## Support Vector Machines

André Hopfgartner & Matthias Rupp 08.06.2021

Vorarlberg University of Applied Sciences



### Agenda

- 1. Einführung
- 2. Hard-Margin Support Vector Machine
- 3. Lösung mittels QP-Solver
- 4. Soft-Margin Support Vector Machine
- 5. Vergleich Hard- & Soft-Margin Support Vector Machine
- 6. Nichtlineare Trennung
- 7. Pseudocode und Beispiele

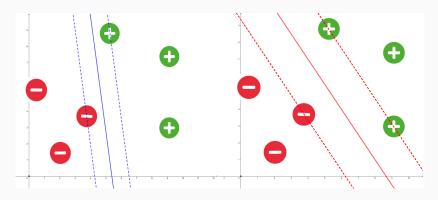
# Einführung

Ziel: lineare Trennung zweier Klassen

Ziel: lineare Trennung zweier Klassen Wie?: Definition einer (Hyper-) Ebene

Ziel: lineare Trennung zweier Klassen
Wie?: Definition einer (Hyper-) Ebene
Nebenbedingung: Möglichst großer freier Bereich

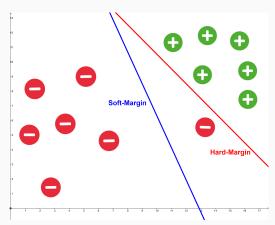
Ziel: lineare Trennung zweier Klassen
Wie?: Definition einer (Hyper-) Ebene
Nebenbedingung: Möglichst großer freier Bereich



### Arten von SVM

#### Arten von SVM:

- Hard-Margin SVM: Daten werden 100% korrekt getrennt
- Soft-Margin SVM: Einzelne Datenpunkte können falsch klassifiziert werden um insgesamt bessere Trennung zu erhalten



Hard-Margin Support Vector

Machine

### Mathematische Formulierung

Gegeben sei ein Gewichtsvektor  $w \in \mathbb{R}^K$ , ein Bias  $b \in \mathbb{R}$ , ein beliebiger Punkt  $x_n \in \mathbb{R}^K$  und ein zugehöriges Label  $y_n \in \{-1, +1\}$ . Eine Ebene im Raum kann allgemein definiert werden durch:

$$w^T x_n + b = 0$$

Ziel der SVM: w und b bestimmen für optimale Trennung

#### Klassifikation

Annahme: w und b bereits bekannt Wie klassifiziert man einen Punkt  $x_n$ ?

#### Klassifikation

Annahme: w und b bereits bekannt

Wie klassifiziert man einen Punkt  $x_n$ ?

Liegt  $x_n$  über oder unter Ebene = Vorzeichen:

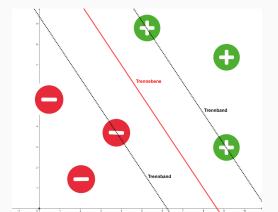
$$y = sign(w^Tx_n + b)$$
 ist gleichbedeutend mit  $w^Tx_n + b > 0$  für  $y_n = +1$   $w^Tx_n + b < 0$  für  $y_n = -1$ 

Bisher: Punkte können genau auf der Grenze liegen wenn  $w^Tx_n + b = 0$ 

### Einführung eines Trennbandes

Striktere Regel: Um Ebene soll Band frei bleiben

$$w^T x_n + b \ge +1$$
 für  $y_n = +1$   
 $w^T x_n + b \le -1$  für  $y_n = -1$ 



### Einführung eines Trennbandes

Beidseitige Multiplikation mit  $y_n$ 

$$y_n(w^Tx_n + b) \ge 1$$
 für  $y_n = +1$   
 $y_n(w^Tx_n + b) \ge 1$  für  $y_n = -1$ 

### Einführung eines Trennbandes

Beidseitige Multiplikation mit  $y_n$ 

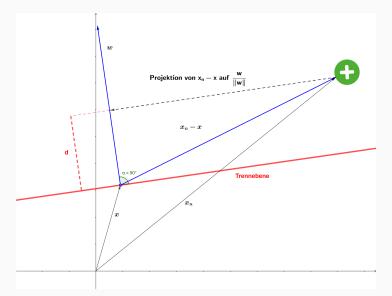
$$y_n(w^Tx_n + b) \ge 1$$
 für  $y_n = +1$   
 $y_n(w^Tx_n + b) \ge 1$  für  $y_n = -1$ 

Für den Fall, dass  $x_n = \hat{x}$  genau an der Grenze des Trennbands liegt, gilt somit:

$$y_n(w^T\hat{x}+b)=1$$

#### Normalabstand eines Punktes zur Ebene

Gesucht: Normalabstand d eines Punktes  $x_n \in \mathbb{R}^K$  zur Ebene

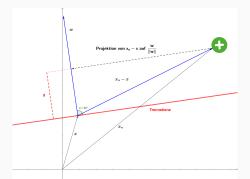


### Normalabstand eines Punktes zur Ebene

$$d = \left| \frac{w^{T}}{\|w\|} (x_{n} - x) \right| =$$

$$= \frac{1}{\|w\|} |(w^{T} x_{n} - w^{T} x)| =$$

$$= \frac{1}{\|w\|} |(w^{T} x_{n} + b - (w^{T} x + b))|$$



#### Normalabstand eines Punktes zur Ebene

$$d = \frac{1}{\|w\|} |(w^T x_n + b - (w^T x + b))|$$

Weil der Punkt x auf der Ebene liegt gilt  $w^Tx + b = 0$  und somit für den Normalabstand eines beliebigen Punktes  $x_n$ :

$$d = \frac{1}{\|w\|} |(w^T x_n + b)|$$

#### Breite des Trennbands

$$d = \frac{1}{\|w\|} |(w^T x_n + b)|$$

Annahme:  $x_n = \hat{x}$  ist der am nächsten zur Ebene liegende Punkt auf der Grenze des Trennbands

Weil  $y_n(w^T\hat{x} + b) = 1 = |w^T\hat{x} + b|$  gilt ergibt sich der minimale Normalabstand D:

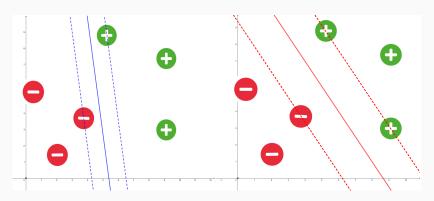
$$D = \frac{1}{\|w\|}$$

Weil D der minimale Normalabstand zur Ebene ist, ist 2D die Breite des freien Trennbands.

#### Reminder

Ziel: lineare Trennung mit möglichst breitem, freien Trennband Entspricht Maximierung:

$$\max_{w}(2D) = \max_{w} \frac{2}{\|w\|} = \max_{w} \frac{1}{\|w\|}$$



### Optimierungsproblem

$$\max_{w} \frac{1}{\|w\|}$$

$$\min_{n=1..N} |w^{T}x_{n} + b| = 1$$

$$\min_{n=1..N} |w^T x_n + b| = 1$$
 ist der am nächsten zur Ebene liegende Punkt  $\hat{x}$ 

Beidseitige Multiplikation mit  $y_n$  zur Vermeidung des Betrags:

$$|w^Tx_n+b|=y_n(w^Tx_n+b)$$

### Optimierungsproblem

Nach Umformung (Maximierung in Minimierung) und Verallgemeinerung der Nebenbedingung auf beliebige Punkte  $x_n$ :

$$\min_{w} \frac{1}{2} w^{T} w$$

$$\min_{w} y_{n}(w^{T} x_{n} + b) \ge 1 \text{ für } n = 1..N$$

#### Bemerkungen:

- Faktor  $\frac{1}{2}$  wird so gewählt weil dieser später wegfällt
- $w^T w$  und ||w|| sind aus Optimierungssicht gleichbedeutend, Problem ist in dieser Form aber besser optimierbar

## Lagrange Optimierung

Optimierungsproblem mit Ungleichung als Nebenbedingung Umformen der Nebenbedingung:

$$\min_{w} \frac{1}{2} w^{T} w$$

$$\min_{w} y_{n}(w^{T} x_{n} + b) - 1 \ge 0 \text{ für } n = 1..N$$

## Aufstellen der Lagrange Gleichung

Ungleichung wird von zu optimierender Funktion abgezogen und Lagrange Multiplikatoren eingeführt:

$$\min_{w,b} \qquad \mathcal{L}(w,b,\alpha) = \frac{1}{2} w^T w - \sum_{n=1}^{N} \alpha_n (y_n (w^T x_n + b) - 1)$$

$$\max_{\alpha_n} \qquad \alpha_n \ge 0 \text{ für } n = 1..N$$

Lösung durch 0 setzen der partiellen Ableitungen:

$$\nabla_{w}\mathcal{L} \stackrel{!}{=} \vec{0}$$
$$\frac{\partial}{\partial b}\mathcal{L} \stackrel{!}{=} 0$$

## Lösen der Lagrange Gleichung

Nach w:

$$\nabla_{w} \mathcal{L} = w - \sum_{n=1}^{N} \alpha_{n} y_{n} x_{n} \stackrel{!}{=} \vec{0}$$

$$w = \sum_{n=1}^{N} \alpha_{n} y_{n} x_{n}$$

Nach b:

$$\frac{\partial}{\partial b} \mathcal{L} = -\sum_{n=1}^{N} \alpha_n y_n \stackrel{!}{=} 0$$
$$\sum_{n=1}^{N} \alpha_n y_n = 0$$

## Rücksubstitution in Lagrange Gleichung

Aufteilen der Summe:

$$\mathcal{L}(w, b, \alpha) = \frac{1}{2} w^{T} w - \sum_{n=1}^{N} \alpha_{n} (y_{n}(w^{T} x_{n} + b) - 1) =$$

$$= \frac{1}{2} w^{T} w - [\sum_{n=1}^{N} \alpha_{n} y_{n} b - \sum_{n=1}^{N} \alpha_{n} + \sum_{n=1}^{N} \alpha_{n} y_{n} w^{T} x_{n}]$$

Aus Ableitung nach b wissen wir  $\sum_{n=1}^{N} \alpha_n y_n = 0$ :

$$\mathcal{L}(w, b, \alpha) = \frac{1}{2} w^T w - \left[ -\sum_{n=1}^{N} \alpha_n + \sum_{n=1}^{N} \alpha_n y_n w^T x_n \right]$$

### Rücksubstitution in Lagrange Gleichung

Vergleicht man den Term  $\sum_{n=1}^{N} \alpha_n y_n w^T x_n$  mit dem Ergebnis der partiellen Ableitung nach w ( $w = \sum_{n=1}^{N} \alpha_n y_n x_n$ ) erkennt man, dass gilt:

$$\sum_{n=1}^{N} \alpha_n y_n w^T x_n = w^T w =$$

$$= \sum_{n=1}^{N} \sum_{m=1}^{M} y_n y_m \alpha_n \alpha_m x_n^T x_m$$

Eingesetzt in Lagrange Gleichung:

$$\mathcal{L}(\alpha) = \sum_{n=1}^{N} \alpha_n - \frac{1}{2} \sum_{n=1}^{N} \sum_{m=1}^{M} y_n y_m \alpha_n \alpha_m x_n^T x_m$$

### Maximierung ohne Nebenbedingung

Quadratic Programming Problem  $(x_n^T x_m)$ :

$$\begin{aligned} \max_{\alpha} \qquad & \mathcal{L}(\alpha) = \sum_{n=1}^{N} \alpha_n - \frac{1}{2} \sum_{n=1}^{N} \sum_{m=1}^{M} y_n y_m \alpha_n \alpha_m x_n^T x_m \\ \min & \alpha_n \geq 0 \text{ für } n = 1..N \\ & \sum_{n=1}^{N} \alpha_n y_n = 0 \text{ für } n = 1..N \end{aligned}$$

Lösung mittels QP-Solver

Ergebnis:  $\alpha$  Vektor mit  $\alpha_n$  Lagrange-Multiplikatoren

### Schlupfterm

Reminder Ausgangsproblem:

$$\min_{w,b} \qquad \mathcal{L}(w,b,\alpha) = \frac{1}{2} w^T w - \sum_{n=1}^{N} \alpha_n (y_n (w^T x_n + b) - 1)$$

$$\max_{\alpha_n} \qquad \alpha_n \ge 0 \text{ für } n = 1..N$$

$$\alpha_n(y_n(w^Tx_n+b)-1)$$
 ("Schlupf") wird 0 wenn:

- $\alpha_n = 0$  oder
- $(y_n(w^Tx_n + b) 1) = 0$

Umgekehrt: Alle  $x_n$  mit  $\alpha_n \neq 0$  haben Schlupf 0, liegen also am nächsten zur Trennebene.

Diese Vektoren werden Stützvektoren genannt.

### Bestimmung Gewichtsvektor

 $\alpha$  Vektor mit  $\alpha_n$  Faktoren ist bekannt aus QP-Solver Viele  $\alpha_i$  werden 0 sein, die  $\alpha_i \neq 0$  gehören zu den Stützvektoren  $x_i$ . Damit kann Formel für w

$$w = \sum_{n=1}^{N} \alpha_n y_n x_n$$

vereinfacht werden:

$$w = \sum_{n \text{ ist S \"{u}tzvektor}} \alpha_n y_n x_n$$

Die Bezeichnung Stützvektor ergibt sich, weil die Ebene durch diese Vektoren "gestützt "wird. Alle Vektoren mit  $\alpha_n=0$  haben keinen Einfluss!

### **Bestimmung Bias**

 $y_n(w^Tx_n + b) = 1$  gilt für Stützvektoren, daher kann mit beliebigem Stützvektor  $x_n$  der Bias bestimmt werden:

$$b = \frac{1}{y_n} - w^T x_n =$$
$$= y_n - w^T x_n$$

Lösung mittels QP-Solver

### Lösung mittels QP-Solver

Standardform von QP-Problemen:

$$\min_{x} = \frac{1}{2}x^{T}Qx + cx + d$$

Umforming Maximierung in Minimierung weil  $\max -f(x) = \min f(x)$ :

$$\min_{\alpha} \mathcal{L}(\alpha) = \frac{1}{2} \sum_{n=1}^{N} \sum_{m=1}^{M} y_n y_m \alpha_n \alpha_m x_n^T x_m - \sum_{n=1}^{N} \alpha_n$$

### Problem in QP-Standardform

$$\min_{\alpha} \mathcal{L}(\alpha) = \frac{1}{2} \sum_{n=1}^{N} \sum_{m=1}^{M} y_n y_m \alpha_n \alpha_m x_n^T x_m - \sum_{n=1}^{N} \alpha_n$$

In QP-Standardform  $\rightarrow$  Lösungs-Frameworks:

### Problem in QP-Standardform

$$\min_{\alpha} \mathcal{L}(\alpha) = \frac{1}{2} \sum_{n=1}^{N} \sum_{m=1}^{M} y_n y_m \alpha_n \alpha_m x_n^T x_m - \sum_{n=1}^{N} \alpha_n$$

In QP-Standardform  $\rightarrow$  Lösungs-Frameworks:

Q ist  $N \times N$  Matrix. Problematisch bei großen Trainingssets!

### Lösung mittels QP-Solver

Ergebnis des QP-Solvers:  $\alpha = (\alpha_1, \alpha_2, ..., \alpha_n)$ Berechnung von w und b wie zuvor gezeigt:

$$w = \sum_{n=1}^{N} \alpha_n y_n x_n$$

Mit beliebigem Stützvektor  $x_k$ :

$$b = \frac{1}{y_k} - w^T x_k$$

Klassifikation neuer Eingaben x:

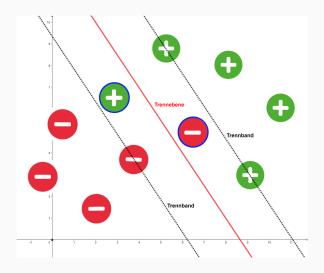
$$y = sign(w^T x + b)$$

Soft-Margin Support Vector

Machine

# Einführung Soft-Margin SVM

Annahme bisher: Daten linear trennbar ohne Fehler



# Einführung von Fehlervariablen

Problem: bisheriger Algorithmus terminiert nicht bei Fehlern Lösung: Einführung von positiven Fehlervariablen  $\xi_n \in \mathbb{R}^K, \xi_n \geq 0$ :

$$w^T x_n + b \ge +1 - \xi_n$$
 für  $y_n = +1$   
 $w^T x_n + b \le -1 + \xi_n$  für  $y_n = -1$ 

Wann kann einzelne Fehlklassifikation auftreten? Wenn  $\xi_n>1$ Obere Grenze Anzahl Fehler:

$$E = C(\sum_{n=1}^{N} \xi_n)$$

 $C \in \mathbb{R}, C \geq 0$ : "Straffaktor"für Fehler

# Erweiterung Optimierungsproblem um Fehlerterm

Ziel: Optimales w mit möglichst wenig Fehlern:

$$\min_{w} \frac{1}{2} w^{T} w + C(\sum_{n=1}^{N} \xi_{n})$$

$$\min_{w} y_{n}(w^{T} x_{n} + b) - 1 \ge 0 \text{ für } n = 1..N$$

Ableiten, 0 setzen und lösen wie zuvor...

# Soft-Margin SVM Optimierungsproblem

Soft-Margin Optimierungsproblem:

$$\max_{\alpha} \qquad \mathcal{L}(\alpha) = \sum_{n=1}^{N} \alpha_n - \frac{1}{2} \sum_{n=1}^{N} \sum_{m=1}^{M} y_n y_m \alpha_n \alpha_m x_n^T x_m$$
 mit 
$$0 \le \alpha_n \le C \text{ für } n = 1..N$$
 
$$\sum_{n=1}^{N} \alpha_n y_n = 0 \text{ für } n = 1..N$$

Einziger Unterschied zu Hard-Margin: Beschränkung  $\alpha_n \leq C$  (Hard-Margin:  $\alpha_n \leq \infty$ )

# Soft-Margin SVM Optimierungsproblem

Soft-Margin Optimierungsproblem:

$$\max_{\alpha} \qquad \mathcal{L}(\alpha) = \sum_{n=1}^{N} \alpha_n - \frac{1}{2} \sum_{n=1}^{N} \sum_{m=1}^{M} y_n y_m \alpha_n \alpha_m x_n^T x_m$$

$$\min \qquad 0 \le \alpha_n \le C \text{ für } n = 1..N$$

$$\sum_{n=1}^{N} \alpha_n y_n = 0 \text{ für } n = 1..N$$

Einziger Unterschied zu Hard-Margin: Beschränkung  $\alpha_n \leq C$  (Hard-Margin:  $\alpha_n \leq \infty$ )

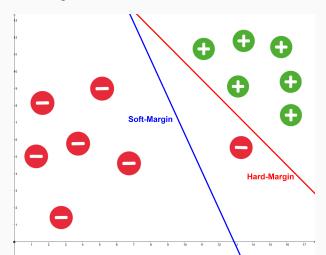
Umgekehrt: Soft-Margin mit  $C \to \infty$  entspricht Hard-Margin Lösung: Wie zuvor gezeigt mit QP-Solver

# Support Vector Machine

Vergleich Hard- & Soft-Margin

# Vergleich Hard- & Soft-Margin SVM

Hard-Margin: einzelne Ausreißer bestimmen Lage der Ebene Soft-Margin: Fehlklassifikationen zugunsten besserer Gesamt-Trennung



# A test with images

- Some
- text
- on left side of slide here...
- Abb. 1 zeigt blabla.

# A test with images

- Some
- text
- on left side of slide here..
- Abb. 1 zeigt blabla.

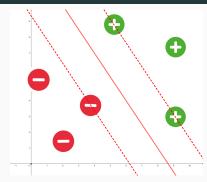


Abbildung 1: Abhängig von der Lage der Trennebene entstehen schmale (blau) oder breite (rot) Trennbänder. Ziel ist die Maximierung der Breite des Trennbands durch die Ermittlung der optimalen Lage der Trennebene.

#### citation tests

$$y = sign(w^Tx + b)$$
 gleichbedeutend mit (14a)  
 $w^Tx + b > 0$  für  $y = +1$  (14b)  
 $w^Tx + b < 0$  für  $y = -1$  (14c)

In Gleichung (14) wird .. Footcite example<sup>1</sup> Burges (1998)

<sup>&</sup>lt;sup>1</sup>Platt 1998.

Nichtlineare Trennung

# Einleitung

Ziel: nichtlineare Trennung

Problem: SVM trennt ausschließlich linear

# **Einleitung**

Ziel: nichtlineare Trennung

Problem: SVM trennt ausschließlich linear

Lösung: Transformation Eingabevektoren in linear trennbaren Raum

Transformationsfunktion  $\Phi(x) : \mathbb{R}^K \to \mathbb{R}^L$ 

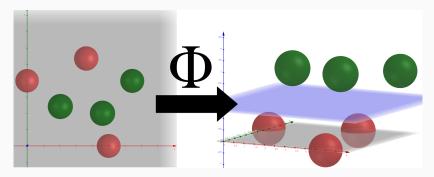


Abbildung 2: Transformation Eingabevektoren macht linear trennbar

Optimierungsproblem mit transformierten Eingabevektoren:

Optimierungsproblem mit transformierten Eingabevektoren:

$$\max_{\alpha} \qquad \mathcal{L}(\alpha) = \sum_{n=1}^{N} \alpha_n - \frac{1}{2} \sum_{n=1}^{N} \sum_{m=1}^{M} y_n y_m \alpha_n \alpha_m \Phi(x_n)^T \Phi(x_m)$$
mit 
$$0 \le \alpha_n \le C \text{ für } n = 1..N$$

$$\sum_{n=1}^{N} \alpha_n y_n = 0 \text{ für } n = 1..N$$

Optimierungsproblem mit transformierten Eingabevektoren:

$$\max_{\alpha} \qquad \mathcal{L}(\alpha) = \sum_{n=1}^{N} \alpha_n - \frac{1}{2} \sum_{n=1}^{N} \sum_{m=1}^{M} y_n y_m \alpha_n \alpha_m \Phi(x_n)^T \Phi(x_m)$$
mit  $0 \le \alpha_n \le C$  für  $n = 1..N$ 

$$\sum_{n=1}^{N} \alpha_n y_n = 0$$
 für  $n = 1..N$ 

Anzahl Lagrangefaktoren  $\alpha$  und Dimension der Q-Matrix hängen von Anzahl Eingabevektoren ab, nicht von der Dimension

Optimierungsproblem mit transformierten Eingabevektoren:

$$\max_{\alpha} \qquad \mathcal{L}(\alpha) = \sum_{n=1}^{N} \alpha_n - \frac{1}{2} \sum_{n=1}^{N} \sum_{m=1}^{M} y_n y_m \alpha_n \alpha_m \Phi(x_n)^T \Phi(x_m)$$
mit  $0 \le \alpha_n \le C$  für  $n = 1..N$ 

$$\sum_{n=1}^{N} \alpha_n y_n = 0$$
 für  $n = 1..N$ 

Anzahl Lagrangefaktoren  $\alpha$  und Dimension der Q-Matrix hängen von Anzahl Eingabevektoren ab, nicht von der Dimension => Zusatzkosten: Berechnung höherdimensionaler Skalarprodukte  $\Phi(x)^T\Phi(x)$ 

Problem 1: Wahl der Transformationsfunktion  $\Phi(x)$ 

Problem 1: Wahl der Transformationsfunktion  $\Phi(x)$ Problem 2: Eingabevektoren in sehr hochdimensionalen/unendlichen Raum transformiert ->

Berechnung Skalarprodukt sehr aufwändig/unmöglich

Problem 1: Wahl der Transformationsfunktion  $\Phi(x)$ 

Problem 2: Eingabevektoren in sehr

hochdimensionalen/unendlichen Raum transformiert ->

Berechnung Skalarprodukt sehr aufwändig/unmöglich

Erkenntnis 1: Transformation erlaubt Bestimmung nichtlinearer

Trenngrenzen

Problem 1: Wahl der Transformationsfunktion  $\Phi(x)$ 

Problem 2: Eingabevektoren in sehr

hochdimensionalen/unendlichen Raum transformiert ->

Berechnung Skalarprodukt sehr aufwändig/unmöglich

Erkenntnis 1: Transformation erlaubt Bestimmung nichtlinearer

Trenngrenzen

Erkenntnis 2: Dimension Vektoren beeinflusst Optimierungsproblem nicht stark

Problem 1: Wahl der Transformationsfunktion  $\Phi(x)$ 

Problem 2: Eingabevektoren in sehr

hochdimensionalen/unendlichen Raum transformiert ->

Berechnung Skalarprodukt sehr aufwändig/unmöglich

Erkenntnis 1: Transformation erlaubt Bestimmung nichtlinearer

Trenngrenzen

Erkenntnis 2: Dimension Vektoren beeinflusst Optimierungsproblem nicht stark

Verbesserung: Umgehung Zusatzkosten der transformierten

Skalarprodukte => Kernel Trick

Es gilt: 
$$z = \Phi(x)$$

$$\begin{aligned} \max_{\alpha} \qquad & \mathcal{L}(\alpha) = \sum_{n=1}^{N} \alpha_n - \frac{1}{2} \sum_{n=1}^{N} \sum_{m=1}^{M} y_n y_m \alpha_n \alpha_m z_n^{\mathsf{T}} z_m \\ \text{mit} \qquad & 0 \leq \alpha_n \leq C \text{ für } n = 1..N \\ & \sum_{n=1}^{N} \alpha_n y_n = 0 \text{ für } n = 1..N \end{aligned}$$

Es gilt:  $z = \Phi(x)$ 

$$\begin{aligned} \max_{\alpha} \qquad \mathcal{L}(\alpha) &= \sum_{n=1}^{N} \alpha_n - \frac{1}{2} \sum_{n=1}^{N} \sum_{m=1}^{M} y_n y_m \alpha_n \alpha_m z_n^T z_m \\ \text{mit} \qquad 0 &\leq \alpha_n \leq C \text{ für } n = 1..N \\ \sum_{n=1}^{N} \alpha_n y_n &= 0 \text{ für } n = 1..N \end{aligned}$$

Berechnung von w und b:

$$w = \sum_{n=1}^{N} \alpha_n y_n z_n$$
$$b = \frac{1}{v_k} - w^T z_k$$

Einführung einer Kernel-Funktion  $K(x,x')=z_1^Tz_2=\Phi(x)^T\Phi(x')$ 

Einführung einer Kernel-Funktion  $K(x,x')=z_1^Tz_2=\Phi(x)^T\Phi(x')$ Berechnet Skalarprodukt der transformierten Eingabevektoren Transformiert Eingabevektoren aber nicht tatsächlich in den neuen Raum

Einführung einer Kernel-Funktion  $K(x,x')=z_1^Tz_2=\Phi(x)^T\Phi(x')$ Berechnet Skalarprodukt der transformierten Eingabevektoren Transformiert Eingabevektoren aber nicht tatsächlich in den neuen Raum

Berechnung hochdimensionaler Skalarprodukte wird umgangen

Kernel-Funktion für  $x, x' \in \mathbb{R}^2$ :

$$K(x,x') = (1+x^Tx')^2 =$$

Kernel-Funktion für  $x, x' \in \mathbb{R}^2$ :

$$K(x, x') = (1 + x^T x')^2 =$$
  
=  $(1 + x_1 x'_1 + x_2 x'_2)^2 =$ 

Kernel-Funktion für  $x, x' \in \mathbb{R}^2$ :

$$K(x, x') = (1 + x^{T}x')^{2} =$$

$$= (1 + x_{1}x'_{1} + x_{2}x'_{2})^{2} =$$

$$= 1 + x_{1}^{2}x'_{1}^{2} + x_{2}^{2}x'_{2}^{2} + 2x_{1}x'_{1} + 2x_{2}x'_{2} + 2x_{1}x'_{1}x_{2}x'_{2}$$

Annahme für verwendete Transformationsfunktion Φ:

$$\Phi(x) = (1, x_1^2, x_2^2, \sqrt{2}x_1, \sqrt{2}x_2, \sqrt{2}x_1x_2)$$

Annahme für verwendete Transformationsfunktion Φ:

$$\Phi(x) = (1, x_1^2, x_2^2, \sqrt{2}x_1, \sqrt{2}x_2, \sqrt{2}x_1x_2)$$

$$\Phi(x) = (1, x_1^2, x_2^2, \sqrt{2}x_1, \sqrt{2}x_2, \sqrt{2}x_1x_2)$$

Annahme für verwendete Transformationsfunktion Φ:

$$\Phi(x) = (1, x_1^2, x_2^2, \sqrt{2}x_1, \sqrt{2}x_2, \sqrt{2}x_1x_2)$$

$$\Phi(x) = (1, x_1^2, x_2^2, \sqrt{2}x_1, \sqrt{2}x_2, \sqrt{2}x_1x_2)$$
  

$$\Phi(x') = (1, x_1'^2, x_2'^2, \sqrt{2}x_1', \sqrt{2}x_2', \sqrt{2}x_1'x_2')$$

Annahme für verwendete Transformationsfunktion Φ:

$$\Phi(x) = (1, x_1^2, x_2^2, \sqrt{2}x_1, \sqrt{2}x_2, \sqrt{2}x_1x_2)$$

$$\Phi(x) = (1, x_1^2, x_2^2, \sqrt{2}x_1, \sqrt{2}x_2, \sqrt{2}x_1x_2)$$

$$\Phi(x') = (1, x_1'^2, x_2'^2, \sqrt{2}x_1', \sqrt{2}x_2', \sqrt{2}x_1'x_2')$$

$$\Phi(x)^T \Phi(x') = 1 + x_1^2 x_1'^2 + x_2^2 x_2'^2 + 2x_1 x_1' + 2x_2 x_2' + 2x_1 x_1' x_2 x_2'$$

Annahme für verwendete Transformationsfunktion Φ:

$$\Phi(x) = (1, x_1^2, x_2^2, \sqrt{2}x_1, \sqrt{2}x_2, \sqrt{2}x_1x_2)$$

Anwendung auf Vektoren x und x':

$$\Phi(x) = (1, x_1^2, x_2^2, \sqrt{2}x_1, \sqrt{2}x_2, \sqrt{2}x_1x_2)$$

$$\Phi(x') = (1, x_1'^2, x_2'^2, \sqrt{2}x_1', \sqrt{2}x_2', \sqrt{2}x_1'x_2')$$

$$\Phi(x)^T \Phi(x') = 1 + x_1^2 x_1'^2 + x_2^2 x_2'^2 + 2x_1 x_1' + 2x_2 x_2' + 2x_1 x_1' x_2 x_2'$$

Kernel-Funktion  $K(x,x')=(1+x^Tx')^2$  entspricht Skalarprodukt der mit  $\Phi$  transformierten Vektoren x,x'

Verallgemeinerung des Beispiels Seien Eingabevektoren  $x \in \mathbb{R}^d$  und Transformationsfunktion  $\Phi: \mathbb{R}^d \to \mathbb{Z}$  ein Polynom der Ordnung QKernel-Funktion:

$$K(x, x') = (1 + x^T x')^Q =$$

Verallgemeinerung des Beispiels Seien Eingabevektoren  $x \in \mathbb{R}^d$  und Transformationsfunktion  $\Phi: \mathbb{R}^d \to \mathbb{Z}$  ein Polynom der Ordnung QKernel-Funktion:

$$K(x, x') = (1 + x^T x')^Q =$$
  
=  $(1 + x_1 x'_1 + x_2 x'_2 + \dots + x_d x'_d)^Q$ 

Verallgemeinerung des Beispiels Seien Eingabevektoren  $x \in \mathbb{R}^d$  und Transformationsfunktion  $\Phi: \mathbb{R}^d \to \mathbb{Z}$  ein Polynom der Ordnung QKernel-Funktion:

$$K(x, x') = (1 + x^T x')^Q =$$
  
=  $(1 + x_1 x'_1 + x_2 x'_2 + \dots + x_d x'_d)^Q$ 

Skalierungsfaktoren a und b für Kompensation Faktoren:

$$K(x, x') = (ax^T x' + b)^Q$$

Verallgemeinerung des Beispiels Seien Eingabevektoren  $x \in \mathbb{R}^d$  und Transformationsfunktion  $\Phi: \mathbb{R}^d \to \mathbb{Z}$  ein Polynom der Ordnung QKernel-Funktion:

$$K(x, x') = (1 + x^T x')^Q =$$
  
=  $(1 + x_1 x'_1 + x_2 x'_2 + \dots + x_d x'_d)^Q$ 

Skalierungsfaktoren a und b für Kompensation Faktoren:

$$K(x, x') = (ax^T x' + b)^Q$$

Berechnung des Skalarprodukts Polynoms von Grad Q ohne Transformation

Verallgemeinerung des Beispiels Seien Eingabevektoren  $x \in \mathbb{R}^d$  und Transformationsfunktion  $\Phi: \mathbb{R}^d \to \mathbb{Z}$  ein Polynom der Ordnung QKernel-Funktion:

$$K(x, x') = (1 + x^T x')^Q =$$
  
=  $(1 + x_1 x'_1 + x_2 x'_2 + \dots + x_d x'_d)^Q$ 

Skalierungsfaktoren a und b für Kompensation Faktoren:

$$K(x, x') = (ax^T x' + b)^Q$$

Berechnung des Skalarprodukts Polynoms von Grad Q ohne Transformation Polynomieller Kernel

Weitere Kernel-Funktion: Radials Basis Function (RBF) Kernel:

Weitere Kernel-Funktion: Radials Basis Function (RBF) Kernel:

$$K(x, x') = \exp \gamma ||x - x'||^2$$

Weitere Kernel-Funktion: Radials Basis Function (RBF) Kernel:

$$K(x, x') = \exp \gamma ||x - x'||^2$$

 $\gamma$  ist wählbarer Parameter

Weitere Kernel-Funktion: Radials Basis Function (RBF) Kernel:

$$K(x, x') = \exp \gamma ||x - x'||^2$$

 $\gamma$  ist wählbarer Parameter Dem Kernel zugehörige Transformationsfunktion  $\Phi$  bildet in unendlich dimensionalen Raum ab

$$K(x, x') = \exp(-(x - x')^2) =$$

$$K(x, x') = \exp(-(x - x')^2) =$$
  
=  $\exp(-x^2 + 2xx' - x'^2) =$ 

$$K(x, x') = \exp(-(x - x')^{2}) =$$

$$= \exp(-x^{2} + 2xx' - x'^{2}) =$$

$$= \exp(-x^{2}) \exp(2xx') \exp(-x'^{2}) =$$

$$K(x, x') = \exp(-(x - x')^{2}) =$$

$$= \exp(-x^{2} + 2xx' - x'^{2}) =$$

$$= \exp(-x^{2}) \exp(2xx') \exp(-x'^{2}) =$$

$$= \exp(-x^{2}) \sum_{k=0}^{\infty} \frac{2^{k}(x)^{k}(x')^{k}}{k!} \exp(-x'^{2})$$

Beweis für einfachsten Fall:

$$K(x, x') = \exp(-(x - x')^{2}) =$$

$$= \exp(-x^{2} + 2xx' - x'^{2}) =$$

$$= \exp(-x^{2}) \exp(2xx') \exp(-x'^{2}) =$$

$$= \exp(-x^{2}) \sum_{k=0}^{\infty} \frac{2^{k}(x)^{k}(x')^{k}}{k!} \exp(-x'^{2})$$

Taylorexpansion von  $\exp(2xx')$  macht Unendlichkeit Raum sichtbar

Beweis für einfachsten Fall:

$$K(x, x') = \exp(-(x - x')^{2}) =$$

$$= \exp(-x^{2} + 2xx' - x'^{2}) =$$

$$= \exp(-x^{2}) \exp(2xx') \exp(-x'^{2}) =$$

$$= \exp(-x^{2}) \sum_{k=0}^{\infty} \frac{2^{k}(x)^{k}(x')^{k}}{k!} \exp(-x'^{2})$$

Taylorexpansion von  $\exp(2xx')$  macht Unendlichkeit Raum sichtbar Hat für Skalarprodukt benötigte Symmetrie  $\exp(-x^2)$  -  $\exp(-x'^2)$  und  $(x)^k$  -  $(x')^k$ 

Beweis für einfachsten Fall:

$$K(x, x') = \exp(-(x - x')^{2}) =$$

$$= \exp(-x^{2} + 2xx' - x'^{2}) =$$

$$= \exp(-x^{2}) \exp(2xx') \exp(-x'^{2}) =$$

$$= \exp(-x^{2}) \sum_{k=0}^{\infty} \frac{2^{k}(x)^{k}(x')^{k}}{k!} \exp(-x'^{2})$$

Taylorexpansion von  $\exp(2xx')$  macht Unendlichkeit Raum sichtbar Hat für Skalarprodukt benötigte Symmetrie  $\exp(-x^2)$  -  $\exp(-x'^2)$  und  $(x)^k$  -  $(x')^k$ 

Anteile  $\frac{2^k}{k!}$  gleichmäßig auf x und x' aufteilbar (Wurzel der Anteile zu x und x' multiplizieren)

Eingabe x, Transformation mit  $z = \Phi(x)$ , Klassifikation mit:

Eingabe x, Transformation mit  $z = \Phi(x)$ , Klassifikation mit:

$$y(x) = sign(w^{T}z + b)$$
 (17)

Eingabe x, Transformation mit  $z = \Phi(x)$ , Klassifikation mit:

$$y(x) = sign(w^{T}z + b)$$
 (17)

Funktion Φ muss bekannt sein

Eingabe x, Transformation mit  $z = \Phi(x)$ , Klassifikation mit:

$$y(x) = sign(w^{T}z + b)$$
 (17)

Funktion Φ muss bekannt sein

Transformation nötig

Eingabe x, Transformation mit  $z = \Phi(x)$ , Klassifikation mit:

$$y(x) = sign(w^T z + b) \tag{17}$$

Funktion Φ muss bekannt sein

Transformation nötig

Ziel: Problem mittels Kernel-Funktion K(x,x') ausdrücken,

transformierte Vektoren vermeiden

$$w = \sum_{z_n \text{ ist SV}} \alpha_n y_n z_n \tag{18}$$

$$w = \sum_{z_n \text{ ist SV}} \alpha_n y_n z_n \tag{18}$$

Einsetzen Gleichung (18) in Gleichung (17):

$$w = \sum_{z_n \text{ ist SV}} \alpha_n y_n z_n \tag{18}$$

Einsetzen Gleichung (18) in Gleichung (17):

$$y(x) = sign(\sum_{\alpha_n > 0} \alpha_n y_n z_n^T z + b) =$$

$$w = \sum_{z_n \text{ ist SV}} \alpha_n y_n z_n \tag{18}$$

Einsetzen Gleichung (18) in Gleichung (17):

$$y(x) = sign(\sum_{\alpha_n > 0} \alpha_n y_n z_n^T z + b) =$$

$$= sign(\sum_{\alpha_n > 0} \alpha_n y_n K(x_n, x) + b)$$

$$w = \sum_{z_n \text{ ist SV}} \alpha_n y_n z_n \tag{18}$$

Einsetzen Gleichung (18) in Gleichung (17):

$$y(x) = sign(\sum_{\alpha_n > 0} \alpha_n y_n z_n^T z + b) =$$

$$= sign(\sum_{\alpha_n > 0} \alpha_n y_n K(x_n, x) + b)$$

Einsetzen von Gleichung (18) für beliebigen Stützvektor für b:

$$w = \sum_{z_n \text{ ist SV}} \alpha_n y_n z_n \tag{18}$$

Einsetzen Gleichung (18) in Gleichung (17):

$$y(x) = sign(\sum_{\alpha_n > 0} \alpha_n y_n z_n^T z + b) =$$

$$= sign(\sum_{\alpha_n > 0} \alpha_n y_n K(x_n, x) + b)$$

Einsetzen von Gleichung (18) für beliebigen Stützvektor für b:

$$b = \frac{1}{y_k} - w^T z_k =$$

$$w = \sum_{z_n \text{ ist SV}} \alpha_n y_n z_n \tag{18}$$

Einsetzen Gleichung (18) in Gleichung (17):

$$y(x) = sign(\sum_{\alpha_n > 0} \alpha_n y_n z_n^T z + b) =$$

$$= sign(\sum_{\alpha_n > 0} \alpha_n y_n K(x_n, x) + b)$$

Einsetzen von Gleichung (18) für beliebigen Stützvektor für b:

$$b = \frac{1}{y_k} - w^T z_k =$$

$$= \frac{1}{y_k} - \sum_{\alpha_n > 0} \alpha_n y_n K(x_n, x_k) =$$

$$w = \sum_{z_n \text{ ist SV}} \alpha_n y_n z_n \tag{18}$$

Einsetzen Gleichung (18) in Gleichung (17):

$$y(x) = sign(\sum_{\alpha_n > 0} \alpha_n y_n z_n^T z + b) =$$

$$= sign(\sum_{\alpha_n > 0} \alpha_n y_n K(x_n, x) + b)$$

Einsetzen von Gleichung (18) für beliebigen Stützvektor für b:

$$b = \frac{1}{y_k} - w^T z_k =$$

$$= \frac{1}{y_k} - \sum_{\alpha_n > 0} \alpha_n y_n K(x_n, x_k) =$$

$$= y_k - \sum_{\alpha_n > 0} \alpha_n y_n K(x_n, x_k) =$$

46 / 51

• SVM vollständig definiert

- SVM vollständig definiert
- Transformationsfunktion Φ muss nicht bekannt sein

- SVM vollständig definiert
- Transformations funktion Φ muss nicht bekannt sein
- Keine einzige tatsächliche Transformation wird durchgeführt

- SVM vollständig definiert
- Transformationsfunktion Φ muss nicht bekannt sein
- Keine einzige tatsächliche Transformation wird durchgeführt
- Beliebige dimensionale Räume durch entsprechende Kernel-Funktionen verwendbar

- SVM vollständig definiert
- Transformationsfunktion Φ muss nicht bekannt sein
- Keine einzige tatsächliche Transformation wird durchgeführt
- Beliebige dimensionale R\u00e4ume durch entsprechende Kernel-Funktionen verwendbar
- Beliebige Kernel-Funktion verwendbar, solange bestimmte Bedingungen erfüllt werden

# Bedingungen für Kernel-Funktion

Kernel-Funktion muss Skalarprodukt in Raum entsprechen Zwei verschiedene Ansätze, um das zu zeigen:

# Bedingungen für Kernel-Funktion

Kernel-Funktion muss Skalarprodukt in Raum entsprechen Zwei verschiedene Ansätze, um das zu zeigen:

- Für vermutlich richtige Kernel-Funktion wird konstruktiv versucht, die zugehörige Transformationsfunktion Φ zu bestimmen
- Kernel ist gültig, wenn K(x, x') symmetrisch und die Matrix

$$K = \begin{bmatrix} K(x_1, x_1) & K(x_1, x_2) & \dots & K(x_1, x_N) \\ K(x_2, x_1) & K(x_2, x_2) & \dots & K(x_2, x_N) \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ K(x_N, x_1) & K(x_N, x_2) & \dots & K(x_N, x_N) \end{bmatrix}$$

positiv semi-definit ist für jedes beliebige  $x_1..x_N$ .

# Bedingungen für Kernel-Funktion

Kernel-Funktion muss Skalarprodukt in Raum entsprechen Zwei verschiedene Ansätze, um das zu zeigen:

- Für vermutlich richtige Kernel-Funktion wird konstruktiv versucht, die zugehörige Transformationsfunktion Φ zu bestimmen
- ullet Kernel ist gültig, wenn K(x,x') symmetrisch und die Matrix

$$K = \begin{bmatrix} K(x_1, x_1) & K(x_1, x_2) & \dots & K(x_1, x_N) \\ K(x_2, x_1) & K(x_2, x_2) & \dots & K(x_2, x_N) \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ K(x_N, x_1) & K(x_N, x_2) & \dots & K(x_N, x_N) \end{bmatrix}$$

positiv semi-definit ist für jedes beliebige  $x_1...x_N$ . Auch Satz von Mercer genannt, garantiert, dass Funktion  $\Phi$  existiert, die in Raum abbildet, dessen Skalarprodukte durch Kernel-Funktion beschrieben werden können

Lösung mittels Quadratic Programming Solver weiter möglich Änderung: In  $Q-Matrix\ K(x_n,x_m)$  statt  $x_n^Tx_m$ 

Lösung mittels Quadratic Programming Solver weiter möglich Änderung: In  $Q-Matrix\ K(x_n,x_m)$  statt  $x_n^Tx_m$ 

$$\min_{\alpha} \qquad \mathcal{L}(\alpha) = \frac{1}{2} \alpha^{T} Q \alpha + (-1^{T}) \alpha$$

$$\min_{\alpha} \qquad Q = \begin{bmatrix} y_{1} y_{1} K(x_{1}, x_{1}) & y_{1} y_{2} K(x_{1}, x_{2}) & \dots & y_{1} y_{N} K(x_{1}, x_{N}) \\ y_{2} y_{1} K(x_{2}, x_{1}) & y_{2} y_{2} K(x_{2}, x_{2}) & \dots & y_{2} y_{N} K(x_{2}, x_{N}) \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ y_{N} y_{1} K(x_{N}, x_{1}) & y_{N} y_{2} K(x_{N}, x_{2}) & \dots & y_{N} y_{N} K(x_{N}, x_{N}) \end{bmatrix}$$

$$\text{für} \qquad y^{T} \alpha = 0$$

$$0 \leq \alpha \leq \infty$$

Lösung mittels Quadratic Programming Solver weiter möglich Änderung: In  $Q-Matrix\ K(x_n,x_m)$  statt  $x_n^Tx_m$ 

$$\min_{\alpha} \quad \mathcal{L}(\alpha) = \frac{1}{2} \alpha^{T} Q \alpha + (-1^{T}) \alpha$$

$$\min_{\alpha} \quad Q = \begin{bmatrix} y_{1} y_{1} K(x_{1}, x_{1}) & y_{1} y_{2} K(x_{1}, x_{2}) & \dots & y_{1} y_{N} K(x_{1}, x_{N}) \\ y_{2} y_{1} K(x_{2}, x_{1}) & y_{2} y_{2} K(x_{2}, x_{2}) & \dots & y_{2} y_{N} K(x_{2}, x_{N}) \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ y_{N} y_{1} K(x_{N}, x_{1}) & y_{N} y_{2} K(x_{N}, x_{2}) & \dots & y_{N} y_{N} K(x_{N}, x_{N}) \end{bmatrix}$$

$$\text{für } \quad y^{T} \alpha = 0$$

$$0 \leq \alpha \leq \infty$$

An QP-Solver übergeben und lpha erhalten

Lösung mittels Quadratic Programming Solver weiter möglich Änderung: In  $Q-Matrix\ K(x_n,x_m)$  statt  $x_n^Tx_m$ 

$$\min_{\alpha} \qquad \mathcal{L}(\alpha) = \frac{1}{2} \alpha^{T} Q \alpha + (-1^{T}) \alpha$$

$$\min_{\alpha} \qquad Q = \begin{bmatrix} y_{1} y_{1} K(x_{1}, x_{1}) & y_{1} y_{2} K(x_{1}, x_{2}) & \dots & y_{1} y_{N} K(x_{1}, x_{N}) \\ y_{2} y_{1} K(x_{2}, x_{1}) & y_{2} y_{2} K(x_{2}, x_{2}) & \dots & y_{2} y_{N} K(x_{2}, x_{N}) \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ y_{N} y_{1} K(x_{N}, x_{1}) & y_{N} y_{2} K(x_{N}, x_{2}) & \dots & y_{N} y_{N} K(x_{N}, x_{N}) \end{bmatrix}$$

$$\text{für} \qquad y^{T} \alpha = 0$$

An QP-Solver übergeben und lpha erhalten

SVM in Kombination mit Kernel-Funktionen auf beliebige binäre

Klassifikationsprobleme anwendbar

 $0 < \alpha < \infty$ 

Pseudocode und Beispiele

# Pseudocode Hard-Margin SVM

Hard-Margin SVM	Zeile
Initialisiere x, y	1
$Q = (yy^T)K$	2
$c = (-1, -1, \dots, -1)^T$	3
$A = diag\left(-1, -1, \dots, -1\right)$	4
$b = (0, 0, \dots, 0)^{T}$	5
$A_{eq} = y^{T}$	6
$b_{eq}=0$	7
$b = (0, 0, \dots, 0)^{T}$	8
$ub = C * (1, 1, \dots, 1)^T$	9
$\alpha = QPSolver(Q, c, A, b, A_{eq}, b_{eq})$	10
$w = \sum_{n=SV} \alpha_n y_n x_n$	11
$bias = \frac{1}{y_n} - \mathbf{w}^T \mathbf{x}_n$	12

Fragen?

## Literatur

- Burges, Christopher J.C. (1. Juni 1998). "A Tutorial on Support Vector Machines for Pattern Recognition". In: Data Mining and Knowledge Discovery 2.2, S. 121–167. ISSN: 1573-756X. DOI: 10.1023/A:1009715923555. URL: https://doi.org/10.1023/A:1009715923555 (besucht am 06.03.2021).
  - Algorithm for Training Support Vector Machines.

    MSR-TR-98-14, S. 21. URL: https://www.microsoft.com/en-us/research/publication/sequential-minimal-optimization-a-fast-algorithm-for-training-support-vector-machines/.

Platt, John (Apr. 1998). Sequential Minimal Optimization: A Fast