more practical than a good theory.

—— 弗拉基米尔·万普尼克 (Vladimir Vapnik) | 俄罗斯统计学家、数学家 | 1936 ~

- `numpy.hstack()` 水平方向将数组堆叠起来
- `numpy.vstack()` 竖直方向将数组堆叠起来
- `sklearn.svm.SVC` 支持向量机算法函数



7.1 支持向量机

弗拉基米尔 · 万普尼克 (Vladimir Vapnik) 和他的同事们发明并且完善了**支持向量机** (Support Vector Machine, SVM)。支持向量机 SVM 是一种用于分类和回归问题的监督学习算法。SVM 的主要思想是找到一个可以将不同类别分隔开的最优超平面，该超平面具有最大间隔，即离最近的数据点的距离最大。超平面可以被认为是一个决策边界，可以用于预测新的未知数据点的类别。

在实践中，SVM 使用内积核函数将原始输入数据映射到高维空间，从而能够处理非线性问题。一些常见的内积核函数包括线性核函数，多项式核函数和径向基函数核函数。

SVM 是一个非常强大的算法，因为它可以处理高维空间和非线性问题，并且能够有效地避免过拟合。SVM 的缺点是它对于大型数据集的计算成本很高，以及内积核函数的选择和调整需要一定的经验和技巧。

弗拉基米尔·万普尼克为机器学习发展奠定了大量理论基础，大家有兴趣的话可以翻看他的作品——*The Nature of Statistical Learning Theory*。

弗拉基米尔·万普尼克 (Vladimir Vapnik) | 俄罗斯统计学家、数学家 | 1936 ~
支持向量机发明者之一。关键词： ● 支持向量机 ● 核技巧

原理

图 1 所示为支持向量机核心思路。如图 1 所示，一片湖面左右散布着蓝色 ● 红色 ● 礁石，游戏规则是，皮划艇以直线路径穿越水道，保证船身恰好紧贴礁石。寻找一条路径，让该路径通过的皮划艇宽度最大。很明显，图 1 (b) 中规划的路径好于图 1 (a)。

图 1 (b) 中加黑圈 ○ 的五个点，就是所谓的**支持向量** (support vector)。

图 1 中深蓝色线，便是**决策边界**，也称**分离超平面** (separating hyperplane)。本书为了统一称呼，下文都使用决策边界。特别提醒大家注意一点，加黑圈 ○ 支持向量确定决策边界位置；其他数据并没有起到任何作用。因此，SVM 对于数据特征数量远高于数据样本量的情况也有效。

图 1 中两条虚线之间宽度叫做**间隔** (margin)。正如，本章副标题所言，支持向量机的优化目标为——间隔最大化。

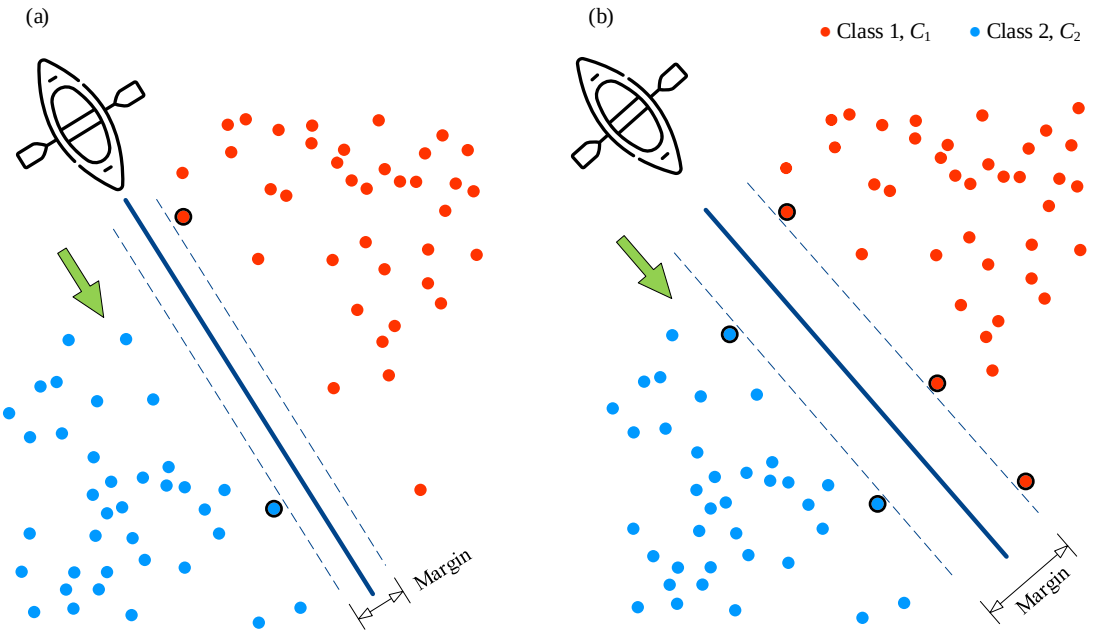


图 1. 支持向量机原理

线性可分、线性不可分

从数据角度，图 1 两类数据用一条直线便可以分割开来，这种数据叫做**线性可分** (linearly separable)。线性可分问题采用**硬间隔** (hard margin)；白话说，硬间隔指的是，间隔内没有数据点。

实践中，并不是所有数据都是线性可分。多数时候，数据**线性不可分** (non-linearly separable)。如图 2 所示，不能找到一条直线将蓝色 ● 红色 ● 数据分离。

对于线性不可分问题，就要引入两种方法——**软间隔** (soft margin) 和**核技巧** (kernel trick)。

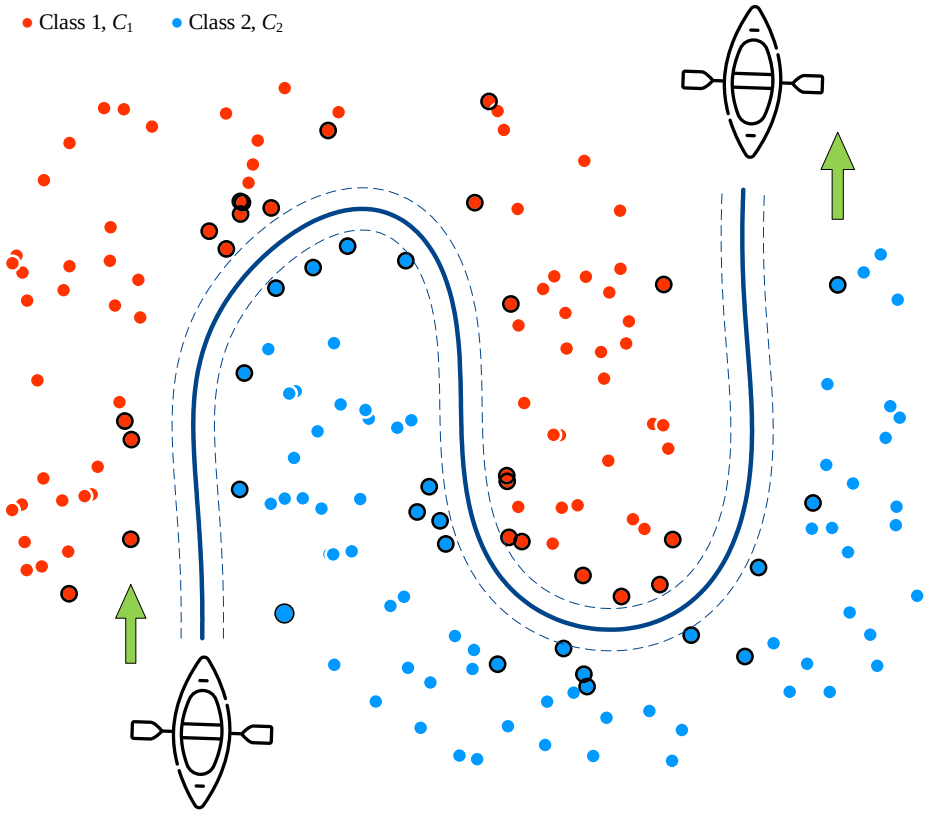


图 2. 线性不可分数据

软间隔

白话说，如图 3 所示，软间隔相当于一个**缓冲区** (buffer zone)。软间隔存在时，用决策边界分离数据时，有数据点侵入间隔，甚至超越间隔带。

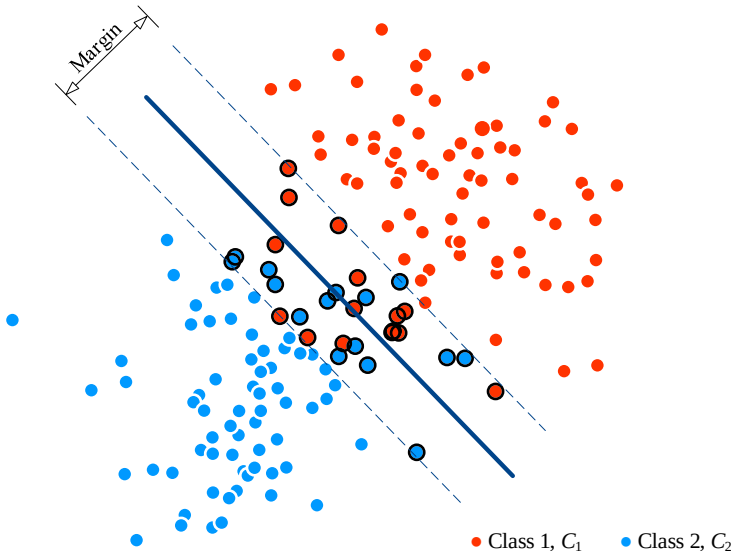


图 3. 软间隔

核技巧

核技巧将数据映射到高维特征空间，是一种数据升维。如图 4 所示，样本数据有两个特征，用平面可视化数据点位置。很明显图 4 给出的原始数据线性不可分。

采用核技巧，将图 4 二维数据，投射到三维核曲面上；很明显，在这个高维特征空间，容易找到某个水平面，将蓝色 ● 红色 ● 数据分离。利用核技巧，分离线性不可分数据变得更容易。

通常，采用支持向量机解决线性不可分问题，需要并用软间隔和核技巧。如图 5 所示，SVM 分类环形数据中，核技巧配合软间隔。

另外，支持向量机也可以用来处理回归问题，对应的方法为**支持向量回归** (Support Vector Regression, SVR)。本章将主要介绍硬间隔、支持向量和软间隔；下一章，将介绍核技巧。本章和下一章有一定比例的公式推导，这对理解支持向量机原理有帮助，希望大家耐心阅读。

《矩阵力量》第 19 章为本章提供大量数学工具，建议大家回顾。

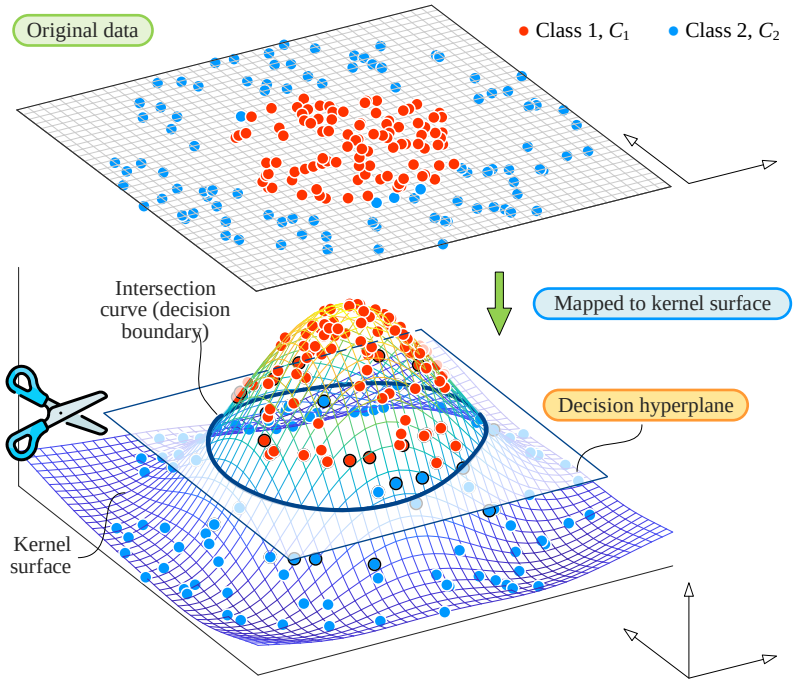


图 4. 核技巧原理

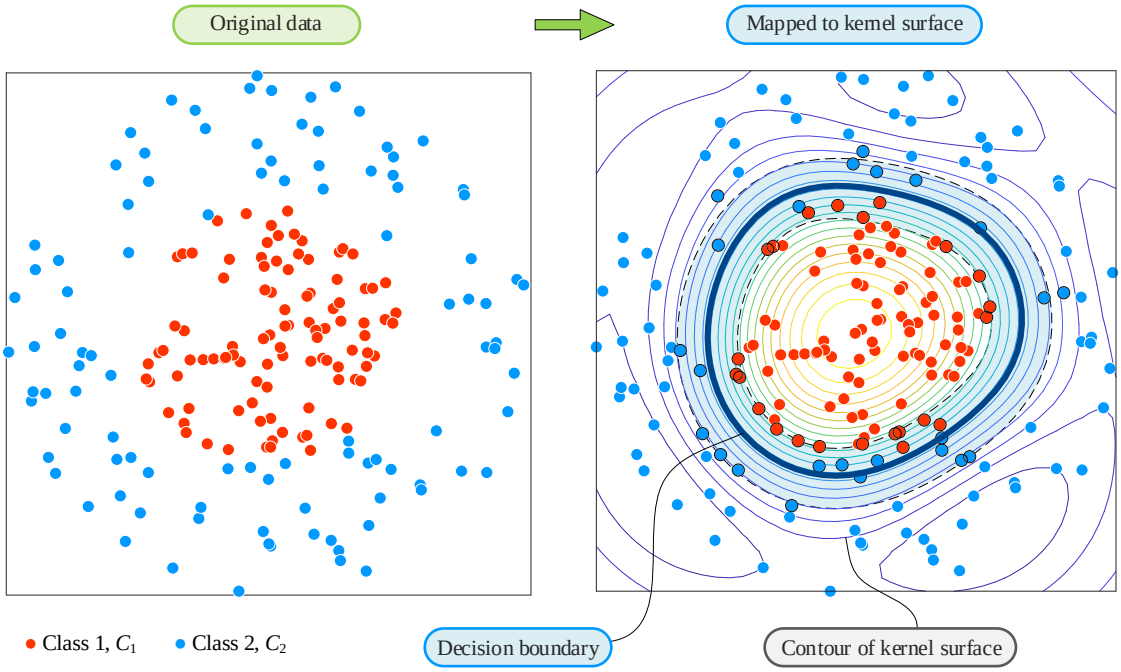


图 5. 核技巧配合软间隔

7.2 硬间隔：处理线性可分

支持向量机中硬间隔方法用来处理线性可分数据。利用《矩阵力量》一册讲解的向量几何知识，这一节将构造 SVM 中支持向量、决策边界、分类标签和间隔等元素之间的数学关系。

决策边界

如图 6 所示，决策边界定义如下：

$$f(\boldsymbol{x}) = \boldsymbol{w}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{x} + b = 0 \tag{1}$$

其中，$\boldsymbol{w}$ 和 b 为模型参数；$\boldsymbol{w}$ 为 $f(\boldsymbol{w})$ 的梯度向量，形式为列向量。(1) 中，列向量 $\boldsymbol{w}$ 和 $\boldsymbol{x}$ 行数均为特征数 D。

很明显 (1) 为**超平面** (hyperplane)。注意，图 6 所示间隔宽度为 $2h$ ($h > 0$)。

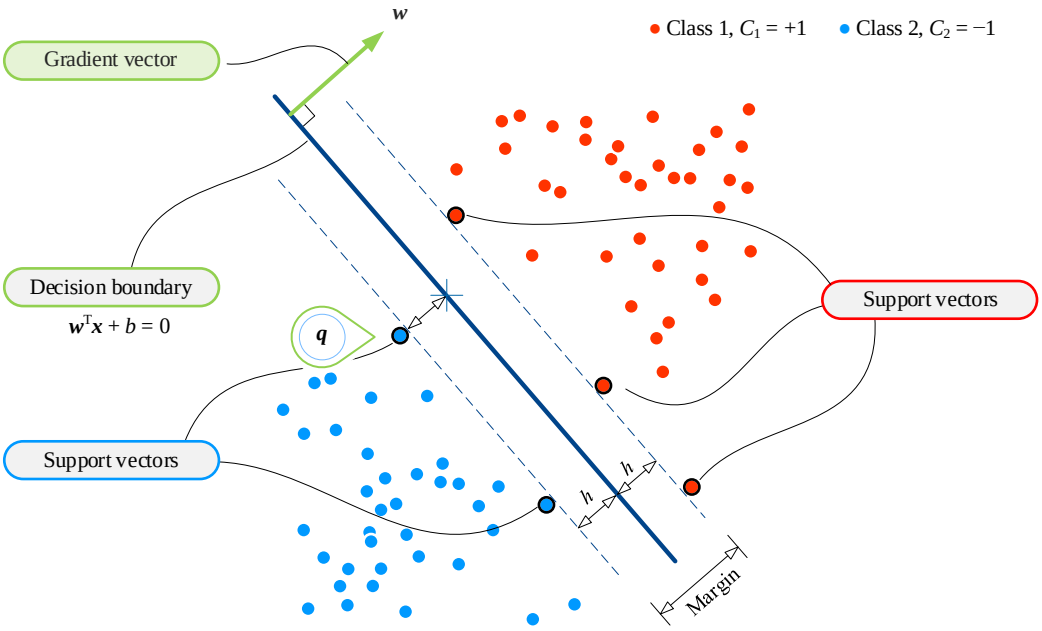


图 6. 硬间隔 SVM 处理二分类问题

(1) 可以展开为：

$$f(\boldsymbol{x}) = w_1 x_1 + w_2 x_2 + \ldots + w_D x_D + b = 0 \tag{2}$$

特别地，对于 $D = 2$ 时，决策边界形式为：

$$w_1 x_1 + w_2 x_2 + b = 0 \tag{3}$$

分类

对于二分类 ($K = 2$) 问题，决策边界“上方”的数据点满足：

$$f(\boldsymbol{x}) = \boldsymbol{w}^T \boldsymbol{x} + b > 0 \tag{4}$$

展开 (4) 得到：

$$w_1 x_1 + w_2 x_2 + \ldots + w_D x_D + b > 0 \tag{5}$$

决策边界“下方”的数据点满足：

$$f(\boldsymbol{x}) = \boldsymbol{w}^T \boldsymbol{x} + b < 0 \tag{6}$$

展开 (6) 得到：

$$w_1 x_1 + w_2 x_2 + \ldots + w_D x_D + b < 0 \tag{7}$$

准确地说，以 (1) 中 $f(\boldsymbol{x}) = 0$ 为基准，“上方”对应 $f(\boldsymbol{x}) > 0$；“下方”对应 $f(\boldsymbol{x}) < 0$。

决策函数

对任意查询点 $\boldsymbol{q}$，二分类决策函数 $p(\boldsymbol{q})$ 则可以表达为：

$$p(\boldsymbol{q}) = \text{sign}\left(\boldsymbol{w}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{q} + b\right) \tag{8}$$

其中，sign() 为**符号函数** (sign function)。

如图 6 所示，对于二分类 (K = 2) 问题，决策边界“上方”的数据点，预测分类为+1；决策边界“下方”的数据点，预测分类为−1。

支持向量到决策边界距离

图 6 中，某一支持向量坐标位置用列向量 $\boldsymbol{q}$ 表达。支持向量 $\boldsymbol{q}$ 到 (1) 对应的决策边界的距离为：

$$d = \frac{\left|\boldsymbol{w}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{q} + b\right|}{\|\boldsymbol{w}\|} = \frac{\left|\boldsymbol{w}\cdot\boldsymbol{q} + b\right|}{\|\boldsymbol{w}\|} \tag{9}$$

对于上式陌生的读者，请回顾《矩阵力量》第 19 章第 6 节。

一般情况点线距离不考虑正负。但是，对于分类问题，考虑距离正负便于判断点和超平面关系。

(9) 分子去掉绝对值符号得到：

$$d = \frac{\boldsymbol{w}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{q} + b}{\|\boldsymbol{w}\|} = \frac{\boldsymbol{w}\cdot\boldsymbol{q} + b}{\|\boldsymbol{w}\|} \tag{10}$$

d 大于 0 时，点在超平面上方；d 小于 0 时，点在超平面下方。如图 7 所示，$\boldsymbol{q}_1$ 位于直线上方；而 $\boldsymbol{q}_2$ 位于直线下方。

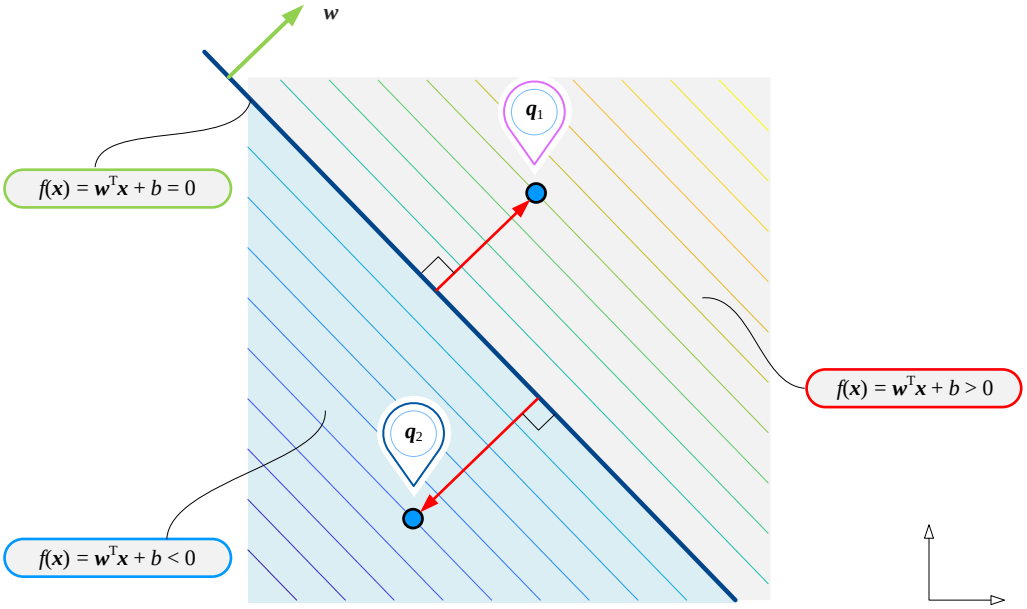


图 7. 直线外一点到直线距离，和平面外一点到平面距离

支持向量到硬间隔距离

如图 8 所示，硬间隔“下边界”为 l_1，l_1 到决策边界距离为$-h$。而支持向量 A、B 在 l_1 上，因此满足：

$$\frac{\boldsymbol{w}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{x}+b}{\|\boldsymbol{w}\|}=-h \tag{11}$$

硬间隔“上边界”为 l_2，l_2 到决策边界为$+h$。支持向量 C 在 l_2 上，满足：

$$\frac{\boldsymbol{w}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{x}+b}{\|\boldsymbol{w}\|}=+h \tag{12}$$

如图 8 所示，决策边界 (深蓝色线) 成功分离样本数据。距离决策边界大于等于 h 的样本点，标记为 $y=+1$；距离决策边界小于等于$-h$ 的样本点，标记为 $y=-1$，即：

$$\begin{cases}\dfrac{\boldsymbol{w}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{x}+b}{\|\boldsymbol{w}\|}\geq+h, & y=+1\\ \dfrac{\boldsymbol{w}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{x}+b}{\|\boldsymbol{w}\|}\leq-h, & y=-1\end{cases} \tag{13}$$

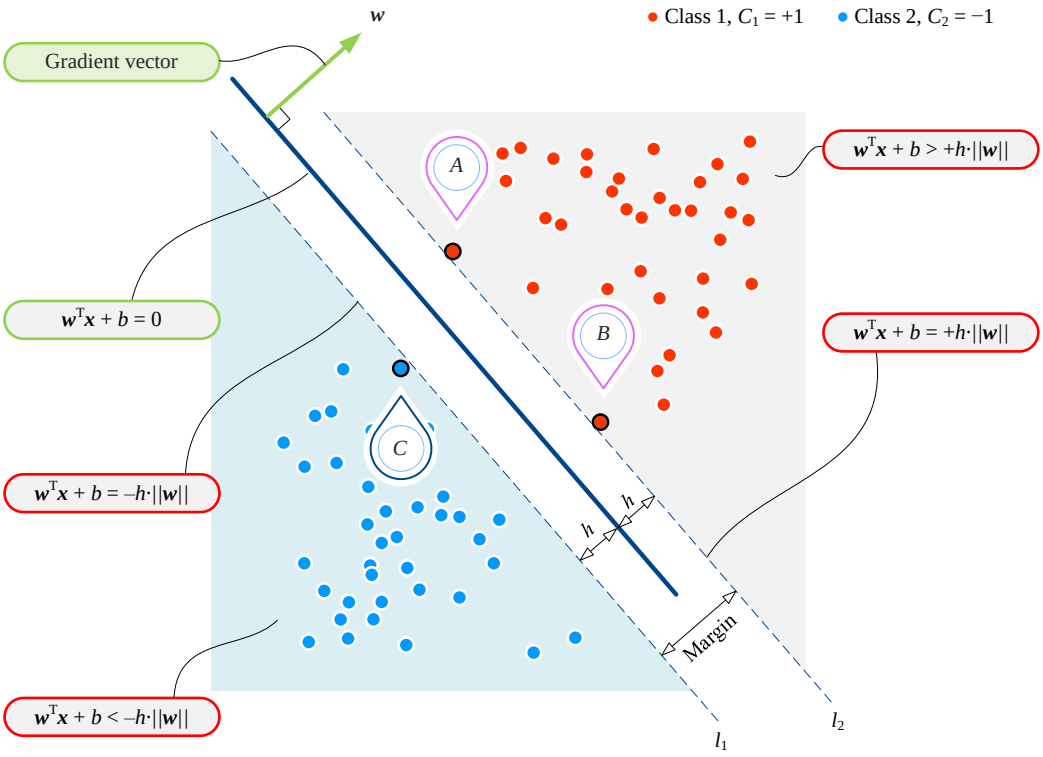


图 8. 硬间隔、决策边界和支持向量之间关系

整理 (13)，得到：

$$\begin{cases} \dfrac{\boldsymbol{w}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{x}+b}{\|\boldsymbol{w}\|h} \geq +1, & y=+1 \\ \dfrac{\boldsymbol{w}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{x}+b}{\|\boldsymbol{w}\|h} \leq -1, & y=-1 \end{cases} \tag{14}$$

合并 (14) 两式可以得到：

$$\frac{\left(\boldsymbol{w}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{x}+b\right)y}{\|\boldsymbol{w}\|h} \geq 1 \tag{15}$$

特别地，图 8 中三个支持向量点 A、B、C 满足下式：

$$\frac{\left(\boldsymbol{w}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{x}+b\right)y}{\|\boldsymbol{w}\|h} = 1 \tag{16}$$

进一步简化运算

令：

$$\|\boldsymbol{w}\|h = 1 \tag{17}$$

(16) 可以简化为：

$$\left(\boldsymbol{w}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{x}+b\right)y\geq 1 \tag{18}$$

利用内积来表达 (18)：

$$\left(\boldsymbol{w}\cdot\boldsymbol{x}+b\right)y\geq 1 \tag{19}$$

将 (17) 代入 (11) 和 (12)，可以得到间隔上下边界的解析式：

$$\begin{cases}\boldsymbol{w}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{x}+b=+1\\ \boldsymbol{w}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{x}+b=-1\end{cases} \tag{20}$$

根据 (18)，间隔宽度 $2h$ 可以用 $\boldsymbol{w}$ 表达：

$$2h=\frac{2}{\|\boldsymbol{w}\|} \tag{21}$$

7.3 构造优化问题

支持向量机的核心思想——最大化间隔。本节利用**拉格朗日乘子法** (method of Lagrange multipliers) 构造并求解支持向量机优化问题。本节内容相对来说“很不友好”，但是极其重要，建议大家耐心读完。

对拉格朗日乘子法感到陌生的话，请回顾《矩阵力量》第 18 章。

最大化间隔宽度

以 $\boldsymbol{w}$ 和 b 为优化变量，最大化 (21) 给出的间隔宽度：

$$\begin{aligned}&\arg\max_{\boldsymbol{w},b}\ \frac{2}{\|\boldsymbol{w}\|}\\ &\text{subject to}\ \left(\boldsymbol{x}^{(i)}\boldsymbol{w}+b\right)y^{(i)}\geq 1,\quad i=1,2,3,...,n\end{aligned} \tag{22}$$

其中，i 为样本数据点序数，i = 1,2, …, n。n 为样本数据数量。

最小化问题

(22) 等价于如下最小化问题：

$$\begin{aligned}&\arg\min_{\boldsymbol{w},b}\ \frac{\|\boldsymbol{w}\|^2}{2}=\frac{\boldsymbol{w}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{w}}{2}=\frac{\boldsymbol{w}\cdot\boldsymbol{w}}{2}\\ &\text{subject to}\ \left(\boldsymbol{x}^{(i)}\boldsymbol{w}+b\right)y^{(i)}\geq 1,\quad i=1,2,3,...,n\end{aligned} \tag{23}$$

拉格朗日函数

构造**拉格朗日函数** (Lagrangian function) $L(\boldsymbol{w}, b, \boldsymbol{\lambda})$：

$$L(\boldsymbol{w},b,\boldsymbol{\lambda}) = \frac{\boldsymbol{w}\cdot\boldsymbol{w}}{2} + \sum_{i=1}^{n}\lambda_i\left(1-y^{(i)}\left(\boldsymbol{x}^{(i)}\boldsymbol{w}+b\right)\right) \tag{24}$$

其中，$\boldsymbol{\lambda}$ 为拉格朗日乘子构造的列向量：

$$\boldsymbol{\lambda} = \begin{bmatrix}\lambda_1 & \lambda_2 & \cdots & \lambda_n\end{bmatrix}^{\mathrm{T}} \tag{25}$$

这样含不等式约束优化问题，转化为一个无约束优化问题。

偏导

$L(\boldsymbol{w}, b, \boldsymbol{\lambda})$ 对 $\boldsymbol{w}$ 和 b 偏导为 0，得到如下一系列等式：

$$\begin{cases}\dfrac{\partial L(\boldsymbol{w},b,\boldsymbol{\lambda})}{\partial \boldsymbol{w}} = \boldsymbol{w} - \sum_{i=1}^{n}\lambda_i y^{(i)}\boldsymbol{x}^{(i)\mathrm{T}} = \boldsymbol{0} \\ \dfrac{\partial L(\boldsymbol{w},b,\boldsymbol{\lambda})}{\partial b} = \sum_{i=1}^{n}\lambda_i y^{(i)} = 0\end{cases} \tag{26}$$

这部分内容用到了《矩阵力量》第 17 章介绍的多元微分相关数学工具。

整理 (26) 可以得到：

$$\begin{cases}\boldsymbol{w} = \sum_{i=1}^{n}\lambda_i y^{(i)}\boldsymbol{x}^{(i)\mathrm{T}} \\ \sum_{i=1}^{n}\lambda_i y^{(i)} = 0\end{cases} \tag{27}$$

注意，$\boldsymbol{w}$ 为列向量，而 $\boldsymbol{x}^{(i)}$ 为行向量。

简化拉格朗日函数

将上 (27) 带入 (24)，消去式中 $\boldsymbol{w}$ 和 b：

$$\begin{aligned}L(\boldsymbol{w},b,\boldsymbol{\lambda}) &= \frac{\boldsymbol{w}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{w}}{2} + \sum_{i=1}^{n}\lambda_i\left(1-y^{(i)}\left(\boldsymbol{x}^{(i)}\boldsymbol{w}+b\right)\right) \\ &= \frac{\left(\sum_{i=1}^{n}\lambda_i y^{(i)}\boldsymbol{x}^{(i)}\right)^{\mathrm{T}}\left(\sum_{j=1}^{n}\lambda_j y^{(j)}\boldsymbol{x}^{(j)}\right)}{2} + \sum_{i=1}^{n}\lambda_i\left(1-y^{(i)}\left(\sum_{j=1}^{n}\lambda_j y^{(j)}\boldsymbol{x}^{(j)}\right)\cdot\boldsymbol{x}^{(i)} - y^{(i)}b\right) \\ &= \frac{\sum_{j=1}^{n}\sum_{i=1}^{n}\lambda_i\lambda_j y^{(i)}y^{(j)}\left(\boldsymbol{x}^{(i)}\cdot\boldsymbol{x}^{(j)}\right)}{2} - \sum_{j=1}^{n}\sum_{i=1}^{n}\lambda_i\lambda_j y^{(i)}y^{(j)}\left(\boldsymbol{x}^{(i)}\cdot\boldsymbol{x}^{(j)}\right) + \sum_{i=1}^{n}\lambda_i - b\sum_{i=1}^{n}\lambda_i y^{(i)} \\ &= \sum_{i=1}^{n}\lambda_i - \frac{\sum_{j=1}^{n}\sum_{i=1}^{n}\lambda_i\lambda_j y^{(i)}y^{(j)}\left(\boldsymbol{x}^{(i)}\cdot\boldsymbol{x}^{(j)}\right)}{2}\end{aligned} \tag{28}$$

拉格朗日函数 $L(\boldsymbol{w}, b, \boldsymbol{\lambda})$ 简化为 $L(\boldsymbol{\lambda})$：

$$L(\boldsymbol{\lambda}) = \sum_{i=1}^{n} \lambda_i - \frac{\sum_{j=1}^{n}\sum_{i=1}^{n} \lambda_i \lambda_j y^{(i)} y^{(j)} \left(\boldsymbol{x}^{(i)} \cdot \boldsymbol{x}^{(j)} \right)}{2} \tag{29}$$

对偶问题

利用拉格朗日乘子法，这样便将 (23) 优化问题转化成一个以 $\boldsymbol{\lambda}$ 为变量的优化问题：

$$\begin{aligned} &\arg\min_{\boldsymbol{\lambda}} \quad \sum_{i=1}^{n} \lambda_i - \frac{\sum_{j=1}^{n}\sum_{i=1}^{n} \lambda_i \lambda_j y^{(i)} y^{(j)} \left(\boldsymbol{x}^{(i)} \cdot \boldsymbol{x}^{(j)} \right)}{2} \\ &\text{subject to} \quad \begin{cases} \sum_{i=1}^{n} \lambda_i y^{(i)} = 0 \\ \lambda_i \geq 0, \quad i, j = 1, 2, 3, ..., n \end{cases} \end{aligned} \tag{30}$$

这个优化问题常被称作**拉格朗日对偶问题** (Lagrange duality)，也称**对偶问题** (duality)。

发现二次型、格拉姆矩阵

大家是否发现 (29) 中的二次型？

对二次型陌生的读者，请回顾《矩阵力量》第 5 章。

举个例子，当 $n = 2$，即两个样本数据，(29) 可以展开为：

$$L(\boldsymbol{\lambda}) = (\lambda_1 + \lambda_2) - \frac{1}{2}\left(\lambda_1 \lambda_1 y^{(1)} y^{(1)} \left(\boldsymbol{x}^{(1)} \cdot \boldsymbol{x}^{(1)} \right) + 2\lambda_1 \lambda_2 y^{(1)} y^{(2)} \left(\boldsymbol{x}^{(1)} \cdot \boldsymbol{x}^{(2)} \right) + \lambda_2 \lambda_2 y^{(2)} y^{(2)} \left(\boldsymbol{x}^{(2)} \cdot \boldsymbol{x}^{(2)} \right) \right) \tag{31}$$

(31) 整理为如下二次型：

$$L(\boldsymbol{\lambda}) = (\lambda_1 + \lambda_2) - \frac{1}{2} \begin{bmatrix} \lambda_1 y^{(1)} & \lambda_2 y^{(2)} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \boldsymbol{x}^{(1)} \cdot \boldsymbol{x}^{(1)} & \boldsymbol{x}^{(1)} \cdot \boldsymbol{x}^{(2)} \\ \boldsymbol{x}^{(2)} \cdot \boldsymbol{x}^{(1)} & \boldsymbol{x}^{(2)} \cdot \boldsymbol{x}^{(2)} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \lambda_1 y^{(1)} \\ \lambda_2 y^{(2)} \end{bmatrix} \tag{32}$$

类似地，(29) 可以整理为：

$$L(\boldsymbol{\lambda}) = \sum_{i=1}^{n} \lambda_i - \frac{1}{2} \begin{bmatrix} \lambda_1 y^{(1)} \\ \lambda_2 y^{(2)} \\ \vdots \\ \lambda_n y^{(n)} \end{bmatrix}^{\mathrm{T}} \underbrace{\begin{bmatrix} \left\langle \boldsymbol{x}^{(1)}, \boldsymbol{x}^{(1)} \right\rangle & \left\langle \boldsymbol{x}^{(1)}, \boldsymbol{x}^{(2)} \right\rangle & \cdots & \left\langle \boldsymbol{x}^{(1)}, \boldsymbol{x}^{(n)} \right\rangle \\ \left\langle \boldsymbol{x}^{(2)}, \boldsymbol{x}^{(1)} \right\rangle & \left\langle \boldsymbol{x}^{(2)}, \boldsymbol{x}^{(2)} \right\rangle & \cdots & \left\langle \boldsymbol{x}^{(2)}, \boldsymbol{x}^{(n)} \right\rangle \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \left\langle \boldsymbol{x}^{(n)}, \boldsymbol{x}^{(1)} \right\rangle & \left\langle \boldsymbol{x}^{(n)}, \boldsymbol{x}^{(2)} \right\rangle & \cdots & \left\langle \boldsymbol{x}^{(n)}, \boldsymbol{x}^{(n)} \right\rangle \end{bmatrix}}_{\text{Gram matrix}} \begin{bmatrix} \lambda_1 y^{(1)} \\ \lambda_2 y^{(2)} \\ \vdots \\ \lambda_n y^{(n)} \end{bmatrix} \tag{33}$$

相信大家已经在上式中看到了久违的**格拉姆矩阵** (Gram matrix)！

决策边界

利用 (27)，决策边界可以整理为：

$$f(\boldsymbol{x}) = \boldsymbol{w}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{x} + b = \underbrace{\left(\sum_{i=1}^{n}\lambda_i y^{(i)}\boldsymbol{x}^{(i)}\right)}_{\text{Coefficients}}\boldsymbol{x} + b = 0 \tag{34}$$

需要大家注意区分，行向量 $\boldsymbol{x}^{(i)}$ 为第 i 个数据点，$\boldsymbol{x}$ 为未知量构成的列向量。也就是说，$\sum_{i=1}^{n}\lambda_i y^{(i)}\boldsymbol{x}^{(i)}$ 求和结果为行向量。

分类决策函数 $p(\boldsymbol{x})$ 则为：

$$p(\boldsymbol{x}) = \operatorname{sign}\left(\boldsymbol{w}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{x} + b\right) = \operatorname{sign}\left(\underbrace{\left(\sum_{i=1}^{n}\lambda_i y^{(i)}\boldsymbol{x}^{(i)}\right)}_{\text{Coefficients}}\boldsymbol{x} + b\right) \tag{35}$$

7.4 支持向量机处理二分类问题

本节利用具体实例介绍如何实现硬间隔支持向量机算法。

实例

图 9 所示为 20 个样本数据，容易发现样本数据线性可分，下面利用支持向量机进行预测分类。

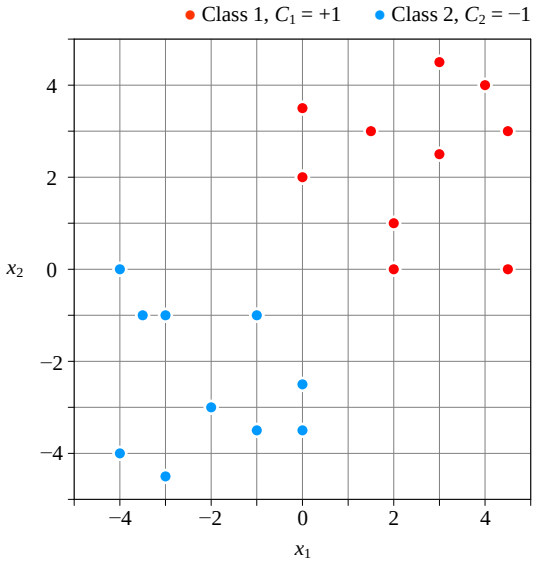


图 9. 20 个样本数据点平面位置

决策边界

对于 $D = 2$ 的情况，将 (1) 展开：

$$w_1 x_1 + w_2 x_2 + b = 0 \tag{36}$$

w_2 不等于 0 时，将 (36) 写成大家熟悉的一次函数形式：

$$x_2 = -\frac{w_1}{w_2} x_1 - \frac{b}{w_2} \tag{37}$$

硬间隔

根据 (20)，硬间隔“上边界”l_1 对应的函数为：

$$w_1 x_1 + w_2 x_2 + b = 1 \quad \Rightarrow \quad x_2 = -\frac{w_1}{w_2} x_1 - \frac{b-1}{w_2} \tag{38}$$

间隔“下边界” l_2 对应的函数为：

$$w_1 x_1 + w_2 x_2 + b = -1 \quad \Rightarrow \quad x_2 = -\frac{w_1}{w_2} x_1 - \frac{b+1}{w_2} \tag{39}$$

再次注意，因为 (37) 中 w_2 不能为 0，因此 (37) 存在局限性。这种表达方式仅为方便大家理解。

分类结果

图 10 为分类结果。容易发现，一共存在三个支持向量——A (0, 2)、B (2, 0) 和 C (−1, −1)。剩余 17 个样本数据对决策边界没有丝毫影响。

图 10 中深蓝色直线为决策边界，对应解析式：

$$\frac{x_1}{2} + \frac{x_2}{2} = 0 \quad \Rightarrow \quad x_1 + x_2 = 0 \quad \Rightarrow \quad x_2 = -x_1 \tag{40}$$

分类决策函数 $p(\boldsymbol{x})$ 为：

$$p(x_1, x_2) = \text{sign}(x_1 + x_2) \tag{41}$$

间隔“上”边界 l_1 对应的函数为：

$$\frac{x_1}{2} + \frac{x_2}{2} = 1 \quad \Rightarrow \quad x_2 = -x_1 + 2 \tag{42}$$

间隔“下”边界 l_2 对应的函数为：

$$\frac{x_1}{2}+\frac{x_2}{2}=-1 \quad \Rightarrow \quad x_2=-x_1-2 \tag{43}$$

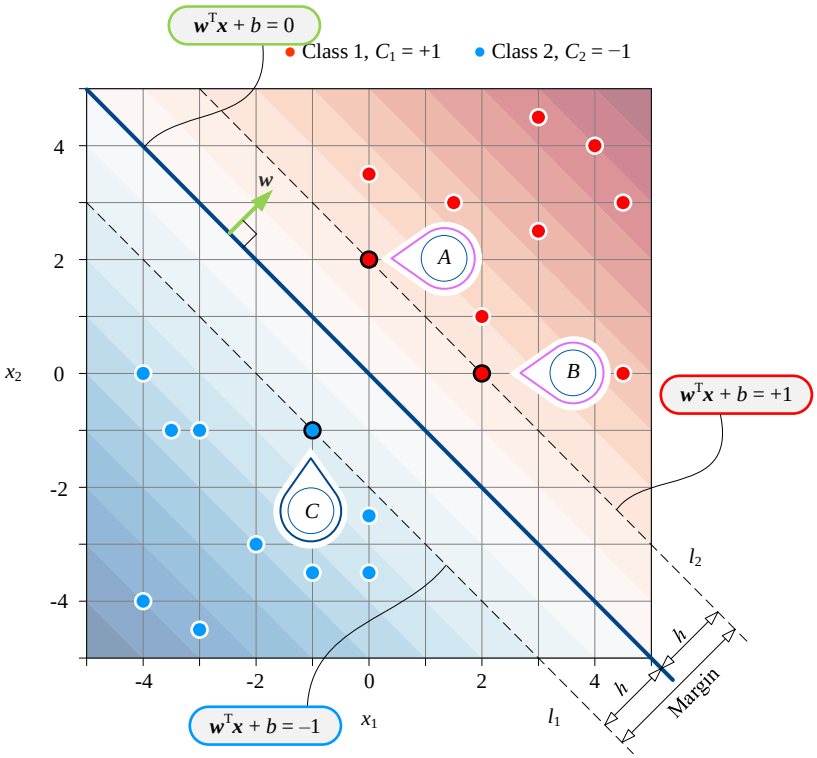


图 10. 硬间隔分类结果

预测分类

将 (4, 4) 代入 (41)，可以判断 (4, 4) 的预测分类为+1：

$$p(4,4)=\text{sign}(4+4)=+1 \tag{44}$$

将 (−2, −3) 代入 (41)，可以判断 (−2, −3) 的预测分类为−1：

$$p(-2,-3)=\text{sign}(-2-3)=-1 \tag{45}$$

将 (3, −3) 代入 (41)，结果为 0，可以判断 (3, −3) 位于决策边界上：

$$p(3,-3)=\text{sign}(3-3)=0 \tag{46}$$

支持向量影响决策边界

图 11 所示为删除点 A 后，支持向量变化，以及决策边界和间隔位置。再次强调，支持向量算法中，除支持向量之外的样本数据对决策边界没有影响。

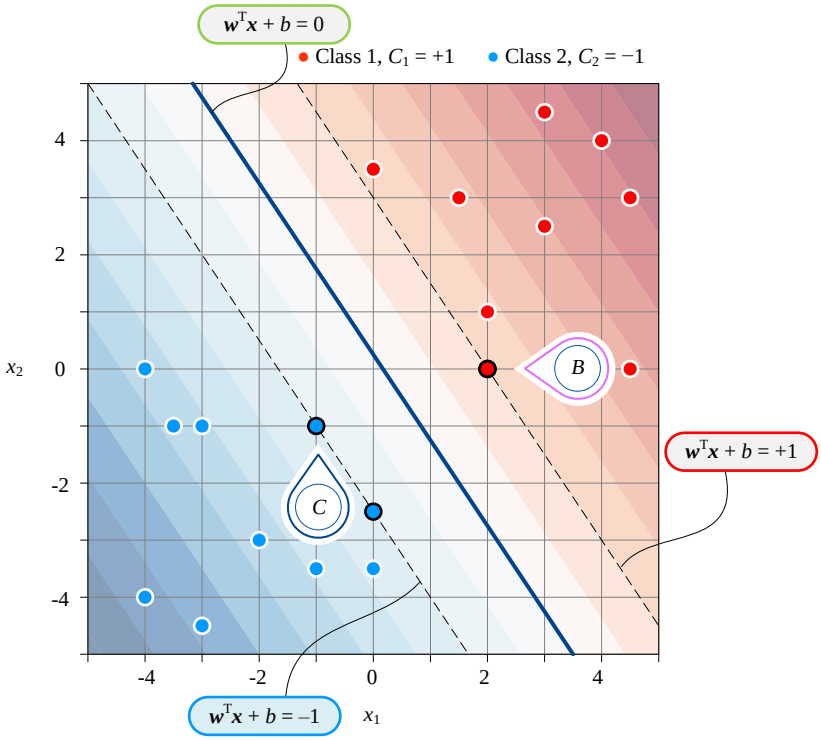


图 11. 删除点 A 后硬间隔 SVM 分类结果

7.5 软间隔：处理线性不可分

本章第一节提到，支持向量机可以采用**软间隔** (soft margin) 处理**线性不可分** (non-linearly separable data)。白话说，**硬间隔** (hard margin) 处理“泾渭分明”的分类数据，一条直线将样本数据彻底分离，如图 12 (a) 所示。而软间隔处理的数据呈现“你中有我，我中有你”，如图 12 (b) 所示。

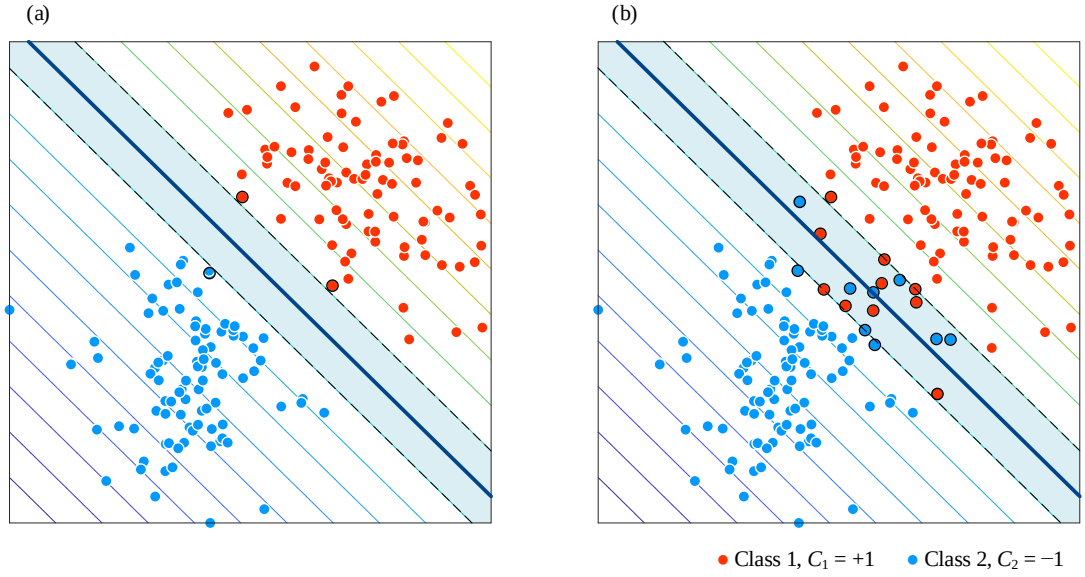


图 12. 比较硬间隔和软间隔

软间隔 SVM 方法的核心思想是牺牲部分数据点分类准确性，来换取更宽的间隔。

软间隔有两个重要参数：

- **松弛变量** (slack variable) ξ，一般读作 /ksaɪ/
- **惩罚因子** (penalty parameter) C

松弛变量

松弛变量用来模糊间隔边界，图 13 所示为原理图。

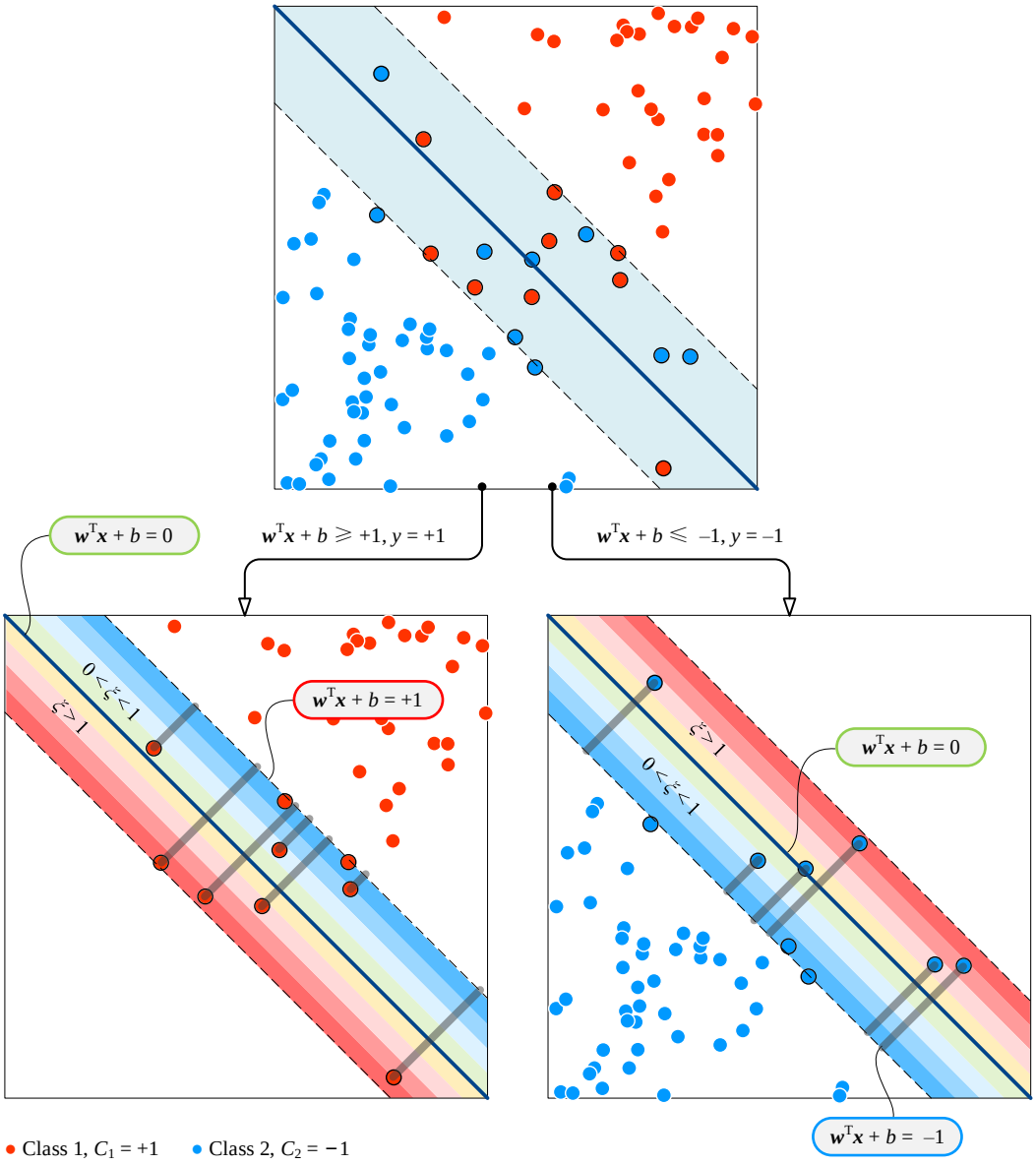


图 13. 软间隔中松弛变量作用

引入松弛变量 ξ，(19) 被改造为：

$$(\boldsymbol{w}\cdot\boldsymbol{x}+b)y\geq 1-\xi \tag{47}$$

当 $y=+1$，

$$(\boldsymbol{w}\cdot\boldsymbol{x}+b)\geq 1-\xi \tag{48}$$

当 $y=-1$

$$(\boldsymbol{w}\cdot\boldsymbol{x}+b)\leq -1+\xi \tag{49}$$

如图 13 所示，当 $\xi=0$，样本数据位于正确分类区域内或正确间隔边界上；当 $\xi>0$，样本数据位于软间隔范围之内，甚至在错误的分类区域内。图 13 中，红色带对应松弛变量 ξ 较大区域，蓝色带对应松弛变量 ξ 较小区域。

图 13 中，软间隔内任一数据点 $\boldsymbol{x}^{(i)}$ 距离各自边界距离为：

$$d_i=\frac{\xi_i}{\|\boldsymbol{w}\|} \tag{50}$$

优化问题

下面，在 (23) 基础上引入惩罚因子 C，构造软间隔 SVM 优化问题：

$$\begin{aligned}&\arg\min_{\boldsymbol{w},b,\xi}\ \frac{\boldsymbol{w}\cdot\boldsymbol{w}}{2}+C\sum_{i=1}^{n}\xi_i\\&\text{subject to}\ \begin{cases}y^{(i)}\left(\boldsymbol{x}^{(i)}\boldsymbol{w}+b\right)\geq 1-\xi_i,\quad i=1,2,3,...,n\\ \xi_i\geq 0\end{cases}\end{aligned} \tag{51}$$

惩罚因子 C 为用户设定参数，它调整松弛变量惩罚项的影响力。C 较大时，优化问题更在意分类准确性，牺牲间隔宽度；间隔可以窄一些，分类错误少犯一些。C 取值较小时，间隔更宽一些，间隔内的样本数据较多，分类错误可以多一点。

也可以采用 L^2 范数来构造松弛变量惩罚项，此时 (51) 被改造成：

$$\begin{aligned}&\arg\min_{\boldsymbol{w},b}\ \frac{\boldsymbol{w}\cdot\boldsymbol{w}}{2}+C\sum_{i=1}^{n}\xi_i^2\\&\text{subject to}\ \begin{cases}y^{(i)}\left(\boldsymbol{w}\cdot\boldsymbol{x}^{(i)}+b\right)\geq 1-\xi_i,\quad i=1,2,3,...,n\\ \xi_i\geq 0\end{cases}\end{aligned} \tag{52}$$

惩罚因子影响分类结果

图 14 所示为惩罚因子 C 取不同值时，支持变量、决策边界和间隔宽度变化。

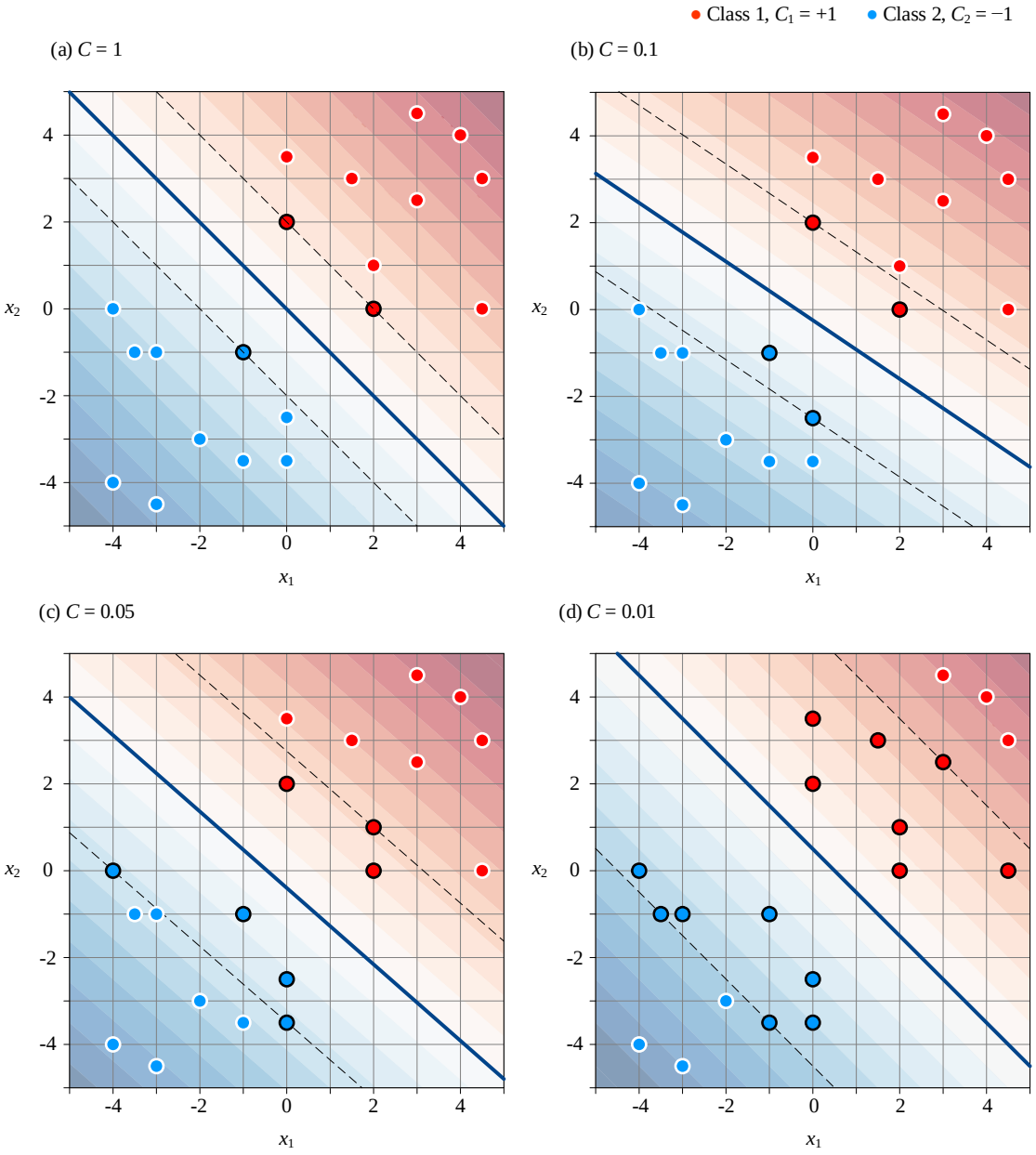
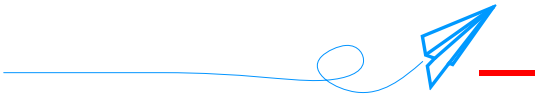


图 14. 惩罚因子对软间隔宽度和决策边界影响

代码 Bk7_Ch07_01.py 利用 SVM 实现分类，并绘制图 10、图 11 和图 14。



支持向量机目标是找到一个能够将两个类别线性分隔的最优超平面。SVM 通过优化一个约束条件下的目标函数来寻找最优超平面。优化问题分为硬间隔和软间隔两种情况，硬间隔要求数据能够完全被分隔，软间隔则允许一定程度的分类误差。优化目标函数可以转化为一个凸二次规划问题，可以通过拉格朗日乘子法来解决。

在实践中，SVM 使用核技巧将输入数据映射到高维空间，以便能够处理非线性问题。常用的核函数有线性核函数、多项式核函数和径向基函数核函数等。这种核技巧可以有效地提高 SVM 的性能和灵活性，因为它可以将低维输入空间中的非线性分类问题转化为高维空间中的线性分类问题。

SVM 是一种强大的分类模型，因为它可以处理高维空间和非线性问题，并且能够有效地避免过拟合。但是，SVM 的计算成本较高，选择和调整核函数也需要一定的经验和技巧。下一章将专门介绍 SVM 中的核函数。本章和下一章共用一个思维导图。