第 5节 非线性分类问题

——核函数理论及应用

5.1 非线性问题分析

分类问题不一定是线性可分的。

要解决一个非线性分类问题，可以设法将其通过非线性变换，转化为高维空间中的线性问题，再在这个变换空间中求最优分类面。

那么，是否有必要显式地找到一个从低维向高维映射的函数呢？事实上，我们只需要在高维空间上定义变换后的内积运算，就可以对样本进行线性分类了。

在映射后得到的高维空间中，如果样本 $\Phi(x_i)$ 与样本 $\Phi(x_j)$ 的距离 $\|\Phi(x_i)-\Phi(x_j)\|$ 的值很小 (即样本点 $\Phi(x_i)$ 和 $\Phi(x_j)$ 很近)，那我们就可以把样本 x_i 和 x_j 分为同一类。

那么，在不知道映射函数 $\Phi(\cdot)$表达形式的条件下，能不能计算 $\|\Phi(x_i)-\Phi(x_j)\|$呢？核函数可以，它可以解决映射后高维空间样本距离 $\|\Phi(x_i)-\Phi(x_j)\|$的计算，同时又不显式地展示出映射函数 $\Phi(\cdot)$。

核函数通常可以表示为：

$$K(x_1, x_2) = \langle \Phi(x_1), \Phi(x_2) \rangle$$

从而有：

$$\left\| \Phi(x_1) - \Phi(x_2) \right\|^2$$

$$= \langle \Phi(x_1) - \Phi(x_2), \Phi(x_1) - \Phi(x_2) \rangle$$

$$= \langle \Phi(x_1), \Phi(x_1) \rangle - 2 \langle \Phi(x_1), \Phi(x_2) \rangle + \langle \Phi(x_2), \Phi(x_2) \rangle$$

$$= K(x_1, x_1) - 2K(x_1, x_2) + K(x_2, x_2)$$

例5.1：XOR问题

x（二维）$\rightarrow \phi(x)$（三维）

$x = (x^1, x^2)$

$$\phi(x) = (\phi_1(x), \phi_2(x), \phi_3(x)) = \left((x^1)^2, (x^2)^2, \sqrt{2}x^1x^2\right)$$

线性不可分

$(0, 0) \rightarrow (0, 0, 0)$

$(1, 1) \rightarrow (1, 1, 2^{1/2})$

$(0, 1) \rightarrow (0, 1, 0)$

$(1, 0) \rightarrow (1, 0, 0)$

线性可分

XOR数据点从二维向三维空间映射，如图5.1所示。

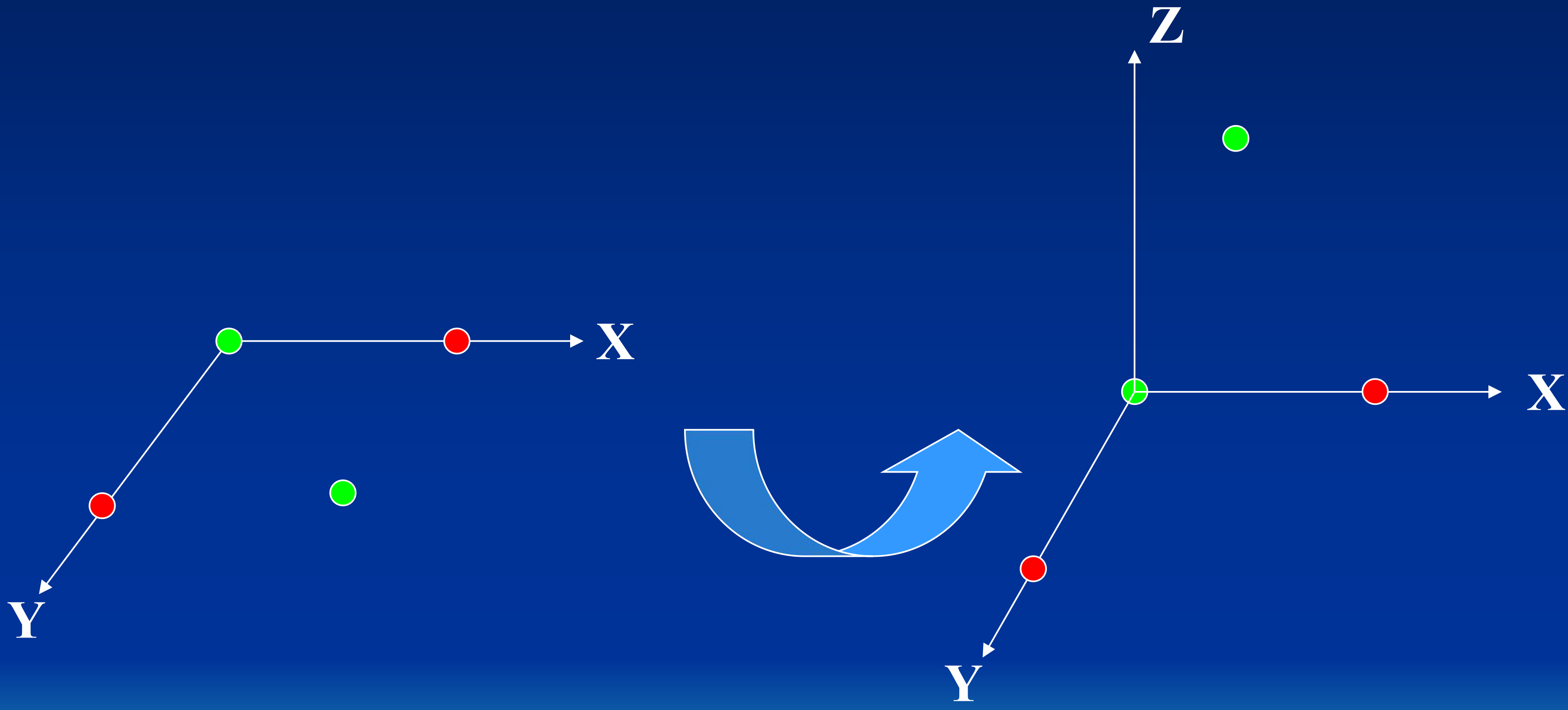


图5.1　XOR数据点从二维向三维映射示意图

5.1.1 核函数定义

设 X 是输入空间，H 是特征空间。如果存在一个从 X 到 H 的映射： $\varphi(x)$：$X \to H$

使得对所有 $x, z \in X$，函数 $K(x, z)$ 满足条件：

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

则称 $K(x, z)$ 为核函数， $\varphi(x)$ 为映射函数，式中 $\varphi(x) \cdot \varphi(z)$ 为 $\varphi(x)$ 和 $\varphi(z)$ 的内积。

5.1.2 核变换和特征空间

设 X 是 n 维向量，令

$$\Phi(X) = [\varphi_1(X), \varphi_2(X), \ldots\ldots, \varphi_M(X)]^T$$

表示从 n 维样本空间向 M 维特征空间的非线性变换。 M 维特征空间的维数较高，也称高维特征空间。

在 M 维特征空间中，如果特征数据可以线性分割，其分类面方程则可以表示为：

$$\sum_{j=1}^{M} W_j \cdot \varphi_j(X) + b = 0$$

其中，b 是分界面方程的偏置量(阈值)。

令 $\varphi_0(X)=1, W_0=b$，则有：

$$\sum_{j=0}^{M} W_j \cdot \varphi(X)=0$$

可写成：$W^{\mathrm{T}} \cdot \Phi(X)=0$

同理，在高维 M 特征空间中，权系数最优值为：

$$W=\sum_{i=1}^{n} \alpha_i \cdot y_i \cdot \Phi(X_i)$$

从而有变换特征空间的分类面为：

$$\sum_{i=1}^{n}\alpha_i\cdot y_i\cdot\Phi^{\mathrm{T}}(X_i)\cdot\Phi(X)=0$$

上式中， $\Phi^{\mathrm{T}}(X_i)\cdot\Phi(X)$ 表示第 i 个样本向量 X_i 在特征变换空间中的像 $\Phi^{\mathrm{T}}(X_i)$ 与输入向量 X 在特征变换空间中的像 $\Phi(X)$ 的内积。

从上面可知：在特征变换空间中构造线性分界面时，仅用特征变换空间的内积即可。

很明显，如果能找到一个函数 k，使得：

$$K(X,X_i)=\Phi^T(X)\cdot\Phi(X_i)=\sum_{j=1}^{M}\varphi_j(X)\cdot\varphi_j(X_i)$$

则在变换特征空间中建立分类面时，无需考虑变换 φ 的形式。$K(X,X_i)$ 称为内积核函数，可以用它来代替内积运算 $\Phi^{\mathrm{T}}(X_i)\cdot\Phi(X)$，此时对偶问题的目标函数可以改写为：

$$A(\alpha)=\frac{1}{2}\sum_{i=1}^{n}\sum_{j=1}^{n}\alpha_i\alpha_j y_i y_j K(x_i,x_j)-\sum_{i=1}^{n}\alpha_i$$

5.1.3 核函数的判定：

函数 $K(X, X_i)$ 满足什么条件才能成为核函数？

Mercer定理：

如果函数 $K(X, X_i)$ 是实数域上的一个有效核函数(也称为Mercer核函数)，那么当且仅当对于训练样例$\{x^{(1)}, x^{(2)}, \ldots, x^{(m)}\}$，其相应的内积矩阵是对称半正定的。

Mercer定理指出如何确定一个候选核是否是有效的核函数，但没有指出如何构造映射函数$\varphi_i(X)$。

5.1.4 常用的核函数：

对于核函数 $K(X, X^{\mathrm{T}})$，只要求它满足Mercer定理即可。因此，核函数可以有多种。常用的核函数有4种：

(1) 多项式核函数

$$K(X, X_i) = [(X \cdot X_i) + 1]^q$$

(2) Gauss核函数

$$K(X, X_i) = \exp(-\frac{|X - X_i|^2}{\sigma^2})$$

(3) Sigmoid核函数

$$K(X, X_i) = \tanh[v(X \cdot X_i) + c]$$

(4) 线性核函数

$$K(X, X_i) = X \cdot X_i$$

高斯核为什么可以映射到无限维：

高斯核函数：

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

指数函数的泰勒展开级数：

$$e^x = 1 + \frac{x}{1!} + \frac{x^2}{2!} + \frac{x^3}{3!} + \cdots = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{x^n}{n!}$$

则可得到：

$$K(X, X_i) = exp\left[-\frac{1}{\sigma^2}\langle X - X_i, X - X_i\rangle\right]$$

$$= exp\left[-\frac{1}{\sigma^2}\left(\|X\|^2 + \|X_i\|^2 - 2X^T X_i\right)\right]$$

$$= exp\left(-\frac{\|X\|^2}{\sigma^2}\right) * exp\left(-\frac{\|X_i\|^2}{\sigma^2}\right) * exp\left(\frac{2X^T X_i}{\sigma^2}\right)$$

其中：

$$exp\left(-\frac{\|X\|^2}{\sigma^2}\right)=\sum_{n=0}^{\infty}\frac{\left(-\frac{\|X\|^2}{\sigma^2}\right)^n}{n!}$$

$$=\sum_{n=0}^{\infty}\frac{-\frac{1}{\sigma^2}\left(\|X_1\|^2+\|X_2\|^2+\cdots\|X_k\|^2\right)^n}{n!}$$

$X=(X_1,X_2,\ldots,X_k)^{\mathrm{T}}$

也就是说，$exp\left(-\frac{\|X\|^2}{\sigma^2}\right)$ 含有了无穷多项的多项式，对应的映射将 k 维空间映射成了无限维空间。

5.1.5 如何选择正确的核函数:

核函数的选择包括两部分工作:

1) 核函数类型的选择;

2) 确定核函数类型后相关参数的选择。

目前,没有具体的理论或方法来指导核函数的选取,但在在选取核函数解决实际问题时,有些通常采用的方法。

a) 利用专家的先验知识预先选定核函数；

b) 分别试用不同的核函数，归纳误差最小的核函数就是最好的核函数。

例如，对傅立叶核、**RBF**核，结合信号处理问题中的函数回归问题，通过仿真实验，对比分析了在相同数据条件下，采用傅立叶核的**SVM**要比采用**RBF**核的**SVM**误差小很多。

c) 采用由**Smits**等人提出的混合核函数方法，将不同的核函数结合起来后会有更好的特性，这是混合核函数方法的基本思想。

5.2 非线性问题的支持向量机

支持向量机对非线性数据样本，采用核方法，即核函数映射等一系列非线性数据处理。

在本质上讲，核方法实现了样本空间、特征空间和类别空间之间的非线性变换。

设 X、X_i 为样本空间的样本，考虑对样本空间的非线性分类。样本空间到特征空间的映射函数为 Φ，则核方法的基础就是实现向量的内积变换，如下式所示：

$$(X, X_i) \to K(X, X_i) = \Phi(X) \cdot \Phi(X_i)$$

非线性变换$\Phi(\cdot)$相当复杂，但核函数$K(\cdot,\cdot)$则简单得多，在实际计算时，只用$K(\cdot,\cdot)$，而不需要用$\Phi(\cdot)$。

在线性分类中，有几个式子十分重要，分别是：

(1) Lagrange乘子寻优函数：

$$A(\alpha)=\sum_{i=1}^{n}\alpha_i-\frac{1}{2}\sum_{i=1}^{n}\sum_{j=1}^{n}\alpha_i\alpha_j y_i y_j X_i X_j$$

(2) 分类面函数：

$$d(X)=W^*\cdot X+b^*=\sum_{i=1}^{n}\alpha_i^* y_i X_i\cdot X+b^*$$

如果用核函数 $K(\cdot,\cdot)$ 取代上面两个公式中的 X 内积，很明显就相当于进行了从样本空间到特征空间的非线性变换，因为这种取代实现了核函数分解成内积的变换。

这时有非线性问题寻优和分类函数：

$$A(\alpha)=\sum_{i=1}^{n}\alpha_i-\frac{1}{2}\sum_{i=1}^{n}\sum_{j=1}^{n}\alpha_i\alpha_j y_i y_j\cdot K(X_i,X_j)$$

$$d(X)=\sum_{i=1}^{n}\alpha_i^{*}y_i\cdot K(X_i,X)+b^{*}$$

很明显，这也是一种线性分类，它就是非线性支持向量机，可以用结构图表示，如图5.2所示。它由一个三层的网络组成：输入层、中间层和输出层。

输入层是输入样本向量，中间层是基于 S 个支持向量 $X_i, i = 1, 2, \ldots, S$ 的非线性变换，即核函数 $K(X, X_i)$。

输出层是决策规则 $d(X)$。

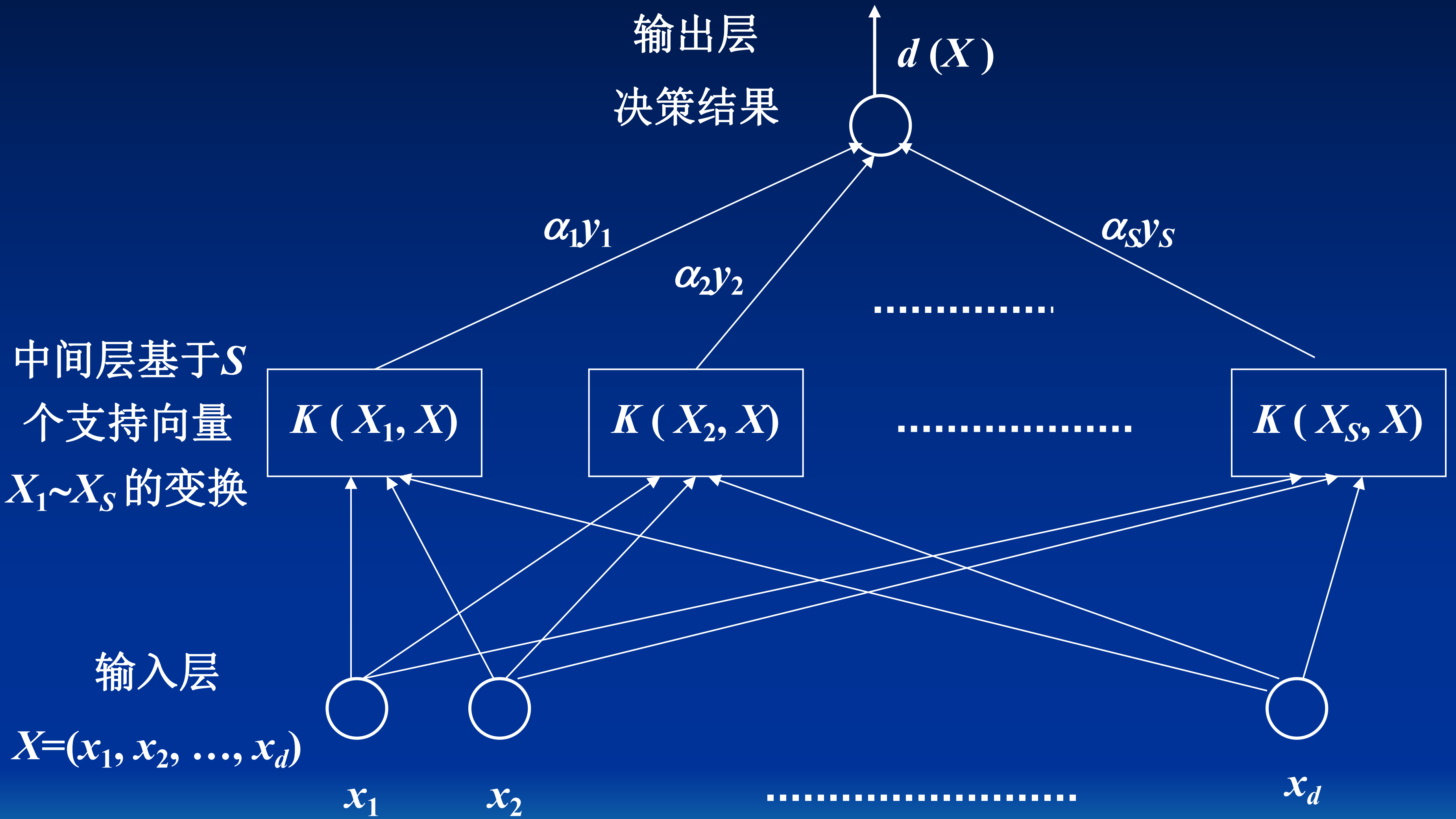


图5.2 非线性支持向量机网络结构示图

5.3 非线性支持向量机实例

在实际应用中，用支持向量机求分类问题步骤如下：

1. 选择适当核函数 $K(\cdot,\cdot)$；
2. 求解寻优方程 $A(\alpha)$，得出Lagrange乘子 α_i，$i=1, 2, \ldots$ 和 $\alpha_i \neq 0$ 对应的支持向量；
3. 给出最优分类面方程：

$$d(X)=\sum_{i=1}^{n}\alpha_i^* y_i \cdot K(X_i, X)+b^*$$

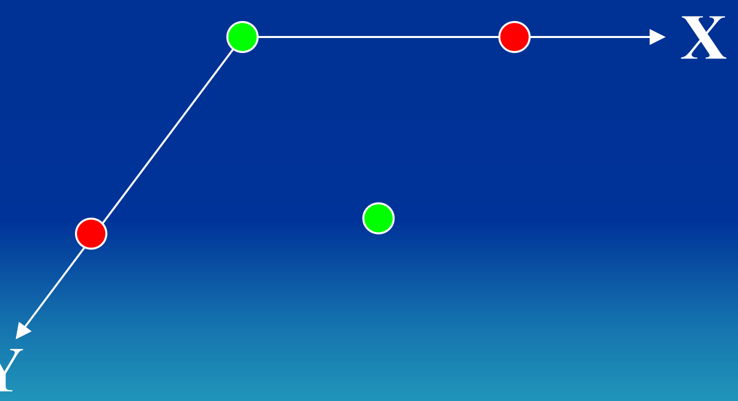
例5.2

XOR (异或) 分类问题：

$$X_1 = \{ (1, 0), (0, 1) \}$$

$$X_{-1} = \{ (1, 1), (0, 0) \}$$

求它们的最优分类面。



解：

1. 选择核函数：选择以下的非线性映射将二维数据映射到三维特征空间：

$$\varphi(x_i)=(z_{i1},z_{i2},z_{i3})=(x_{i1},x_{i2},x_{i1}\cdot x_{i2})$$

$x_{i1}(z_{i1})$	$x_{i2}(z_{i2})$	$x_{i1}\cdot x_{i2}(z_{i3})$	Label
1	0	0	1
0	1	0	1
1	1	1	-1
0	0	0	-1

2. 解寻优方程

首先求出三维空间中的核函数：

$$K(z_i, z) = \langle z_i, z \rangle$$

$$= \begin{vmatrix} 1 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 1 & 0 \\ 1 & 1 & 3 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{vmatrix}$$

接着，对Lagrange寻优函数求导以获得最优值 α^*：

$$A(\alpha)=\sum_{i=1}^{n}\alpha_i-\frac{1}{2}\sum_{i=1}^{n}\sum_{j=1}^{n}\alpha_i\alpha_j y_i y_j\cdot K(z_i,z_j)$$

得到相应的优化方程：

$$\begin{cases}\alpha_1-\alpha_3=1\\ \alpha_2-\alpha_3=1\\ \alpha_1+\alpha_2-3\alpha_3=-1\end{cases}$$

再加上约束：$\sum_{i=1}^{4}\alpha_i y_i=0$ 即：$\alpha_1+\alpha_2-\alpha_3-\alpha_4=0$

联立上述四个方程组成方程组，求解得到拉格朗日系数 α 的最优值为：

$$\begin{cases} \alpha_1 = 4 \\ \alpha_2 = 4 \\ \alpha_3 = 3 \\ \alpha_4 = 5 \end{cases}$$

说明此例中的四个样本都是支持向量。

3. 给出最优分类面方程：

① 根据最优权向量 W^* 的计算公式：

$$W^* = \sum_{i=1}^{n} \alpha_i y_i \varphi(z_i)$$

计算得出最优的权值向量 $W^* = [\,1 \;\; 1 \;\; -3\,]^T$

② 根据最优阈值 b^* 的计算公式：

$$b^* = -\frac{1}{2} W^* \cdot (z_i + z_j)$$

其中，z_i 和 z_j 是来自两个不同类的支持向量。计算得出最优阈值为：

$$b^* = -\frac{1}{2}$$

最优分界面方程为：

$$d(z)=W^{*}\cdot z+b^{*}=\begin{bmatrix}1 & 1 & -3\end{bmatrix}\cdot\begin{bmatrix}z_1\\ z_2\\ z_3\end{bmatrix}-\frac{1}{2}$$

$$=z_1+z_2-3z_3-\frac{1}{2}$$

映射回二维空间，可得：

$$x_1+x_2-3x_1\cdot x_2-\frac{1}{2}=0$$

如图5.3所示。

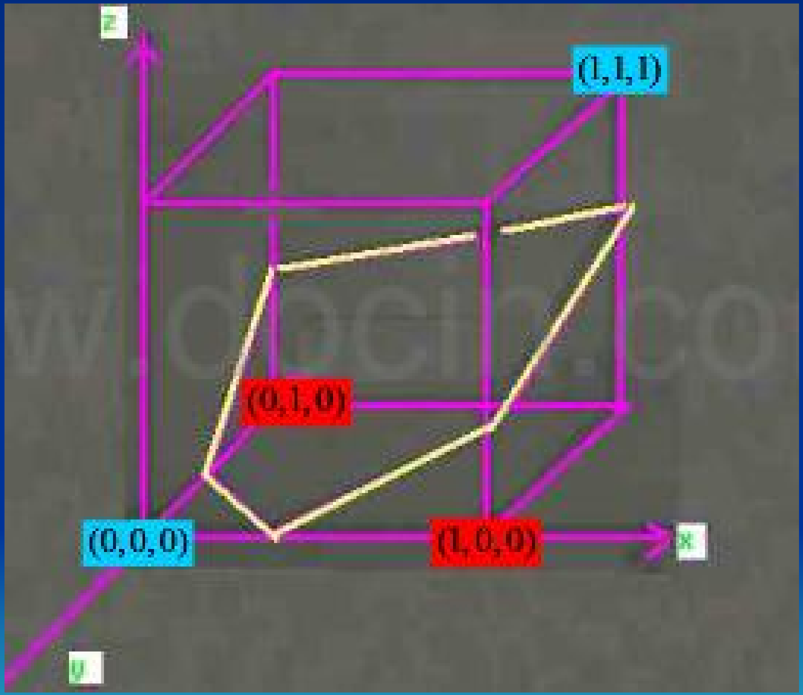


图5.3 XOR问题SVM解答示意图

例5.3 XOR问题的另一个核函数

输入向量 x	期望的类别 y
(+1， -1)	+1
(-1，+1)	+1
(-1， -1)	-1
(+1, +1)	-1

1、核函数取多项式核函数

$$K(x_i, x_j) = (1 + x_i^T x_j)^2$$

$$x_i = [x_{i1}, x_{i2}]^T$$

$$\boldsymbol{K(x_i, x_j) = 1 + x_{i1}^2 x_{j1}^2 + 2x_{i1}x_{i2}x_{j1}x_{j2} +}$$

$$\boldsymbol{x_{i2}^2 x_{j2}^2 + 2x_{i1}x_{j1} + 2x_{i2}x_{j2}}$$

多项式核的基函数：

多项式核函数展开后，可以得到基函数，也就是构成核函数的内积基。它把二维输入向量映射到高维特征空间。

$$K(x_i,x_j)=1+x_{i1}{}^2x_{j1}{}^2+2x_{i1}x_{i2}x_{j1}x_{j2}+x_{i2}{}^2x_{j2}{}^2+2x_{i1}x_{j1}+2x_{i2}x_{j2}$$

$$=\begin{pmatrix}1 & x_{i1}^2 & \sqrt{2}x_{i1}x_{i2} & x_{i2}^2 & \sqrt{2}x_{i1} & \sqrt{2}x_{i2}\end{pmatrix}\cdot\begin{pmatrix}1\\ x_{j1}^2\\ \sqrt{2}x_{j1}x_{j2}\\ x_{j2}^2\\ \sqrt{2}x_{j1}\\ \sqrt{2}x_{j2}\end{pmatrix}=\varphi(x_i)\cdot\varphi(x_j)^{\mathrm{T}}$$

所以，多项式核函数的内积基为：

$$\varphi(x_i) = [1, x_{i1}{}^2, \sqrt{2}x_{i1}x_{i2}, x_{i2}{}^2, \sqrt{2}x_{i1}, \sqrt{2}x_{i2}]^T$$

根据此特征基，每个二维空间的样本都可以映射成为六维空间中的一个向量。例如，$x_1 = (+1, -1)$ 这个向量可以映射为：

$$\varphi(x_1) = [\ 1,\ \ 1,\ -\sqrt{2},\ \ 1,\ \sqrt{2},\ -\sqrt{2}\ ]^T$$

$\varphi(x_2)$，$\varphi(x_3)$，$\varphi(x_4)$ 的计算类似可以完成。

2、求解寻优方程 $A(\alpha)$

首先计算高维 (本例是六维)空间中的核函数

$K(x_i, x_j)$，得到：

$$K = \begin{vmatrix} 9 & 1 & 1 & 1 \\ 1 & 9 & 1 & 1 \\ 1 & 1 & 9 & 1 \\ 1 & 1 & 1 & 9 \end{vmatrix}$$

接着，对Lagrange寻优函数求导以获得最优值 α^*：

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

得到相应的优化方程：

$$\begin{cases} 9\alpha_1 + \alpha_2 - \alpha_3 - \alpha_4 = 1 \\ \alpha_1 + 9\alpha_2 - \alpha_3 - \alpha_4 = 1 \\ \alpha_1 + \alpha_2 - 9\alpha_3 - \alpha_4 = -1 \\ \alpha_1 + \alpha_2 - \alpha_3 - 9\alpha_4 = -1 \end{cases}$$

再加上约束：

$$\sum_{i=1}^{4} \alpha_i y_i = 0 \quad 即：\alpha_1 + \alpha_2 - \alpha_3 - \alpha_4 = 0$$

联立上述五个方程组成方程组，求解得到拉格朗日系数 α 的最优值为：

$$
\begin{cases}
\alpha_1 = \dfrac{1}{8} \\
\alpha_2 = \dfrac{1}{8} \\
\alpha_3 = \dfrac{1}{8} \\
\alpha_4 = \dfrac{1}{8}
\end{cases}
$$

说明此例中的四个样本都是支持向量。

3. 给出最优分类面方程：

① 根据最优权向量 W^* 的计算公式：

$$W^* = \sum_{i=1}^{n} \alpha_i y_i \varphi(x_i)$$

计算得出最优的权值向量：$W^* = [0\ \ 0\ \ -1/\sqrt{2}\ \ 0\ \ 0\ \ 0]^{\mathrm{T}}$

② 根据最优阈值 b^* 的计算公式：

$$b^* = -\frac{1}{2} W^* \cdot [\varphi(x_i) + \varphi(x_j)]$$

其中，$\varphi(x_i)$ 和 $\varphi(x_j)$ 是高维空间中来自两个不同类的支持向量。计算得出最优阈值 $b^* = 0$

最优分界面方程为：

$$d\ [\varphi(x)] = W^{*} \cdot \varphi(x) + b^{*} = \begin{bmatrix} 0 & 0 & -\frac{1}{\sqrt{2}} & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} \varphi(x_1) \\ \varphi(x_2) \\ \varphi(x_3) \\ \varphi(x_4) \\ \varphi(x_5) \\ \varphi(x_6) \end{bmatrix} + 0$$

$$= -\frac{1}{\sqrt{2}} \varphi(x_3)$$

映射回二维空间，可得二维分界面为：

$$-x_1 \cdot x_2 = 0$$

例5.4 存在两类样本集：

$$SX_A = \{ (1, 1), (1, 4), (4, 1), (4, 4)\}$$

$$SX_B = \{ (2, 2), (2, 3), (3, 2), (3, 3)\}$$

求它们的最优分类面。

解：1. 选择核函数

选二阶多项式核函数：

$$K(X, X_i) = [(X \cdot X_i) + 1]^2$$

2. 解寻优方程

$$A(\alpha) = \sum_{i=1}^{8} \alpha_i - \frac{1}{2} \sum_{i=1}^{8} \sum_{j=1}^{8} \alpha_i \alpha_j y_i y_j K(X_i \cdot X_j)$$

从而求出最优的 α 值以及对应的支持向量 X_i^* 及分界面的最优权重 W^*、阈值 b^*。

3. 给出最优分类面方程：

$$d(X) = \sum_{i=1}^{8} \alpha_i^* y_i [(X_i \cdot X) + 1]^2 + b^*$$

计算得出分类面方程如下，结果如图5.4所示。

$$x_1^2 + x_2^2 - 5x_1 - 5x_2 + 10 = 0$$

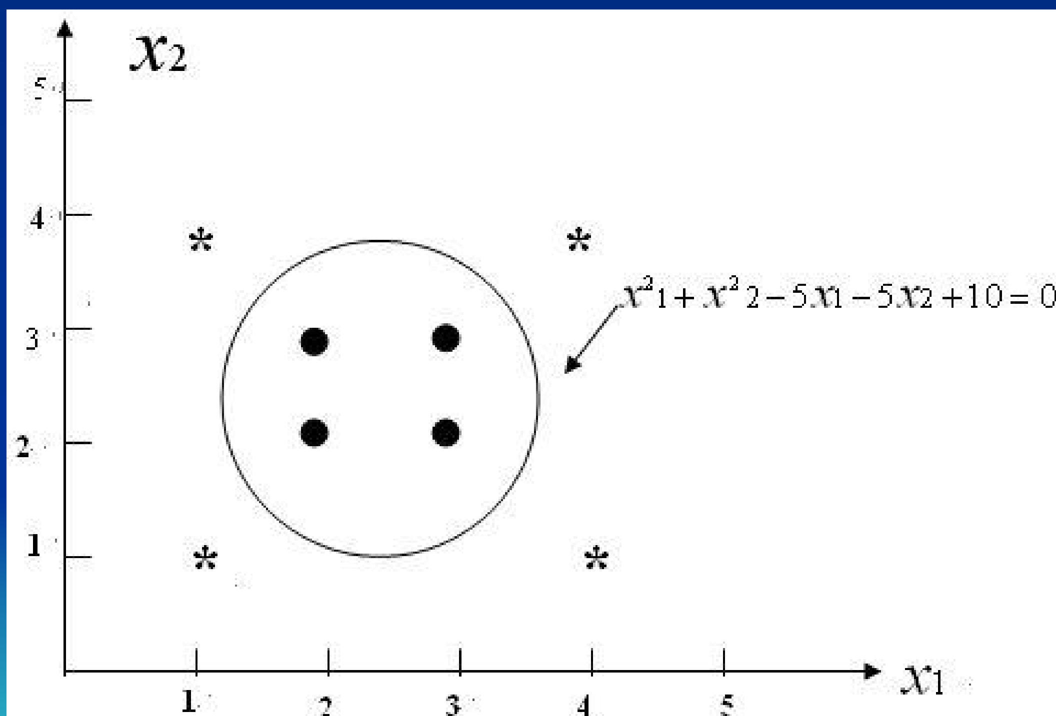


图5.4 例5.4解图