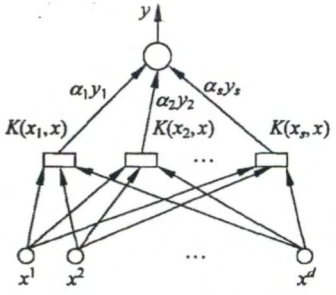
者累试的方法来选择核函数参数。比如，最流行的支持向量机软件之一 libSVM(见 5.5.4 小节)提供了一种功能，按照规定的网格自动用各种参数取值来进行试验，根据每个参数取值下的留一法交叉验证结果选择最佳的参数。

通常，对于很多应用来说，核函数参数的选择并不是十分困难，人们往往手工尝试几种选择便会找出比较合适的参数。一条基本的经验是，应该首先尝试简单的选择，比如首先尝试线性核，当结果不满意时才考虑非线性核；如果选择 RBF 核函数，则首先应该选用宽度比较大的核，即 σ 比较大，宽度越大越接近线性，然后再尝试减小宽度，增加非线性程度。

3. 核函数与相似性度量

支持向量机的基本思想可以概括为，首先通过非线性变换将输入空间变换到一个高维空间，然后在这个新空间中求最优分类面即最大间隔分类面，而这种非线性变换是通过定义适当的内积核函数实现的。

支持向量机求得的分类函数，形式上类似于一个神经网络，其输出是若干中间层节点的线性组合，而每一个中间层节点对应于输入样本与一个支持向量的内积，因此早期也被叫做支持向量网络，如图 5-21 所示。



输出(决策规则)：

$y=\mathrm{sgn}(\sum_{i=1}^{s}\alpha_i y_i K(x_i,x)+b)$

权值 $w_i=\alpha_i y_i$

基于 s 个支持向量 $x_1, x_2, \cdots, x_s$ 的非线性变换(内积)

输入向量 $x=[x^1, x^2 \cdots, x^d]$

图 5-21 支持向量机的决策函数

支持向量机的决策过程也可以看作是一种相似性比较的过程。首先，输入样本与一系列模板样本进行相似性比较，模板样本就是训练过程中决定的支持向量，而采用的相似性度量就是核函数。样本与各支持向量比较后的得分进行加权后求和，权值就是训练时得到的各支持向量的系数 α 与类别标号的乘积。最后根据加权求和值的大小来进行决策。

采用不同的核函数，可以看作是选择不同的相似性度量，线性支持向量机就是采用欧式空间中的内积作为相似性度量。根据这一思想，人们除了可以选择上面介绍的常用的核函数形式外，在一些实际问题中还可以根据相关领域的专门知识定义一些特殊的核函数。例如，人们在用支持向量机进行生物序列的分类时，可以根据专门的生物知识定义序列样本间的相似性度量，比如采用编辑距离作为相似性度量，这样构造的支持向量机能够更好地与专业知识相结合，往往可以取得更好的效果。①

需要注意的是，当选用新的核函数或自己定义核函数时，需要考虑所定义的核函数是否满足 Mercer 条件。如果不满足，则可能导致支持向量机的目标函数不再是凸函数，导致解

① 比如，这样的一个例子可以见 Li H and Jiang T. A class of edit kernels for SVMs to predict translation initiation sites in Eukaryotic mRNAs, *Journal of Computational Biology*, 2005,12(6): 702-718