

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

Intuition

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

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

Annahme: w und b bereits bekannt

Wie klassifiziert man einen Punkt x_n ?

Annahme: w und b bereits bekannt

Wie klassifiziert man einen Punkt x_n ?

Liegt x_n über oder unter Ebene = Vorzeichen:

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

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

$$w^T x_n + b \geq +1 \quad \text{für } y_n = +1$$

$$w^T x_n + b \leq -1 \quad \text{für } y_n = -1$$



Beidseitige Multiplikation mit y_n

$$y_n(w^T x_n + b) \geq 1 \quad \text{für } y_n = +1$$

$$y_n(w^T x_n + b) \geq 1 \quad \text{für } y_n = -1$$

Beidseitige Multiplikation mit y_n

$$y_n(w^T x_n + b) \geq 1 \quad \text{für } y_n = +1$$

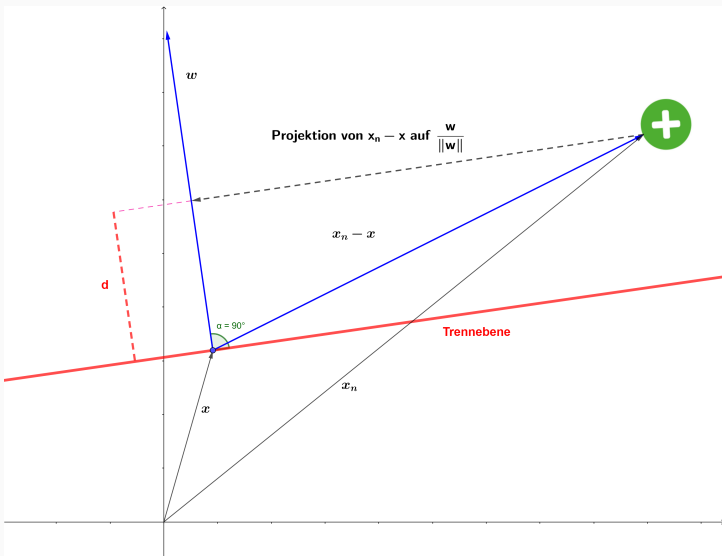
$$y_n(w^T x_n + b) \geq 1 \quad \text{für } y_n = -1$$

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

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

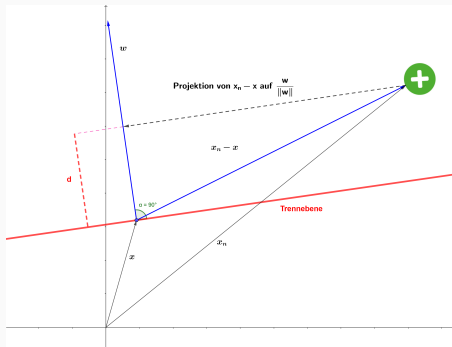
Normalabstand eines Punktes zur Ebene

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



Normalabstand eines Punktes zur Ebene

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



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 :

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

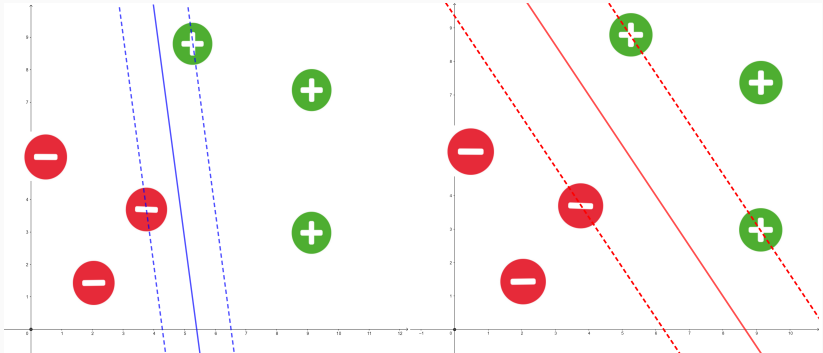
Weil D der minimale Normalabstand zur Ebene ist, ist $2D$ die Breite des freien Trennbands.

Reminder

Ziel: lineare Trennung mit möglichst breitem, freien Trennband

Entspricht Maximierung:

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



$$\begin{aligned} \max_w \quad & \frac{1}{\|w\|} \\ \text{mit} \quad & \min_{n=1..N} |w^T x_n + b| = 1 \end{aligned}$$

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

Beidseitige Multiplikation mit y_n zur Vermeidung des Betrags:

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

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

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

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:

$$\begin{array}{ll} \min_{\mathbf{w}} & \frac{1}{2} \mathbf{w}^T \mathbf{w} \\ \text{mit} & y_n(\mathbf{w}^T \mathbf{x}_n + b) - 1 \geq 0 \text{ für } n = 1..N \end{array}$$

Aufstellen der Lagrange Gleichung

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

$$\begin{aligned} \min_{w,b} \quad & \mathcal{L}(w, b, \alpha) = \frac{1}{2} w^T w - \sum_{n=1}^N \alpha_n (y_n (w^T x_n + b) - 1) \\ \max_{\alpha_n} \quad & \alpha_n \geq 0 \text{ für } n = 1..N \end{aligned}$$

Lösung durch 0 setzen der partiellen Ableitungen:

$$\begin{aligned} \nabla_w \mathcal{L} &\stackrel{!}{=} \vec{0} \\ \frac{\partial}{\partial b} \mathcal{L} &\stackrel{!}{=} 0 \end{aligned}$$

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:

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

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:

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

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 ($x_n^T x_m$):

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

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

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

Lösung mittels QP-Solver

Ergebnis: α Vektor mit α_n Lagrange-Multiplikatoren

Reminder Ausgangsproblem:

$$\min_{w,b} \quad \mathcal{L}(w, b, \alpha) = \frac{1}{2} w^T w - \sum_{n=1}^N \alpha_n (y_n (w^T x_n + b) - 1)$$
$$\max_{\alpha_n} \quad \alpha_n \geq 0 \text{ für } n = 1..N$$

$\alpha_n (y_n (w^T x_n + b) - 1)$ („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!

$y_n(w^T x_n + b) = 1$ 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

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 \rightarrow Lösungs-Frameworks:

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

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:

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

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

Lösung mittels QP-Solver

Ergebnis des QP-Solvers: $\alpha = (\alpha_1, \alpha_2, \dots, \alpha_n)$

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 :

$$y = \text{sign}(w^T x + b)$$

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

$$w^T x_n + b \geq +1 - \xi_n \quad \text{für } y_n = +1$$

$$w^T x_n + b \leq -1 + \xi_n \quad \text{für } y_n = -1$$

Wann kann einzelne Fehlklassifikation auftreten? Wenn $\xi_n > 1$

Obere Grenze Anzahl Fehler:

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

$C \in \mathbb{R}, C \geq 0$: „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:

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

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

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

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

Soft-Margin SVM Optimierungsproblem

Soft-Margin Optimierungsproblem:

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

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

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

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

Umgekehrt: Soft-Margin mit $C \rightarrow \infty$ entspricht Hard-Margin

Lösung: Wie zuvor gezeigt mit QP-Solver

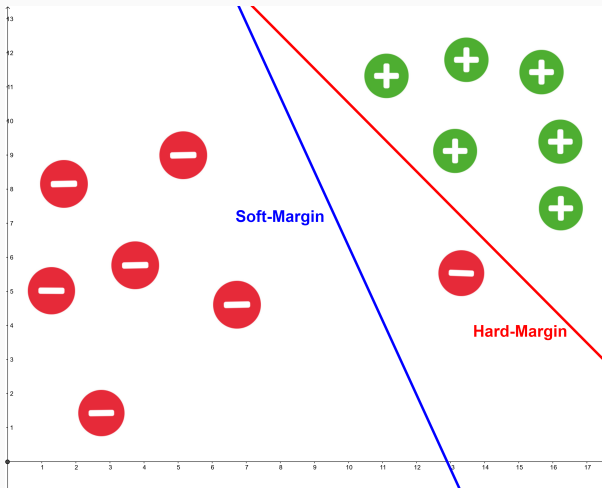
Vergleich Hard- & Soft-Margin Support Vector Machine

Vergleich Hard- & Soft-Margin SVM

Hard-Margin: einzelne Ausreißer bestimmen Lage der Ebene

Soft-Margin: Fehlklassifikationen zugunsten besserer

Gesamt-Trennung



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.

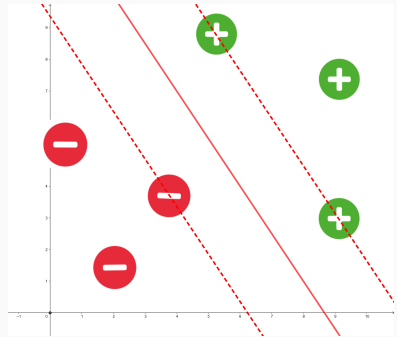


Abbildung 1: Abhängig von der Lage der Trennebene entstehen schmale (blau) oder breite (rot) Trennbänder. Ziel ist die Maximierung der Breite des Trennbands durch die Ermittlung der optimalen Lage der Trennebene.

$$y = \text{sign}(w^T x + b) \quad \text{gleichbedeutend mit} \quad (14a)$$

$$w^T x + b > 0 \quad \text{für } y = +1 \quad (14b)$$

$$w^T x + b < 0 \quad \text{für } y = -1 \quad (14c)$$

In Gleichung (14) wird ..

Footcite example¹

Burges (1998)

¹Platt 1998.

Nichtlineare Trennung

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

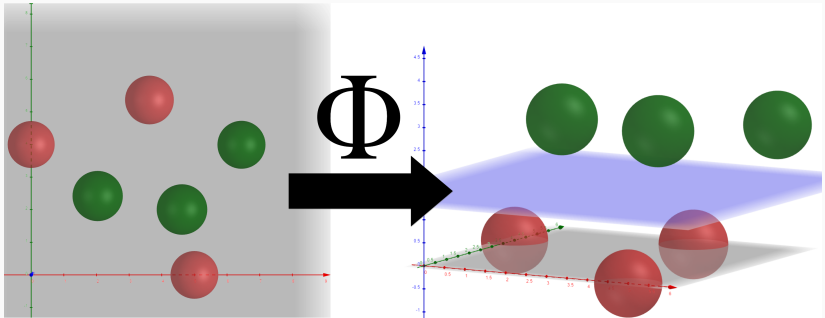


Abbildung 2: Transformation Eingabevektoren macht linear trennbar

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:

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

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

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

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

Optimierungsproblem transformiert

Optimierungsproblem mit transformierten Eingabevektoren:

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

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

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

Anzahl Lagrange faktoren α und Dimension der Q -Matrix hängen von Anzahl Eingabevektoren ab, nicht von der Dimension
 \Rightarrow 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: $z = \Phi(x)$

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

mit $0 \leq \alpha_n \leq C$ für $n = 1..N$

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

Kernel Trick

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

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

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

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

Berechnung von w und b :

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

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

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

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

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

$$\begin{aligned} K(x, x') &= (1 + x^T x')^2 = \\ &= (1 + x_1 x'_1 + x_2 x'_2)^2 = \\ &= 1 + x_1^2 x'^2_1 + x_2^2 x'^2_2 + 2x_1 x'_1 + 2x_2 x'_2 + 2x_1 x'_1 x_2 x'_2 \end{aligned}$$

Beispiel Kernel-Funktion

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' :

Beispiel Kernel-Funktion

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' :

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

Beispiel Kernel-Funktion

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' :

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

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

Beispiel Kernel-Funktion

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' :

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

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

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

Beispiel Kernel-Funktion

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'

Polynomieller Kernel

Verallgemeinerung des Beispiels

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

$\Phi : \mathbb{R}^d \rightarrow \mathbb{Z}$ 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

$\Phi : \mathbb{R}^d \rightarrow \mathbb{Z}$ 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

$\Phi : \mathbb{R}^d \rightarrow \mathbb{Z}$ 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:

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

Polynomieller Kernel

Verallgemeinerung des Beispiels

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

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

Kernel-Funktion:

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

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

Verallgemeinerung des Beispiels

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

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

Kernel-Funktion:

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

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:

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

Radial Basis Function Kernel

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

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

γ ist wählbarer Parameter

Radial Basis Function Kernel

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

Beweis für einfachsten Fall:

Beweis für einfachsten Fall:

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

Beweis für einfachsten Fall:

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

Beweis für einfachsten Fall:

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

Beweis für einfachsten Fall:

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

Beweis unendliche Dimensionalität

Beweis für einfachsten Fall:

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

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

Beweis unendliche Dimensionalität

Beweis für einfachsten Fall:

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

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

Beweis unendliche Dimensionalität

Beweis für einfachsten Fall:

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

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

Hat für Skalarprodukt benötigte Symmetrie $\exp(-x^2) \cdot \exp(-x'^2)$
und $(x)^k \cdot (x')^k$

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:

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

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

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

Funktion Φ muss bekannt sein

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

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

Funktion Φ muss bekannt sein

Transformation nötig

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

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

Funktion Φ muss bekannt sein

Transformation nötig

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

$$w = \sum_{z_n \text{ ist SV}} \alpha_n y_n z_n \quad (18)$$

$$w = \sum_{z_n \text{ ist SV}} \alpha_n y_n z_n \quad (18)$$

Einsetzen Gleichung (18) in Gleichung (17):

$$w = \sum_{z_n \text{ ist SV}} \alpha_n y_n z_n \quad (18)$$

Einsetzen Gleichung (18) in Gleichung (17):

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

$$w = \sum_{z_n \text{ ist SV}} \alpha_n y_n z_n \quad (18)$$

Einsetzen Gleichung (18) in Gleichung (17):

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

$$w = \sum_{z_n \text{ ist SV}} \alpha_n y_n z_n \quad (18)$$

Einsetzen Gleichung (18) in Gleichung (17):

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

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

$$w = \sum_{z_n \text{ ist SV}} \alpha_n y_n z_n \quad (18)$$

Einsetzen Gleichung (18) in Gleichung (17):

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

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

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

$$w = \sum_{z_n \text{ ist SV}} \alpha_n y_n z_n \quad (18)$$

Einsetzen Gleichung (18) in Gleichung (17):

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

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

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

$$w = \sum_{z_n \text{ ist SV}} \alpha_n y_n z_n \quad (18)$$

Einsetzen Gleichung (18) in Gleichung (17):

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

Einsetzen von Gleichung (18) 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 vollständig definiert

- SVM vollständig definiert
- Transformationsfunktion Φ muss nicht bekannt sein

- SVM vollständig definiert
- Transformationsfunktion 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 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
- 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 $x_1 \dots x_N$.

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 $x_1 \dots x_N$. 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 $x_n^T x_m$

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

$$\text{mit} \quad Q = \begin{bmatrix} y_1 y_1 K(x_1, x_1) & y_1 y_2 K(x_1, x_2) & \dots & y_1 y_N K(x_1, x_N) \\ y_2 y_1 K(x_2, x_1) & y_2 y_2 K(x_2, x_2) & \dots & y_2 y_N K(x_2, x_N) \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ y_N y_1 K(x_N, x_1) & y_N y_2 K(x_N, x_2) & \dots & y_N y_N K(x_N, x_N) \end{bmatrix}$$

$$\text{für} \quad y^T \alpha = 0$$

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

Anpassung QP-Solver

Lösung mittels Quadratic Programming Solver weiter möglich

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

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

$$\text{mit} \quad Q = \begin{bmatrix} y_1 y_1 K(x_1, x_1) & y_1 y_2 K(x_1, x_2) & \dots & y_1 y_N K(x_1, x_N) \\ y_2 y_1 K(x_2, x_1) & y_2 y_2 K(x_2, x_2) & \dots & y_2 y_N K(x_2, x_N) \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ y_N y_1 K(x_N, x_1) & y_N y_2 K(x_N, x_2) & \dots & y_N y_N K(x_N, x_N) \end{bmatrix}$$

$$\text{für} \quad y^T \alpha = 0$$

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

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 $x_n^T x_m$

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

$$\text{mit} \quad Q = \begin{bmatrix} y_1 y_1 K(x_1, x_1) & y_1 y_2 K(x_1, x_2) & \dots & y_1 y_N K(x_1, x_N) \\ y_2 y_1 K(x_2, x_1) & y_2 y_2 K(x_2, x_2) & \dots & y_2 y_N K(x_2, x_N) \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ y_N y_1 K(x_N, x_1) & y_N y_2 K(x_N, x_2) & \dots & y_N y_N K(x_N, x_N) \end{bmatrix}$$

$$\text{für} \quad y^T \alpha = 0$$

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

An QP-Solver übergeben und 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

Pseudocode Hard-Margin SVM

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

Pseudocode Hard-Margin SVM

Hard-Margin SVM	Zeile
Initialisiere x, y	1
$Q = (yy^T)K$	2
$c = (-1, -1, \dots, -1)^T$	3
$A = \text{diag}(-1, -1, \dots, -1)$	4
$b = (0, 0, \dots, 0)^T$	5

Pseudocode Hard-Margin SVM

Hard-Margin SVM	Zeile
Initialisiere x, y	1
$Q = (yy^T)K$	2
$c = (-1, -1, \dots, -1)^T$	3
$A = \text{diag}(-1, -1, \dots, -1)$	4
$b = (0, 0, \dots, 0)^T$	5
$A_{eq} = y^T$	6
$b_{eq} = 0$	7

Pseudocode Hard-Margin SVM

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

Pseudocode Hard-Margin SVM

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

Pseudocode Hard-Margin SVM

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

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 $j = 2$ To N	3

Pseudocode Berechnung K -Matrix

K Berechnung	Zeile
Initialisiere x	1
For $i = 1$ To N	2
For $j = 2$ To N	3
$K(i, j) = x_i \cdot x_j$	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

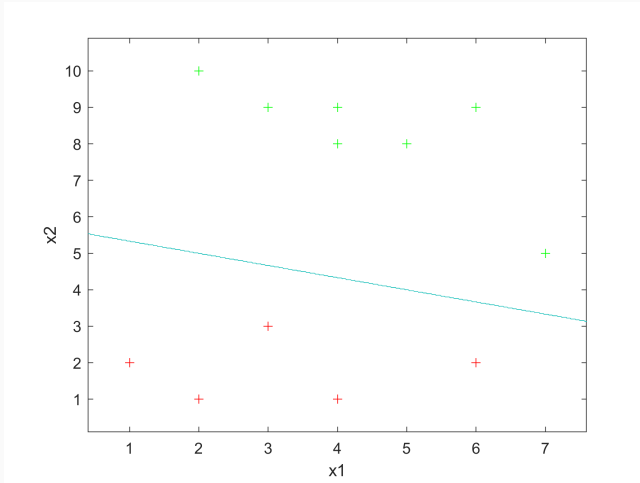


Abbildung 3: Beispiel Trenngrenze lineares Problem mit Hard-Margin SVM

Pseudocode Soft-Margin SVM

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

Pseudocode Soft-Margin SVM

Soft-Margin SVM	Zeile
Initialisiere x, y, C	1
$Q = (yy^T)K$	2
$c = (-1, -1, \dots, -1)^T$	3
$A = \text{diag}(-1, -1, \dots, -1)$	4
$b = (0, 0, \dots, 0)^T$	5
$A_{eq} = y^T$	6
$b_{eq} = 0$	7

Pseudocode Soft-Margin SVM

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

Pseudocode Soft-Margin SVM

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

Pseudocode Soft-Margin SVM

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

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 $(-\infty, -\infty, \dots, -\infty)$ 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

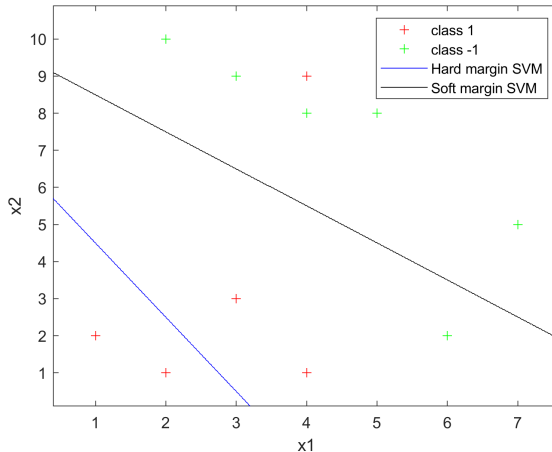
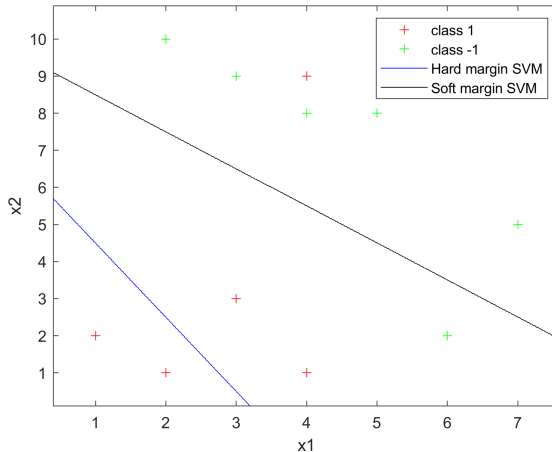


Abbildung 4: Trenngrenze nichtlineares Problem mit Hard-Margin und Soft-Margin SVM

Beispiel Soft-Margin SVM



Gute
Ergebnisse
auch bei
Ausreißern

Abbildung 4: Trenngrenze nichtlineares Problem mit Hard-Margin und Soft-Margin SVM

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
$Q = (yy^T)K$	2

Pseudocode Kernel-Trick

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

Pseudocode Kernel-Trick

Soft-Margin SVM mit Kernel-Trick	Zeile
Initialisiere x, y, C	1
$Q = (yy^T)K$	2
$c = (-1, -1, \dots, -1)^T$	3
$A = \text{diag}(-1, -1, \dots, -1)$	4
$b = (0, 0, \dots, 0)^T$	5
$A_{\text{eq}} = y^T$	6
$b_{\text{eq}} = 0$	7
$lb = (0, 0, \dots, 0)^T$	8
$ub = C * (1, 1, \dots, 1)^T$	9
$\alpha = \text{QPSolver}(Q, c, A, b, A_{\text{eq}}, b_{\text{eq}}, lb, ub)$	10
$\text{bias} = y_k - \sum_{\alpha_n > 0} \alpha_n y_n KF(x_n, x_k)$	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 $(-\infty, -\infty, \dots, -\infty)$ 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, $y_{k8} / 63$

Pseudocode für K -Matrix bei Kernel

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

Pseudocode für K -Matrix bei Kernel

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

N Suchraumdimensionalität, 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

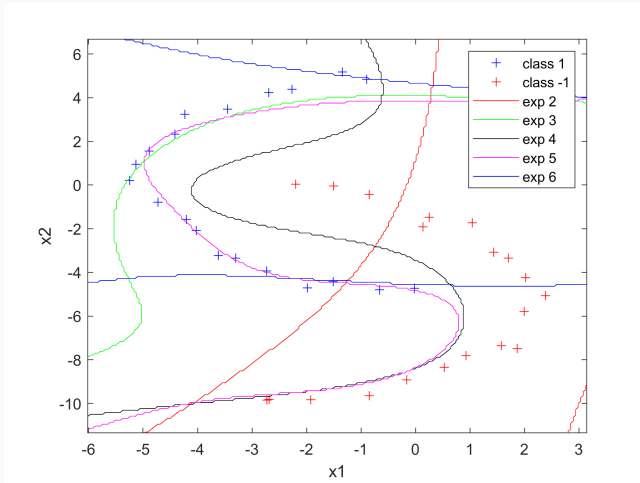


Abbildung 5: Trenngrenzen für polynomiellen Kernel mit verschiedenen Exponenten Q

Beispiel Polynomieller Kernel mit $Q = 4$

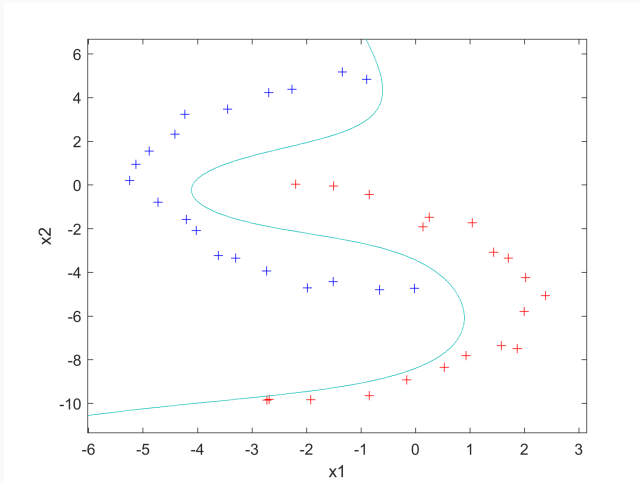


Abbildung 6: Trenngrenzen für polynomiellen Kernel $(ax^T x' + b)^Q$ mit $Q = 4$

Beispiel RBF Kernel

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

Beispiel RBF Kernel

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

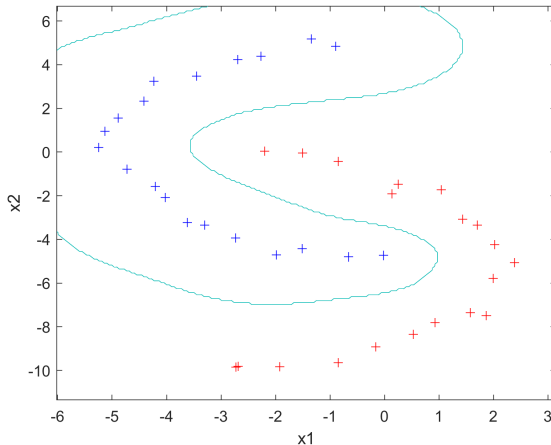
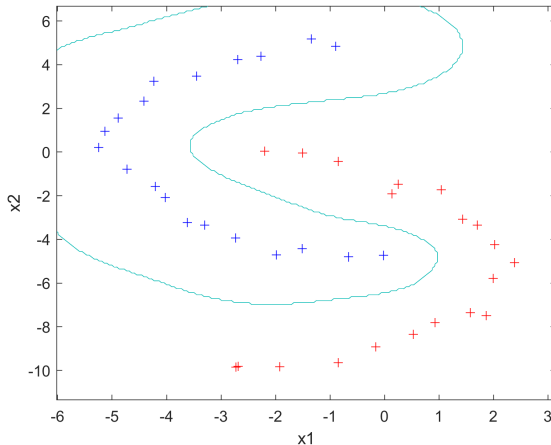


Abbildung 7: Trenngrenzen für RBF Kernel mit $\gamma = 1$ auf nicht linear trennbarem Datensatz

Beispiel RBF Kernel

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

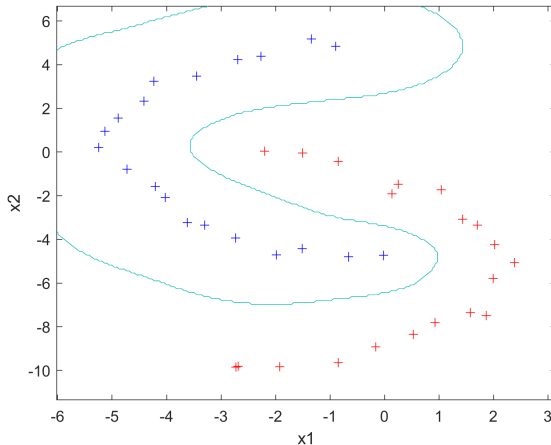


Blaue Punkte
umschlossen

Abbildung 7: 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 \rightarrow
z.B. eigene
Grenze für
jeden Punkt

Abbildung 7: Trenngrenzen für RBF Kernel mit $\gamma = 1$ auf nicht linear trennbarem Datensatz

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/>.