Support Vector Machines

André Hopfgartner & Matthias Rupp

08.06.2021

Vorarlberg University of Applied Sciences

FH Vorarlberg
University of Applied Sciences

Agenda

Einführung

Intuition

Ziel: lineare Trennung zweier Klassen

Intuition

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

Intuition

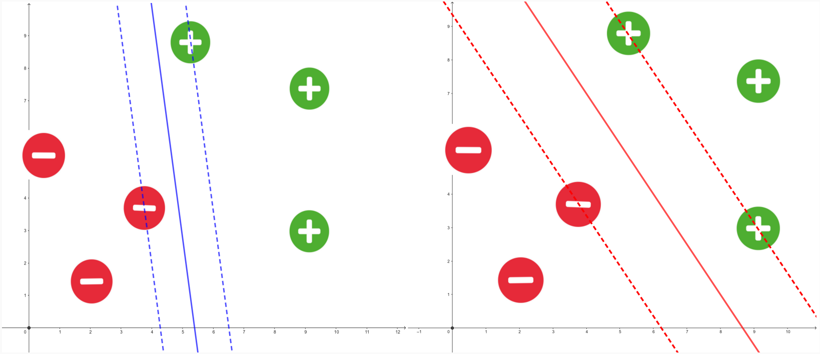
Ziel: lineare Trennung zweier Klassen
Wie?: Definition einer (Hyper-) Ebene
Nebenbedingung: Möglichst großer freier Bereich

Intuition

Ziel: lineare Trennung zweier Klassen

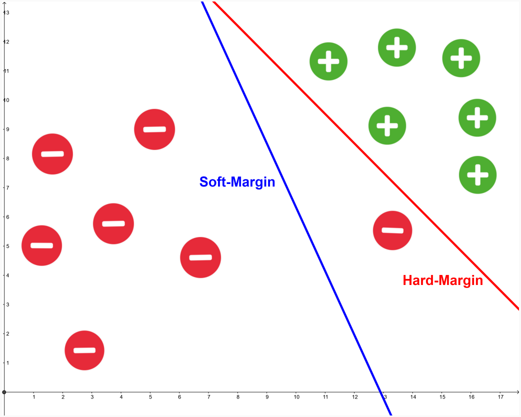
Wie?: Definition einer (Hyper-) Ebene

Nebenbedingung: Möglichst großer freier Bereich



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:

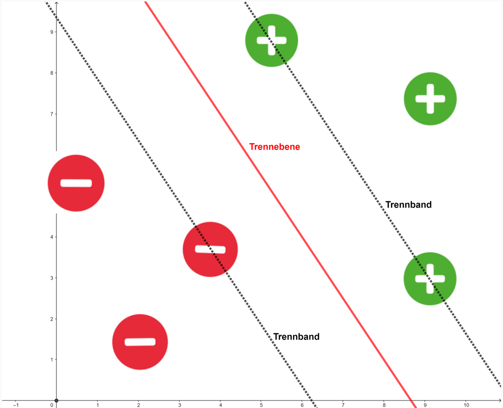
$$
\begin{aligned}
y = sign(w^T x_n + b) & \qquad \text{ist gleichbedeutend mit} \\
w^T x_n + b > 0 & \qquad \text{für } y_n = +1 \\
w^T x_n + b < 0 & \qquad \text{für } y_n = -1
\end{aligned}
$$

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

Einführung eines Trennbandes

Striktere Regel: Um Ebene soll Band frei bleiben

$$
\begin{aligned}
w^T x_n + b &\geq +1 \qquad \text{für } y_n = +1 \\
w^T x_n + b &\leq -1 \qquad \text{für } y_n = -1
\end{aligned}
$$



Einführung eines Trennbandes

Beidseitige Multiplikation mit y_n

$$
\begin{aligned}
y_n(w^T x_n + b) &\geq 1 \qquad \text{für } y_n = +1 \\
y_n(w^T x_n + b) &\geq 1 \qquad \text{für } y_n = -1
\end{aligned}
$$

Einführung eines Trennbandes

Beidseitige Multiplikation mit y_n

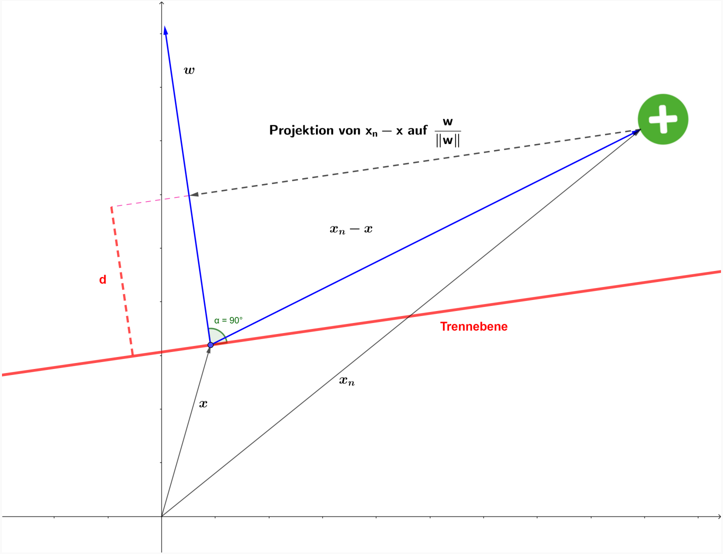
$$
\begin{aligned}
y_n(w^T x_n + b) &\geq 1 \qquad \text{für } y_n = +1 \\
y_n(w^T x_n + b) &\geq 1 \qquad \text{für } y_n = -1
\end{aligned}
$$

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

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

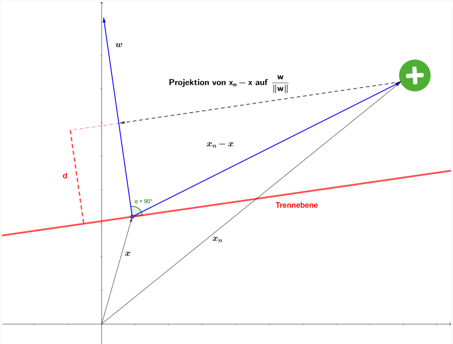
Normalabstand eines Punktes zur Ebene

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



Normalabstand eines Punktes zur Ebene

$$\begin{aligned} d &= \left|\frac{w^T}{\|w\|}(x_n - x)\right| = \\ &= \frac{1}{\|w\|}\left|(w^T x_n - w^T x)\right| = \\ &= \frac{1}{\|w\|}\left|(w^T x_n + b - (w^T x + b))\right| \end{aligned}$$



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 $w^T x + b = 0$ 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:

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

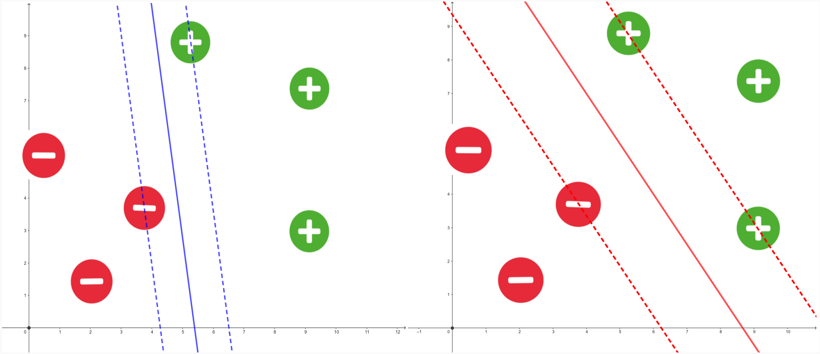
Weil D der minimale Normalabstand zur Ebene ist, ist $2D$ die Breite des freien Trennbands.

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

$$\max_{w} \quad \frac{1}{\|w\|}$$
$$\text{mit} \quad \min_{n=1..N} |w^T x_n + b| = 1$$

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

Beidseitige Multiplikation mit y_n zur Vermeidung des Betrags:

$$|w^T x_n + b| = y_n(w^T x_n + b)$$

Optimierungsproblem

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

$$\begin{aligned} \min_{w} \quad & \frac{1}{2} w^T w \\ \text{mit} \quad & y_n(w^T x_n + b) \geq 1 \text{ für } n = 1..N \end{aligned}$$

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

Optimierungsproblem mit Ungleichung als Nebenbedingung

Umformen der Nebenbedingung:

$$\begin{aligned} \min_{w} \quad & \frac{1}{2} w^T w \\ \text{mit} \quad & y_n(w^T x_n + b) - 1 \geq 0 \text{ für } n = 1..N \end{aligned}$$

Aufstellen der Lagrange Gleichung

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

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

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

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

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

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:

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

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 ($x_n^T x_m$):

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

Lösung mittels QP-Solver

Ergebnis: α Vektor mit α_n Lagrange-Multiplikatoren

Schlupfterm

Reminder Ausgangsproblem:

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

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

$\alpha_n (y_n (w^T x_n + b) - 1)$ („Schlupf“) wird 0 wenn:

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

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

α Vektor mit α_n Faktoren ist bekannt aus QP-Solver
Viele α_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:

$$w = \sum_{n \text{ ist Stützvektor}} \alpha_n y_n x_n$$

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

Bestimmung Bias

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

$$
\begin{aligned}
b &= \frac{1}{y_n} - w^T x_n = \\
&= y_n - w^T x_n
\end{aligned}
$$

Lösung mittels QP-Solver

Lösung mittels QP-Solver

Standardform von QP-Problemen:

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

Umformung 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 → Lösungs-Frameworks:

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

$$\text{mit} \qquad Q = \begin{bmatrix} y_1 y_1 x_1^T x_1 & y_1 y_2 x_1^T x_2 & \dots & y_1 y_N x_1^T x_N \\ y_2 y_1 x_2^T x_1 & y_2 y_2 x_2^T x_2 & \dots & y_2 y_N x_2^T x_N \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ y_N y_1 x_N^T x_1 & y_N y_2 x_N^T x_2 & \dots & y_N y_N x_N^T x_N \end{bmatrix}$$

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:

$$\begin{aligned}
\min_{\alpha} \quad & \mathcal{L}(\alpha) = \frac{1}{2} \alpha^T Q \alpha + (-1^T)\alpha \\
\text{mit} \quad & Q = \begin{bmatrix} y_1 y_1 x_1^T x_1 & y_1 y_2 x_1^T x_2 & \dots & y_1 y_N x_1^T x_N \\ y_2 y_1 x_2^T x_1 & y_2 y_2 x_2^T x_2 & \dots & y_2 y_N x_2^T x_N \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ y_N y_1 x_N^T x_1 & y_N y_2 x_N^T x_2 & \dots & y_N y_N x_N^T x_N \end{bmatrix}
\end{aligned}$$

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:

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

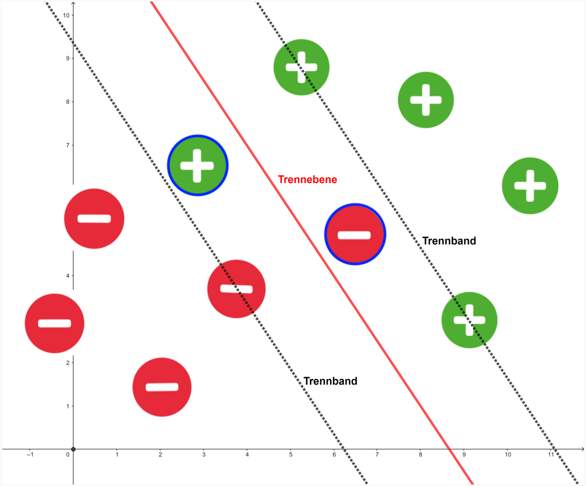
Klassifikation neuer Eingaben x:

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

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 $\xi_n \in \mathbb{R}^K, \xi_n \geq 0$:

$$
\begin{aligned}
w^T x_n + b &\geq +1 - \xi_n \qquad \text{für } y_n = +1 \\
w^T x_n + b &\leq -1 + \xi_n \qquad \text{für } y_n = -1
\end{aligned}
$$

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:

$$
\begin{aligned}
\min_{w} \quad & \frac{1}{2} w^T w + C\left(\sum_{n=1}^{N} \xi_n\right) \\
\text{mit} \quad & y_n(w^T x_n + b) - 1 \geq 0 \text{ für } n = 1..N
\end{aligned}
$$

Ableiten, 0 setzen und lösen wie zuvor...

Soft-Margin SVM Optimierungsproblem

Soft-Margin Optimierungsproblem:

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

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

Soft-Margin SVM Optimierungsproblem

Soft-Margin Optimierungsproblem:

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

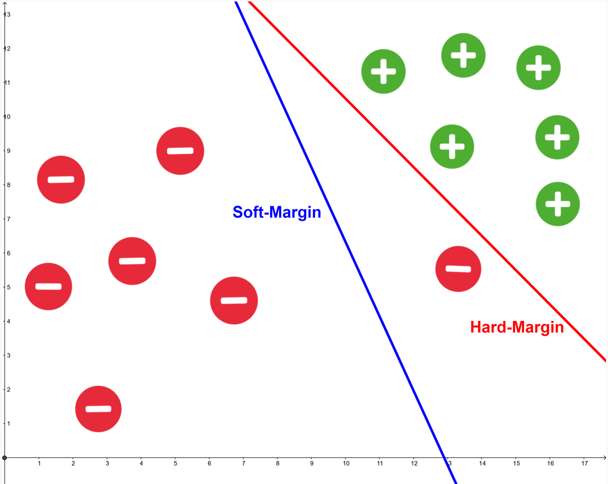
Einziger Unterschied zu Hard-Margin: Beschränkung $\alpha_n \leq C$
(Hard-Margin: $\alpha_n \leq \infty$)
Umgekehrt: Soft-Margin mit $C \to \infty$ entspricht Hard-Margin
Lösung: Wie zuvor gezeigt mit QP-Solver

Vergleich Hard- & Soft-Margin Support Vector Machine

Vergleich Hard- & Soft-Margin SVM

Hard-Margin: einzelne Ausreißer bestimmen Lage der Ebene

Soft-Margin: Fehlklassifikationen zugunsten besserer Gesamt-Trennung



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

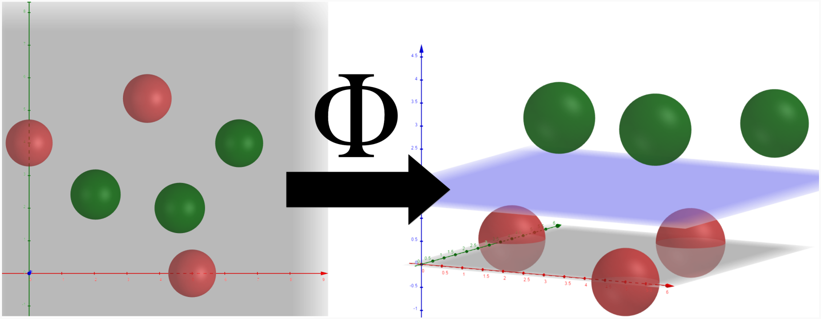


Abbildung 1: Transformation Eingabevektoren macht linear trennbar

Optimierungsproblem transformiert

Optimierungsproblem mit transformierten Eingabevektoren:

Optimierungsproblem transformiert

Optimierungsproblem mit transformierten Eingabevektoren:

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

$$\text{mit} \quad 0 \leq \alpha_n \leq C \text{ für } n = 1..N$$

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

Optimierungsproblem transformiert

Optimierungsproblem mit transformierten Eingabevektoren:

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

Anzahl Lagrangefaktoren α und Dimension der Q-Matrix hängen von Anzahl Eingabevektoren ab, nicht von der Dimension

Optimierungsproblem transformiert

Optimierungsproblem mit transformierten Eingabevektoren:

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

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

Probleme und Erkenntnisse

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

Probleme und Erkenntnisse

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

Probleme und Erkenntnisse

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

Probleme und Erkenntnisse

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

Probleme und Erkenntnisse

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

Kernel Trick

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

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

Kernel Trick

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

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

$$\text{mit} \qquad 0 \leq \alpha_n \leq C \text{ für } n = 1..N$$

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

Berechnung von w und b:

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

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

Kernel Trick

Einführung einer Kernel-Funktion $K(x, x') = z_1^T z_2 = \Phi(x)^T \Phi(x')$

Kernel Trick

Einführung einer Kernel-Funktion $K(x, x') = z_1^T z_2 = \Phi(x)^T \Phi(x')$
Berechnet Skalarprodukt der transformierten Eingabevektoren
Transformiert Eingabevektoren aber nicht tatsächlich in den neuen Raum

Kernel Trick

Einführung einer Kernel-Funktion $K(x, x') = z_1^T z_2 = \Phi(x)^T \Phi(x')$

Berechnet Skalarprodukt der transformierten Eingabevektoren

Transformiert Eingabevektoren aber nicht tatsächlich in den neuen Raum

Berechnung hochdimensionaler Skalarprodukte wird umgangen

Beispiel Kernel-Funktion

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

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

Beispiel Kernel-Funktion

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

$$
\begin{aligned}
K(x, x') &= (1 + x^T x')^2 = \\
&= (1 + x_1 x_1' + x_2 x_2')^2 =
\end{aligned}
$$

Beispiel Kernel-Funktion

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

$$\begin{aligned}
K(x, x') &= (1 + x^T x')^2 = \\
&= (1 + x_1 x_1' + x_2 x_2')^2 = \\
&= 1 + x_1^2 x_1'^2 + x_2^2 x_2'^2 + 2x_1 x_1' + 2x_2 x_2' + 2x_1 x_1' x_2 x_2'
\end{aligned}$$

Annahme für verwendete Transformationsfunktion Φ:

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

Anwendung auf Vektoren x und x':

Beweis Kernel-Funktion entspricht Skalarprodukt

Annahme für verwendete Transformationsfunktion Φ:

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

Anwendung auf Vektoren x und x':

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

Beweis Kernel-Funktion entspricht Skalarprodukt

Annahme für verwendete Transformationsfunktion Φ:

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

Anwendung auf Vektoren x und x':

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

Beweis Kernel-Funktion entspricht Skalarprodukt

Annahme für verwendete Transformationsfunktion Φ:

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

Anwendung auf Vektoren x und x':

$$\begin{aligned}
\Phi(x) &= (1, x_1^2, x_2^2, \sqrt{2}x_1, \sqrt{2}x_2, \sqrt{2}x_1 x_2) \\
\Phi(x') &= (1, x_1'^2, x_2'^2, \sqrt{2}x_1', \sqrt{2}x_2', \sqrt{2}x_1' x_2') \\
\Phi(x)^T \Phi(x') &= 1 + x_1^2 x_1'^2 + x_2^2 x_2'^2 + 2x_1 x_1' + 2x_2 x_2' + 2x_1 x_1' x_2 x_2'
\end{aligned}$$

Beweis Kernel-Funktion entspricht Skalarprodukt

Annahme für verwendete Transformationsfunktion Φ:

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

Anwendung auf Vektoren x und x':

$$\begin{aligned}
\Phi(x) &= (1, x_1^2, x_2^2, \sqrt{2}x_1, \sqrt{2}x_2, \sqrt{2}x_1 x_2) \\
\Phi(x') &= (1, x_1'^2, x_2'^2, \sqrt{2}x_1', \sqrt{2}x_2', \sqrt{2}x_1' x_2') \\
\Phi(x)^T \Phi(x') &= 1 + x_1^2 x_1'^2 + x_2^2 x_2'^2 + 2x_1 x_1' + 2x_2 x_2' + 2x_1 x_1' x_2 x_2'
\end{aligned}$$

Kernel-Funktion $K(x, x') = (1 + x^T x')^2$ entspricht Skalarprodukt der mit Φ transformierten Vektoren x, x'

Polynomieller Kernel

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

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

Polynomieller Kernel

Verallgemeinerung des Beispiels

Seien Eingabevektoren $x \in \mathbb{R}^d$ und Transformationsfunktion $\Phi : \mathbb{R}^d \to \mathbb{Z}$ ein Polynom der Ordnung Q

Kernel-Funktion:

$$
\begin{aligned}
K(x, x') &= (1 + x^T x')^Q = \\
&= (1 + x_1 x_1' + x_2 x_2' + \cdots + x_d x_d')^Q
\end{aligned}
$$

Polynomieller Kernel

Verallgemeinerung des Beispiels

Seien Eingabevektoren $x \in \mathbb{R}^d$ und Transformationsfunktion $\Phi : \mathbb{R}^d \to \mathbb{Z}$ ein Polynom der Ordnung Q

Kernel-Funktion:

$$\begin{aligned} K(x, x') &= (1 + x^T x')^Q = \\ &= (1 + x_1 x'_1 + x_2 x'_2 + \cdots + x_d x'_d)^Q \end{aligned}$$

Skalierungsfaktoren a und b für Kompensation Faktoren:

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

Polynomieller Kernel

Verallgemeinerung des Beispiels

Seien Eingabevektoren $x \in \mathbb{R}^d$ und Transformationsfunktion $\Phi : \mathbb{R}^d \to \mathbb{Z}$ ein Polynom der Ordnung Q

Kernel-Funktion:

$$\begin{aligned} K(x, x') &= (1 + x^T x')^Q = \\ &= (1 + x_1 x'_1 + x_2 x'_2 + \cdots + x_d x'_d)^Q \end{aligned}$$

Skalierungsfaktoren a und b für Kompensation Faktoren:

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

Berechnung des Skalarprodukts eines Polynoms vom Grad Q ohne Transformation

Polynomieller Kernel

Verallgemeinerung des Beispiels

Seien Eingabevektoren $x \in \mathbb{R}^d$ und Transformationsfunktion $\Phi : \mathbb{R}^d \to \mathbb{Z}$ ein Polynom der Ordnung Q

Kernel-Funktion:

$$\begin{aligned} K(x, x') &= (1 + x^T x')^Q = \\ &= (1 + x_1 x_1' + x_2 x_2' + \cdots + x_d x_d')^Q \end{aligned}$$

Skalierungsfaktoren a und b für Kompensation Faktoren:

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

Berechnung des Skalarprodukts eines Polynoms vom Grad Q ohne Transformation

Polynomieller Kernel

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

Radial Basis Function Kernel

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

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

Radial Basis Function Kernel

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

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

γ ist wählbarer Parameter

Radial Basis Function Kernel

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

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

γ ist wählbarer Parameter

Dem Kernel zugehörige Transformationsfunktion Φ bildet in unendlich dimensionalen Raum ab

Beweis unendliche Dimensionalität

Beweis für einfachsten Fall:

Beweis unendliche Dimensionalität

Beweis für einfachsten Fall:

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

Beweis unendliche Dimensionalität

Beweis für einfachsten Fall:

$$\begin{aligned} K(x, x') &= \exp\left(-(x - x')^2\right) = \\ &= \exp\left(-x^2 + 2xx' - x'^2\right) = \end{aligned}$$

Beweis unendliche Dimensionalität

Beweis für einfachsten Fall:

$$\begin{aligned} K(x,x') &= \exp\left(-(x-x')^2\right) = \\ &= \exp\left(-x^2 + 2xx' - x'^2\right) = \\ &= \exp\left(-x^2\right)\exp\left(2xx'\right)\exp\left(-x'^2\right) = \end{aligned}$$

Beweis unendliche Dimensionalität

Beweis für einfachsten Fall:

$$\begin{aligned}
K(x, x') &= \exp\left(-(x - x')^2\right) = \\
&= \exp\left(-x^2 + 2xx' - x'^2\right) = \\
&= \exp\left(-x^2\right) \exp\left(2xx'\right) \exp\left(-x'^2\right) = \\
&= \exp\left(-x^2\right) \sum_{k=0}^{\infty} \frac{2^k (x)^k (x')^k}{k!} \exp\left(-x'^2\right)
\end{aligned}$$

Beweis unendliche Dimensionalität

Beweis für einfachsten Fall:

$$
\begin{aligned}
K(x, x') &= \exp\left(-(x - x')^2\right) = \\
&= \exp\left(-x^2 + 2xx' - x'^2\right) = \\
&= \exp\left(-x^2\right) \exp\left(2xx'\right) \exp\left(-x'^2\right) = \\
&= \exp\left(-x^2\right) \sum_{k=0}^{\infty} \frac{2^k (x)^k (x')^k}{k!} \exp\left(-x'^2\right)
\end{aligned}
$$

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

Beweis unendliche Dimensionalität

Beweis für einfachsten Fall:

$$
\begin{aligned}
K(x, x') &= \exp\left(-(x - x')^2\right) = \\
&= \exp\left(-x^2 + 2xx' - x'^2\right) = \\
&= \exp\left(-x^2\right) \exp\left(2xx'\right) \exp\left(-x'^2\right) = \\
&= \exp\left(-x^2\right) \sum_{k=0}^{\infty} \frac{2^k (x)^k (x')^k}{k!} \exp\left(-x'^2\right)
\end{aligned}
$$

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

Beweis unendliche Dimensionalität

Beweis für einfachsten Fall:

$$\begin{aligned}
K(x,x') &= \exp\left(-(x-x')^2\right) = \\
&= \exp\left(-x^2 + 2xx' - x'^2\right) = \\
&= \exp\left(-x^2\right)\exp\left(2xx'\right)\exp\left(-x'^2\right) = \\
&= \exp\left(-x^2\right)\sum_{k=0}^{\infty}\frac{2^k (x)^k (x')^k}{k!}\exp\left(-x'^2\right)
\end{aligned}$$

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:

SVM mit Kernel

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

$$y(x) = sign(w^T z + b) \tag{16}$$

SVM mit Kernel

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

$$y(x) = sign(w^T z + b) \tag{16}$$

Funktion Φ muss bekannt sein

SVM mit Kernel

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

$$y(x) = sign(w^T z + b) \tag{16}$$

Funktion Φ muss bekannt sein

Transformation nötig

SVM mit Kernel

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

$$y(x) = sign(w^T z + b) \tag{16}$$

Funktion Φ muss bekannt sein

Transformation nötig

Ziel: Problem mittels Kernel-Funktion $K(x, x')$ ausdrücken, transformierte Vektoren vermeiden

SVM mit Kernel

$$w = \sum_{z_n \text{ ist SV}} \alpha_n y_n z_n \tag{17}$$

SVM mit Kernel

$$w = \sum_{z_n \text{ ist SV}} \alpha_n y_n z_n \tag{17}$$

Einsetzen Gleichung (17) in Gleichung (16):

SVM mit Kernel

$$w = \sum_{z_n \text{ ist SV}} \alpha_n y_n z_n \tag{17}$$

Einsetzen Gleichung (17) in Gleichung (16):

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

SVM mit Kernel

$$w = \sum_{z_n \text{ ist SV}} \alpha_n y_n z_n \tag{17}$$

Einsetzen Gleichung (17) in Gleichung (16):

$$\begin{aligned} y(x) &= sign(\sum_{\alpha_n > 0} \alpha_n y_n z_n^T z + b) = \\ &= sign(\sum_{\alpha_n > 0} \alpha_n y_n K(x_n, x) + b) \end{aligned}$$

SVM mit Kernel

$$w = \sum_{z_n \text{ ist SV}} \alpha_n y_n z_n \tag{17}$$

Einsetzen Gleichung (17) in Gleichung (16):

$$\begin{aligned} y(x) &= sign(\sum_{\alpha_n > 0} \alpha_n y_n z_n^T z + b) = \\ &= sign(\sum_{\alpha_n > 0} \alpha_n y_n K(x_n, x) + b) \end{aligned}$$

Einsetzen von Gleichung (17) für beliebigen Stützvektor für b:

SVM mit Kernel

$$w = \sum_{z_n \text{ ist SV}} \alpha_n y_n z_n \tag{17}$$

Einsetzen Gleichung (17) in Gleichung (16):

$$\begin{aligned} y(x) &= sign(\sum_{\alpha_n > 0} \alpha_n y_n z_n^T z + b) = \\ &= sign(\sum_{\alpha_n > 0} \alpha_n y_n K(x_n, x) + b) \end{aligned}$$

Einsetzen von Gleichung (17) für beliebigen Stützvektor für b:

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

SVM mit Kernel

$$w = \sum_{z_n \text{ ist SV}} \alpha_n y_n z_n \tag{17}$$

Einsetzen Gleichung (17) in Gleichung (16):

$$\begin{aligned} y(x) &= sign(\sum_{\alpha_n > 0} \alpha_n y_n z_n^T z + b) = \\ &= sign(\sum_{\alpha_n > 0} \alpha_n y_n K(x_n, x) + b) \end{aligned}$$

Einsetzen von Gleichung (17) für beliebigen Stützvektor für b:

$$\begin{aligned} b &= \frac{1}{y_k} - w^T z_k = \\ &= \frac{1}{y_k} - \sum_{\alpha_n > 0} \alpha_n y_n K(x_n, x_k) = \end{aligned}$$

SVM mit Kernel

$$w = \sum_{z_n \text{ ist SV}} \alpha_n y_n z_n \tag{17}$$

Einsetzen Gleichung (17) in Gleichung (16):

$$\begin{aligned} y(x) &= sign(\sum_{\alpha_n > 0} \alpha_n y_n z_n^T z + b) = \\ &= sign(\sum_{\alpha_n > 0} \alpha_n y_n K(x_n, x) + b) \end{aligned}$$

Einsetzen von Gleichung (17) für beliebigen Stützvektor für b:

$$\begin{aligned} b &= \frac{1}{y_k} - w^T z_k = \\ &= \frac{1}{y_k} - \sum_{\alpha_n > 0} \alpha_n y_n K(x_n, x_k) = \\ &= y_k - \sum_{\alpha_n > 0} \alpha_n y_n K(x_n, x_k) \end{aligned}$$

SVM mit Kernel

- SVM vollständig definiert

SVM mit Kernel

- SVM vollständig definiert
- Transformationsfunktion Φ muss nicht bekannt sein

SVM mit Kernel

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

SVM mit Kernel

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

SVM mit Kernel

- SVM vollständig definiert
- Transformationsfunktion Φ muss nicht bekannt sein
- Keine einzige tatsächliche Transformation wird durchgeführt
- Beliebige dimensionale Räume 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

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
- 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 Φ existiert, die in Raum abbildet, dessen Skalarprodukte durch Kernel-Funktion beschrieben werden können

Anpassung QP-Solver

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

Anpassung QP-Solver

Lösung mittels Quadratic Programming Solver weiter möglich

Änderung: In $Q - Matrix$ $K(x_n, x_m)$ statt $x_n^T x_m$

$$
\begin{aligned}
\min_{\alpha} \quad & \mathcal{L}(\alpha) = \frac{1}{2}\alpha^T Q \alpha + (-1^T)\alpha \\
\text{mit} \quad & Q = \begin{bmatrix} y_1 y_1 K(x_1, x_1) & y_1 y_2 K(x_1, x_2) & \dots & y_1 y_N K(x_1, x_N) \\ y_2 y_1 K(x_2, x_1) & y_2 y_2 K(x_2, x_2) & \dots & y_2 y_N K(x_2, x_N) \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ y_N y_1 K(x_N, x_1) & y_N y_2 K(x_N, x_2) & \dots & y_N y_N K(x_N, x_N) \end{bmatrix} \\
\text{für} \quad & y^T \alpha = 0 \\
& 0 \leq \alpha \leq \infty
\end{aligned}
$$

Anpassung QP-Solver

Lösung mittels Quadratic Programming Solver weiter möglich

Änderung: In $Q - Matrix$ $K(x_n, x_m)$ statt $x_n^T x_m$

$$
\begin{aligned}
\min_{\alpha} \quad & \mathcal{L}(\alpha) = \frac{1}{2}\alpha^T Q\alpha + (-1^T)\alpha \\
\text{mit} \quad & Q = \begin{bmatrix} y_1 y_1 K(x_1, x_1) & y_1 y_2 K(x_1, x_2) & \dots & y_1 y_N K(x_1, x_N) \\ y_2 y_1 K(x_2, x_1) & y_2 y_2 K(x_2, x_2) & \dots & y_2 y_N K(x_2, x_N) \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ y_N y_1 K(x_N, x_1) & y_N y_2 K(x_N, x_2) & \dots & y_N y_N K(x_N, x_N) \end{bmatrix} \\
\text{für} \quad & y^T\alpha = 0 \\
& 0 \leq \alpha \leq \infty
\end{aligned}
$$

An QP-Solver übergeben und α erhalten

Anpassung QP-Solver

Lösung mittels Quadratic Programming Solver weiter möglich

Änderung: In $Q - Matrix\ K(x_n, x_m)$ statt $x_n^T x_m$

$$
\begin{aligned}
\min_{\alpha} \quad & \mathcal{L}(\alpha) = \frac{1}{2}\alpha^T Q \alpha + (-1^T)\alpha \\
\text{mit} \quad & Q = \begin{bmatrix} y_1 y_1 K(x_1, x_1) & y_1 y_2 K(x_1, x_2) & \dots & y_1 y_N K(x_1, x_N) \\ y_2 y_1 K(x_2, x_1) & y_2 y_2 K(x_2, x_2) & \dots & y_2 y_N K(x_2, x_N) \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ y_N y_1 K(x_N, x_1) & y_N y_2 K(x_N, x_2) & \dots & y_N y_N K(x_N, x_N) \end{bmatrix} \\
\text{für} \quad & y^T \alpha = 0 \\
& 0 \le \alpha \le \infty
\end{aligned}
$$

An QP-Solver übergeben und α erhalten

SVM in Kombination mit Kernel-Funktionen auf beliebige binäre Klassifikationsprobleme anwendbar

Pseudocode und Beispiele

Pseudocode Hard-Margin SVM

Hard-Margin SVM	Zeile
Initialisiere x, y	1

Pseudocode Hard-Margin SVM

Hard-Margin SVM	**Zeile**
Initialisiere x, y	1
$Q = (yy^T)K$	2

Hard-Margin SVM	**Zeile**
Initialisiere x, y	1
$Q = (yy^T)K$	2
$c = (-1, -1, \ldots, -1)^T$	3

Hard-Margin SVM
Initialisiere x, y
$Q = (yy^T)K$
$c = (-1, -1, \dots, -1)^T$
$A = \mathit{diag}\,(-1, -1, \dots, -1)$
$b = (0, 0, \dots, 0)^T$

Pseudocode Hard-Margin SVM

Hard-Margin SVM	**Zeile**
Initialisiere x, y	1
$\mathrm{Q} = (\mathrm{y}\mathrm{y}^{\mathsf{T}})\mathrm{K}$	2
$\mathrm{c} = (-1, -1, \ldots, -1)^{\mathsf{T}}$	3
$\mathrm{A} = diag\,(-1, -1, \ldots, -1)$	4
$\mathrm{b} = (0, 0, \ldots, 0)^{\mathsf{T}}$	5
$\mathrm{A}_{\mathrm{eq}} = y^{\mathsf{T}}$	6
$b_{eq} = 0$	7

Pseudocode Hard-Margin SVM

Hard-Margin SVM	**Zeile**
Initialisiere x, y	1
$\mathsf{Q} = (\mathsf{y}\mathsf{y}^{\mathsf{T}})\mathsf{K}$	2
$\mathsf{c} = (-1, -1, \ldots, -1)^{\mathsf{T}}$	3
$\mathsf{A} = \mathit{diag}\,(-1, -1, \ldots, -1)$	4
$\mathsf{b} = (0, 0, \ldots, 0)^{\mathsf{T}}$	5
$\mathsf{A}_{\mathsf{eq}} = y^{\mathsf{T}}$	6
$b_{eq} = 0$	7
$\alpha = \mathit{QPSolver}\,(\mathsf{Q}, \mathsf{c}, \mathsf{A}, b, \mathsf{A}_{\mathsf{eq}}, \mathsf{b}_{\mathsf{eq}})$	8

Pseudocode Hard-Margin SVM

Hard-Margin SVM	**Zeile**
Initialisiere x, y	1
$Q = (yy^{T})K$	2
$c = (-1, -1, \ldots, -1)^{T}$	3
$A = \mathit{diag}\,(-1, -1, \ldots, -1)$	4
$b = (0, 0, \ldots, 0)^{T}$	5
$A_{eq} = y^{T}$	6
$b_{eq} = 0$	7
$\alpha = \mathit{QPSolver}\,(Q, c, A, b, A_{eq}, b_{eq})$	8
$w = \sum_{n=SV} \alpha_n y_n x_n$	9

Pseudocode Hard-Margin SVM

Hard-Margin SVM	**Zeile**
Initialisiere x, y	1
$\mathrm{Q} = (\mathrm{yy}^{\mathsf{T}})\mathrm{K}$	2
$\mathrm{c} = (-1, -1, \ldots, -1)^{\mathsf{T}}$	3
$\mathrm{A} = \mathit{diag}\left(-1, -1, \ldots, -1\right)$	4
$\mathrm{b} = (0, 0, \ldots, 0)^{\mathsf{T}}$	5
$\mathrm{A}_{\mathrm{eq}} = y^{\mathsf{T}}$	6
$b_{eq} = 0$	7
$\alpha = \mathit{QPSolver}\left(\mathrm{Q}, \mathrm{c}, \mathrm{A}, b, \mathrm{A}_{\mathrm{eq}}, \mathrm{b}_{\mathrm{eq}}\right)$	8
$\mathrm{w} = \sum\limits_{n=SV} \alpha_n y_n x_n$	9
$\mathit{bias} = \frac{1}{y_n} - \mathrm{w}^{\mathsf{T}} x_n$	10

$$\min_x = \frac{1}{2}x^T Qx + cx + d$$
$$Ax \leq b$$
$$A_{eq}x = b_{eq}$$

Anmerkungen zu Pseudocode Hard-Margin SVM

Anmerkungen

- Zeile 1: Initialisieren von Werte- und Klassenvektoren
- Zeile 2: Berechnen der Matrix Q
- Zeile 3: Berechnen von c
- Zeile 4, 5: Berechnen der Ungleichheitsbedingungen
- Zeile 6, 7: Berechnen der Gleichheitsbedingungen
- Zeile 8: Lösen mittels Quadratic Programming
- Zeile 9: Berechnung Gewichte mit Stützvektoren
- Zeile 10: Berechnung bias mit beliebigem Stützvektor

Pseudocode Berechnung K-Matrix

K **Berechnung**	**Zeile**
Initialisiere x	1

Pseudocode Berechnung K-Matrix

K **Berechnung**	**Zeile**
Initialisiere x	1
For $i = 1$ To N	2
For $j = 1$ To N	3

K **Berechnung**	**Zeile**
Initialisiere x	1
For $i = 1$ To N	2
For $j = 1$ To N	3
$\mathrm{K}(i, j) = x_i \cdot x_j$	4
Ende For	5
Ende For	6

Beispiel Hard-Margin SVM

Trennung linear separierbarer Punkte mit Hard-Margin SVM

Beispiel Hard-Margin SVM

Trennung linear separierbarer Punkte mit Hard-Margin SVM

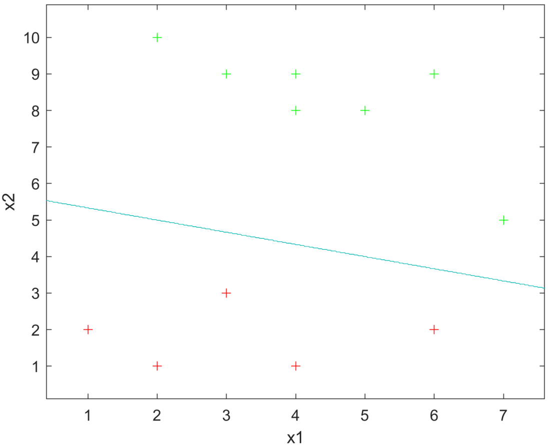


Abbildung 2: Beispiel Trenngrenze lineares Problem mit Hard-Margin SVM

Pseudocode Soft-Margin SVM

Soft-Margin SVM	Zeile
Initialisiere x, y, C	1

Soft-Margin SVM	**Zeile**
Initialisiere $\mathsf{x}, \mathsf{y}, C$	
$\mathsf{Q} = (\mathsf{y}\mathsf{y}^{\mathsf{T}})\mathsf{K}$	
$\mathsf{c} = (-1, -1, \ldots, -1)^{\mathsf{T}}$	
$\mathsf{A} = \mathit{diag}\,(-1, -1, \ldots, -1)$	
$\mathsf{b} = (0, 0, \ldots, 0)^{\mathsf{T}}$	
$\mathsf{A}_{\mathsf{eq}} = \mathsf{y}^{\mathsf{T}}$	
$b_{eq} = 0$	

Pseudocode Soft-Margin SVM

Soft-Margin SVM	Zeile
Initialisiere x, y, C	1
$\mathrm{Q} = (\mathrm{y}\mathrm{y}^{\mathrm{T}})\mathrm{K}$	2
$\mathrm{c} = (-1, -1, \ldots, -1)^{\mathrm{T}}$	3
$\mathrm{A} = diag\,(-1, -1, \ldots, -1)$	4
$\mathrm{b} = (0, 0, \ldots, 0)^{\mathrm{T}}$	5
$\mathrm{A}_{\mathrm{eq}} = \mathrm{y}^{\mathrm{T}}$	6
$b_{eq} = 0$	7
$\mathrm{lb} = (0, 0, \ldots, 0)^{\mathrm{T}}$	8
$\mathrm{ub} = C * (1, 1, \ldots, 1)^{\mathrm{T}}$	9

Pseudocode Soft-Margin SVM

Soft-Margin SVM	Zeile
Initialisiere x, y, C	1
$\mathrm{Q} = (\mathrm{y}\mathrm{y}^{\mathrm{T}})\mathrm{K}$	2
$\mathrm{c} = (-1, -1, \ldots, -1)^{\mathrm{T}}$	3
$\mathrm{A} = \mathit{diag}\,(-1, -1, \ldots, -1)$	4
$\mathrm{b} = (0, 0, \ldots, 0)^{\mathrm{T}}$	5
$\mathrm{A}_{\mathrm{eq}} = \mathrm{y}^{\mathrm{T}}$	6
$b_{eq} = 0$	7
$\mathrm{lb} = (0, 0, \ldots, 0)^{\mathrm{T}}$	8
$\mathrm{ub} = C * (1, 1, \ldots, 1)^{\mathrm{T}}$	9
$\alpha = \mathit{QPSolver}\,(\mathrm{Q}, \mathrm{c}, \mathrm{A}, b, \mathrm{A}_{\mathrm{eq}}, \mathrm{b}_{\mathrm{eq}}, \mathrm{lb}, \mathrm{ub})$	10

Pseudocode Soft-Margin SVM

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

QP Parameter Soft Margin

$$\min_x = \frac{1}{2}x^T Qx + cx + d$$
$$Ax \leq b$$
$$A_{eq}x = b_{eq}$$
$$lb \leq x \leq ub$$

Anmerkungen zu Pseudocode Soft-Margin SVM

Anmerkungen

- Zeile 1: Initialisieren von Werte- und Klassenvektoren und Bestrafungsparameter C
- Zeile 2: Berechnen der Matrix Q
- Zeile 3: Berechnen von c
- Zeile 4, 5: Berechnen der Ungleichheitsbedingungen
- Zeile 6, 7: Berechnen der Gleichheitsbedingungen
- Zeile 8: untere Grenze (kann auch $(-\infty, -\infty, \ldots, -\infty)$ gewählt werden)
- Zeile 9: Berechnung obere Grenze mit C
- Zeile 10: Lösen mittels Quadratic Programming
- Zeile 11: Berechnung Gewichte mit Stützvektoren
- Zeile 12: Berechnung bias mit beliebigem Stützvektor

Beispiel Soft-Margin SVM

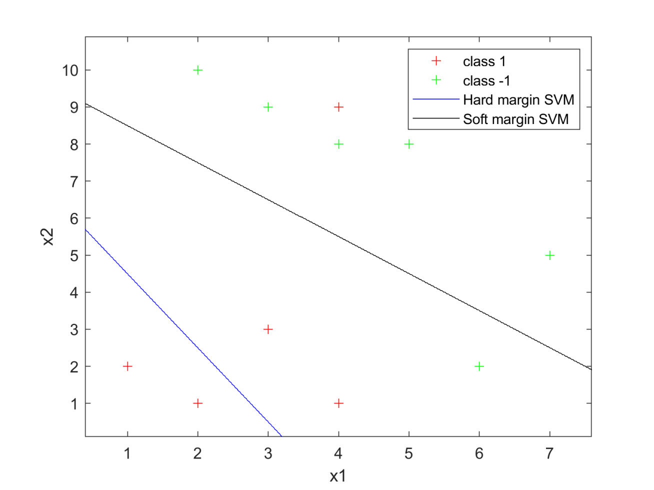
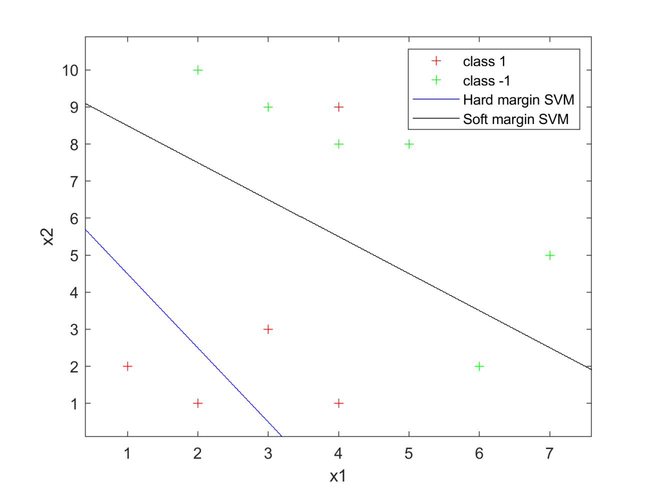


Abbildung 3: Trenngrenze nichtlineares Problem mit Hard-Margin und Soft-Margin SVM

Beispiel Soft-Margin SVM



Gute Ergebnisse auch bei Ausreißern

Abbildung 3: Trenngrenze nichtlineares Problem mit Hard-Margin und Soft-Margin SVM

Pseudocode Kernel-Trick

Soft-Margin SVM mit Kernel-Trick	**Zeile**
Initialisiere x, y, C	1

Pseudocode Kernel-Trick

Soft-Margin SVM mit Kernel-Trick	**Zeile**
Initialisiere x, y, C	1
$\mathrm{Q} = (\mathrm{y}\mathrm{y}^{\mathsf{T}})\mathrm{K}$	2

Pseudocode Kernel-Trick

Soft-Margin SVM mit Kernel-Trick	**Zeile**
Initialisiere $\mathrm{x}, \mathrm{y}, C$	1
$\mathrm{Q} = (\mathrm{y}\mathrm{y}^{\mathrm{T}})\mathrm{K}$	2
$\mathrm{c} = (-1, -1, \ldots, -1)^{\mathrm{T}}$	3
$\mathrm{A} = diag\,(-1, -1, \ldots, -1)$	4
$\mathrm{b} = (0, 0, \ldots, 0)^{\mathrm{T}}$	5
$\mathrm{A}_{\mathrm{eq}} = \mathrm{y}^{\mathrm{T}}$	6
$b_{eq} = 0$	7
$\mathrm{lb} = (0, 0, \ldots, 0)^{\mathrm{T}}$	8
$\mathrm{ub} = C * (1, 1, \ldots, 1)^{\mathrm{T}}$	9
$\alpha = QPSolver\,(\mathrm{Q}, \mathrm{c}, \mathrm{A}, b, \mathrm{A}_{\mathrm{eq}}, \mathrm{b}_{\mathrm{eq}}, \mathrm{lb}, \mathrm{ub})$	10

Pseudocode Kernel-Trick

Soft-Margin SVM mit Kernel-Trick	**Zeile**
Initialisiere x, y, C	1
$\mathrm{Q} = (\mathrm{y}\mathrm{y}^\mathrm{T})\mathrm{K}$	2
$\mathrm{c} = (-1, -1, \ldots, -1)^\mathrm{T}$	3
$\mathrm{A} = diag\,(-1, -1, \ldots, -1)$	4
$\mathrm{b} = (0, 0, \ldots, 0)^\mathrm{T}$	5
$\mathrm{A}_{\mathrm{eq}} = \mathrm{y}^\mathrm{T}$	6
$b_{eq} = 0$	7
$\mathrm{lb} = (0, 0, \ldots, 0)^\mathrm{T}$	8
$\mathrm{ub} = C * (1, 1, \ldots, 1)^\mathrm{T}$	9
$\alpha = QPSolver\,(\mathrm{Q}, \mathrm{c}, \mathrm{A}, b, \mathrm{A}_{\mathrm{eq}}, \mathrm{b}_{\mathrm{eq}}, \mathrm{lb}, \mathrm{ub})$	10
$bias = y_k - \sum_{\alpha_n > 0} \alpha_n y_n KF\,(x_n, x_k)$	11

Anmerkungen zu Pseudocode Kernel-Trick

Anmerkungen

- *KF* ist die Kernel-Funktion.
- Algorithmus ist für alle Kernel (RBF, polynomiell, ...) gleich.
- Klassifizierung muss auch angepasst werden.
- Zeile 1: Initialisieren von Werte- und Klassenvektoren und Bestrafungsparameter C
- Zeile 2: Berechnen der Matrix Q
- Zeile 3: Berechnen von c
- Zeile 4, 5: Berechnen der Ungleichheitsbedingungen
- Zeile 6, 7: Berechnen der Gleichheitsbedingungen
- Zeile 8: untere Grenze (kann auch $(-\infty, -\infty, \ldots, -\infty)$ gewählt werden)
- Zeile 9: Berechnung obere Grenze mit C
- Zeile 10: Lösen mittels Quadratic Programming
- Zeile 11: Berechnung bias, x_k ist ein beliebiger Stützvektor, y_k

Pseudocode für K-Matrix bei Kernel

K **Berechnung**	**Zeile**
Initialisiere x	1
For $i = 1$ To N	2
For $j = 1$ To N	3

Pseudocode für K-Matrix bei Kernel

K **Berechnung**	**Zeile**
Initialisiere x	1
For $i = 1$ To N	2
For $j = 1$ To N	3
$\mathrm{K}\,(i,j) = KF\,(x_i, x_j)$	4
Ende For	5
Ende For	6

Pseudocode für K-Matrix bei Kernel

K **Berechnung**	**Zeile**
Initialisiere x	1
For $i = 1$ To N	2
For $j = 1$ To N	3
$\mathrm{K}(i, j) = KF(x_i, x_j)$	4
Ende For	5
Ende For	6

N Anzahl Eingabevektoren, KF Kernel-Funktion

Anstatt Skalarprodukt Kernel-Funktion

Spart Transformation in höhere Dimensionen

Beispiel Polynomieller Kernel

Kernel: $(ax^T x' + b)^Q$, $b = 1, a = 1$, Exponent Q wird variiert

Beispiel Polynomieller Kernel

Kernel: $(ax^T x' + b)^Q$, $b = 1, a = 1$, Exponent Q wird variiert

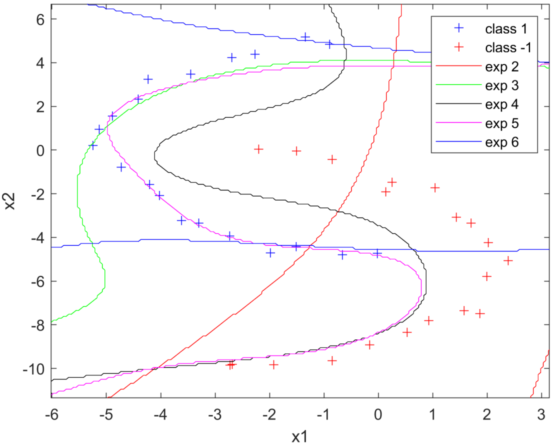


Abbildung 4: Trenngrenzen für polynomiellen Kernel mit verschiedenen Exponenten Q

Beispiel Polynomieller Kernel mit $Q = 4$

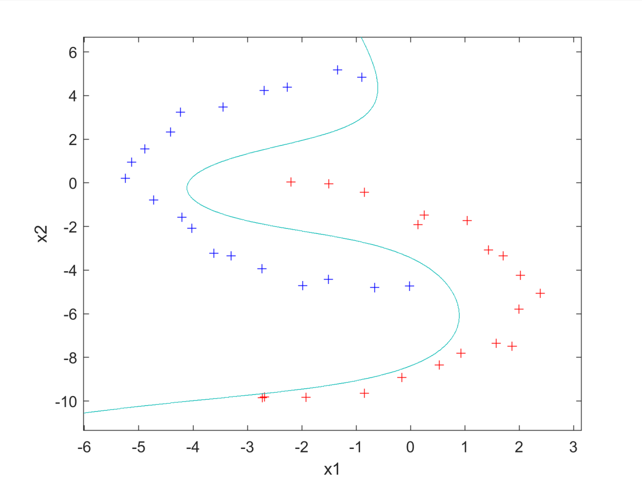


Abbildung 5: Trenngrenzen für polynomiellen Kernel $(ax^T x' + b)^Q$ mit $Q = 4$

Beispiel RBF Kernel

Parameter γ muss richtig eingestellt werden, hier: $\gamma = 1$

Beispiel RBF Kernel

Parameter γ muss richtig eingestellt werden, hier: $\gamma = 1$

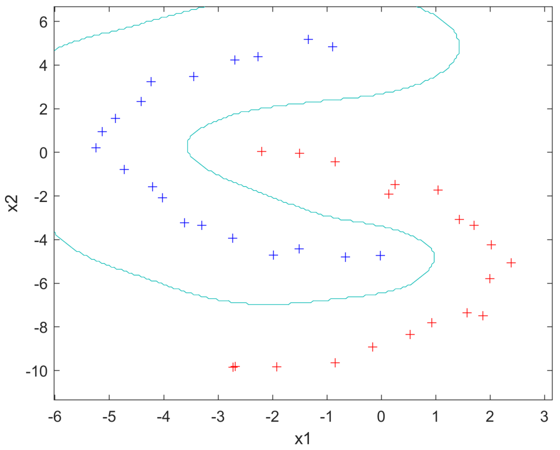
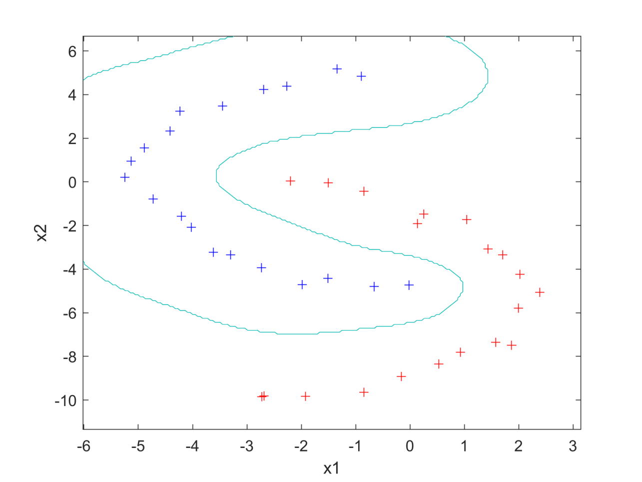


Abbildung 6: Trenngrenzen für RBF Kernel mit $\gamma = 1$ auf nicht linear trennbarem Datensatz

Beispiel RBF Kernel

Parameter γ muss richtig eingestellt werden, hier: $\gamma = 1$

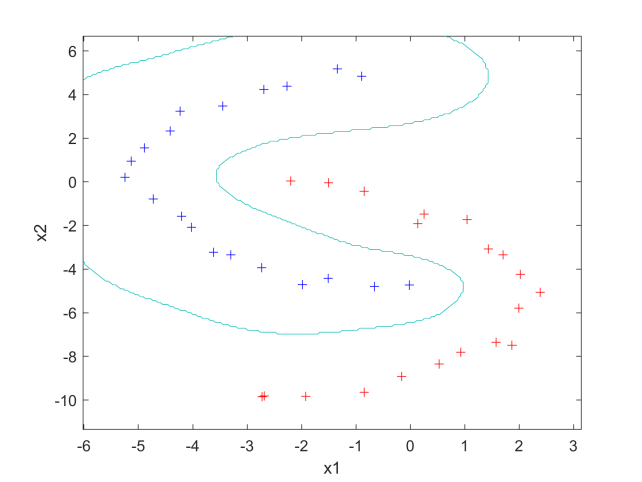


Blaue Punkte umschlossen

Abbildung 6: Trenngrenzen für RBF Kernel mit $\gamma = 1$ auf nicht linear trennbarem Datensatz

Beispiel RBF Kernel

Parameter γ muss richtig eingestellt werden, hier: $\gamma = 1$



Blaue Punkte umschlossen

γ nicht korrekt -> z.B. eigene Grenze für jeden Punkt

Abbildung 6: Trenngrenzen für RBF Kernel mit $\gamma = 1$ auf nicht linear trennbarem Datensatz

Fragen?