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

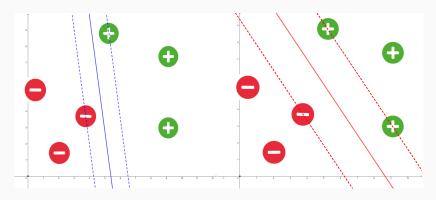
Einführung

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

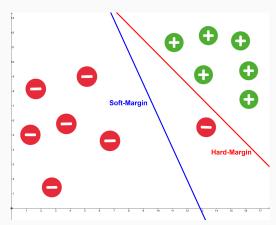
Ziel: lineare Trennung zweier Klassen
Wie?: Definition einer (Hyper-) Ebene
Nebenbedingung: Möglichst großer freier Bereich



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:

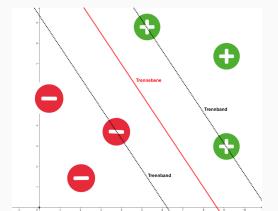
$$y = sign(w^Tx_n + b)$$
 ist gleichbedeutend mit $w^Tx_n + b > 0$ für $y_n = +1$ $w^Tx_n + b < 0$ für $y_n = -1$

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

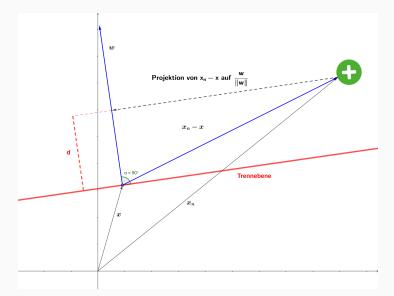
$$y_n(w^Tx_n + b) \ge 1$$
 für $y_n = +1$
 $y_n(w^Tx_n + b) \ge 1$ für $y_n = -1$

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

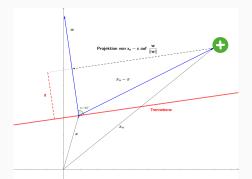


Normalabstand eines Punktes zur Ebene

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

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

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



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:

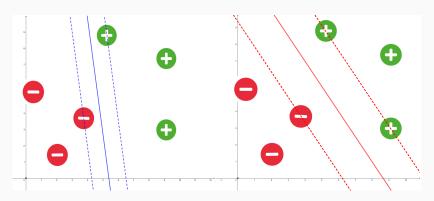
$$D = \frac{1}{\|w\|}$$

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 :

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

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

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:

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

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

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 $(x_n^T x_m)$:

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

Lösung mittels QP-Solver

Ergebnis: α Vektor mit α_n Lagrange-Multiplikatoren

Schlupfterm

Reminder Ausgangsproblem:

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

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

$$\alpha_n(y_n(w^Tx_n+b)-1)$$
 ("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

 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:

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

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:

$$\min_{x} = \frac{1}{2} x^{T} Q x + c x + d$$

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 \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:

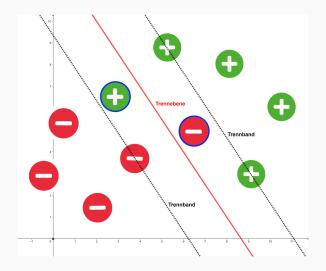
$$y = sign(w^T x + b)$$

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:

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

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

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

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

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: $\alpha_n \leq \infty$)

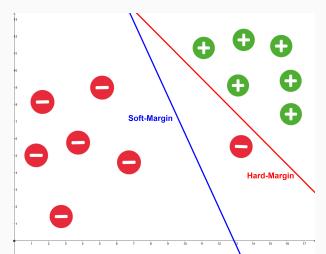
Umgekehrt: Soft-Margin mit $C \to \infty$ entspricht Hard-Margin Lösung: Wie zuvor gezeigt mit QP-Solver

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.

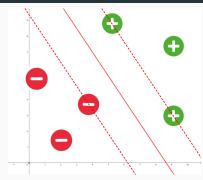


Abbildung 1: Abhängig von der Lage der Trennebene entstehen schmale (blau) oder breite (rot) Trennbänder. Ziel ist die Maximierung der Breite des Trennbands durch die Ermittlung der optimalen Lage der Trennebene.

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 example¹ Burges (1998)

¹Platt 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 $\Phi(x) : \mathbb{R}^K \to \mathbb{R}^L$

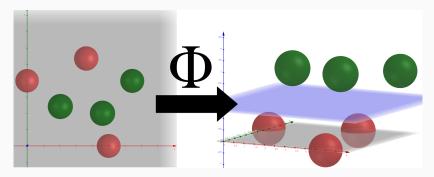


Abbildung 2: Transformation Eingabevektoren macht linear trennbar

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 $0 \le \alpha_n \le C$ für $n = 1..N$

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

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

Anzahl Lagrangefaktoren α 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
$$0 \le \alpha_n \le C \text{ für } n = 1..N$$

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

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

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

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

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 $x, x' \in \mathbb{R}^2$:

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

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 $K(x, x') = (1 + x^T x')^2$ entspricht Skalarprodukt der mit Φ 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:

$$K(x,x') = (ax^Tx' + b)^Q$$

Verallgemeinerung des Beispiels

Seien Eingabevektoren $x \in \mathbb{R}^d$ und Transformationsfunktion

 $\Phi: \mathbb{R}^d o \mathbb{Z}$ ein Polynom der Ordnung Q

Kernel-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 eines Polynoms vom Grad ${\cal Q}$ 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 eines Polynoms vom 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:

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

 γ ist wählbarer Parameter

Weitere Kernel-Funktion: Radials 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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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:

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

Funktion Φ muss bekannt sein

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

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

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

Funktion Φ muss bekannt sein

Transformation nötig

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

45 / 52

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

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

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):

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

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

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

Einsetzen Gleichung (18) in Gleichung (17):

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

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

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

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

Einsetzen Gleichung (18) in Gleichung (17):

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

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

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

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

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

Einsetzen Gleichung (18) in Gleichung (17):

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

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

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

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

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

• 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
- 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

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 $x_n^Tx_m$

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

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

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

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

An QP-Solver übergeben und lpha erhalten

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

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

$$\min_{\alpha} \qquad Q = \begin{bmatrix} y_1 y_1 K(x_1, x_1) & y_1 y_2 K(x_1, x_2) & \dots & y_1 y_N K(x_1, x_N) \\ y_2 y_1 K(x_2, x_1) & y_2 y_2 K(x_2, x_2) & \dots & y_2 y_N K(x_2, x_N) \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ y_N y_1 K(x_N, x_1) & y_N y_2 K(x_N, x_2) & \dots & y_N y_N K(x_N, x_N) \end{bmatrix}$$

$$\text{für} \qquad y^T \alpha = 0$$

An QP-Solver übergeben und α erhalten

SVM in Kombination mit Kernel-Funktionen auf beliebige binäre

Klassifikationsprobleme anwendbar

 $0 < \alpha < \infty$

Pseudocode und Beispiele

A test with tabularx

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

Anmerkungen

Zeile 1: Initialisieren von Werte-

und Klassenvek-

Zeile 2: Berech-

toren

nen der Matrix Q Zeile 3: Berech-

nen von c

Zeile 4, 5: Be-

rechnen der Ungleichheitsbe-

dingungen Zeile 6, 7: Be-

rechnen

Pseudocode Hard-Margin SVM

Hard-Margin SVM	Zeile
Initialisiere x, y	1
$Q = (yy^T)K$	2
$c = (-1, -1, \dots, -1)^T$	3
$A = diag(-1, -1, \dots, -1)$	4
$b = (0, 0, \dots, 0)^{T}$	5
$A_{eq} = y^{T}$	6
$b_{eq}=0$	7
$ b = (0, 0,, 0)^{T}$	8
$ub = C * (1, 1,, 1)^{T}$	9
$\alpha = QPSolver(Q, c, A, b, A_{eq}, b_{eq})$	10
$w = \sum_{n=SV} \alpha_n y_n x_n$	11
$bias = \frac{1}{y_n} - \mathbf{w}^T x_n$	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).
- Platt, John (Apr. 1998). Sequential Minimal Optimization: A Fast 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/.