



西安交通大学  
XI'AN JIAOTONG UNIVERSITY

# 机器学习在信息安全中的应用

言湮

li.yan.88@xjtu.edu.cn

2025年11月

## 小测验

□ 以下可行的最近邻分类的加速方案？（ A, B ）

A. 分层搜索

B. 训练样本缩减

C. 样本增加

## 小测验

□ 一般来说，K最近邻方法在什么情况下效果好？（ B ）

- A. 样本较多但典型性不好
- B. 样本较少但典型性较好
- C. 样本呈团状分布
- D. 样本呈链状分布

## 小测验

- 在下列哪种情况下，协同过滤系统是最合适的学习算法（与线性或逻辑斯蒂回归相比）？（ A, D ）
- A. 你经营一家在线书店，收集许多用户的评价。你想用它来识别哪些书彼此“相似”（即，如果一个用户喜欢某本书，那么她可能也喜欢哪些书？）
  - B. 你管理一个在线书店，你有许多用户的书评。你想根据一本书的平均评分来预测预期的销售量（售出的书的数量）。
  - C. 你是个艺术家，为你的客户手绘肖像。每个客户都会得到不同的肖像（他们自己）并给你1-5星级的评价反馈，每个客户最多购买1幅肖像。你想预测下一个客户会给你什么样的评分。
  - D. 你开了一家服装店，出售许多款式和品牌的牛仔裤。你已经收集了经常购物者对不同款式和品牌的评论，你想用这些评论为那些购物者提供你认为他们最有可能购买的牛仔裤的折扣

## 小测验

- ▣ 你刚刚收购了三家电影评论网站（A、B和C），希望将三个公司的数据集合并在一起，以建立一个基于协同过滤的电影推荐系统。在A网站上，用户的评分为1到5颗星。在B网站上，用户的评分是1-10分，允许使用小数（如7.5）。在C网站，用户评分为1到100。以下哪个陈述是正确的？（ **A** ）
- A. 可以将三个数据集合并为一个数据集，但是应该首先规范化每个数据集的评级（比如将每个数据集的评级重新调整为0-1范围）。
  - B. 只要在合并数据后执行均值归一化和特征缩放，就可以将所有三个训练集合并为一个。
  - C. 假设在一个数据库中至少有一个电影/用户没有出现在第二个数据库中，那么就没有合并这些数据集的合理方法，因为缺少数据。
  - D. 无法合并这些网站的数据。你必须建立三个独立的推荐系统。

# 第四章：支持向量机



**4.1 支持向量机简介**

**4.2 支持向量机优化求解**

**4.3 序列最小优化算法**

**4.4 支持向量机核方法**



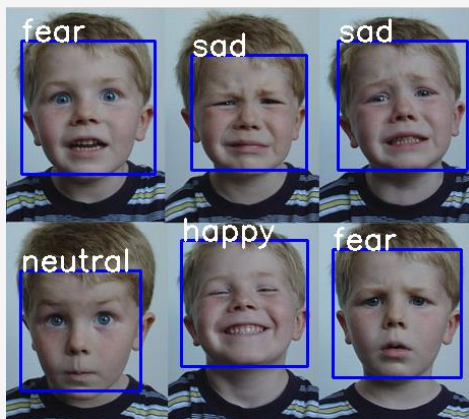
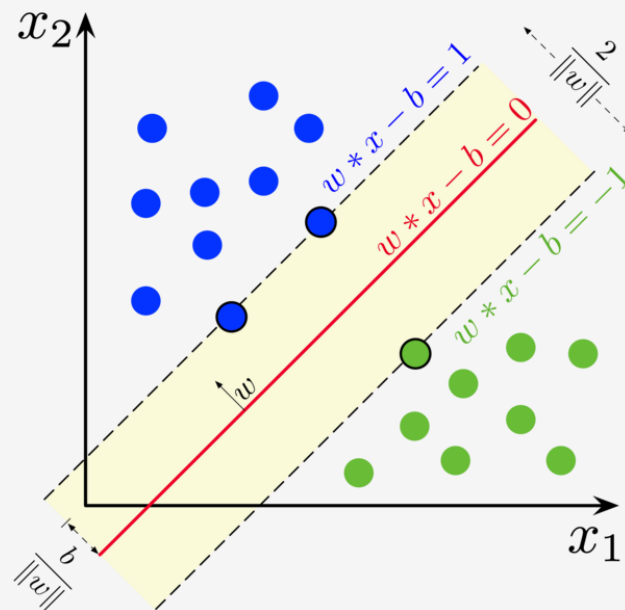
西安交通大学  
XI'AN JIAOTONG UNIVERSITY

## 4.1 支持向量机简介

## 4.1 支持向量机简介

### 支持向量机简史

- 最早在1992年提出，灵感来源于统计学习理论。
- 因在MNIST数字识别数据集成功而变得流行（1994年）。
- 在计算机视觉、文本分类、排序、时间序列分析和生物信息学等领域有许多成功的应用。
- 被视为“核方法”的一个重要例子，可以说是2000年代初机器学习中最热门领域之一。



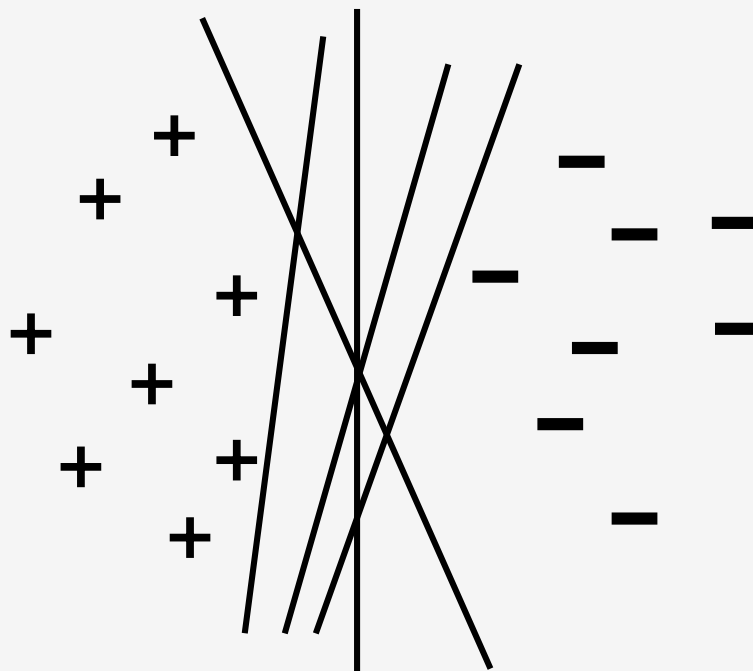


## 4.1 支持向量机简介

### 线性分类器

#### 决策边界

- 线性可分的情形下，决策边界可以是多样的

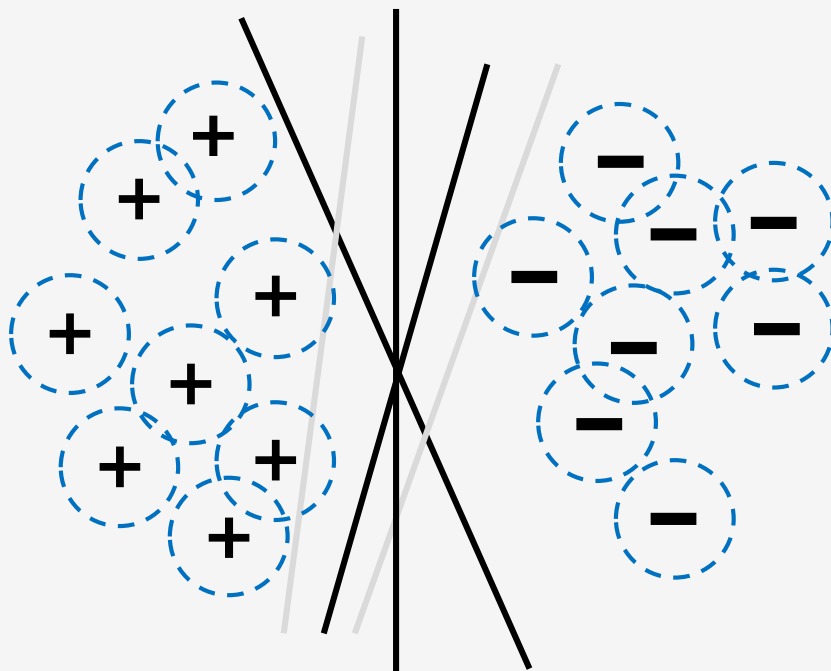


## 4.1 支持向量机简介

### 线性分类器

#### 决策边界

- 线性可分的情形下，决策边界可以是多样的



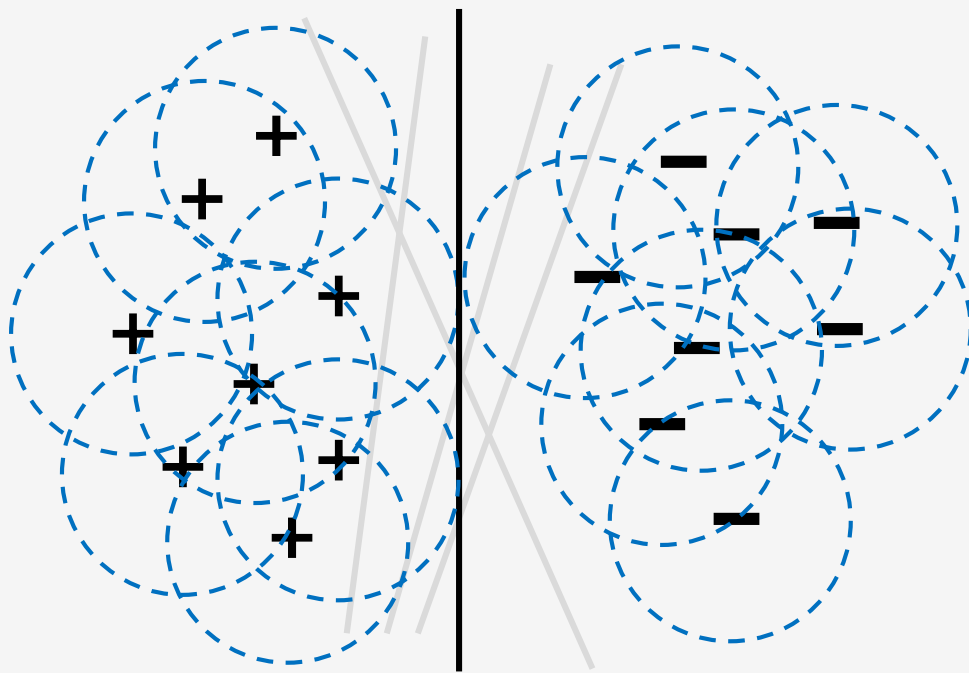
- 考虑数据噪声，可以去除一些划分

## 4.1 支持向量机简介

### 线性分类器

#### 决策边界

- 线性可分的情形下，决策边界可以是多样的



- 一种直观的最优决策边界：最大间隔边界

## 4.1 支持向量机简介

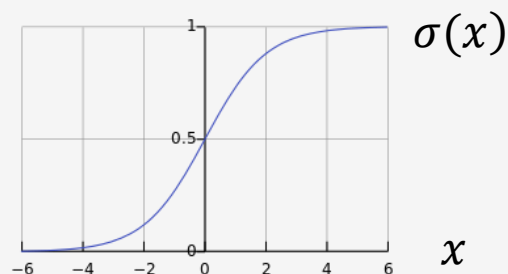
### 线性分类器

#### 逻辑斯蒂回归

- 逻辑回归是一种二分类模型

$$p_{\theta}(y = 1|x) = \sigma(\theta^T x) = \frac{1}{1 + e^{-\theta^T x}}$$

$$p_{\theta}(y = 0|x) = \frac{e^{-\theta^T x}}{1 + e^{-\theta^T x}}$$



- 交叉熵损失函数

$$\mathcal{L}(y, x, p_{\theta}) = -y \log \sigma(\theta^T x) - (1 - y) \log (1 - \sigma(\theta^T x))$$

- 梯度函数

$$\begin{aligned} \frac{\partial \mathcal{L}(y, x, p_{\theta})}{\partial \theta} &= -y \frac{1}{\sigma(\theta^T x)} \sigma(z)(1 - \sigma(z))x - (1 - y) \frac{-1}{1 - \sigma(\theta^T x)} \sigma(z)(1 - \sigma(z))x \\ &= (\sigma(\theta^T x) - y)x \end{aligned}$$
$$\theta \leftarrow \theta + \eta (y - \sigma(\theta^T x)) x$$

## 4.1 支持向量机简介

### 线性分类器

#### 标签决策

- 逻辑回归给出了每个类别的概率

$$p_{\theta}(y = 1|x) = \sigma(\theta^T x) = \frac{1}{1 + e^{-\theta^T x}}$$

$$p_{\theta}(y = 0|x) = \frac{e^{-\theta^T x}}{1 + e^{-\theta^T x}}$$

- 每个样例的最终标签由设定的阈值 $h$ 决定

$$\hat{y} = \begin{cases} 1, & p_{\theta}(y = 1|x) > h \\ 0, & \text{otherwise} \end{cases}$$

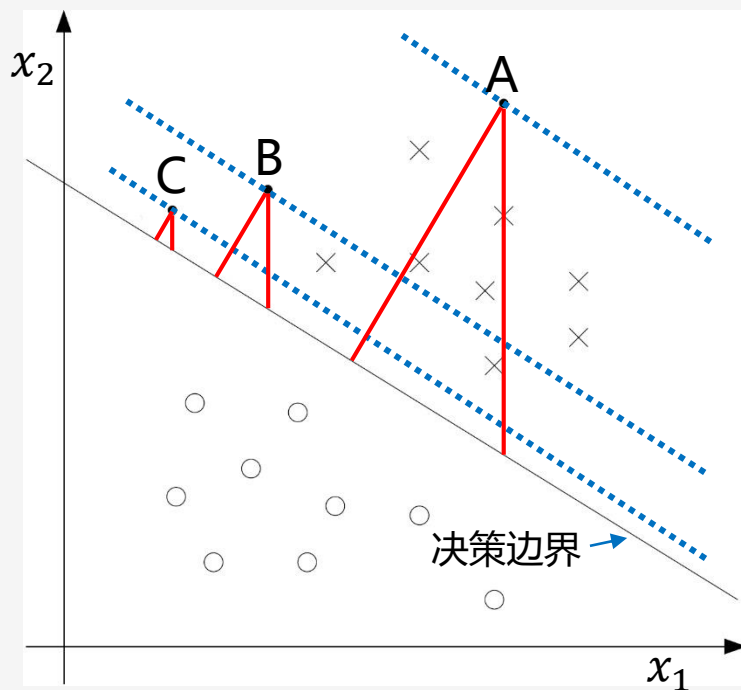
## 4.1 支持向量机简介

### 线性分类器

#### 打分函数

##### 逻辑回归的打分函数

$$s(x) = \theta_0 + \theta_1 x_1 + \theta_2 x_2$$



$$p_{\theta}(y = 1|x) = \frac{1}{1 + e^{-s(x)}}$$

$$s(x) = \theta_0 + \theta_1 x_1^{(A)} + \theta_2 x_2^{(A)}$$

$$s(x) = \theta_0 + \theta_1 x_1^{(B)} + \theta_2 x_2^{(B)}$$

$$s(x) = \theta_0 + \theta_1 x_1^{(C)} + \theta_2 x_2^{(C)}$$

$$s(x) = 0$$

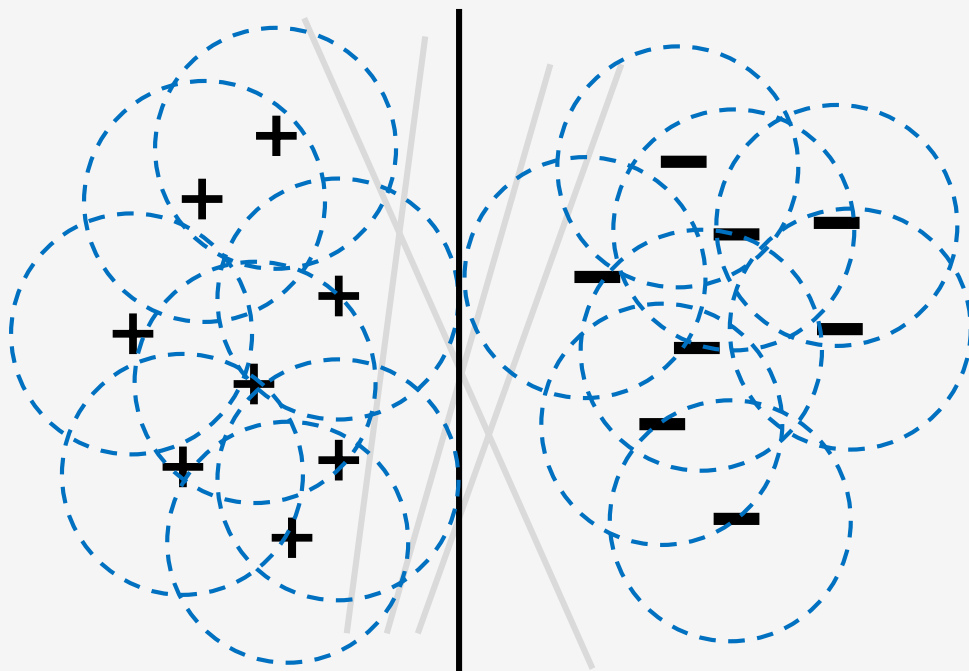
打分越高的样例越远离决策边界，具有更高的分类置信度

## 4.1 支持向量机简介

### 支持向量机

#### 最优决策边界

- 直观的最优决策边界：最高的分类置信度



## 4.1 支持向量机简介

### 支持向量机

#### 符号说明

- ▣ 特征向量  $x$
- ▣ 类别标签  $y \in \{-1, 1\}$
- ▣ 参数
  - 截距  $b$
  - 特征权重向量  $w$
- ▣ 标签预测

$$h_{w,b}(x) = g(w^T x + b)$$
$$g(z) = \begin{cases} +1 & z \geq 0 \\ -1 & \text{otherwise} \end{cases}$$



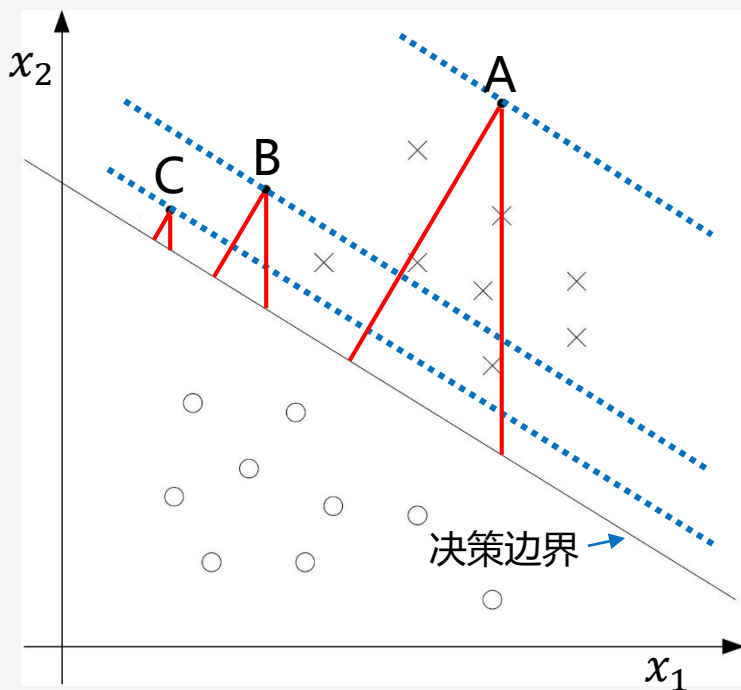
## 4.1 支持向量机简介

### 支持向量机

#### 打分函数

##### 逻辑回归的打分函数

$$s(x) = \theta_0 + \theta_1 x_1 + \theta_2 x_2$$



$$p_{\theta}(y = 1|x) = \frac{1}{1 + e^{-s(x)}}$$

$$s(x) = \theta_0 + \theta_1 x_1^{(A)} + \theta_2 x_2^{(A)}$$

$$s(x) = \theta_0 + \theta_1 x_1^{(B)} + \theta_2 x_2^{(B)}$$

$$s(x) = \theta_0 + \theta_1 x_1^{(C)} + \theta_2 x_2^{(C)}$$

$$s(x) = 0$$

打分越高的样例越远离决策边界，具有更高的分类置信度

## 4.1 支持向量机简介

### 支持向量机

#### 边界间隔

##### □ 函数间隔

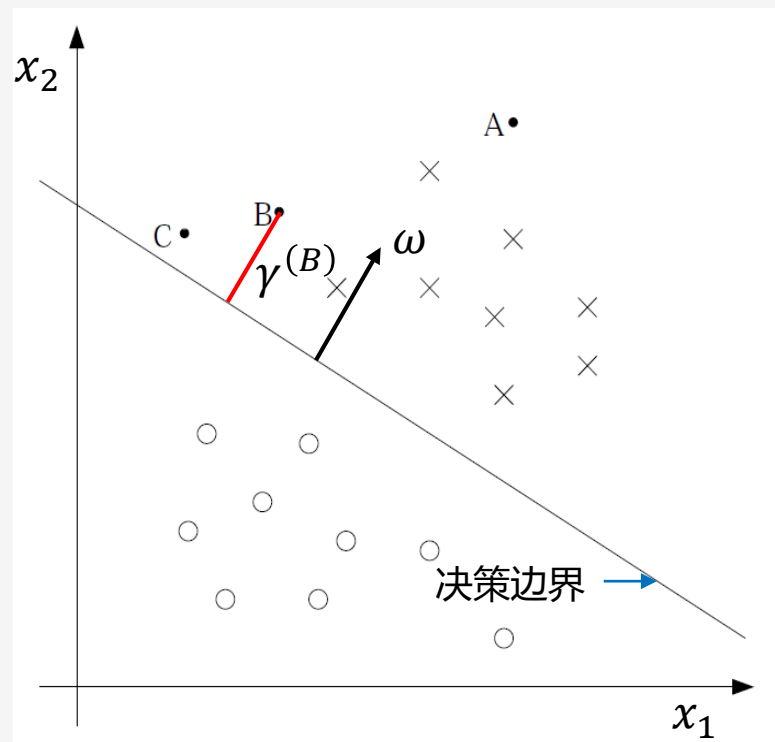
$$\hat{y}^{(i)} = y^{(i)}(w^T x^{(i)} + b)$$

##### □ 分割超平面不会随 $(\omega, b)$ 的幅值改变而改变

$$g(w^T x + b) = g(2w^T x + 2b)$$

##### □ 几何间隔

$$\gamma^{(i)} = \left( \frac{w}{\|w\|} \right)^T x^{(i)} + \frac{b}{\|w\|}$$



## 4.1 支持向量机简介

### 支持向量机

#### 边界间隔

##### □ 函数间隔

$$\begin{aligned}\hat{\gamma}^{(i)} &= y^{(i)}(w^T x^{(i)} + b) \\ &= y^{(i)} s(x^{(i)}) \\ &= |s(x^{(i)})|\end{aligned}$$

##### □ 几何间隔

$$\begin{aligned}\gamma^{(i)} &= \left( \frac{w}{\|w\|} \right)^T x^{(i)} + \frac{b}{\|w\|} \\ &= \frac{|s(x^{(i)})|}{\|w\|}\end{aligned}$$

#### 点到平面的距离

若点坐标为  $(x_0, y_0, z_0)$ , 平面为  $Ax + By + Cz + D = 0$ , 则点到平面的距离为:

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

##### □ 给定训练集 $S = \{(x_i, y_i)\}_{i=1, \dots, m}$ , 最小几何间隔为

$$\gamma = \min_{i=1, \dots, m} \gamma^{(i)}$$

## 4.1 支持向量机简介

### 支持向量机

#### 目标函数

- 寻找一个使最小几何间隔达到最大值的分割超平面

$$\begin{aligned} \max_{\gamma, w, b} \quad & \gamma \\ \text{s.t.} \quad & y^{(i)}(w^T x^{(i)} + b) \geq \gamma, \quad i = 1, \dots, m \\ & \|w\| = 1 \quad (\text{非凸约束}) \end{aligned}$$

- 等同于归一化函数间隔

$$\begin{aligned} \max_{\hat{\gamma}, w, b} \quad & \frac{\hat{\gamma}}{\|w\|} \quad (\text{非凸目标函数}) \\ \text{s.t.} \quad & y^{(i)}(w^T x^{(i)} + b) \geq \hat{\gamma}, \quad i = 1, \dots, m \end{aligned}$$

## 4.1 支持向量机简介

### 支持向量机

#### 目标函数

#### □ 分类间隔的变化不会改变决策边界

- 将函数间隔固定为1

$$\hat{y} = 1$$

- 目标函数重写成

$$\begin{aligned} \max_{w,b} \quad & \frac{1}{\|w\|} \\ \text{s.t.} \quad & y^{(i)}(w^T x^{(i)} + b) \geq 1, \quad i = 1, \dots, m \end{aligned}$$

- 目标函数等同于

$$\begin{aligned} \min_{w,b} \quad & \frac{1}{2} \|w\|^2 \\ \text{s.t.} \quad & y^{(i)}(w^T x^{(i)} + b) \geq 1, \quad i = 1, \dots, m \end{aligned}$$

#### □ 此优化问题可以由二次规划算法有效求解

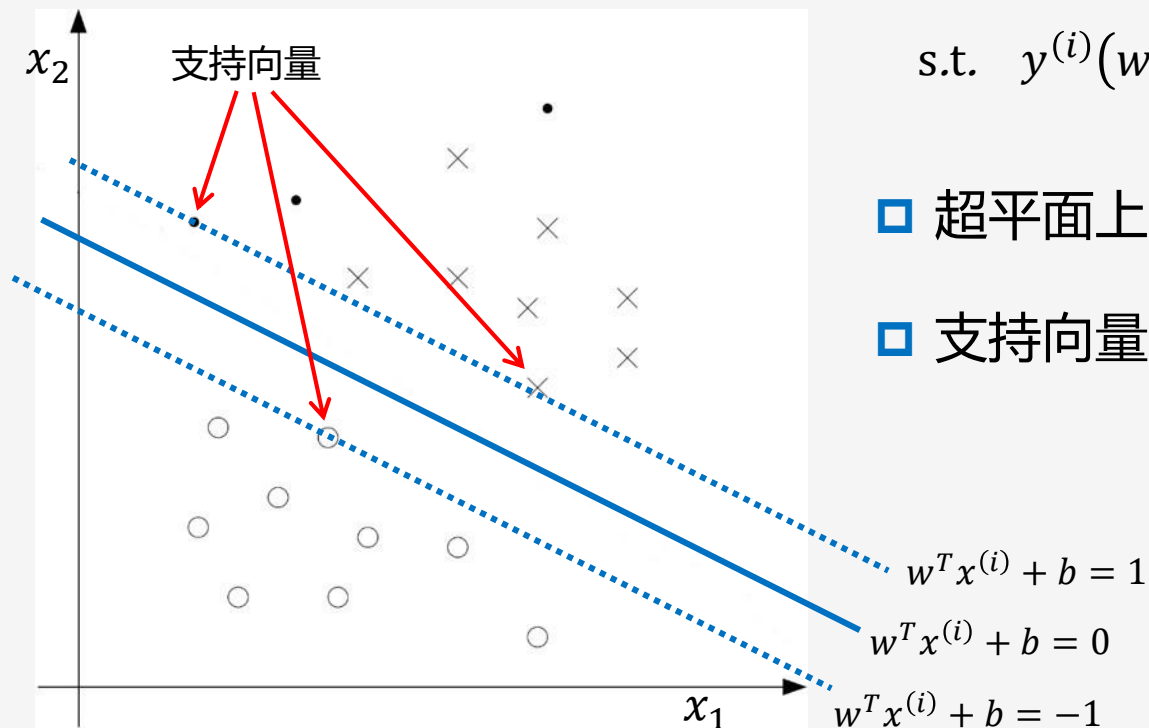
## 4.1 支持向量机简介

### 支持向量机

#### 目标函数

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

$$\text{s.t. } y^{(i)}(w^T x^{(i)} + b) \geq 1, \quad i = 1, \dots, m$$



□ 超平面上的函数间隔为0

□ 支持向量的函数间隔为1



西安交通大学  
XI'AN JIAOTONG UNIVERSITY

## 4.2 支持向量机优化求解

## 4.2 支持向量机优化求解

### 拉格朗日对偶问题

#### 等式凸优化

拉格朗日函数的极值点就是原凸优化问题的最优解!



#### □ 对于凸优化问题

$$\begin{aligned} \min_w \quad & f(w) \\ \text{s.t.} \quad & h_i(w) = 0, \quad i = 1, \dots, l \end{aligned}$$

#### □ 问题的拉格朗日函数定义为

$$\mathcal{L}(w, \beta) = f(w) + \sum_{i=1}^l \beta_i h_i(w)$$

拉格朗日乘子

• 求解  $\frac{\partial \mathcal{L}(w, \beta)}{\partial w} = 0 \quad \frac{\partial \mathcal{L}(w, \beta)}{\partial \beta} = 0$

可得原优化问题的解

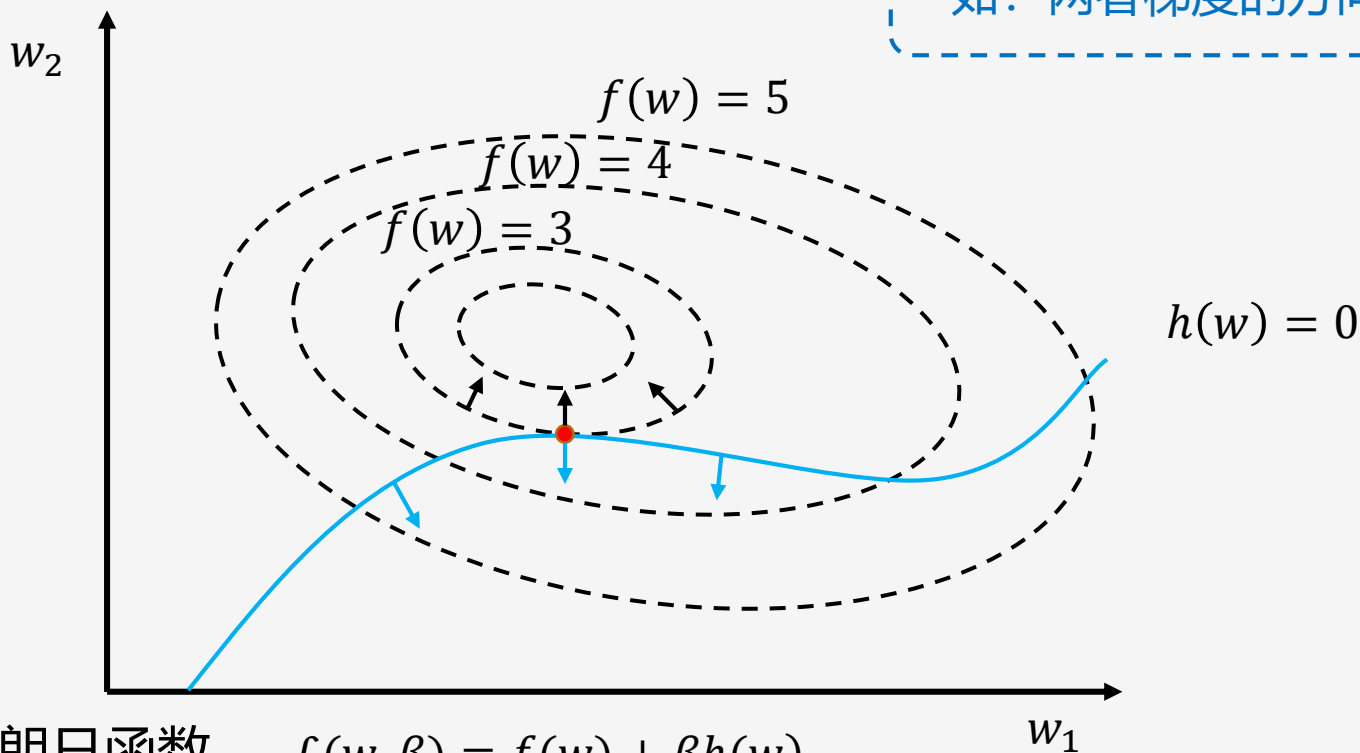


## 4.2 支持向量机优化求解

### 拉格朗日对偶问题

#### 拉格朗日函数解析

如：两者梯度的方向相同



□ 拉格朗日函数  $\mathcal{L}(w, \beta) = f(w) + \beta h(w)$

$$\frac{\partial \mathcal{L}(w, \beta)}{\partial \beta} = h(w) = 0$$

$$\frac{\partial \mathcal{L}(w, \beta)}{\partial w} = \frac{\partial f(w)}{\partial w} + \beta \frac{\partial h(w)}{\partial w} = 0$$

## 4.2 支持向量机优化求解

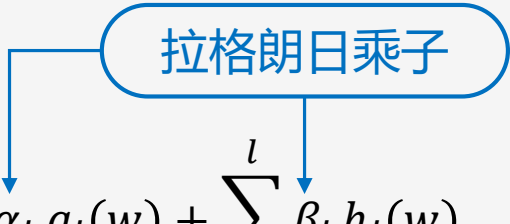
### 拉格朗日对偶问题

#### 不等式凸优化

#### □ 对于凸优化问题

$$\begin{aligned} \min_w \quad & f(w) \\ \text{s.t.} \quad & g_i(w) \leq 0, \quad i = 1, \dots, k \\ & h_i(w) = 0, \quad i = 1, \dots, l \end{aligned}$$

#### □ 问题的拉格朗日函数定义为


$$\mathcal{L}(w, \alpha, \beta) = f(w) + \sum_{i=1}^k \alpha_i g_i(w) + \sum_{i=1}^l \beta_i h_i(w)$$

$\alpha_i \geq 0, \beta_i \in R$

## 4.2 支持向量机优化求解

### 拉格朗日对偶问题

#### 原始问题

#### 凸优化问题

$$\begin{aligned} \min_w \quad & f(w) \\ \text{s.t.} \quad & g_i(w) \leq 0, \quad i = 1, \dots, k \\ & h_i(w) = 0, \quad i = 1, \dots, l \end{aligned}$$

#### 拉格朗日函数

$$\mathcal{L}(w, \alpha, \beta) = f(w) + \sum_{i=1}^k \alpha_i g_i(w) + \sum_{i=1}^l \beta_i h_i(w)$$

#### 原始问题

$$\theta_{\mathcal{P}}(w) = \max_{\alpha, \beta: \alpha_i \geq 0} \mathcal{L}(w, \alpha, \beta)$$

- 对于不满足约束条件的 $w$ , 例如

$$g_i(w) > 0 \text{ 或者 } h_i(w) \neq 0$$

可得  $\theta_{\mathcal{P}}(w) = +\infty$

## 4.2 支持向量机优化求解

### 拉格朗日对偶问题

#### 原始问题

##### 凸优化问题

$$\begin{aligned} \min_w \quad & f(w) \\ \text{s.t.} \quad & g_i(w) \leq 0, \quad i = 1, \dots, k \\ & h_i(w) = 0, \quad i = 1, \dots, l \end{aligned}$$

##### 拉格朗日函数

$$\mathcal{L}(w, \alpha, \beta) = f(w) + \sum_{i=1}^k \alpha_i g_i(w) + \sum_{i=1}^l \beta_i h_i(w)$$

##### 原始问题

$$\theta_{\mathcal{P}}(w) = \max_{\alpha, \beta: \alpha_i \geq 0} \mathcal{L}(w, \alpha, \beta)$$

- 相反, 对于满足所有约束条件的 $w$

可得  $\theta_{\mathcal{P}}(w) = f(w)$

$$\theta_{\mathcal{P}}(w) = \begin{cases} f(w) & w \text{ 满足原始问题约束} \\ +\infty & \text{其他} \end{cases}$$

## 4.2 支持向量机优化求解

### 拉格朗日对偶问题

#### 原始问题

$$\theta_{\mathcal{P}}(w) = \begin{cases} f(w) & w \text{ 满足原始问题约束} \\ +\infty & \text{其他} \end{cases}$$

#### □ 函数最小化问题

$$\min_w \theta_{\mathcal{P}}(w) = \min_w \max_{\alpha, \beta: \alpha_i \geq 0} \mathcal{L}(w, \alpha, \beta)$$

$$\min_w f(w)$$

$$\text{s.t. } g_i(w) \leq 0, \quad i = 1, \dots, k$$

$$h_i(w) = 0, \quad i = 1, \dots, l$$

#### □ 定义原始问题的最优值为

$$p^* = \min_w \theta_{\mathcal{P}}(w)$$

## 4.2 支持向量机优化求解

### 拉格朗日对偶问题

#### 对偶问题

- 略不相同的问题

$$\theta_{\mathcal{D}}(\alpha, \beta) = \min_w \mathcal{L}(w, \alpha, \beta)$$

- 定义对偶优化问题

$$\max_{\alpha, \beta: \alpha_i \geq 0} \theta_{\mathcal{D}}(\alpha, \beta) = \max_{\alpha, \beta: \alpha_i \geq 0} \min_w \mathcal{L}(w, \alpha, \beta)$$

$$\min_w \theta_{\mathcal{P}}(w) = \min_w \max_{\alpha, \beta: \alpha_i \geq 0} \mathcal{L}(w, \alpha, \beta)$$

- 定义对偶问题的最优值为

$$d^* = \max_{\alpha, \beta: \alpha_i \geq 0} \min_w \mathcal{L}(w, \alpha, \beta)$$

## 4.2 支持向量机优化求解

### 拉格朗日对偶问题

#### 问题对比

□  $d^*$ 与 $p^*$ 的大小关系

$$d^* = \max_{\alpha, \beta: \alpha_i \geq 0} \min_w \mathcal{L}(w, \alpha, \beta) \leq \min_w \max_{\alpha, \beta: \alpha_i \geq 0} \mathcal{L}(w, \alpha, \beta) = p^*$$

□ 证明

$$\theta_{\mathcal{D}}(\alpha, \beta) = \min_w \mathcal{L}(w, \alpha, \beta) \leq \mathcal{L}(w, \alpha, \beta) \leq \max_{\alpha, \beta: \alpha_i \geq 0} \mathcal{L}(w, \alpha, \beta) = \theta_{\mathcal{P}}(w), \quad \forall w, \alpha \geq 0, \beta$$

$$\Rightarrow \theta_{\mathcal{D}}(\alpha, \beta) \leq \theta_{\mathcal{P}}(w)$$

$$\Rightarrow \max_{\alpha, \beta: \alpha_i \geq 0} \theta_{\mathcal{D}}(\alpha, \beta) \leq \min_w \theta_{\mathcal{P}}(w)$$

□ 满足一定条件, 可得

$$d^* = p^*$$

□

## 4.2 支持向量机优化求解

### 拉格朗日对偶问题

#### KKT条件 (Karush-Kuhn-Tucker conditions)

- ▣ 假设 $f$ 以及 $g_i$ 是凸函数, 并且 $h_i$ 为仿射函数, 且 $g_i$ 严格满足可行域
- ▣ 必然存在  $(w^*, \alpha^*, \beta^*)$ , 满足
  - $w^*$ 是原始问题的解
  - $\alpha^*, \beta^*$ 是对偶问题的解
  - 两个问题的解数值相等  $p^* = d^* = \mathcal{L}(w^*, \alpha^*, \beta^*)$
- ▣ 同时,  $(w^*, \alpha^*, \beta^*)$  满足KKT条件



## 4.2 支持向量机优化求解

### 拉格朗日对偶问题

#### 拉格朗日函数

#### KKT条件

$$\mathcal{L}(w, \alpha, \beta) = f(w) + \sum_{i=1}^k \alpha_i g_i(w) + \sum_{i=1}^l \beta_i h_i(w)$$

#### □ $(w^*, \alpha^*, \beta^*)$ 满足KKT条件

- $\frac{\partial}{\partial w_i} \mathcal{L}(w^*, \alpha^*, \beta^*) = 0, i = 1, \dots, n$
- $\frac{\partial}{\partial \beta_i} \mathcal{L}(w^*, \alpha^*, \beta^*) = 0, i = 1, \dots, l$
- $\alpha_i^* g_i(w^*) = 0, i = 1, \dots, k$
- $g_i(w^*) \leq 0, i = 1, \dots, k$
- $\alpha^* \geq 0, i = 1, \dots, k$
- 如果存在  $(w^*, \alpha^*, \beta^*)$  满足KKT条件，则这组参数同时也是原始问题以及对偶问题的解

KKT对偶互补条件

## 4.2 支持向量机优化求解

### REVIEW: 支持向量机优化目标

- 寻找一个使最小几何间隔达到最大值的分割超平面

$$\begin{aligned} \max_{\gamma, \omega, b} \quad & \gamma \\ \text{s.t.} \quad & y^{(i)}(w^T x^{(i)} + b) \geq \gamma, \quad i = 1, \dots, m \\ & \|\omega\| = 1 \quad (\text{非凸约束}) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \max_{\hat{\gamma}, w, b} \quad & \frac{\hat{\gamma}}{\|w\|} \quad (\text{非凸目标函数}) \\ \text{s.t.} \quad & y^{(i)}(w^T x^{(i)} + b) \geq \hat{\gamma} \\ & i = 1, \dots, m \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \min_{w, b} \quad & \frac{1}{2} \|w\|^2 \\ \text{s.t.} \quad & y^{(i)}(w^T x^{(i)} + b) \geq 1, \\ & i = 1, \dots, m \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \hat{\gamma} &= 1 \\ \max_{w, b} \quad & \frac{1}{\|w\|} \\ \text{s.t.} \quad & y^{(i)}(w^T x^{(i)} + b) \geq 1, \quad i = 1, \dots, m \end{aligned}$$

## 4.2 支持向量机优化求解

### 支持向量机优化目标

#### 目标函数

- 支持向量机的目标函数：寻找最优间隔分类器

$$\begin{aligned} \min_{w,b} \quad & \frac{1}{2} \|w\|^2 \\ \text{s.t.} \quad & y^{(i)}(w^T x^{(i)} + b) \geq 1, \quad i = 1, \dots, m \end{aligned}$$

- 重写约束条件

$$g_i(w) = -y^{(i)}(w^T x^{(i)} + b) + 1 \leq 0$$

- 对应标准优化形式

$$\begin{aligned} \min_w \quad & f(w) \\ \text{s.t.} \quad & g_i(w) \leq 0, \quad i = 1, \dots, k \\ & h_i(w) = 0, \quad i = 1, \dots, l \end{aligned}$$

## 4.2 支持向量机优化求解

### REVIEW: 拉格朗日对偶问题

#### 目标函数

#### □ 凸优化问题

$$\begin{aligned} \min_w \quad & f(w) \\ \text{s.t.} \quad & g_i(w) \leq 0, \quad i = 1, \dots, k \\ & h_i(w) = 0, \quad i = 1, \dots, l \end{aligned}$$

#### □ 拉格朗日函数

$$\mathcal{L}(w, \alpha, \beta) = f(w) + \sum_{i=1}^k \alpha_i g_i(w) + \sum_{i=1}^l \beta_i h_i(w)$$

#### □ 原始问题

$$\theta_{\mathcal{P}}(w) = \max_{\alpha, \beta: \alpha_i \geq 0} \mathcal{L}(w, \alpha, \beta)$$

- 对于不满足约束条件的 $w$ , 例如 $g_i(w) > 0$  或者  $h_i(w) \neq 0$ , 可得  $\theta_{\mathcal{P}}(w) = +\infty$

#### □ 定义原始问题的解为 $p^* = \min_w \theta_{\mathcal{P}}(w) = \min_w \max_{\alpha, \beta: \alpha_i \geq 0} \mathcal{L}(w, \alpha, \beta) \leftarrow$ 不好直接解

#### □ 定义对偶问题的解为 $d^* = \max_{\alpha, \beta: \alpha_i \geq 0} \min_w \mathcal{L}(w, \alpha, \beta) \leftarrow$ 容易直接解

## 4.2 支持向量机优化求解

### REVIEW: 拉格朗日对偶问题

#### □ $d^*$ 与 $p^*$ 的大小关系

$$d^* = \max_{\alpha, \beta: \alpha_i \geq 0} \min_w \mathcal{L}(w, \alpha, \beta) \leq \min_w \max_{\alpha, \beta: \alpha_i \geq 0} \mathcal{L}(w, \alpha, \beta) = p^*$$

#### □ 满足KKT条件, $d^* = p^*$ 成立, 这时解对偶问题就是解原问题

##### KKT条件

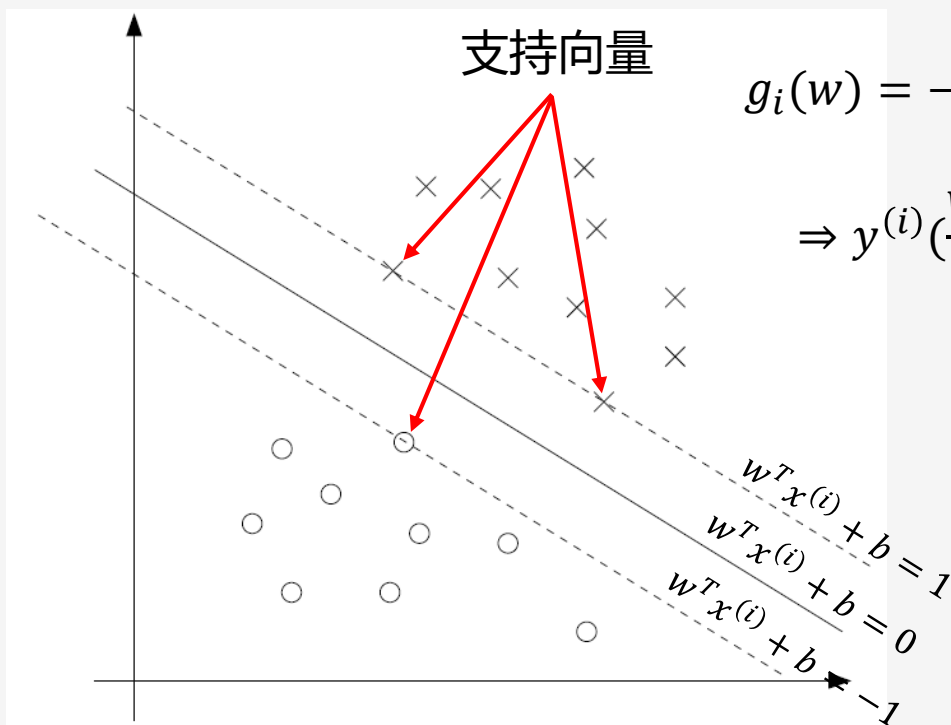
- $\frac{\partial}{\partial w_i} \mathcal{L}(w^*, \alpha^*, \beta^*) = 0, i = 1, \dots, n$
- $\frac{\partial}{\partial \beta_i} \mathcal{L}(w^*, \alpha^*, \beta^*) = 0, i = 1, \dots, l$
- $\alpha_i^* g_i(w^*) = 0, i = 1, \dots, k$
- $g_i(w^*) \leq 0, i = 1, \dots, k$
- $\alpha^* \geq 0, i = 1, \dots, k$

← KKT对偶互补条件

## 4.2 支持向量机优化求解

### 等式情况

- 对于不等式约束条件，考虑等号成立的情况



$$g_i(w) = -y^{(i)}(w^T x^{(i)} + b) + 1 = 0$$

$$\Rightarrow y^{(i)}\left(\frac{w^T x^{(i)}}{\|w\|} + \frac{b}{\|w\|}\right) = \frac{1}{\|w\|}$$

几何间隔

当 $g_i = 0$ 时，训练样本的函数间隔恰好等于1

## 4.2 支持向量机优化求解

### 目标函数

- 支持向量机的目标函数：寻找最优间隔分类器

$$\begin{aligned} \min_{w,b} \quad & \frac{1}{2} \|w\|^2 \\ \text{s.t.} \quad & -y^{(i)}(w^T x^{(i)} + b) + 1 \leq 0, \quad i = 1, \dots, m \end{aligned}$$

- 拉格朗日函数

$$\mathcal{L}(w, b, \alpha) = \frac{1}{2} \|w\|^2 - \sum_{i=1}^m \alpha_i [y^{(i)}(w^T x^{(i)} + b) - 1]$$

- 支持向量机中不存在 $\beta$ 或者等式约束

$$\begin{aligned} \square \text{ 原始问题} \quad & \theta_{\mathcal{P}}(w) = \max_{\alpha_i \geq 0} \mathcal{L}(w, b, \alpha) \quad \square \text{ 对偶问题} \quad \theta_{\mathcal{D}}(w) = \min_{w,b} \mathcal{L}(w, b, \alpha) \end{aligned}$$

## 4.2 支持向量机优化求解

### 问题求解

#### ▣ 求解拉格朗日对偶问题

$$\mathcal{L}(w, b, \alpha) = \frac{1}{2} \|w\|^2 - \sum_{i=1}^m \alpha_i [y^{(i)}(w^T x^{(i)} + b) - 1]$$

- 关于两个参数的偏导数

$$\frac{\partial}{\partial w} \mathcal{L}(w, b, \alpha) = w - \sum_{i=1}^m \alpha_i y^{(i)} x^{(i)} = 0 \Rightarrow w = \sum_{i=1}^m \alpha_i y^{(i)} x^{(i)}$$

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

- 重写拉格朗日函数

$$\mathcal{L}(w, b, \alpha) = \sum_{i=1}^m \alpha_i - \frac{1}{2} \sum_{i,j=1}^m y^{(i)} y^{(j)} \alpha_i \alpha_j x^{(i)T} x^{(j)} - b \sum_{i=1}^m \alpha_i y^{(i)}$$



## 4.2 支持向量机优化求解

### 问题求解

$$\begin{aligned}\mathcal{L}(w, b, \alpha) &= \frac{1}{2} \|w\|^2 - \sum_{i=1}^m \alpha_i [y^{(i)}(w^T x^{(i)} + b) - 1] \\&= \frac{1}{2} w^T w - \sum_{i=1}^m \alpha_i y^{(i)} w^T x^{(i)} - \sum_{i=1}^m \alpha_i y^{(i)} b + \sum_{i=1}^m \alpha_i \\&= \frac{1}{2} w^T \sum_{i=1}^m \alpha_i y^{(i)} x^{(i)} - w^T \sum_{i=1}^m \alpha_i y^{(i)} x^{(i)} - \sum_{i=1}^m \alpha_i y^{(i)} b + \sum_{i=1}^m \alpha_i \\&= -\frac{1}{2} w^T \sum_{i=1}^m \alpha_i y^{(i)} x^{(i)} - b \sum_{i=1}^m \alpha_i y^{(i)} + \sum_{i=1}^m \alpha_i \\&= -\frac{1}{2} \left( \sum_{i=1}^m \alpha_i y^{(i)} x^{(i)} \right)^T \sum_{i=1}^m \alpha_i y^{(i)} x^{(i)} - b \sum_{i=1}^m \alpha_i y^{(i)} + \sum_{i=1}^m \alpha_i \\&= -\frac{1}{2} \sum_{i=1}^m \alpha_i y^{(i)} (x^{(i)})^T \sum_{i=1}^m \alpha_i y^{(i)} x^{(i)} - b \sum_{i=1}^m \alpha_i y^{(i)} + \sum_{i=1}^m \alpha_i \\&= \sum_{i=1}^m \alpha_i - \frac{1}{2} \sum_{i,j=1}^m y^{(i)} y^{(j)} \alpha_i \alpha_j x^{(i)T} x^{(j)} - b \sum_{i=1}^m \alpha_i y^{(i)} = 0\end{aligned}$$

## 4.2 支持向量机优化求解

### 求解 $\alpha^*$

▣ 求解拉格朗日对偶问题

▣ 原始问题  $\theta_{\mathcal{P}}(w) = \max_{\alpha_i \geq 0} \mathcal{L}(w, b, \alpha)$

$$\max_{\alpha \geq 0} \theta_{\mathcal{D}}(\alpha) = \max_{\alpha \geq 0} \min_{w, b} \mathcal{L}(w, b, \alpha)$$

$$\max_{\alpha} W(\alpha) = \sum_{i=1}^m \alpha_i - \frac{1}{2} \sum_{i,j=1}^m y^{(i)} y^{(j)} \alpha_i \alpha_j x^{(i)T} x^{(j)}$$

$$\text{s.t. } \alpha_i \geq 0, \quad i = 1, \dots, m$$

$$\sum_{i=1}^m \alpha_i y^{(i)} = 0$$

▣ 可以使用序列最小优化 (SMO) 算法对 $\alpha^*$ 进行求解

## 4.2 支持向量机优化求解

### 求解 $w^*$ 和 $b^*$

- 当求解得到 $\alpha^*$ 以后,  $w^*$ 可以直接求解

$$w = \sum_{i=1}^m \alpha_i y^{(i)} x^{(i)}$$

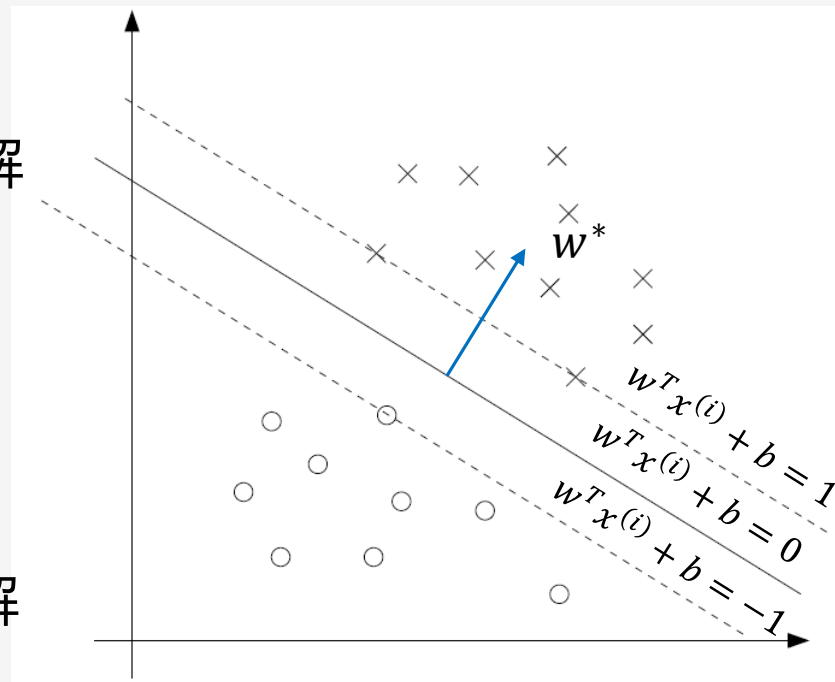
- 只有支持向量 $\alpha > 0$

- 当求解得到 $w^*$ 以后,  $b^*$ 可以直接求解

$$b^* = -\frac{\max_{i:y^{(i)}=-1} w^{*T} x^{(i)} + \min_{i:y^{(i)}=1} w^{*T} x^{(i)}}{2}$$

- 拉格朗日函数

$$\max_{\alpha_i \geq 0} \mathcal{L}(w, b, \alpha) = \max_{\alpha_i \geq 0} \frac{1}{2} \|w\|^2 - \sum_{i=1}^m \alpha_i [y^{(i)}(w^T x^{(i)} + b) - 1] \quad \frac{\partial}{\partial b} \mathcal{L}(w, b, \alpha) = \sum_{i=1}^m \alpha_i y^{(i)} = 0$$



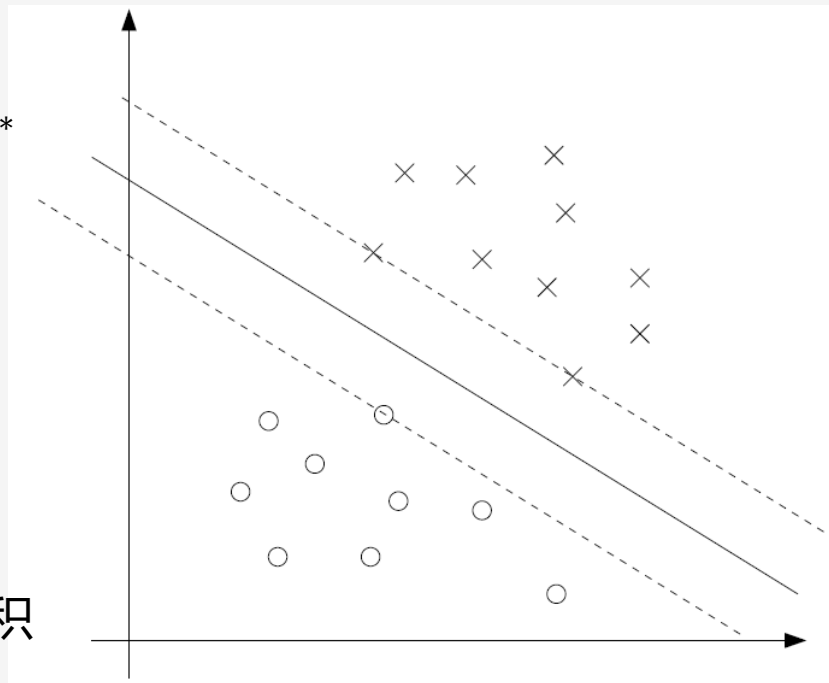
## 4.2 支持向量机优化求解

### 预测数值

■ 当求解得到 $w^*$ 和 $b^*$ 以后，每个样例的预测数值（如：函数间隔）为

$$\begin{aligned} f(x) &= w^{*T}x + b^* = \left( \sum_{i=1}^m \alpha_i y^{(i)} x^{(i)} \right)^T x + b^* \\ &= \sum_{i=1}^m \alpha_i y^{(i)} \langle x^{(i)}, x \rangle + b^* \end{aligned}$$

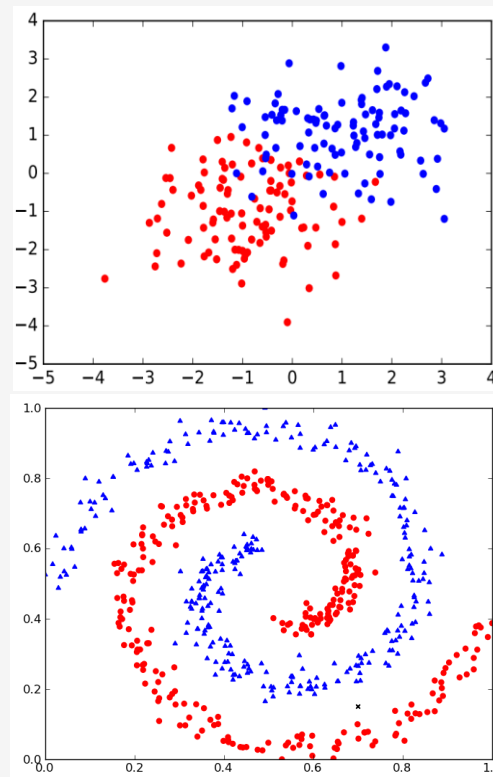
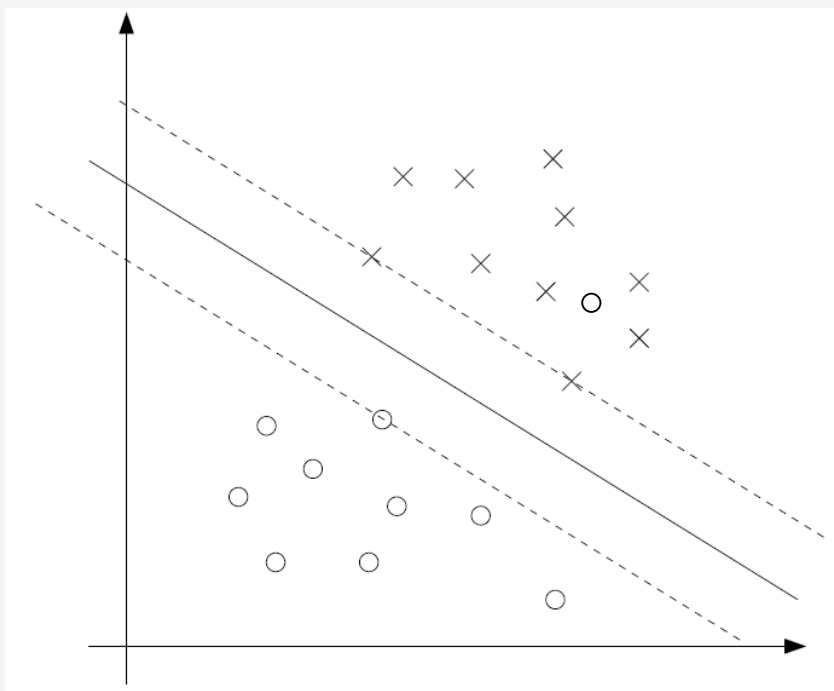
- 只需要计算样例 $x$ 与支持向量的内积



## 4.2 支持向量机优化求解

### 不可分情况

- 在之前支持向量机的推导过程中，数据被假定为线性可分的
- 应用场景中，数据往往是线性不可分的



## 4.2 支持向量机优化求解

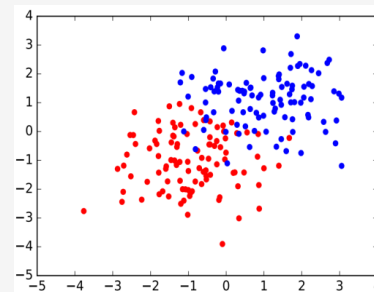
### 处理不可分情况

#### 增加松弛变量

$$\min_{w,b,\xi} \frac{1}{2} \|w\|^2 + C \sum_{i=1}^m \xi_i$$

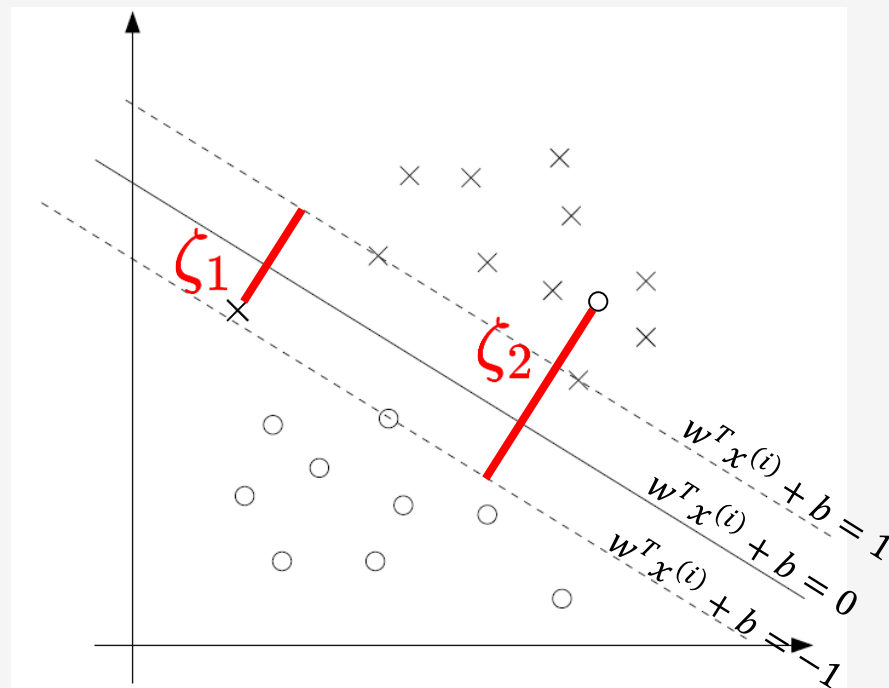
$$\text{s.t. } y^{(i)}(w^T x^{(i)} + b) \geq 1 - \xi_i, \quad i = 1, \dots, m$$

$$\xi_i \geq 0, \quad i = 1, \dots, m$$



□  $\xi$ : 衡量数据实例允许允许偏离函数间隔的程度。

□  $C$ : 控制在最大化间隔和最小化数据点偏差量之间的权衡



## 4.2 支持向量机优化求解

### 处理不可分情况

#### □ 增加松弛变量

$$\begin{aligned} \min_{w, b, \xi} \quad & \frac{1}{2} \|w\|^2 + C \sum_{i=1}^m \xi_i \\ \text{s.t.} \quad & y^{(i)}(w^T x^{(i)} + b) \geq 1 - \xi_i, \quad i = 1, \dots, m \\ & \xi_i \geq 0, \quad i = 1, \dots, m \end{aligned}$$

#### □ 拉格朗日函数

$$\mathcal{L}(w, b, \xi, \alpha, r) = \frac{1}{2} w^T w + C \sum_{i=1}^m \xi_i - \sum_{i=1}^m \alpha_i [y^{(i)}(x^T w + b) - 1 + \xi_i] - \sum_{i=1}^m r_i \xi_i$$

#### □ 对偶问题

$$\begin{aligned} \max_{\alpha} \quad & W(\alpha) = \sum_{i=1}^m \alpha_i - \frac{1}{2} \sum_{i,j=1}^m y^{(i)} y^{(j)} \alpha_i \alpha_j x^{(i)T} x^{(j)} \\ \text{s.t.} \quad & 0 \leq \alpha_i \leq C, \quad i = 1, \dots, m \\ & \sum_{i=1}^m \alpha_i y^{(i)} = 0 \end{aligned}$$

## 4.2 支持向量机优化求解

### 损失函数

#### 增加松弛变量

$$\min_{w,b,\xi} \frac{1}{2} \|w\|^2 + C \sum_{i=1}^m \xi_i$$

$$\text{s.t. } y^{(i)}(w^T x^{(i)} + b) \geq 1 - \xi_i, \quad i = 1, \dots, m$$

$$\xi_i \geq 0, \quad i = 1, \dots, m$$

#### 如果 $y^{(i)}(w^T x^{(i)} + b) \geq 1$ , 则

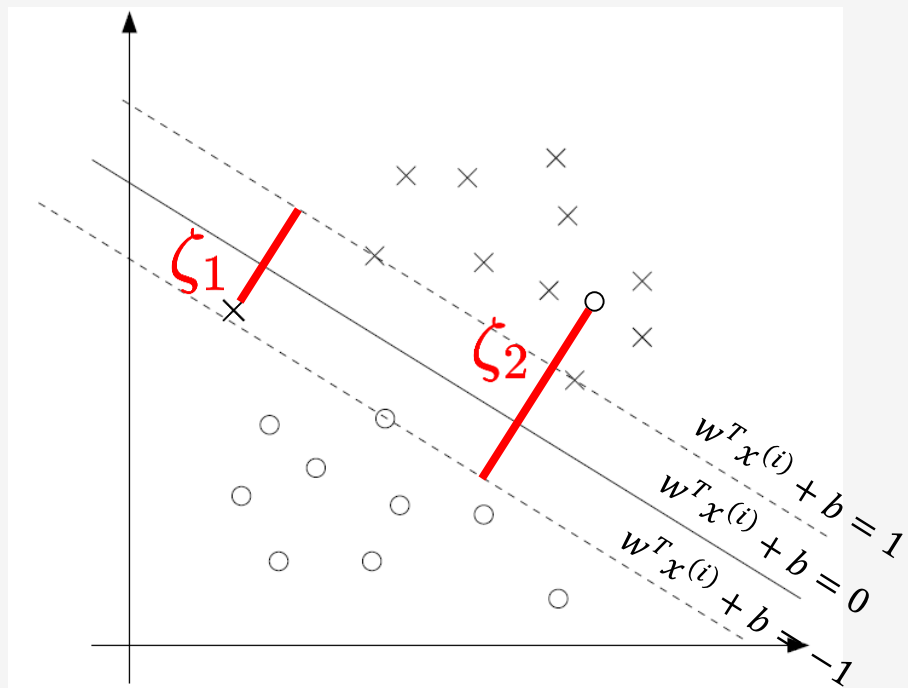
$$\xi_i = 0$$

#### 如果 $y^{(i)}(w^T x^{(i)} + b) < 1$ , 则

$$\xi_i = 1 - y^{(i)}(w^T x^{(i)} + b)$$

$$\Rightarrow \xi_i = \max\{0, 1 - y^{(i)}(w^T x^{(i)} + b)\}$$

支持向量机铰链损失 (Hinge Loss)





## 4.2 支持向量机优化求解

### 损失函数对比

支持向量机的铰链损失

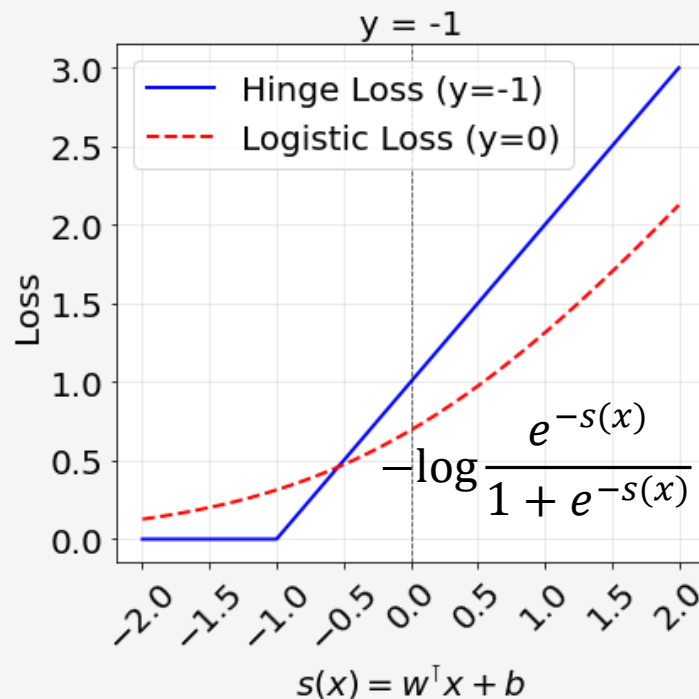
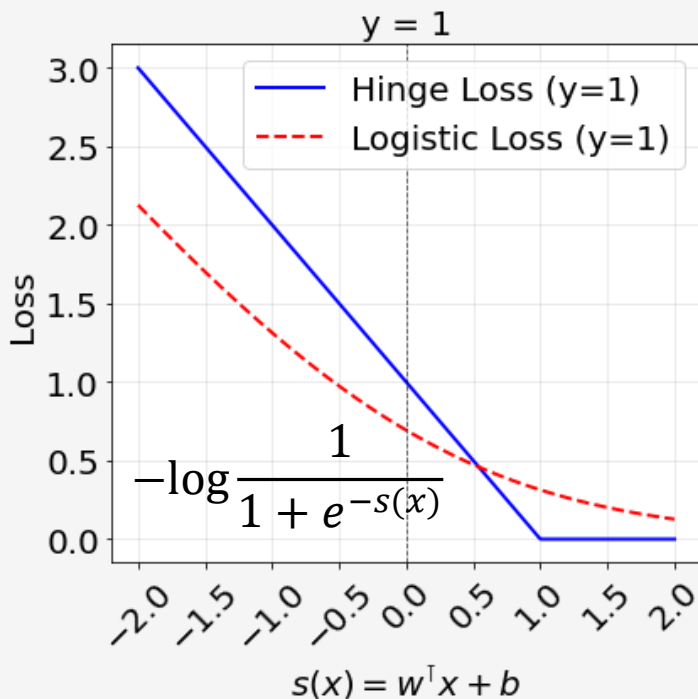
$$\frac{1}{2} \|w\|^2 + C \sum_{i=1}^m \max(0, 1 - y_i(w^\top x_i + b))$$

L2正则化

铰链损失

逻辑斯蒂回归的对数损失

$$-y_i \log \sigma(w^\top x_i + b) - (1 - y_i) \log (1 - \sigma(w^\top x_i + b)) + c \|w\|_q$$





西安交通大学  
XI'AN JIAOTONG UNIVERSITY

## 4.3 序列最小优化算法

## 4.3 序列最小优化算法

### 坐标上升法

#### □ 对于优化问题

$$\max_{\alpha} W(\alpha_1, \alpha_2, \dots, \alpha_m) \quad \leftarrow \quad \begin{aligned} \max_{\alpha} \quad & W(\alpha) = \sum_{i=1}^m \alpha_i - \frac{1}{2} \sum_{i,j=1}^m y^{(i)} y^{(j)} \alpha_i \alpha_j x^{(i)T} x^{(j)} \\ \text{s.t.} \quad & \alpha_i \geq 0, \quad i = 1, \dots, m \\ & \sum_{i=1}^m \alpha_i y^{(i)} = 0 \end{aligned}$$

#### □ 坐标上升法

循环直到收敛: {

对于  $i = 1, \dots, m$  {

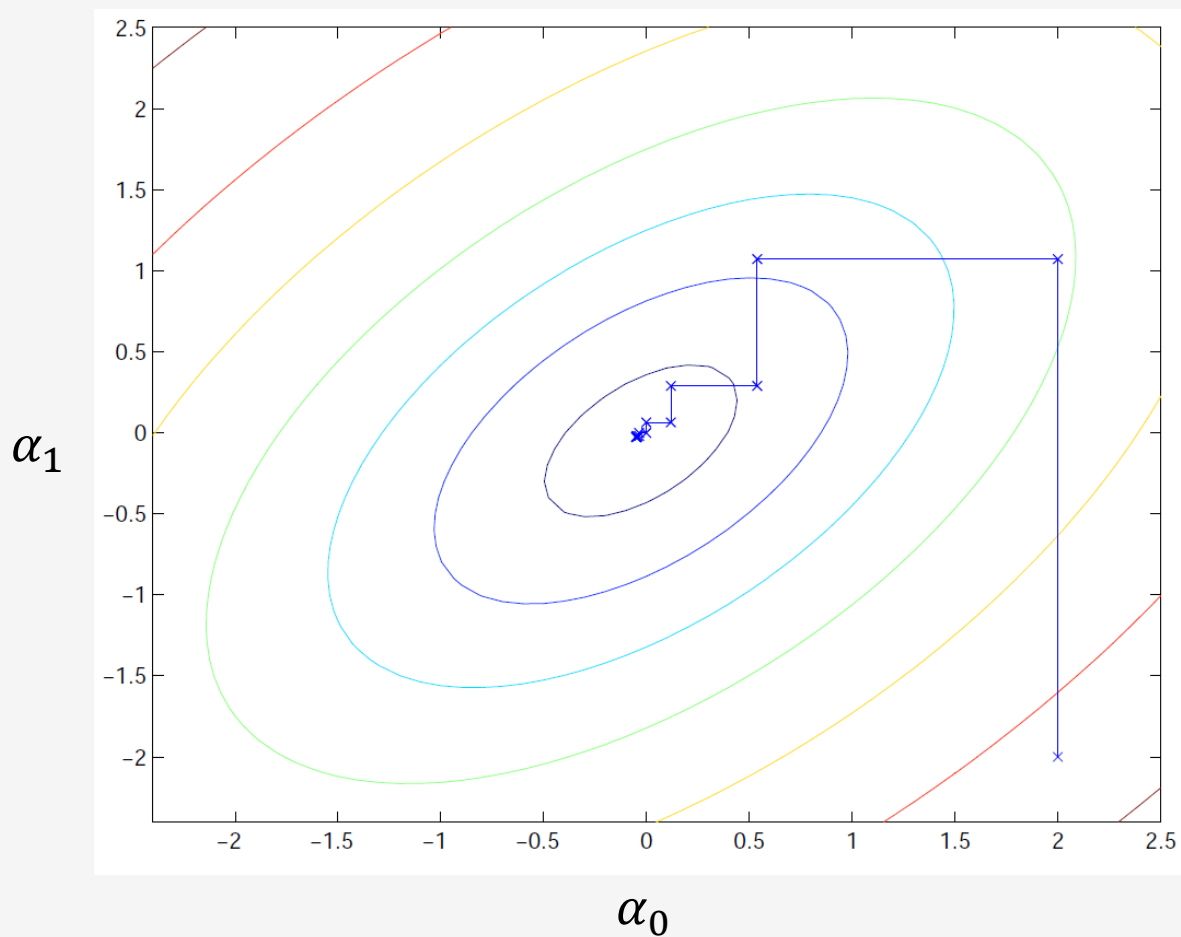
$$\alpha_i := \arg \max_{\hat{\alpha}_i} W(\alpha_1, \dots, \alpha_{i-1}, \hat{\alpha}_i, \alpha_{i+1}, \dots, \alpha_m)$$

}

}

## 4.3 序列最小优化算法

### 坐标上升法



二维坐标上升法样例

## 4.3 序列最小优化算法

### 序列最小优化 (SMO) 算法

#### □ 支持向量机的优化问题

$$\begin{aligned} \max_{\alpha} W(\alpha) &= \sum_{i=1}^m \alpha_i - \frac{1}{2} \sum_{i,j=1}^m y^{(i)} y^{(j)} \alpha_i \alpha_j x^{(i)T} x^{(j)} \\ \text{s.t. } 0 &\leq \alpha_i \leq C, \quad i = 1, \dots, m \\ \sum_{i=1}^m \alpha_i y^{(i)} &= 0 \end{aligned}$$

#### □ 无法直接使用坐标上升法

$$\sum_{i=1}^m \alpha_i y^{(i)} = 0 \Rightarrow \alpha_i y^{(i)} = - \sum_{j \neq i} \alpha_j y^{(j)}$$

## 4.3 序列最小优化算法

### 序列最小优化 (SMO) 算法

- 每次优化两个变量

循环直到收敛：{

1. 选取一组变量 $\alpha_i$ 和 $\alpha_j$ 进行更新
2. 以 $\alpha_i$ 和 $\alpha_j$ 为变量，对 $W(\alpha)$ 进行再次优化

}

- 收敛判别：当 $W(\alpha)$ 的变化小于一个预设值，如：0.01

- 序列最小优化算法核心优势：更新变量 $\alpha_i$ 和 $\alpha_j$ （步骤2）十分高效

## 4.3 序列最小优化算法

### 序列最小优化 (SMO) 算法

$$\max_{\alpha} W(\alpha) = \sum_{i=1}^m \alpha_i - \frac{1}{2} \sum_{i,j=1}^m y^{(i)} y^{(j)} \alpha_i \alpha_j x^{(i)T} x^{(j)}$$

$$\text{s.t. } 0 \leq \alpha_i \leq C, \quad i = 1, \dots, m$$

$$\sum_{i=1}^m \alpha_i y^{(i)} = 0$$

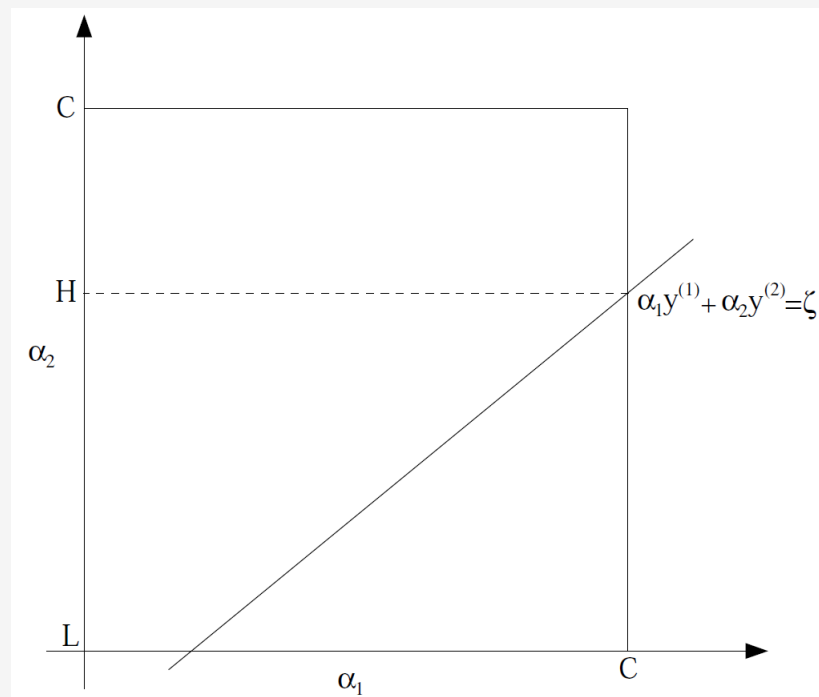
支持向量机的优化问题

□ 不失一般性，固定 $\alpha_3, \dots, \alpha_m$ ，以 $\alpha_1$ 和 $\alpha_2$ 为变量，对 $W(\alpha)$ 进行再次优化

$$\alpha_1 y^{(1)} + \alpha_2 y^{(2)} = - \sum_{i=3}^m \alpha_i y^{(i)} = \zeta$$

$$\Rightarrow \alpha_2 = -\frac{y^{(1)}}{y^{(2)}} \alpha_1 + \frac{\zeta}{y^{(2)}}$$

$$\alpha_1 = (\zeta - \alpha_2 y^{(2)}) y^{(1)}$$



## 4.3 序列最小优化算法

### 序列最小优化 (SMO) 算法

- 由  $\alpha_1 = (\zeta - \alpha_2 y^{(2)}) y^{(1)}$ , 优化目标函数可以重写为

$$W(\alpha_1, \alpha_2, \dots, \alpha_m) = W((\zeta - \alpha_2 y^{(2)}) y^{(1)}, \alpha_2, \dots, \alpha_m)$$

- 原始优化问题

$$\max_{\alpha} W(\alpha) = \sum_{i=1}^m \alpha_i - \frac{1}{2} \sum_{i,j=1}^m y^{(i)} y^{(j)} \alpha_i \alpha_j x^{(i)T} x^{(j)}$$

$$\text{s.t. } 0 \leq \alpha_i \leq C, \quad i = 1, \dots, m$$

$$\sum_{i=1}^m \alpha_i y^{(i)} = 0$$

- 转化为以  $\alpha_2$  为变量的二次优化问题

$$\max_{\alpha_2} W(\alpha_2) = a\alpha_2^2 + b\alpha_2 + c$$

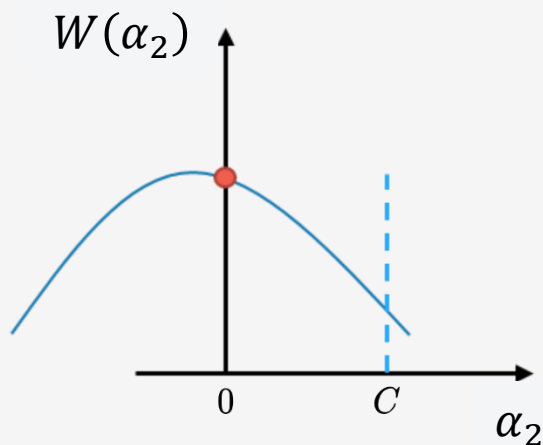
$$\text{s.t. } 0 \leq \alpha_2 \leq C$$



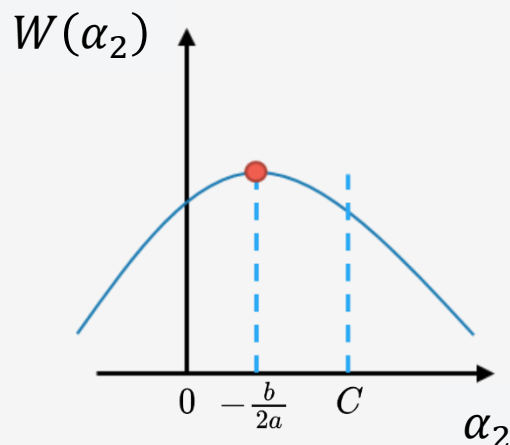
## 4.3 序列最小优化算法

### 序列最小优化 (SMO) 算法

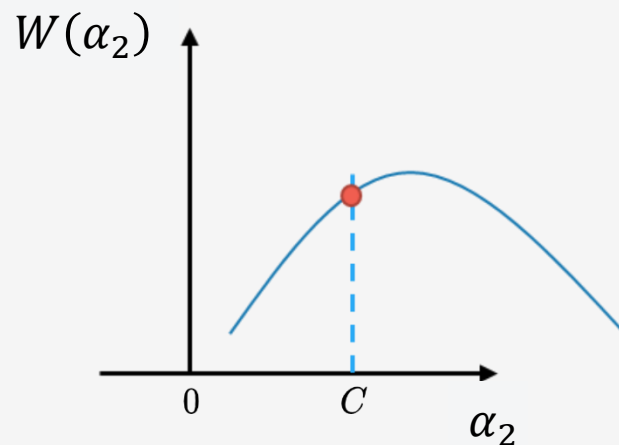
#### □ 二次函数的优化十分高效



(a)  $-\frac{b}{2a} < 0$



(b)  $0 \leq -\frac{b}{2a} \leq C$



(c)  $-\frac{b}{2a} > C$

$$\max_{\alpha_2} W(\alpha_2) = a\alpha_2^2 + b\alpha_2 + c$$

$$\text{s.t. } 0 \leq \alpha_2 \leq C$$



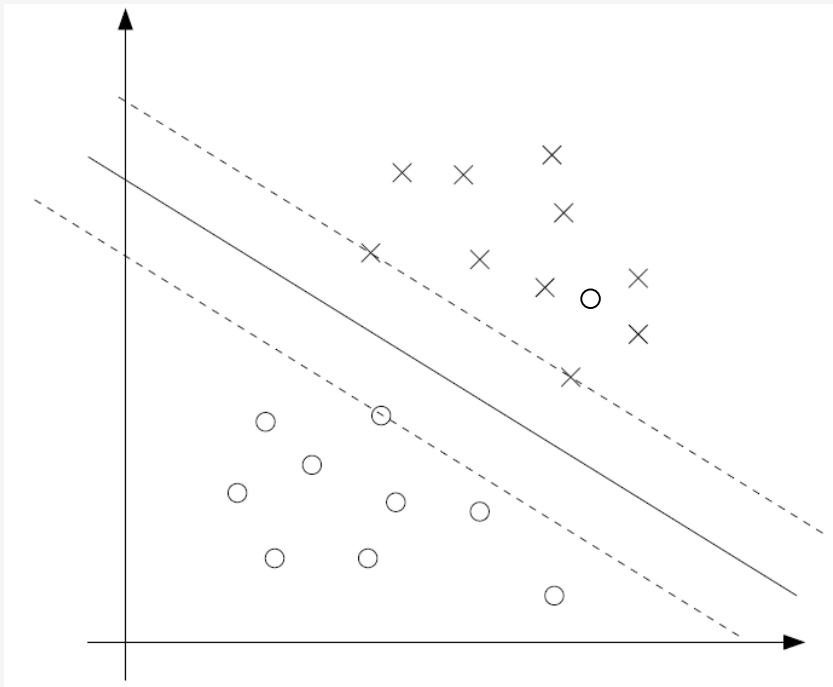
西安交通大学  
XI'AN JIAOTONG UNIVERSITY

## 4.4 支持向量机核方法

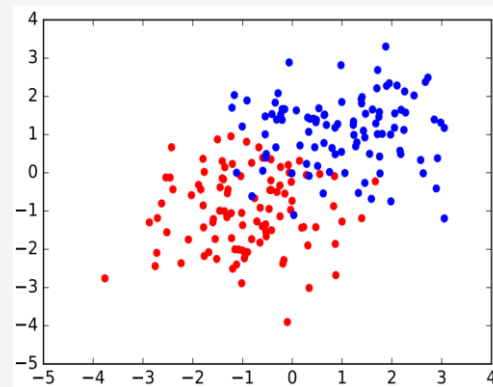
## 4.4 支持向量机核方法

### 不可分情况

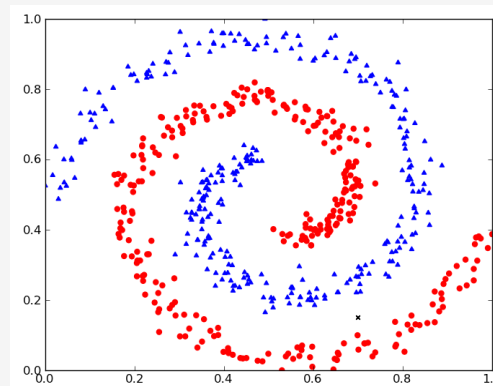
- 应用场景中，数据往往是线性不可分的



线性可分情况



通过松弛变量可解



无法通过松弛变量求解

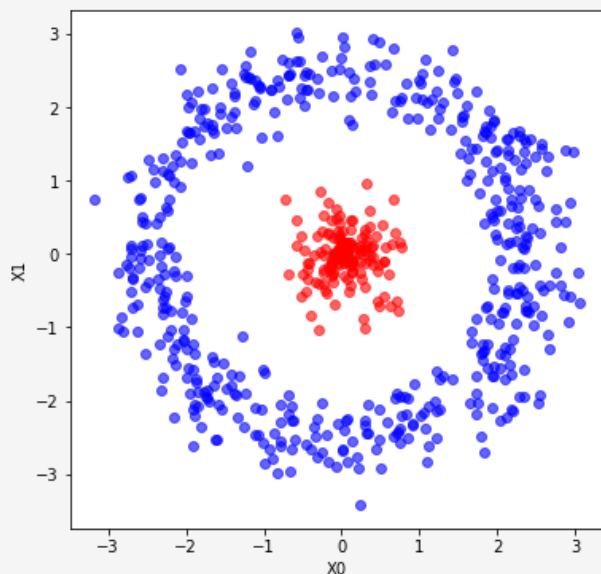
## 4.4 支持向量机核方法

### 不可分情况

- ▣ 应用场景中，数据往往是线性不可分的
- ▣ 解决方案：将特征向量映射到高维空间中

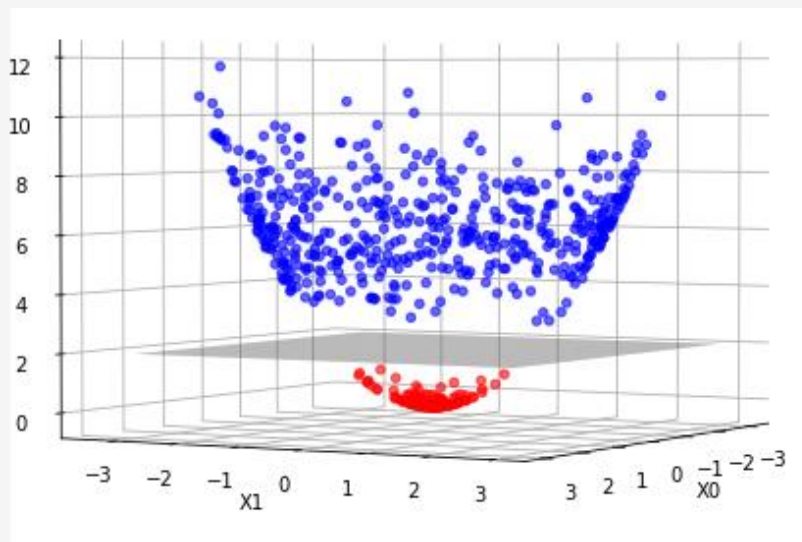
$$\phi(x)$$

- ▣ 一个例子



$$\phi(x) = (x_1, x_2, x_1^2 + x_2^2)$$

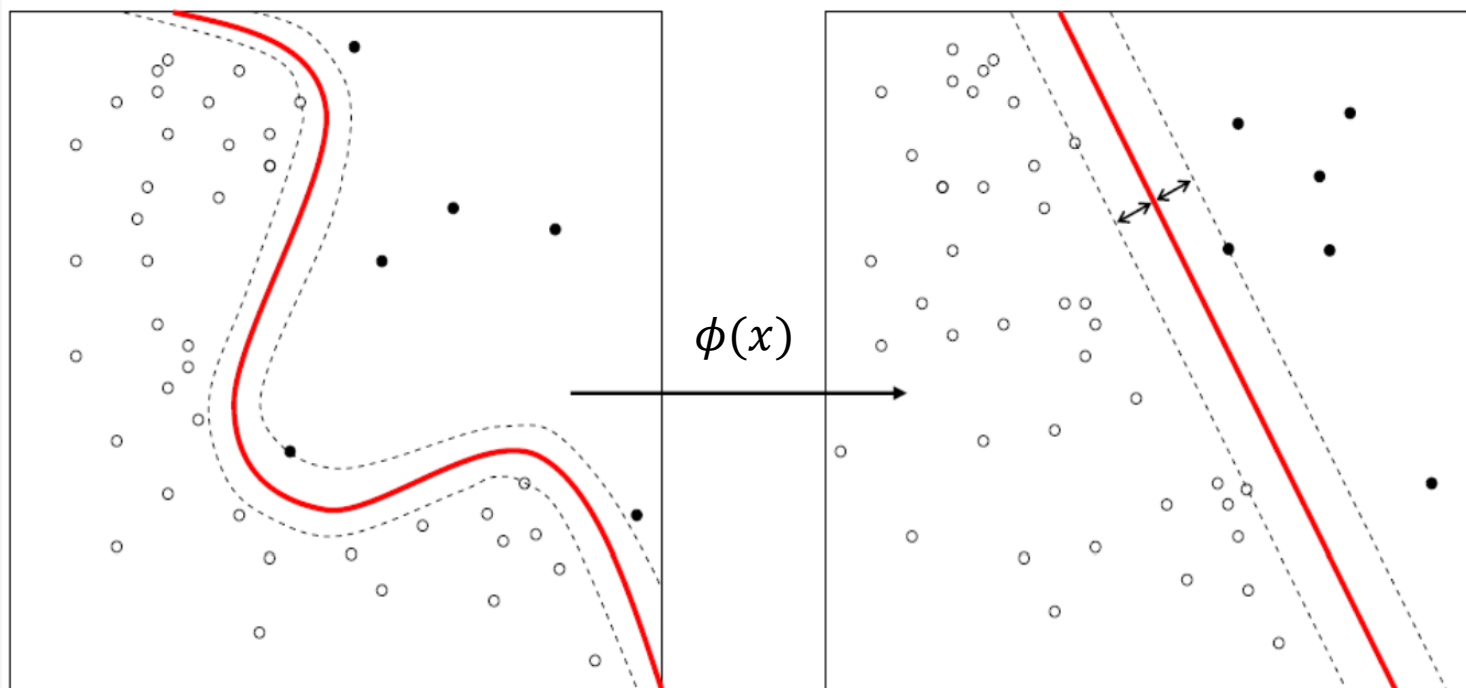
→



## 4.4 支持向量机核方法

### 不可分情况

- 更广义地，将特征向量映射到不同空间中



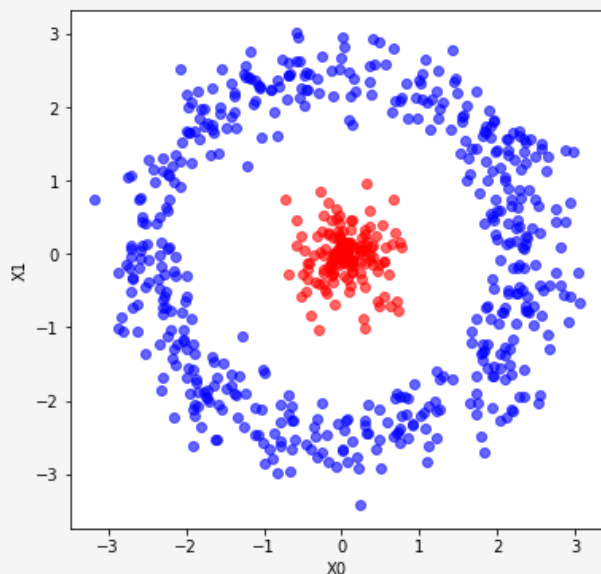
## 4.4 支持向量机核方法

### 不可分情况

- ▣ 应用场景中，数据往往是线性不可分的
- ▣ 解决方案：将特征向量映射到高维空间中

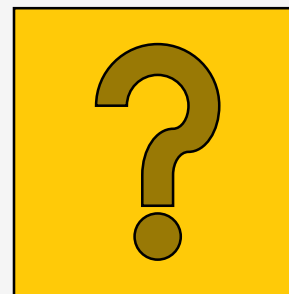
$$\phi(x)$$

- ▣ 一个例子



$$\phi(x)$$

任意高维空间



## 4.4 支持向量机核方法

### 特征映射函数

- 基础的支持向量机只着眼于内积计算

$$W(\alpha) = \sum_{i=1}^m \alpha_i - \frac{1}{2} \sum_{i,j=1}^m y^{(i)} y^{(j)} \alpha_i \alpha_j \mathbf{x}^{(i)T} \mathbf{x}^{(j)}$$

- 定义（隐式的）特征映射函数 $\phi(x)$

$$W(\alpha) = \sum_{i=1}^m \alpha_i - \frac{1}{2} \sum_{i,j=1}^m y^{(i)} y^{(j)} \alpha_i \alpha_j K(\mathbf{x}^{(i)}, \mathbf{x}^{(j)})$$

- 核函数

$$K(\mathbf{x}^{(i)}, \mathbf{x}^{(j)}) = \phi(\mathbf{x}^{(i)})^T \phi(\mathbf{x}^{(j)})$$

## 4.4 支持向量机核方法

### 核函数

- 对于特征映射函数

$$\phi(x) = \begin{bmatrix} x \\ x^2 \\ x^3 \end{bmatrix}$$

- 其对应核函数为

$$\begin{aligned} K(x^{(i)}, x^{(j)}) &= \phi(x^{(i)})^T \phi(x^{(j)}) \\ &= x^{(i)}x^{(j)} + x^{(i)2}x^{(j)2} + x^{(i)3}x^{(j)3} \end{aligned}$$

### 核技巧 (Kernel Trick)

- 在多数情况下，可以直接定义 $K(x^{(i)}, x^{(j)})$ ，从而不需要显式定义

$$\phi(x^{(i)})$$

- 例如，假定  $x^{(i)}, x^{(j)} \in \mathbb{R}^n$ ,  $K(x^{(i)}, x^{(j)}) = \left(x^{(i)T}x^{(j)}\right)^2$



## 4.4 支持向量机核方法

### 训练和预测

- 给定核函数,  $\alpha$  可以通过序列最小优化算法(SMO)求得

$$W(\alpha) = \sum_{i=1}^m \alpha_i - \frac{1}{2} \sum_{i,j=1}^m y^{(i)} y^{(j)} \alpha_i \alpha_j K(x^{(i)}, x^{(j)})$$

- 当求解得到  $\alpha$  以后,  $w^*$  和  $b^*$  可以进行求解

$$w^* = \sum_{i=1}^m \alpha_i y^{(i)} \phi(x^{(i)})$$

$w^*$  不需要被求解

$$b^* = - \frac{\max_{i: y^{(i)} = -1} w^{*T} \phi(x^{(i)}) + \min_{i: y^{(i)} = 1} w^{*T} \phi(x^{(i)})}{2}$$

$$= - \frac{\max_{i: y^{(i)} = -1} \sum_{i=1}^m \alpha_i y^{(i)} K(x^{(i)}, x^{(j)}) + \min_{i: y^{(i)} = 1} \sum_{i=1}^m \alpha_i y^{(i)} K(x^{(i)}, x^{(j)})}{2}$$

## 4.4 支持向量机核方法

### 训练和预测

- 当求解得到 $w^*$ 和 $b^*$ 以后，每个样例的预测数值（如：函数间隔）为

$$\max_{\alpha_i \geq 0} \mathcal{L}(w, b, \alpha) = \max_{\alpha_i \geq 0} \frac{1}{2} \|w\|^2 - \sum_{i=1}^m \alpha_i [y^{(i)}(w^T x^{(i)} + b) - 1]$$

$$\begin{aligned} w^{*T} x + b^* &= \left( \sum_{i=1}^m \alpha_i y^{(i)} \phi(x^{(i)}) \right)^T \phi(x) + b^* \\ &= \sum_{i=1}^m \alpha_i y^{(i)} K(x^{(i)}, x) + b^* \end{aligned}$$

- 假如预测数值为正，样例被预测为正例，反之亦然

注意：整个过程没有真正引入特征映射函数 $\phi(\cdot)$ 的计算

## 4.4 支持向量机核方法

### 根据核函数反算映射函数

▣ 假定  $x^{(i)}, x^{(j)} \in \mathbb{R}^n$

$$\begin{aligned} K(x^{(i)}, x^{(j)}) &= \left( x^{(i)T} x^{(j)} \right)^2 \\ &= \left( \sum_{k=1}^n x_k^{(i)} x_k^{(j)} \right) \left( \sum_{l=1}^n x_l^{(i)} x_l^{(j)} \right) \\ &= \sum_{k=1}^n \sum_{l=1}^n x_k^{(i)} x_k^{(j)} x_l^{(i)} x_l^{(j)} \quad \Rightarrow \quad \phi(x) = \begin{bmatrix} x_1 x_1 \\ x_1 x_2 \\ x_1 x_3 \\ x_2 x_1 \\ x_2 x_2 \\ x_2 x_3 \\ x_3 x_1 \\ x_3 x_2 \\ x_3 x_3 \end{bmatrix} \\ &= \sum_{k,l=1}^n \left( x_k^{(i)} x_l^{(i)} \right) \left( x_k^{(j)} x_l^{(j)} \right) \end{aligned}$$

注意：计算  $\phi(x)$  需要  $O(n^2)$  的时间复杂度

然而计算  $K(x^{(i)}, x^{(j)})$  仅仅需要  $O(n)$  的时间复杂度

## 4.4 支持向量机核方法

### 相似性度量

- 直观上对于 $x$ 和 $z$ 两个样例，如果 $\phi(x)$ 和 $\phi(z)$ 足够接近，我们希望

$$K(x, z) = \phi(x)^T \phi(z)$$

更大，反之亦然

- 高斯核函数（**十分常用**）

$$K(x, z) = \exp\left(-\frac{\|x - z\|^2}{2\sigma^2}\right)$$

- 也被称为径向基函数（**RBF**）核
- 那么，该核函数的特征映射函数是什么？

## 4.4 支持向量机核方法

### 核矩阵

- 对于有限样例集合 $\{x^{(1)}, \dots, x^{(m)}\}$ , 其对应的核矩阵 $K$ 定义为 $\{K_{i,j}\}_{i,j=1,\dots,m}$
- 核矩阵 $K$ 必定是对称矩阵, 由于

$$K_{i,j} = K(x^{(i)}, x^{(j)}) = \phi(x^{(i)})^T \phi(x^{(j)}) = \phi(x^{(j)})^T \phi(x^{(i)}) = K(x^{(j)}, x^{(i)}) = K_{j,i}$$

- 定义 $\phi_k(x)$ 为向量 $\phi(x)$ 的第 $k$ 维坐标值, 那么对于任何向量 $z \in \mathbb{R}^m$

$$\begin{aligned} z^T K z &= \sum_i \sum_j z_i K_{ij} z_j \\ &= \sum_i \sum_j z_i \phi(x^{(i)})^T \phi(x^{(j)}) z_j = \sum_i \sum_j z_i \sum_k \phi_k(x^{(i)}) \phi_k(x^{(j)}) z_j \\ &= \sum_k \sum_i \sum_j z_i \phi_k(x^{(i)}) \phi_k(x^{(j)}) z_j = \sum_k \left( \sum_i z_i \phi_k(x^{(i)}) \right)^2 \geq 0 \end{aligned}$$

- 因此,  $K$ 为半正定矩阵

## 4.4 支持向量机核方法

### 有效核

James Mercer  
英国数学家  
1883-1932



#### □ Mercer定理

- 给定 $K: \mathbb{R}^n \times \mathbb{R}^n \mapsto \mathbb{R}$ , 如果 $K$ 为一个有效 (Mercer) 核, 对于任意集合 $\{x^{(1)}, \dots, x^{(m)}\}, m < \infty$ , 其对应的核矩阵为对称半正定矩阵

#### □ 有效核举例

- RBF核
$$K(x, z) = \exp\left(-\frac{\|x - z\|^2}{2\sigma^2}\right)$$
- 多项式核
$$K(x, z) = (x^T z)^d$$
- 余弦相似度核
$$K(x, z) = \frac{x^T z}{\|x\| \cdot \|z\|}$$

## 4.4 支持向量机核方法

### Sigmoid核

$$K(x, z) = \tanh(\alpha x^T z + c)$$

$$\tanh(b) = \frac{1 - e^{-2b}}{1 + e^{-2b}}$$

- 神经网络使用Sigmoid函数作为激活函数
- 使用Sigmoid核的支持向量机类似于一个二层的感知机
  - 但二层感知机还可以学习



西安交通大学  
XI'AN JIAOTONG UNIVERSITY

# 总结



# 支持向量机总结

## 原始优化问题

$$\begin{aligned} \min_{w,b} \quad & \frac{1}{2} \|w\|^2 \\ \text{s.t.} \quad & y^{(i)}(w^T x^{(i)} + b) \geq 1, \\ & i = 1, \dots, m \end{aligned}$$

- ❑ 原始问题本身求解很方便
- ❑ 带线性不等式约束的凸优化问题
- ❑ 方便用标准求解器求解
- ❑ 参数化方法

## 对偶优化问题

$$\begin{aligned} \max_{\alpha} \quad & W(\alpha) = \sum_{i=1}^m \alpha_i - \frac{1}{2} \sum_{i,j=1}^m y^{(i)} y^{(j)} \alpha_i \alpha_j x^{(i)T} x^{(j)} \\ \text{s.t.} \quad & 0 \leq \alpha_i \leq C, \quad i = 1, \dots, m \\ & \sum_{i=1}^m \alpha_i y^{(i)} = 0 \end{aligned}$$

- ❑ 对偶问题通过SMO算法建模成 $\alpha$ 的二次函数，快速求解
- ❑ 更方便直接用代码手写完成
- ❑ 直接导出了核技巧
- ❑ 非参数化方法

# 支持向量机总结

- 支持向量机是一种线性模型，优化目标是最大化决策边界距离数据点的最小距离，由此获得更好的分类鲁棒性
- 支持向量机的原始问题可转化为一个二次函数优化问题，最终由序列最小优化算法来高效求解
- 当对原始特征数据做了映射变换，支持向量机可能可以处理高度线性不可分的情况，而使用核方法可以让研究者仅仅关注给定的两个数据点之间的相似性



西安交通大学  
XI'AN JIAOTONG UNIVERSITY

谢谢大家！

