



中山大學  
SUN YAT-SEN UNIVERSITY

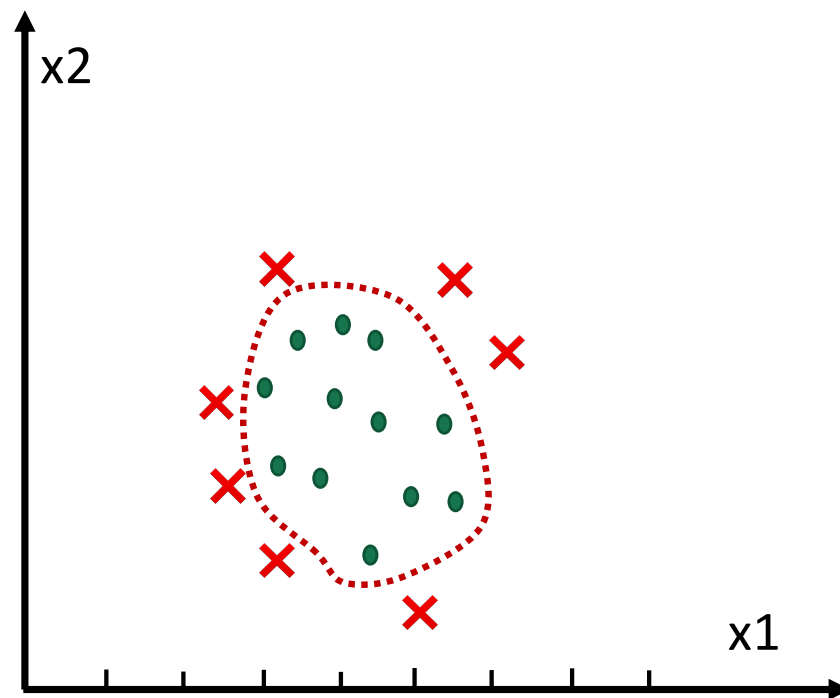
# 第6章 支持向量机\*

1. 线性可分支持向量机与硬间隔最大化
2. 线性支持向量机与软间隔最大化（回顾与加强）
3. 非线性支持向量机与核函数
4. 序列最小最优化算法

\*参阅《统计学习方法》第7章

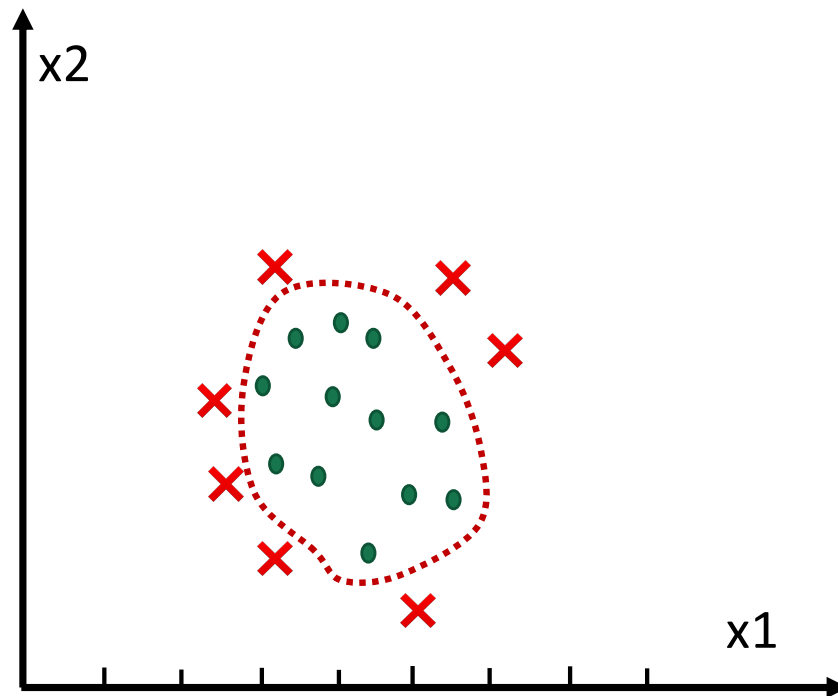
# 线性不可分

若不存在一个能正确划分两类样本的超平面，怎么办？



# 线性不可分

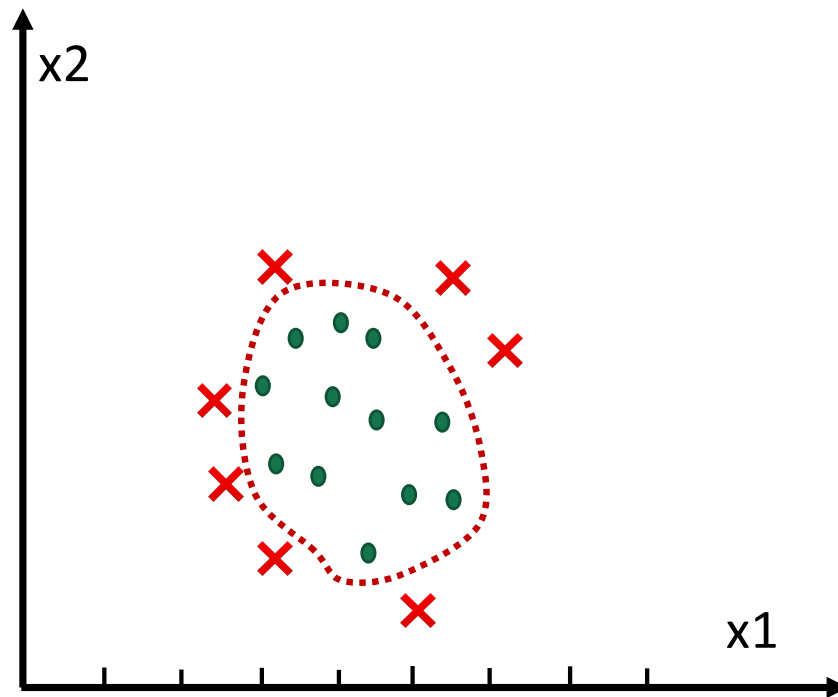
若不存在一个能正确划分两类样本的超平面，怎么办？



进行一个非线性变换，将非线性问题变换为线性问题，  
通过解变换后的线性问题的方法来求解原来的非线性问题

# 线性不可分

若不存在一个能正确划分两类样本的超平面，怎么办？

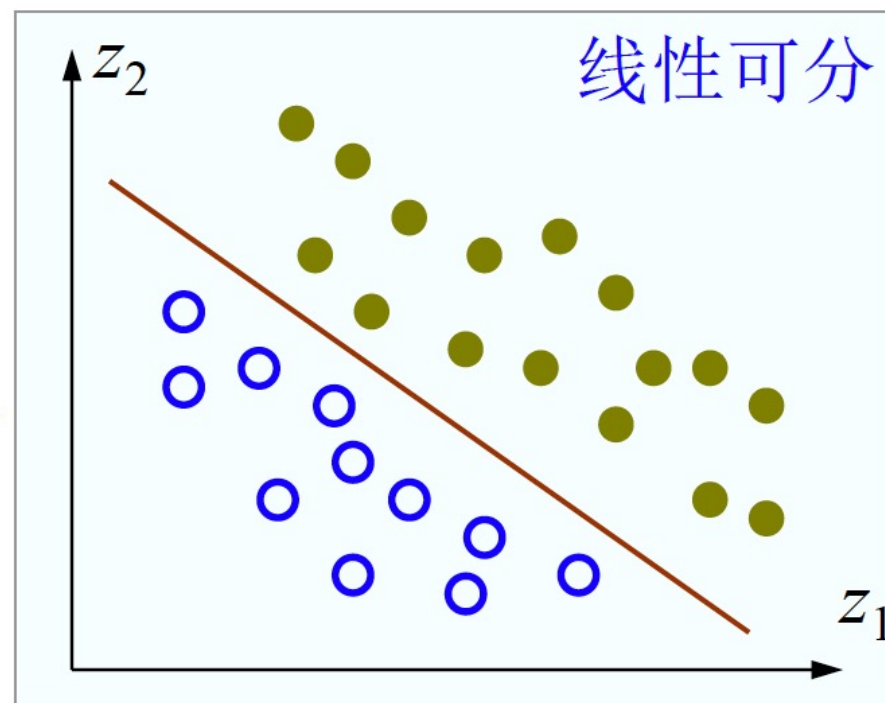
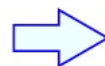
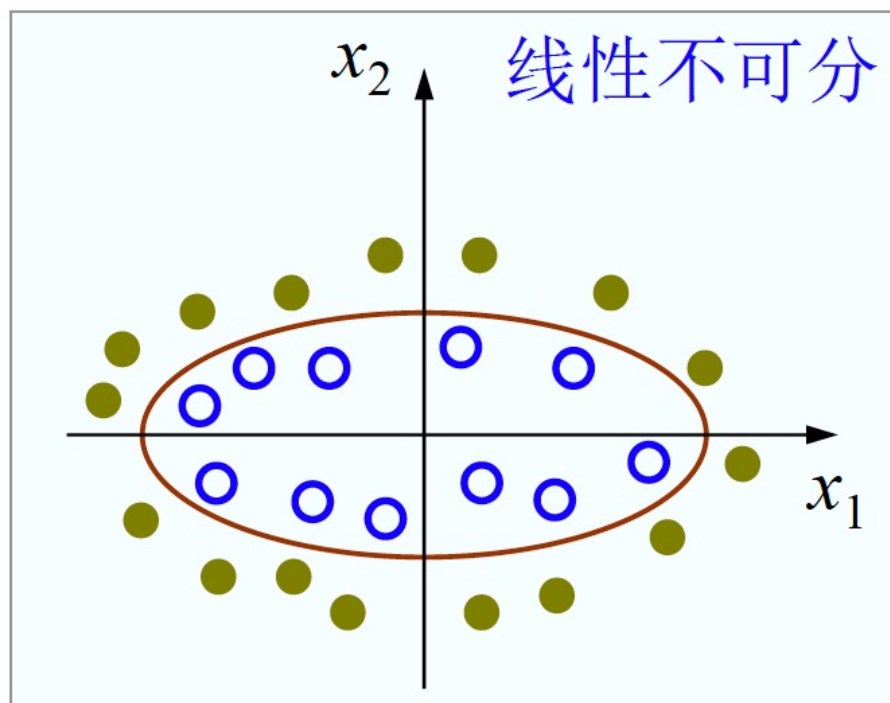


将样本从原始空间映射到一个更高维的特征空间，使得样本在这个特征空间内线性可分。

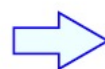
$$\boldsymbol{x} \mapsto \phi(\boldsymbol{x})$$

# 线性不可分

- 非线性分类问题



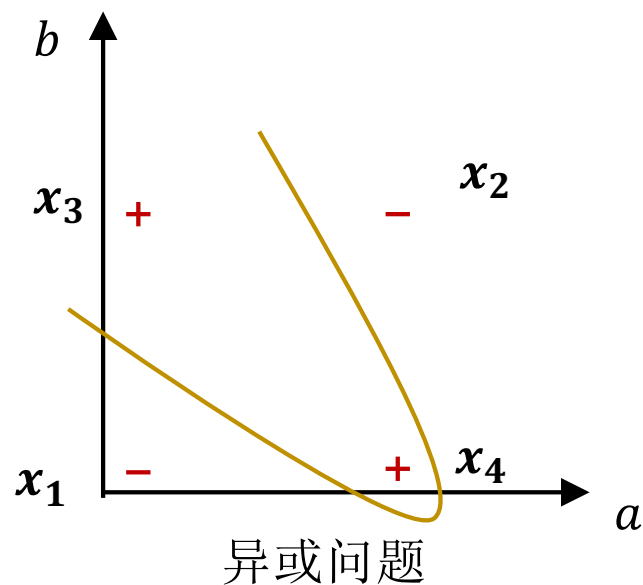
椭圆:  $w_1 x_1^2 + w_2 x_2^2 + b = 0$



直线:  $w_1 z_1 + w_2 z_2 + b = 0$

变换:  $\mathbf{z} = \phi(\mathbf{x}) = ((x_1)^2, (x_2)^2)^T$

# 例子1



$$\mathbf{x} = [a, b]^T$$

$$\mathbf{x} \mapsto \phi(\mathbf{x})$$

C1

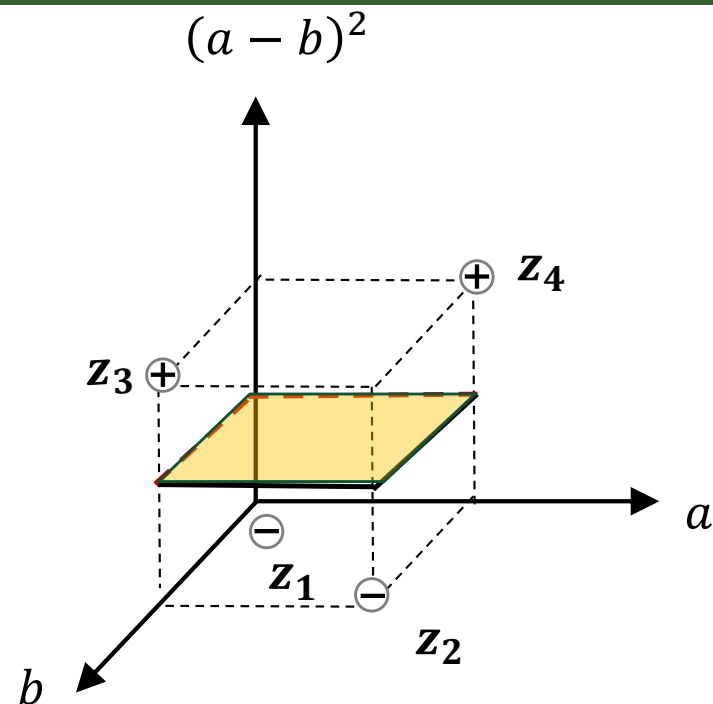
$$\mathbf{x}_1 = [0, 0]^T$$

C2

$$\mathbf{x}_3 = [0, 1]^T$$

$$\mathbf{x}_2 = [1, 1]^T$$

$$\mathbf{x}_4 = [1, 0]^T$$



$$\mathbf{z} = \phi(\mathbf{x})$$

$$\mathbf{z} = [a, b, (a - b)^2]^T$$

$$\mathbf{z}_1 = [0, 0, \mathbf{0}]^T \quad \mathbf{z}_3 = [0, 1, \mathbf{1}]^T$$

$$\mathbf{z}_2 = [1, 1, \mathbf{0}]^T \quad \mathbf{z}_4 = [1, 0, \mathbf{1}]^T$$

# 例子2

找不到一个超平面（二维：直线）  
将其分割开来

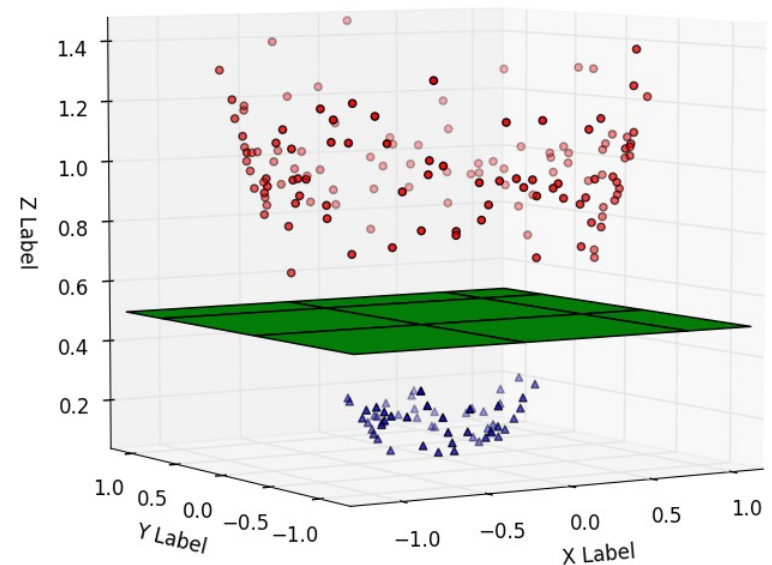
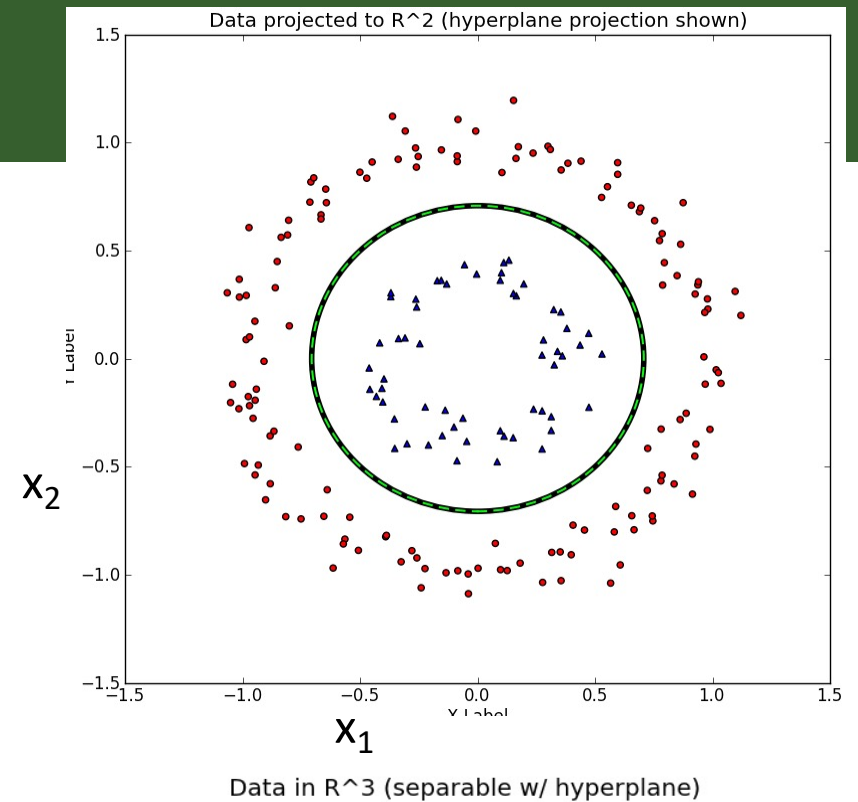
用圆或者椭圆将数据分类

$$a_1x_1^2 + a_2x_1x_2 + a_3x_2^2 = 0$$

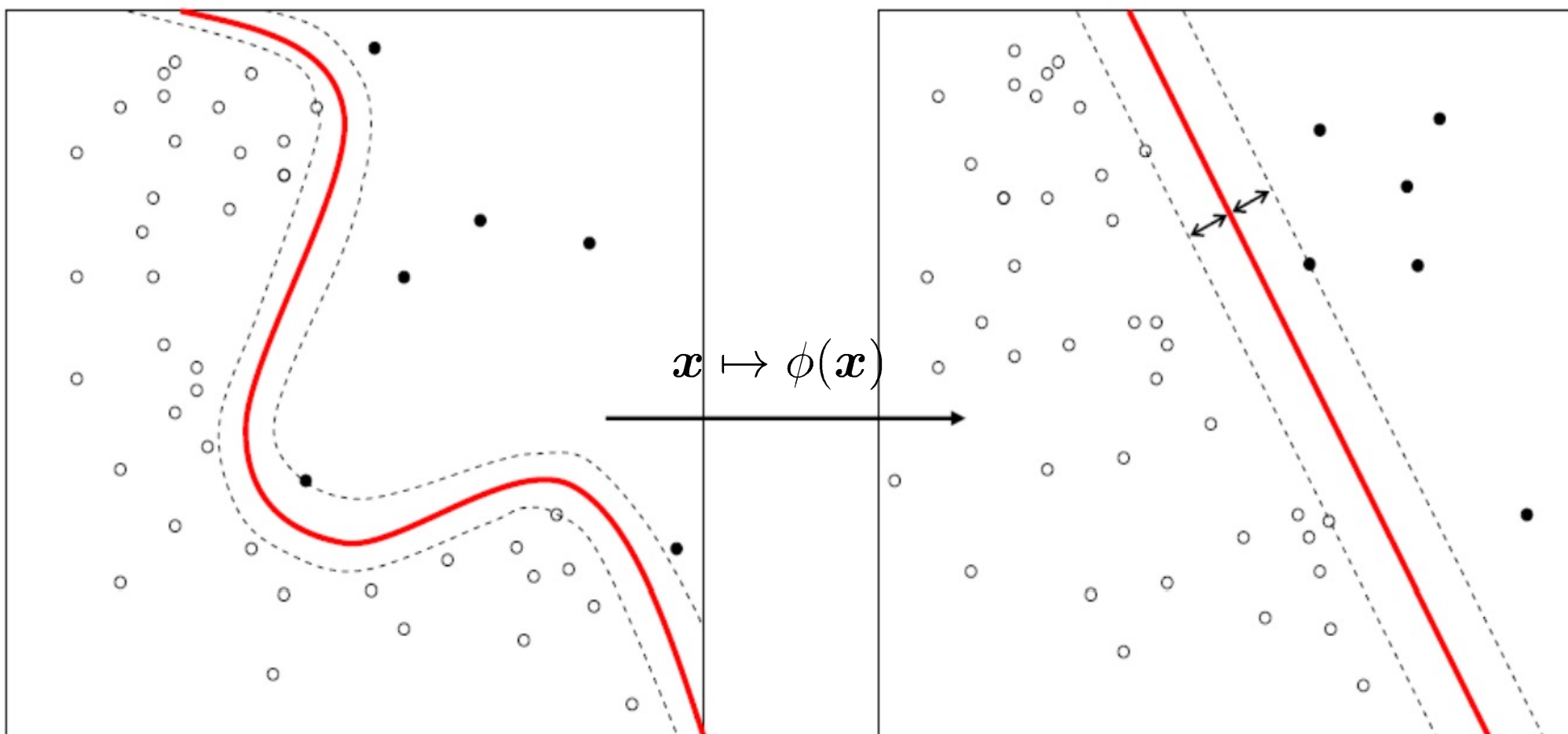
$$\downarrow \quad \mathbf{z} = \varphi(\mathbf{x}) \quad \downarrow$$

$$z_1 = x_1 \quad z_2 = x_2 \quad z_3 = x_1^2 + x_2^2$$

$$(x_1, x_2) \xrightarrow[\mathbf{z} = \varphi(\mathbf{x})]{} (z_1, z_2, z_3)$$



# 核技巧



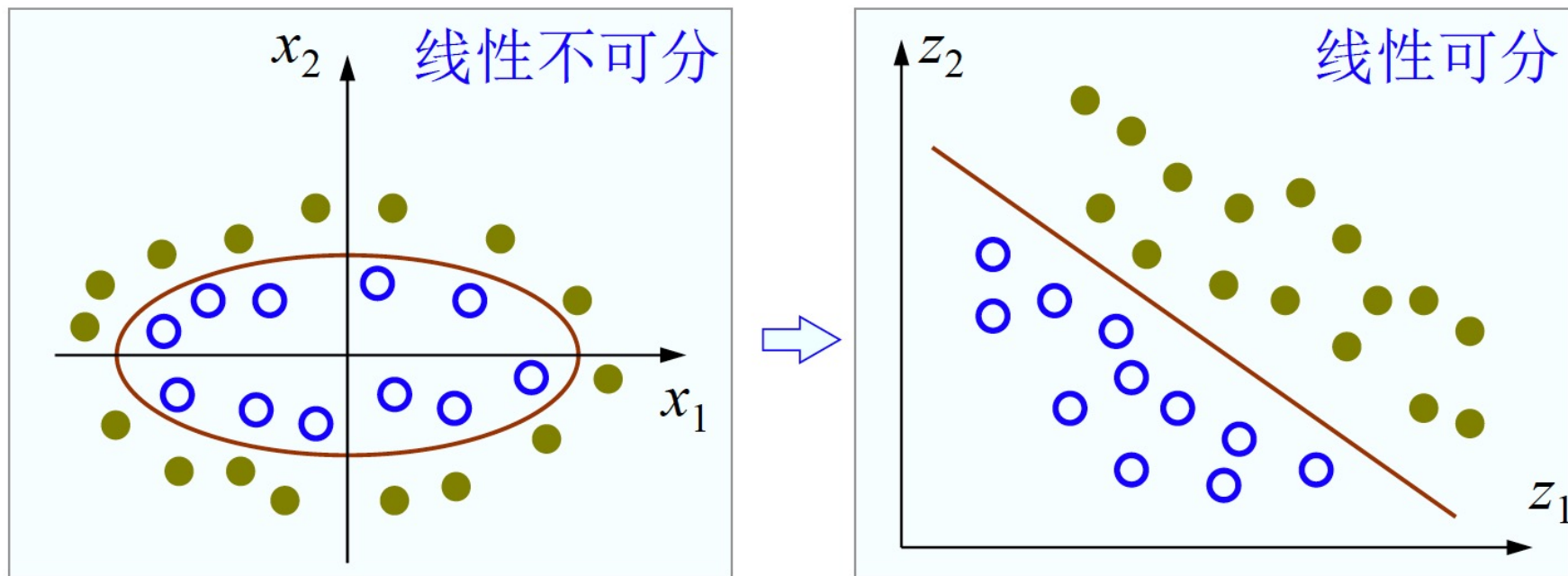


# 核技巧

## □ 非线性分类问题

用线性分类方法求解非线性分类问题分为两步：

- **第一步**，使用一个变换将原空间的数据映射到**新空间**；
- **第二步**，在新空间里用线性分类学习方法从训练数据中**学习分类模型**。

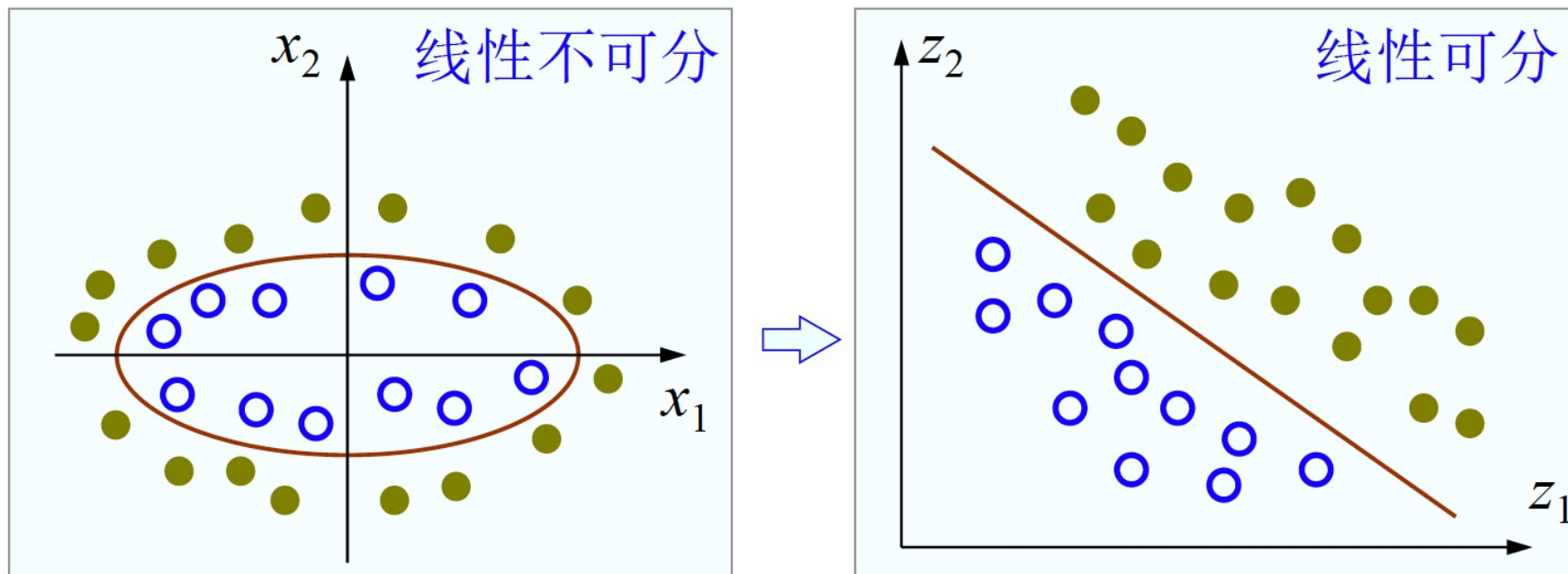


# 核技巧

## □ 非线性分类问题

用线性分类方法求解非线性分类问题分为两步：

- **第一步**，使用一个变换将原空间的数据映射到**新空间**；
- **第二步**，在新空间里用线性分类学习方法从训练数据中**学习分类模型**。



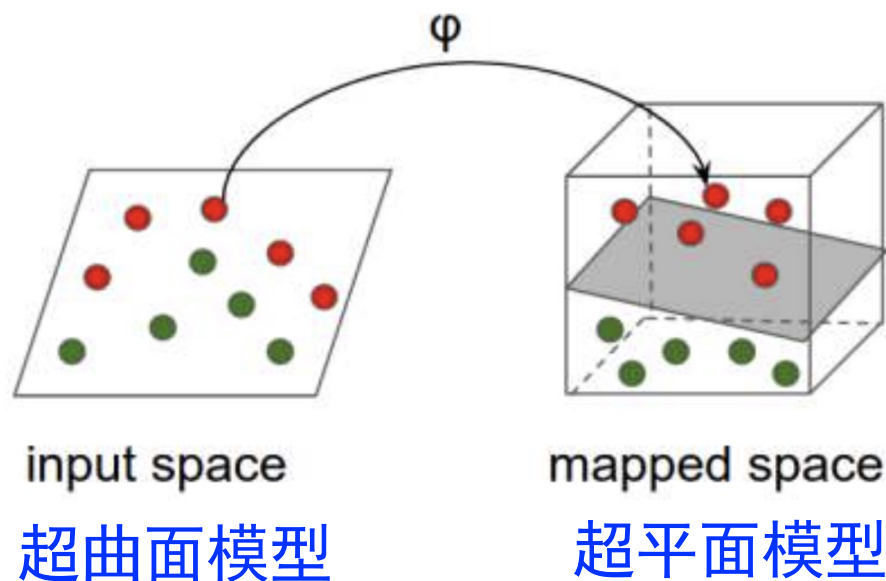
核技巧就属于这样的方法

# 核技巧

## □ 非线性分类问题

**核技巧**应用到支持向量机，其基本想法：

- 通过一个**非线性变换**将**输入空间**（欧氏空间 $\mathbb{R}^d$ 或离散集合）对应于一个**特征空间**（希尔伯特空间 $\mathcal{H}$ ），使得在输入空间 $\mathbb{R}^d$ 中的超曲面模型对应于特征空间 $\mathcal{H}$ 中的超平面模型（支持向量机）；
- 分类问题的学习任务通过在特征空间中求解**线性支持向量机**就可以完成。



# 核技巧——回顾

## □ 线性可分支持向量机

$$\begin{array}{ll} \min_{\omega, b} & \frac{1}{2} \|\omega\|^2 \\ \text{s. t.} & y_i(\omega^T x_i + b) \geq 1, i = 1, \dots, m \end{array}$$

第一步：定义拉格朗日函数

$$L(\omega, b, \alpha) = \frac{1}{2} \|\omega\|^2 + \sum_{i=1}^m \alpha_i (1 - y_i(\omega^T x_i + b))$$

根据拉格朗日对偶性，原始问题的对偶问题是极大极小问题：

$$\max_{\alpha} \min_{\omega, b} L(\omega, b, \alpha)$$

# 核技巧——回顾

## □ 线性可分支持向量机

$$\begin{array}{ll} \min_{\omega, b} & \frac{1}{2} \|\omega\|^2 \\ \text{s. t.} & y_i (\omega^T x_i + b) \geq 1, i = 1, \dots, m \end{array}$$

**第二步：** 求  $\min_{\omega, b} L(\omega, b, \alpha)$

将拉格朗日函数分别对  $\omega$  和  $b$  求偏导数并令其等于0

$$\frac{\partial \mathcal{L}(x, \alpha)}{\partial \omega} = \omega - \sum_{i=1}^m a_i y_i x_i$$

$$\frac{\partial \mathcal{L}(x, \alpha)}{\partial b} = - \sum_{i=1}^m a_i y_i$$

$$\omega = \sum_{i=1}^m a_i y_i x_i$$

$$\sum_{i=1}^m a_i y_i = 0$$

$$\frac{\partial \|\omega\|^2}{\partial \omega} = 2\omega$$

$$\frac{\partial \omega^T x}{\partial \omega} = x$$

# 核技巧——回顾

## □ 线性支持向量机学习的对偶算法

第三步：回代，得到对偶问题

$$\begin{aligned} \min_{\alpha} \quad & \frac{1}{2} \sum_{i=1}^m \sum_{j=1}^m \alpha_i \alpha_j y_i y_j \mathbf{x}_i^T \mathbf{x}_j - \sum_{i=1}^m \alpha_i \\ \text{s. t.} \quad & \sum_{i=1}^m \alpha_i y_i = 0, \\ & 0 \leq \alpha_i \leq C, i = 1, \dots, m \end{aligned}$$

第四步：解出 $\alpha^*$ ，根据KKT条件求出 $(\omega^*, b^*)$

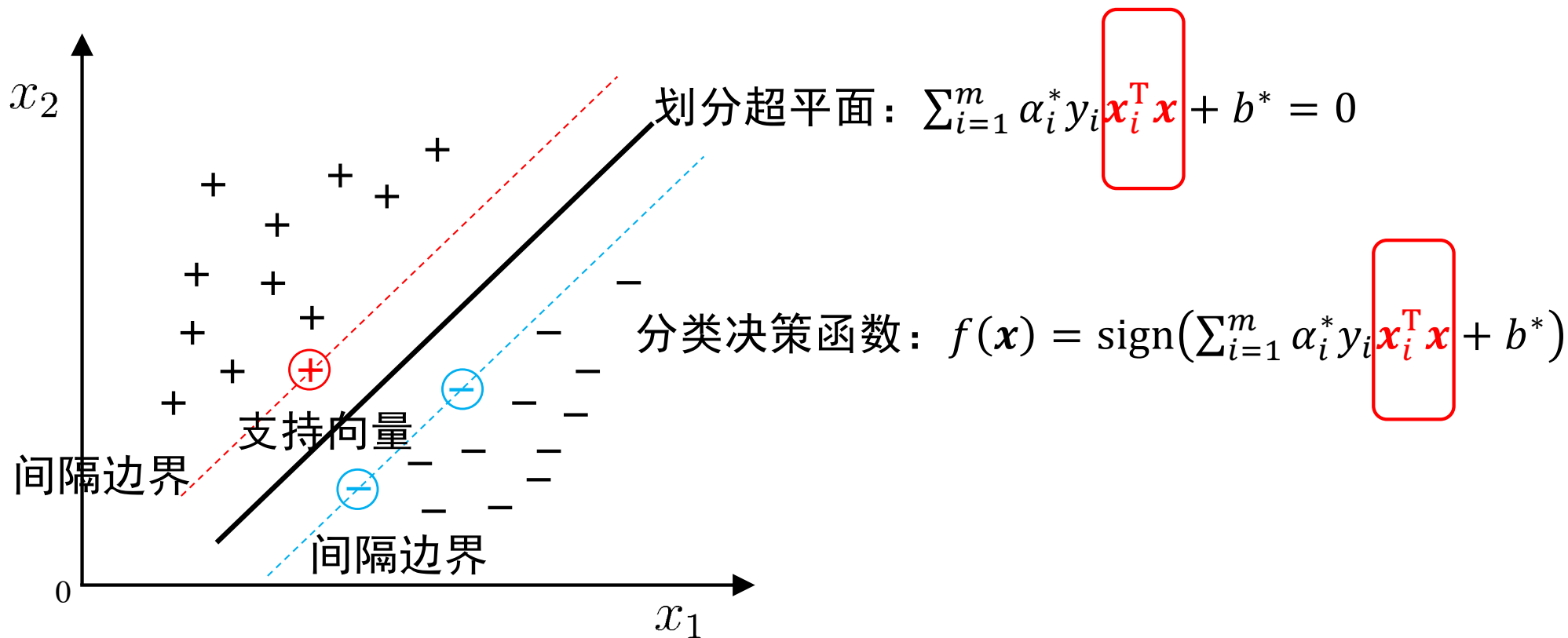
$$\omega^* = \sum_{i=1}^m \alpha_i^* y_i \mathbf{x}_i, b^* = y_j - \sum_{i=1}^m \alpha_i^* y_i \mathbf{x}_i^T \mathbf{x}_j$$

$j$ 为 $\alpha^*$ 中的一个正分量  
 $0 < \alpha_j^* < C$ 所对应的  
下标

# 核技巧——回顾

## □ 线性支持向量机学习的对偶算法

第五步：最终模型  $f(\mathbf{x}) = \text{sign}(\boldsymbol{\omega}^{*\text{T}} \mathbf{x} + b^*)$



现象：分类决策函数只依赖于输入 $\mathbf{x}$ 和训练样本输入的内积。

# 核技巧

## □ 核函数

设 $\mathcal{X}$ 是输入空间（欧式空间 $\mathbb{R}^d$ 的子集或离散集合），  
又设 $\mathcal{H}$ 为特征空间（希尔伯特空间），  
如果存在一个从 $\mathcal{X}$ 到 $\mathcal{H}$ 的映射

$$\phi(x): \mathcal{X} \rightarrow \mathcal{H}$$

$\phi$ 是输入空间 $\mathbb{R}^d$ 到特征空间 $\mathcal{H}$ 的映射，  
特征空间 $\mathcal{H}$ 一般是高维，甚至是无穷维的



# 核技巧

## □ 核函数

设 $\mathcal{X}$ 是输入空间（欧式空间 $\mathbb{R}^d$ 的子集或离散集合），


又设 $\mathcal{H}$ 为特征空间（希尔伯特空间），

如果存在一个从 $\mathcal{X}$ 到 $\mathcal{H}$ 的映射

$$\phi(\mathbf{x}): \mathcal{X} \rightarrow \mathcal{H}$$

使得对所有 $\mathbf{x}_i, \mathbf{x}_j \in \mathcal{X}$ ，函数 $K(\mathbf{x}_i, \mathbf{x}_j)$ 满足条件

$$K(\mathbf{x}_i, \mathbf{x}_j) = \phi(\mathbf{x}_i) \cdot \phi(\mathbf{x}_j) = \langle \phi(\mathbf{x}_i), \phi(\mathbf{x}_j) \rangle = \phi(\mathbf{x}_i)^T \phi(\mathbf{x}_j)$$

  
 $\phi(\mathbf{x})$ 为映射函数     $\langle \phi(\mathbf{x}_i), \phi(\mathbf{x}_j) \rangle$ 为 $\phi(\mathbf{x}_i)$ 和 $\phi(\mathbf{x}_j)$ 的内积

  
则称 $K(\mathbf{x}_i, \mathbf{x}_j)$ 为核函数

# 核技巧

## □ 核函数

设 $\mathcal{X}$ 是输入空间（欧式空间 $\mathbb{R}^d$ 的子集或离散集合），

又设 $\mathcal{H}$ 为特征空间（希尔伯特空间），

如果存在一个从 $\mathcal{X}$ 到 $\mathcal{H}$ 的映射

$$\phi(\mathbf{x}): \mathcal{X} \rightarrow \mathcal{H}$$

使得对所有 $\mathbf{x}_i, \mathbf{x}_j \in \mathcal{X}$ ，函数 $K(\mathbf{x}_i, \mathbf{x}_j)$ 满足条件

$$K(\mathbf{x}_i, \mathbf{x}_j) = \phi(\mathbf{x}_i) \cdot \phi(\mathbf{x}_j) = \langle \phi(\mathbf{x}_i), \phi(\mathbf{x}_j) \rangle = \phi(\mathbf{x}_i)^T \phi(\mathbf{x}_j)$$



则称 $K(\mathbf{x}_i, \mathbf{x}_j)$ 为核函数

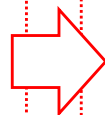
“映射”后高维空间的內积，可通过“映射”前原始空间的核函数来进行计算，并不需要“真正”地映射到高维空间。

# 核技巧

## □ 核技巧在支持向量机中的应用

对偶问题：

$$\begin{aligned} \max_{\alpha} & -\frac{1}{2} \sum_{i=1}^m \sum_{j=1}^m \alpha_i \alpha_j y_i y_j \mathbf{x}_i^T \mathbf{x}_j + \sum_{i=1}^m \alpha_i \\ \text{s. t.} & \sum_{i=1}^m \alpha_i y_i = 0, \\ & 0 \leq \alpha_i \leq C, i = 1, \dots, m \end{aligned}$$



$$\begin{aligned} \max_{\alpha} & -\frac{1}{2} \sum_{i=1}^m \sum_{j=1}^m \alpha_i \alpha_j y_i y_j K(\mathbf{x}_i, \mathbf{x}_j) + \sum_{i=1}^m \alpha_i \\ \text{s. t.} & \sum_{i=1}^m \alpha_i y_i = 0, \\ & 0 \leq \alpha_i \leq C, i = 1, \dots, m \end{aligned}$$

**核函数**  $K(\mathbf{x}_i, \mathbf{x}_j) = \phi(\mathbf{x}_i) \cdot \phi(\mathbf{x}_j) = \langle \phi(\mathbf{x}_i), \phi(\mathbf{x}_j) \rangle = \phi(\mathbf{x}_i)^T \phi(\mathbf{x}_j)$

这等价于：

经过映射函数 $\phi$  将原来的输入空间变换到一个新的特征空间，

将输入空间中的内积 $\mathbf{x}_i^T \mathbf{x}_j$  变换为特征空间中的内积 $\phi(\mathbf{x}_i) \cdot \phi(\mathbf{x}_j)$ ，

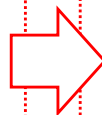
在新的特征空间里从训练样本中学习线性支持向量机。

# 核技巧

## □ 核技巧在支持向量机中的应用

对偶问题:

$$\begin{aligned} \max_{\alpha} & -\frac{1}{2} \sum_{i=1}^m \sum_{j=1}^m \alpha_i \alpha_j y_i y_j \mathbf{x}_i^T \mathbf{x}_j + \sum_{i=1}^m \alpha_i \\ \text{s. t. } & \sum_{i=1}^m \alpha_i y_i = 0, \\ & 0 \leq \alpha_i \leq C, i = 1, \dots, m \end{aligned}$$



$$\begin{aligned} \max_{\alpha} & -\frac{1}{2} \sum_{i=1}^m \sum_{j=1}^m \alpha_i \alpha_j y_i y_j K(\mathbf{x}_i, \mathbf{x}_j) + \sum_{i=1}^m \alpha_i \\ \text{s. t. } & \sum_{i=1}^m \alpha_i y_i = 0, \\ & 0 \leq \alpha_i \leq C, i = 1, \dots, m \end{aligned}$$

决策函数:

$$f(\mathbf{x}) = \text{sign} \left( \sum_{i=1}^m \alpha_i^* y_i \mathbf{x}_i^T \mathbf{x} + b^* \right)$$



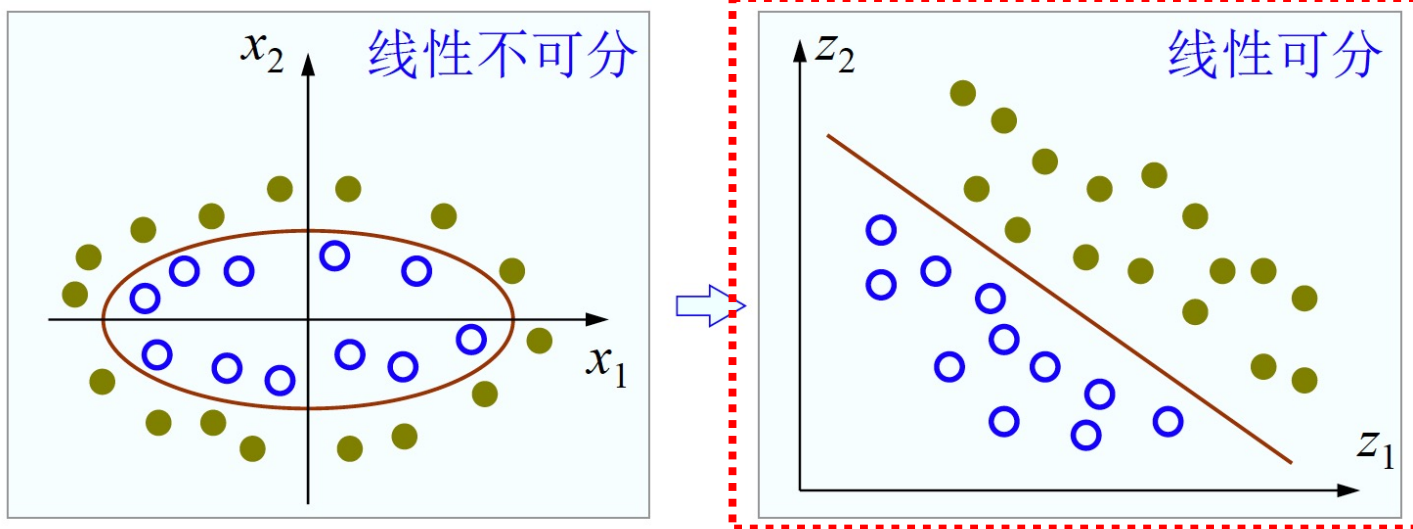
$$f(\mathbf{x}) = \text{sign} \left( \sum_{i=1}^m \alpha_i^* y_i K(\mathbf{x}_i, \mathbf{x}) + b^* \right)$$

当映射函数是非线性函数时,

学习得到的含有核函数的支持向量机是非线性分类模型

# 核技巧

## 核技巧在支持向量机中的应用



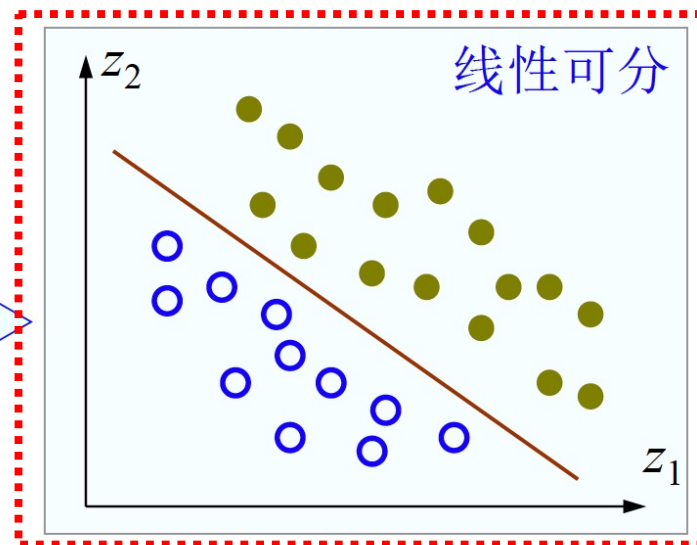
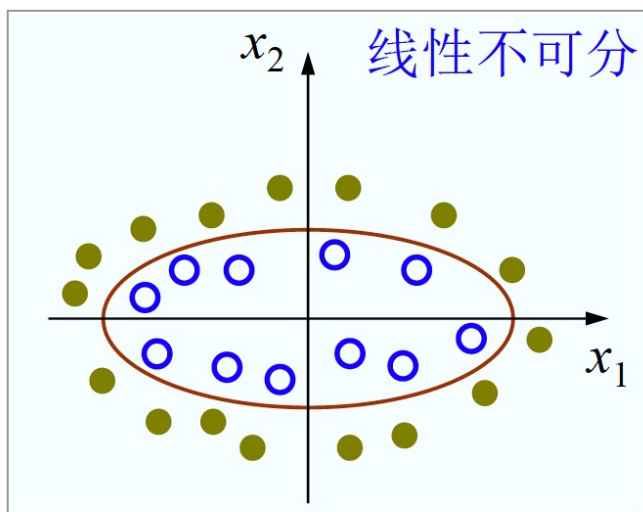
$$\text{核函数 } \kappa(\mathbf{x}_i, \mathbf{x}_j) = \phi(\mathbf{x}_i) \cdot \phi(\mathbf{x}_j) = \langle \phi(\mathbf{x}_i), \phi(\mathbf{x}_j) \rangle = \phi(\mathbf{x}_i)^T \phi(\mathbf{x}_j)$$

在核函数 $K(\mathbf{x}_i, \mathbf{x}_j)$ 给定的条件下，可以利用解线性问题的方法求解非线性分类问题的支持向量机。

学习是隐式地在特征空间进行的，不需要显式地定义特征空间和映射函数。这样的技巧称为核技巧。

# 核技巧

## 核技巧在支持向量机中的应用



**核函数**  $\kappa(x_i, x_j) = \phi(x_i) \cdot \phi(x_j) = \langle \phi(x_i), \phi(x_j) \rangle = \phi(x_i)^T \phi(x_j)$

不显式地设计核映射  
而是设计核函数

# 核技巧

## □ 核技巧的基本想法

在学习与预测中只定义核函数 $K(x_i, x_j)$ ，而不显式地定义映射函数 $\phi(x)$ 。

- $\phi$ 是输入空间 $\mathbb{R}^d$ 到特征空间 $\mathcal{H}$ 的映射，特征空间 $\mathcal{H}$ 一般是高维，甚至是无穷维的；
- 直接计算 $K(x_i, x_j)$ 比较容易，而通过 $\phi(x_i)$ 和 $\phi(x_j)$ 计算 $K(x_i, x_j)$ 并不容易。

# 核技巧举例1

□ 基本想法：不显式地设计核映射, 而是设计核函数.

$$\kappa(\mathbf{x}_i, \mathbf{x}_j) = \phi(\mathbf{x}_i)^\top \phi(\mathbf{x}_j)$$

□ Kernel Trick

$$\mathbf{x} = (a, b)^T \Rightarrow \varphi(\mathbf{x}) = (a^2, b^2, \sqrt{2ab})^T$$

$$\varphi(\mathbf{x}_1)^\top \varphi(\mathbf{x}_2) = (a_1^2, b_1^2, \sqrt{2a_1b_1}) \begin{pmatrix} a_2^2 \\ b_2^2 \\ \sqrt{2a_2b_2} \end{pmatrix}$$

$$= a_1^2 a_2^2 + b_1^2 b_2^2 + 2a_1 b_1 a_2 b_2 \quad \kappa(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2) = (\mathbf{x}_1^\top \mathbf{x}_2)^2$$

$$= (a_1 a_2 + b_1 b_2)^2 = (\mathbf{x}_1^\top \mathbf{x}_2)^2$$



# 核技巧举例1： 2次多项式kernel

## □ d-Feature

$$\mathbf{x} = (x_1, x_2, \dots, x_d)^T$$

$$\varphi_2(\mathbf{x}) = (x_1x_1, x_1x_2, \dots, x_1x_d, x_2x_1, x_2x_2, \dots, x_2x_d, \dots, x_dx_d)^T$$

$$\begin{aligned}\varphi_2(\mathbf{x}^1)^T \varphi_2(\mathbf{x}^2) &= \sum_{i=1}^d \sum_{j=1}^d x_i^1 x_j^1 x_i^2 x_j^2 \\ &= \sum_{i=1}^d x_i^1 x_i^2 \sum_{j=1}^d x_j^1 x_j^2\end{aligned}$$

$$\kappa(\mathbf{x}^1, \mathbf{x}^2) = (\mathbf{x}^1{}^T \mathbf{x}^2)^2$$

# 核函数

□ 基本想法：不显式地设计核映射, 而是设计核函数.

$$\kappa(\mathbf{x}_i, \mathbf{x}_j) = \phi(\mathbf{x}_i)^\top \phi(\mathbf{x}_j)$$

□ 常用核函数：

名称	表达式	参数
线性核	$\kappa(\mathbf{x}_i, \mathbf{x}_j) = \mathbf{x}_i^\top \mathbf{x}_j$	
多项式核	$\kappa(\mathbf{x}_i, \mathbf{x}_j) = (\mathbf{x}_i^\top \mathbf{x}_j)^d$	$d \geq 1$ 为多项式的次数
高斯核	$\kappa(\mathbf{x}_i, \mathbf{x}_j) = \exp\left(-\frac{\ \mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j\ ^2}{2\delta^2}\right)$	$\delta > 0$ 为高斯核的带宽(width)
拉普拉斯核	$\kappa(\mathbf{x}_i, \mathbf{x}_j) = \exp\left(-\frac{\ \mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j\ }{\delta}\right)$	$\delta > 0$
Sigmoid核	$\kappa(\mathbf{x}_i, \mathbf{x}_j) = \tanh(\beta \mathbf{x}_i^\top \mathbf{x}_j + \theta)$	$\tanh$ 为双曲正切函数, $\beta > 0, \theta < 0$

# 非线性支持向量机

## □ 非线性支持向量机定义

从非线性分类训练集，通过核函数与软间隔最大化，或凸二次规划，学习得到的分类决策函数

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

称为非线性支持向量机， $K(\mathbf{x}_i, \mathbf{x}_j)$ 是核函数。

# 非线性支持向量机学习算法

## □ 非线性支持向量机

**输入：** 训练数据集  $D = \{(\mathbf{x}_1, y_1), (\mathbf{x}_2, y_2), \dots, (\mathbf{x}_m, y_m)\}$ , 其中  $\mathbf{x}_i \in \mathbb{R}^d, y_i \in \{-1, 1\}, i = 1, \dots, m$

**输出：** 划分超平面和分类决策函数

(1) 选择适当的核函数  $K(\mathbf{x}_i, \mathbf{x}_j)$  和惩罚参数  $C > 0$ , 构造并求解约束最优化问题

$$\begin{aligned} \min_{\alpha} \quad & \frac{1}{2} \sum_{i=1}^m \sum_{j=1}^m \alpha_i \alpha_j y_i y_j K(\mathbf{x}_i, \mathbf{x}_j) - \sum_{i=1}^m \alpha_i \\ \text{s. t.} \quad & \sum_{i=1}^m \alpha_i y_i = 0, \quad \text{求得最优解 } \boldsymbol{\alpha}^* = (\alpha_1^*, \alpha_2^*, \dots, \alpha_d^*)^T。 \\ & 0 \leq \alpha_i \leq C, i = 1, \dots, m \end{aligned}$$

# 非线性支持向量机学习算法

## □ 非线性支持向量机

**输入：** 训练数据集  $D = \{(\mathbf{x}_1, y_1), (\mathbf{x}_2, y_2), \dots, (\mathbf{x}_m, y_m)\}$ , 其中  $\mathbf{x}_i \in \mathbb{R}^d, y_i \in \{-1, 1\}, i = 1, \dots, m$

**输出：** 划分超平面和分类决策函数

(2) 选择  $\alpha^*$  中的一个正分量  $0 < \alpha_j^* < C$ , 计算

$$b^* = y_j - \sum_{i=1}^m \alpha_i^* y_i K(\mathbf{x}_i, \mathbf{x}_j)$$

# 非线性支持向量机学习算法

## □ 非线性支持向量机

**输入：** 训练数据集  $D = \{(\mathbf{x}_1, y_1), (\mathbf{x}_2, y_2), \dots, (\mathbf{x}_m, y_m)\}$ , 其中  $\mathbf{x}_i \in \mathbb{R}^d, y_i \in \{-1, 1\}, i = 1, \dots, m$

**输出：** 划分超平面和分类决策函数

(3) 求得划分超平面

$$\boldsymbol{\omega}^{*\text{T}} \mathbf{x} + b^* = 0 \text{ 即 } \sum_{i=1}^m \alpha_i^* y_i K(\mathbf{x}_i, \mathbf{x}) + b^* = 0$$

和分类决策函数

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

# 非线性支持向量机

## □ 非线性支持向量机

**数据：**  $D = \{(\mathbf{x}_1, y_1), (\mathbf{x}_2, y_2), \dots, (\mathbf{x}_m, y_m)\}$ ,  $\mathbf{x}_i \in \mathbb{R}^d, y_i \in \{-1, 1\}$

**模型：**  $f(\mathbf{x}_i) = \text{sign}(\boldsymbol{\omega}^T \boldsymbol{\phi}(\mathbf{x}_i) + b)$ , 使得  $f(\mathbf{x}_i) \simeq y_i$ , 其中  $\boldsymbol{\omega} \in \mathbb{R}^d$

**策略：** 经过映射函数  $\phi$  将原来的输入空间变换到一个新的特征空间，将输入空间中的内积  $\mathbf{x}_i^T \mathbf{x}_j$  变换为特征空间中的内积  $\phi(\mathbf{x}_i) \cdot \phi(\mathbf{x}_j)$ ，在新的特征空间里从训练样本中学习线性支持向量机。

**算法：** 对偶算法

**学得模型：** 分离超平面  $\sum_{i=1}^m \alpha_i^* y_i K(\mathbf{x}_i, \mathbf{x}) + b^* = 0$  和分类决策函数为  $f(\mathbf{x}) = \text{sign}(\sum_{i=1}^m \alpha_i^* y_i K(\mathbf{x}_i, \mathbf{x}) + b^*)$ ，即非线性支持向量机。

谢谢！