# Support Vector Machines

André Hopfgartner & Matthias Rupp

08.06.2021

Vorarlberg University of Applied Sciences

FH 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

# 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

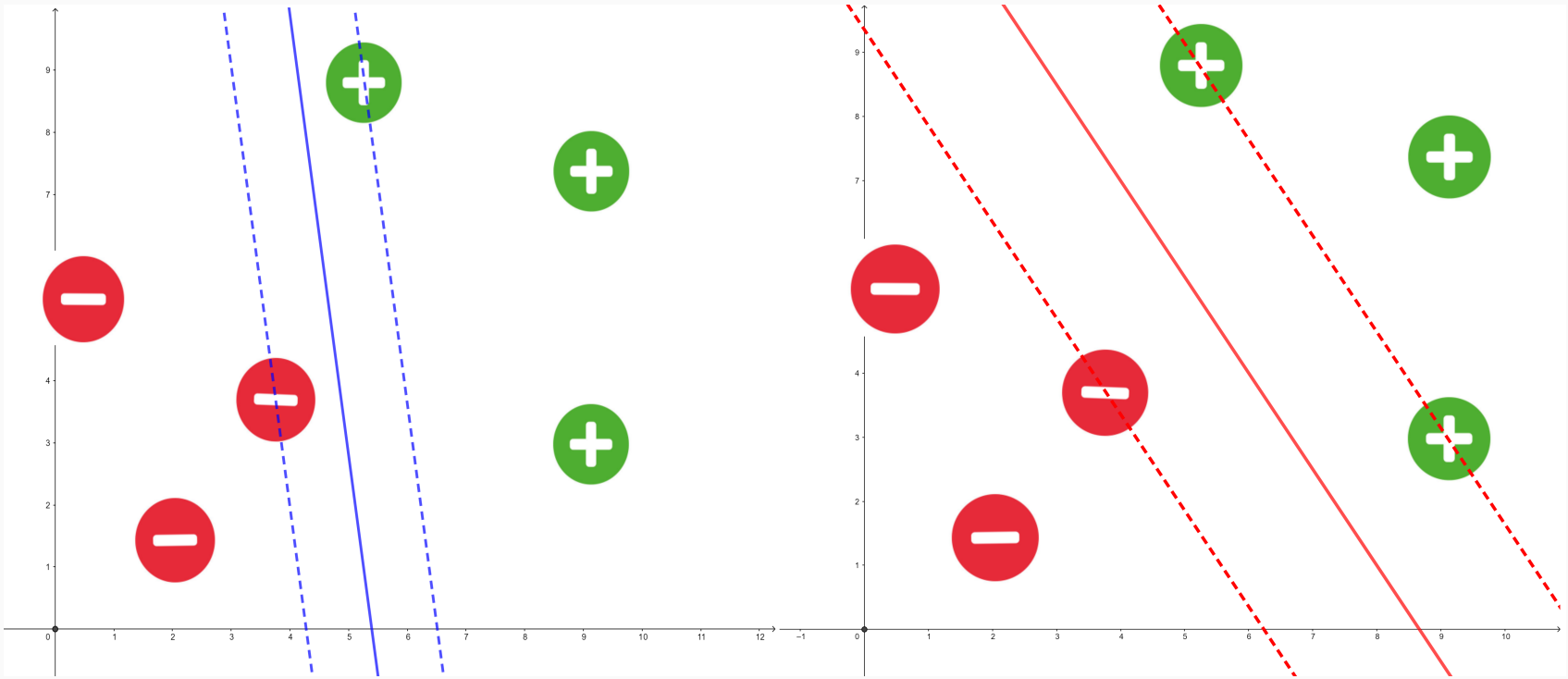
*Nebenbedingung*: Möglichst großer freier Bereich

# Intuition

*Ziel*: lineare Trennung zweier Klassen

*Wie?*: Definition einer (Hyper-) Ebene

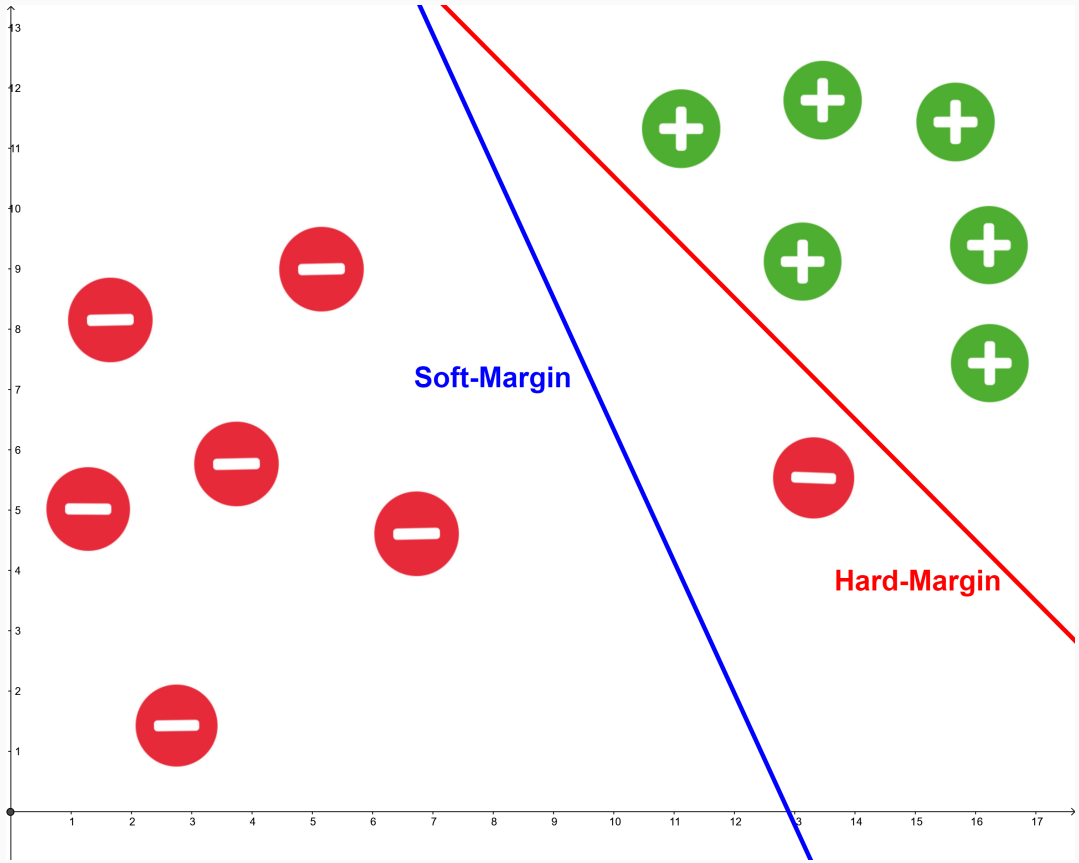
*Nebenbedingung*: Möglichst großer freier Bereich



# Arten von SVM

*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:

$$y = sign(w^T x_n + b) \quad \text{ist gleichbedeutend mit}$$

$$w^T x_n + b > 0 \quad \text{für } y_n = +1$$

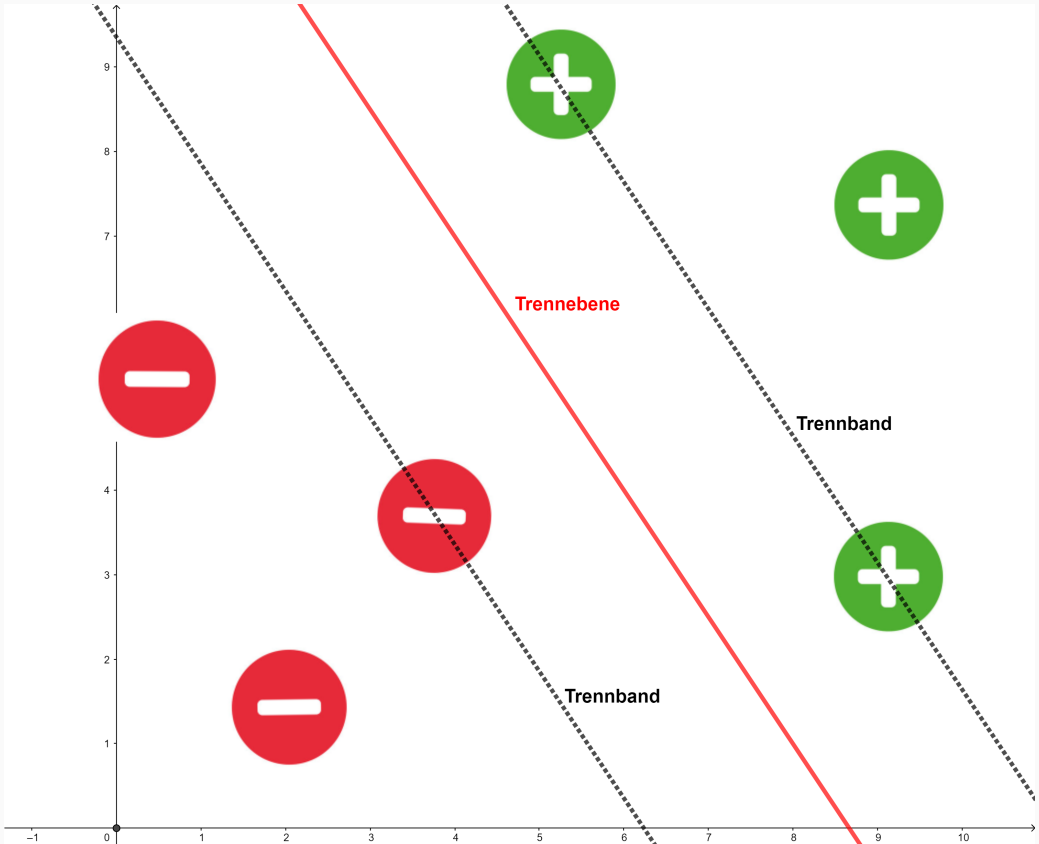
$$w^T x_n + b < 0 \quad \text{für } y_n = -1$$

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

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



# Einführung eines Trennbandes

Beidseitige Multiplikation mit $y_n$

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

# Einführung eines Trennbandes

Beidseitige Multiplikation mit $y_n$

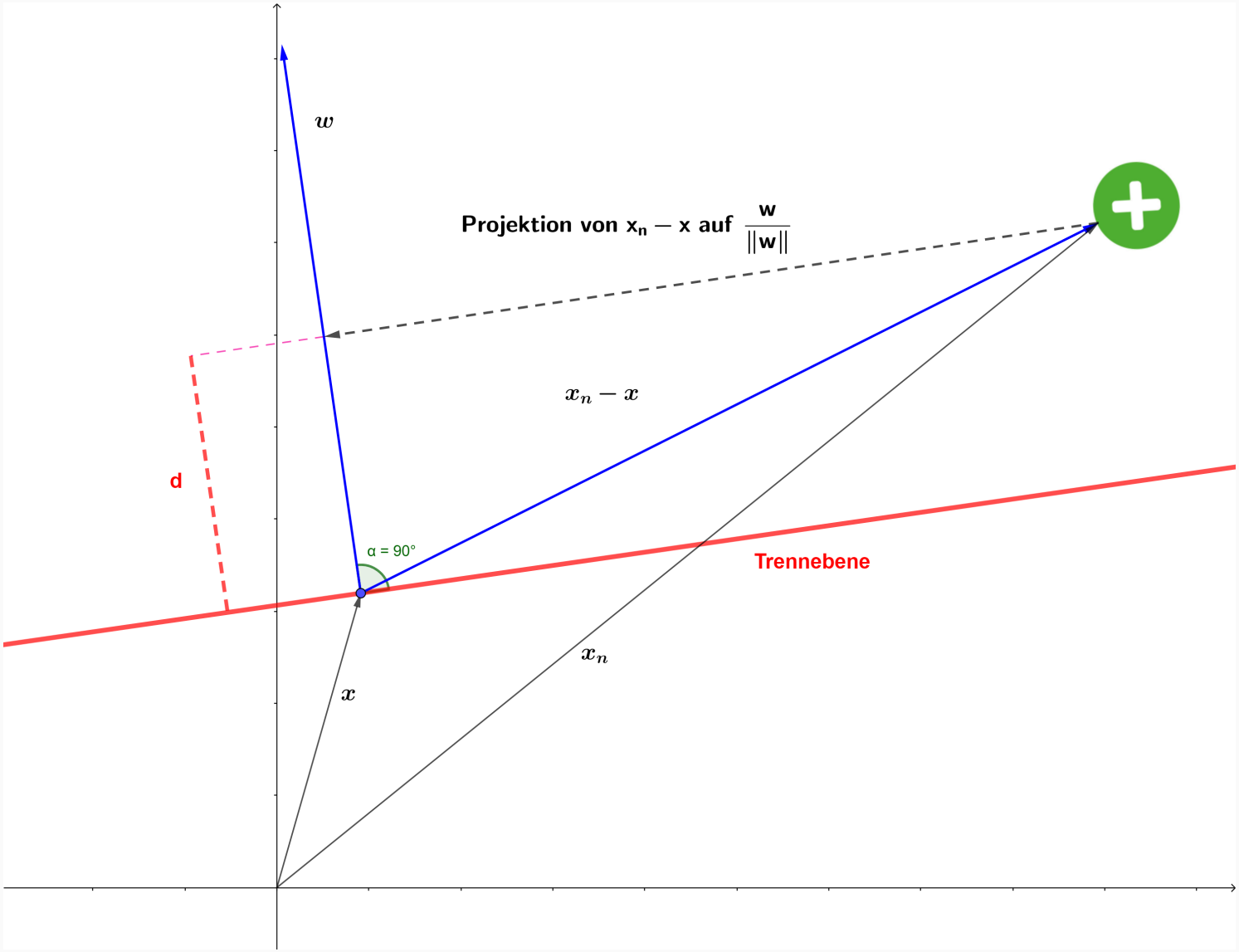
$$y_n(w^T x_n + b) \geq 1 \qquad \text{für } y_n = +1$$
$$y_n(w^T x_n + b) \geq 1 \qquad \text{für } y_n = -1$$

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

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

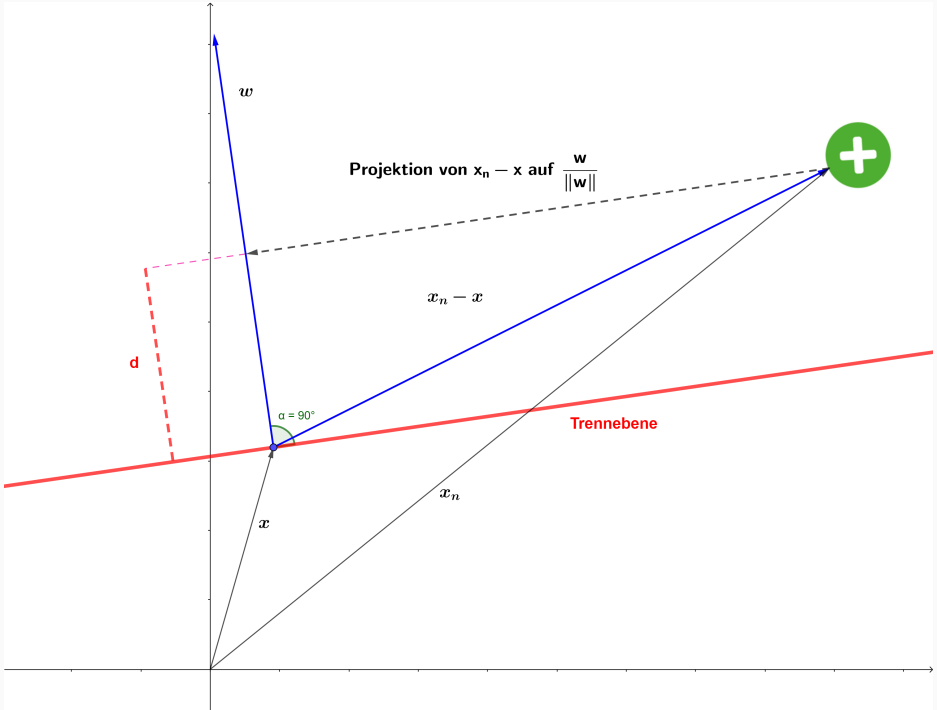
# Normalabstand eines Punktes zur Ebene

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



# Normalabstand eines Punktes zur Ebene

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



# 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 $D$:

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

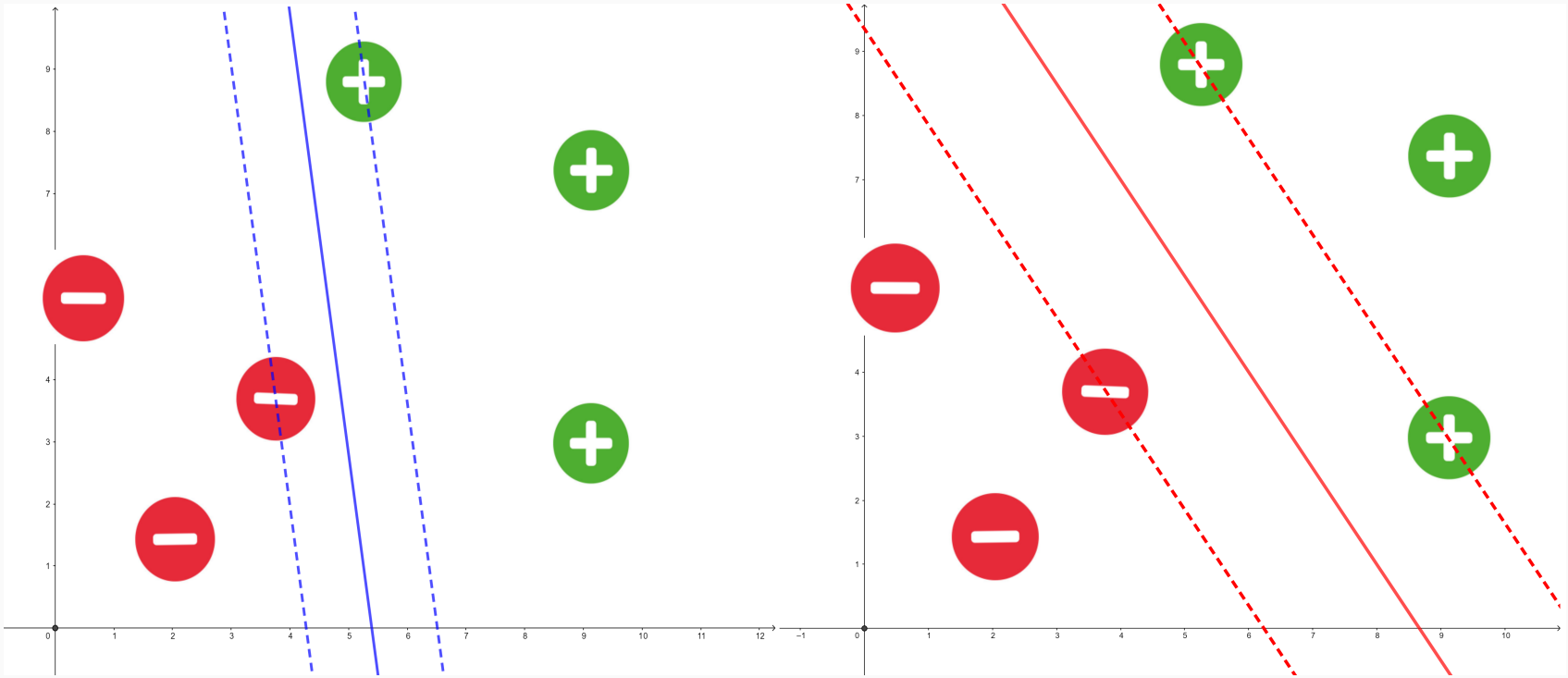
Weil $D$ der minimale Normalabstand zur Ebene ist, ist $2D$ die Breite des freien Trennbands.

# Reminder

Ziel: lineare Trennung mit möglichst breitem, freien Trennband

Entspricht Maximierung:

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



# Optimierungsproblem

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

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

Beidseitige Multiplikation mit $y_n$ zur Vermeidung des Betrags:

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

# 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

# Lagrange Optimierung

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:

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

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

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:

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

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

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 ($x_n^T x_m$):

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

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

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

Lösung mittels QP-Solver

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

# Schlupfterm

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

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

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

vereinfacht werden:

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

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:

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

# Lösung mittels QP-Solver

# Lösung mittels QP-Solver

Standardform von QP-Problemen:

$$\min_x = \frac{1}{2} x^T Q x + cx + d$$

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:

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

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

# 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:

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

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

$Q$ 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 $x_k$:

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

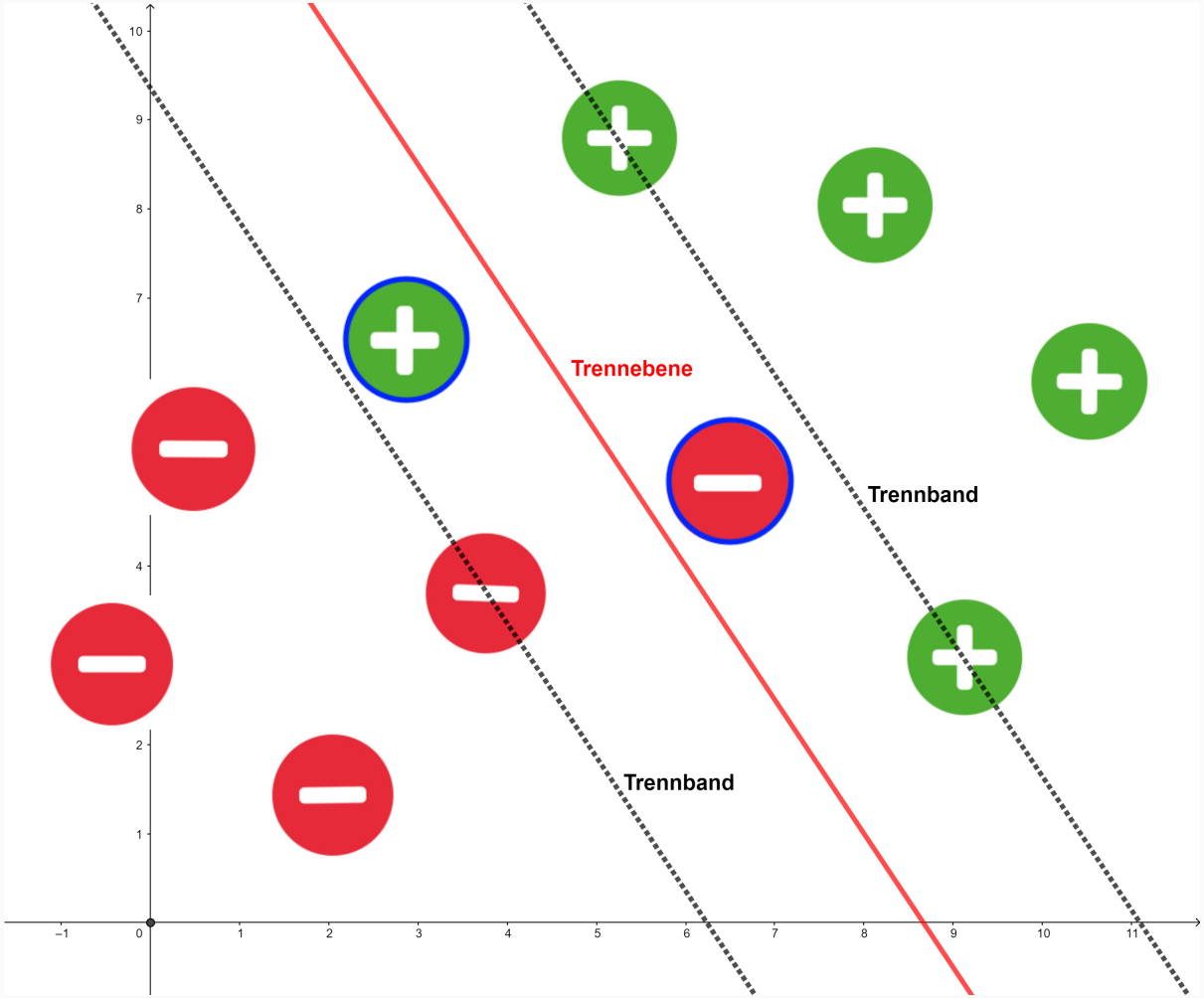
Klassifikation neuer Eingaben $x$:

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

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

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

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:

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

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:

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

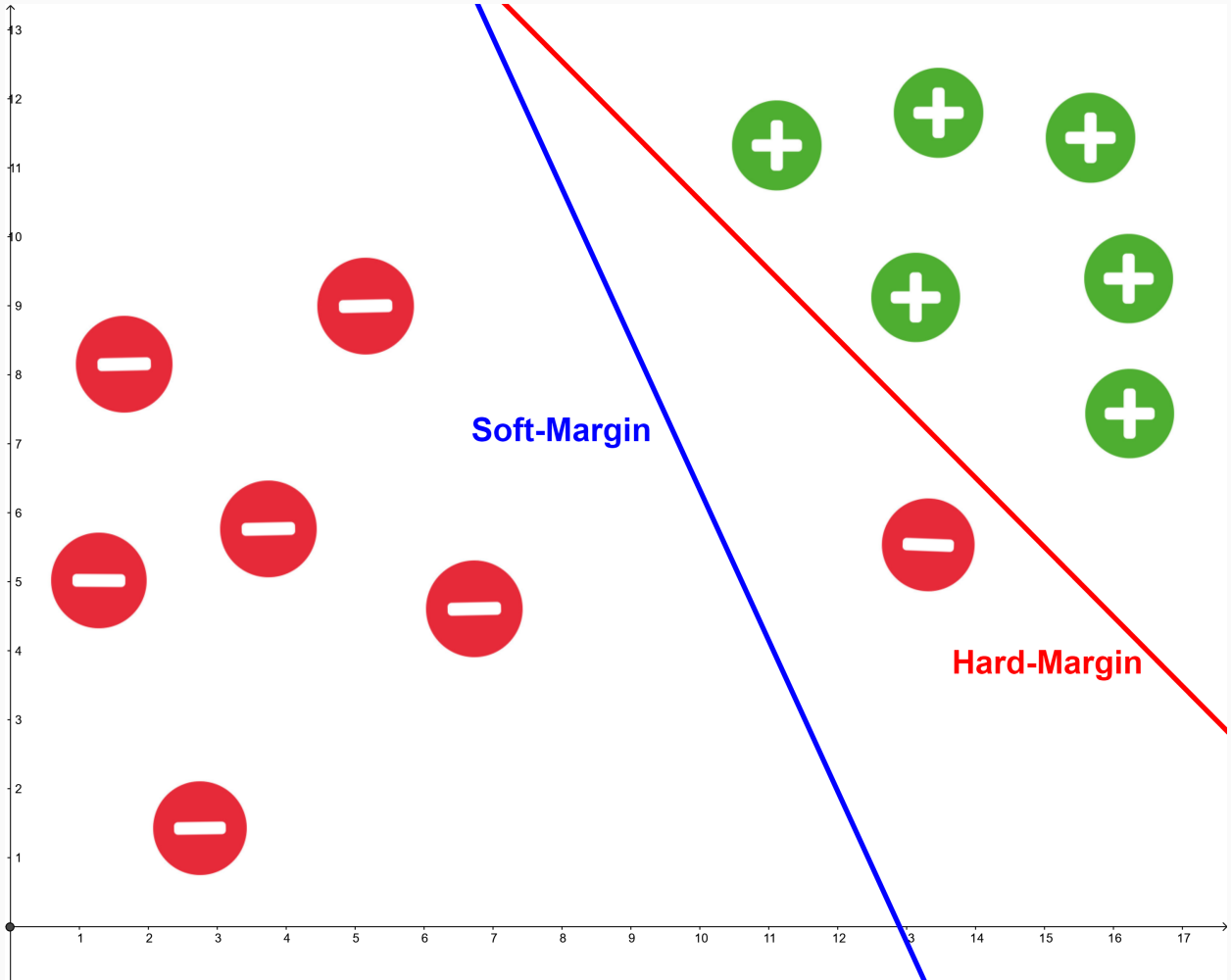
Einziger Unterschied zu Hard-Margin: Beschränkung $\alpha_n \leq C$
(Hard-Margin: $\alpha_n \leq \infty$)
Umgekehrt: Soft-Margin mit $C \to \infty$ entspricht Hard-Margin
Lösung: Wie zuvor gezeigt mit QP-Solver

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

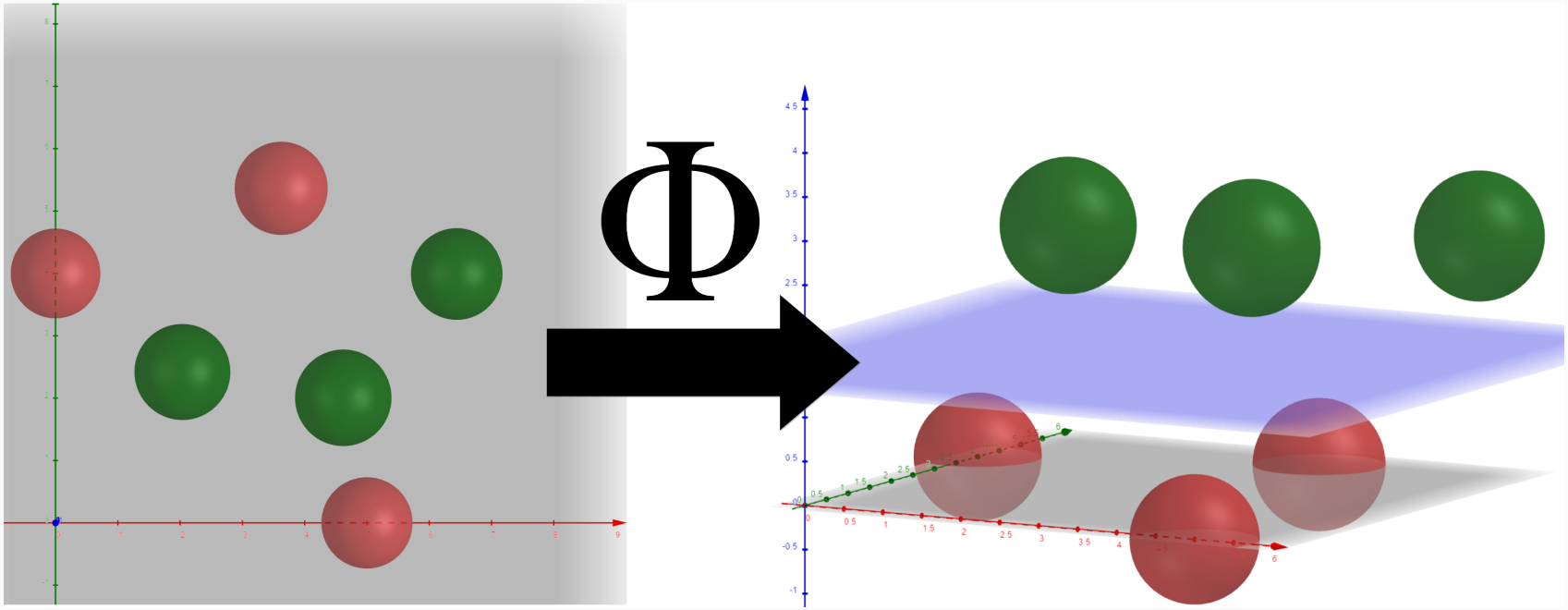



**Abbildung 1:** Transformation Eingabevektoren macht linear trennbar

# 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:

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

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

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

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

# 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: $z = \Phi(x)$

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

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

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

# 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 $b$:

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

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

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

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

# Beispiel Kernel-Funktion

Annahme für verwendete Transformationsfunktion $\Phi$:

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

Anwendung auf Vektoren $x$ und $x'$:

# Beispiel Kernel-Funktion

Annahme für verwendete Transformationsfunktion $\Phi$:

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

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 $\Phi$:

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

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 $\Phi$:

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

Anwendung auf Vektoren $x$ und $x'$:

$$\begin{aligned}
\Phi(x) &= (1, x_1^2, x_2^2, \sqrt{2}x_1, \sqrt{2}x_2, \sqrt{2}x_1x_2) \\
\Phi(x') &= (1, x_1'^2, x_2'^2, \sqrt{2}x_1', \sqrt{2}x_2', \sqrt{2}x_1'x_2') \\
\Phi(x)^T\Phi(x') &= 1 + x_1^2x_1'^2 + x_2^2x_2'^2 + 2x_1x_1' + 2x_2x_2' + 2x_1x_1'x_2x_2'
\end{aligned}$$

# Beispiel Kernel-Funktion

Annahme für verwendete Transformationsfunktion $\Phi$:

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

Anwendung auf Vektoren $x$ und $x'$:

$$\begin{aligned}
\Phi(x) &= (1, x_1^2, x_2^2, \sqrt{2}x_1, \sqrt{2}x_2, \sqrt{2}x_1x_2) \\
\Phi(x') &= (1, x_1'^2, x_2'^2, \sqrt{2}x_1', \sqrt{2}x_2', \sqrt{2}x_1'x_2') \\
\Phi(x)^T\Phi(x') &= 1 + x_1^2x_1'^2 + x_2^2x_2'^2 + 2x_1x_1' + 2x_2x_2' + 2x_1x_1'x_2x_2'
\end{aligned}$$

Kernel-Funktion $K(x, x') = (1 + x^T x')^2$ entspricht Skalarprodukt der mit $\Phi$ 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:

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

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:

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

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:

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

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

# Radial Basis Function Kernel

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

# Radial Basis Function 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:

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

$\gamma$ ist wählbarer Parameter

# Radial Basis Function Kernel

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

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

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

# 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 $\exp(2xx')$ 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:

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

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)

# SVM mit Kernel

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 $\Phi$ 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 $\Phi$ 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 $\Phi$ 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):

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

Einsetzen von Gleichung (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):

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

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

Einsetzen von Gleichung (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 $\Phi$ muss nicht bekannt sein

# SVM mit Kernel

- SVM vollständig definiert
- Transformationsfunktion $\Phi$ muss nicht bekannt sein
- Keine einzige tatsächliche Transformation wird durchgeführt

# SVM mit Kernel

- SVM vollständig definiert
- Transformationsfunktion $\Phi$ 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 $\Phi$ 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 $\Phi$ 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 $\Phi$ 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 $\Phi$ 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 $x_n^T x_m$

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

mit

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

für

$$y^T \alpha = 0$$

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

# 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 $\alpha$ erhalten

# Anpassung QP-Solver

Lösung mittels Quadratic Programming Solver weiter möglich

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

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

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

$$\text{für} \quad y^T \alpha = 0$$

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

An QP-Solver übergeben und $\alpha$ 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 |
| $c = (-1, -1, \ldots, -1)^T$ | 3 |

# 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 |

# 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 |
| $\mathrm{A} = \mathit{diag}\,(-1, -1, \ldots, -1)$ | 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 |
| $\mathsf{Q} = (\mathsf{y}\mathsf{y}^\mathsf{T})\mathsf{K}$ | 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 |
| $\mathsf{w} = \sum_{n=SV} \alpha_n y_n x_n$ | 9 |

# 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 |
| $\mathsf{w} = \sum_{n=SV} \alpha_n y_n x_n$ | 9 |
| $bias = \frac{1}{y_n} - \mathsf{w}^\mathsf{T} x_n$ | 10 |

# 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 $j = 2$ 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 |
| $\mathrm{K}(i,j) = x_i \cdot x_j$ | 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

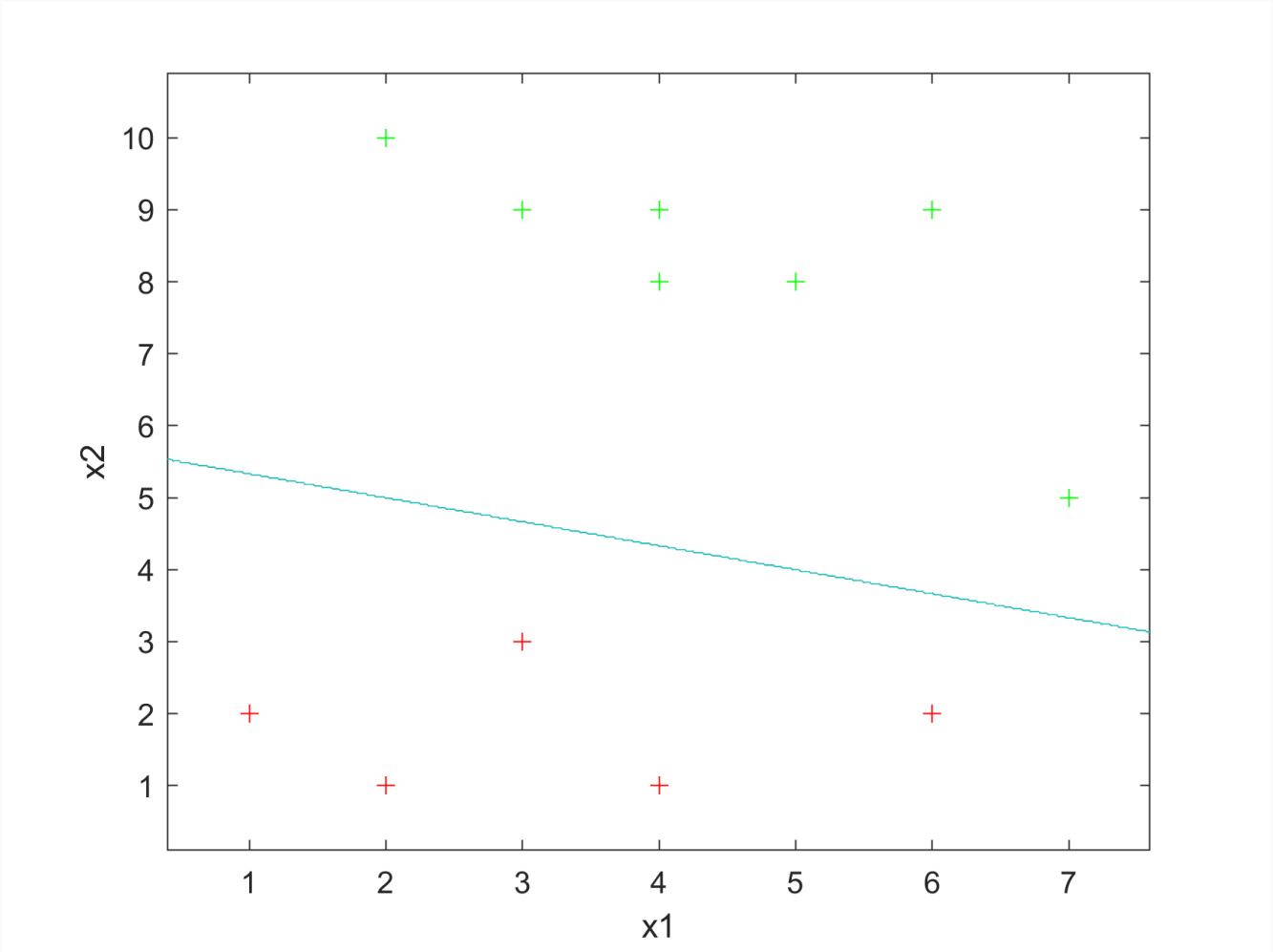



**Abbildung 2:** Beispiel Trenngrenze lineares Problem mit Hard-Margin SVM

# Pseudocode Soft-Margin SVM

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

# Pseudocode Soft-Margin SVM

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

# Pseudocode Soft-Margin SVM

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

# Pseudocode Soft-Margin SVM

| Soft-Margin SVM | Zeile |
|---|---|
| Initialisiere x, y, $C$ | 1 |
| $\mathrm{Q} = (\mathrm{y}\mathrm{y}^{\mathsf{T}})\mathrm{K}$ | 2 |
| $\mathrm{c} = (-1, -1, \ldots, -1)^{\mathsf{T}}$ | 3 |
| $\mathrm{A} = \mathit{diag}\,(-1, -1, \ldots, -1)$ | 4 |
| $\mathrm{b} = (0, 0, \ldots, 0)^{\mathsf{T}}$ | 5 |
| $\mathrm{A}_{\mathrm{eq}} = \mathrm{y}^{\mathsf{T}}$ | 6 |
| $b_{eq} = 0$ | 7 |
| $\mathrm{lb} = (0, 0, \ldots, 0)^{\mathsf{T}}$ | 8 |
| $\mathrm{ub} = C * (1, 1, \ldots, 1)^{\mathsf{T}}$ | 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 |
| $\mathrm{Q} = (\mathrm{y}\mathrm{y}^{\mathsf{T}})\mathrm{K}$ | 2 |
| $\mathrm{c} = (-1, -1, \ldots, -1)^{\mathsf{T}}$ | 3 |
| $\mathrm{A} = \mathit{diag}\,(-1, -1, \ldots, -1)$ | 4 |
| $\mathrm{b} = (0, 0, \ldots, 0)^{\mathsf{T}}$ | 5 |
| $\mathrm{A}_{\mathrm{eq}} = \mathrm{y}^{\mathsf{T}}$ | 6 |
| $b_{eq} = 0$ | 7 |
| $\mathrm{lb} = (0, 0, \ldots, 0)^{\mathsf{T}}$ | 8 |
| $\mathrm{ub} = C * (1, 1, \ldots, 1)^{\mathsf{T}}$ | 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 |
| $bias = \frac{1}{y_n} - \mathrm{w}^{\mathsf{T}} x_n$ | 12 |

# 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

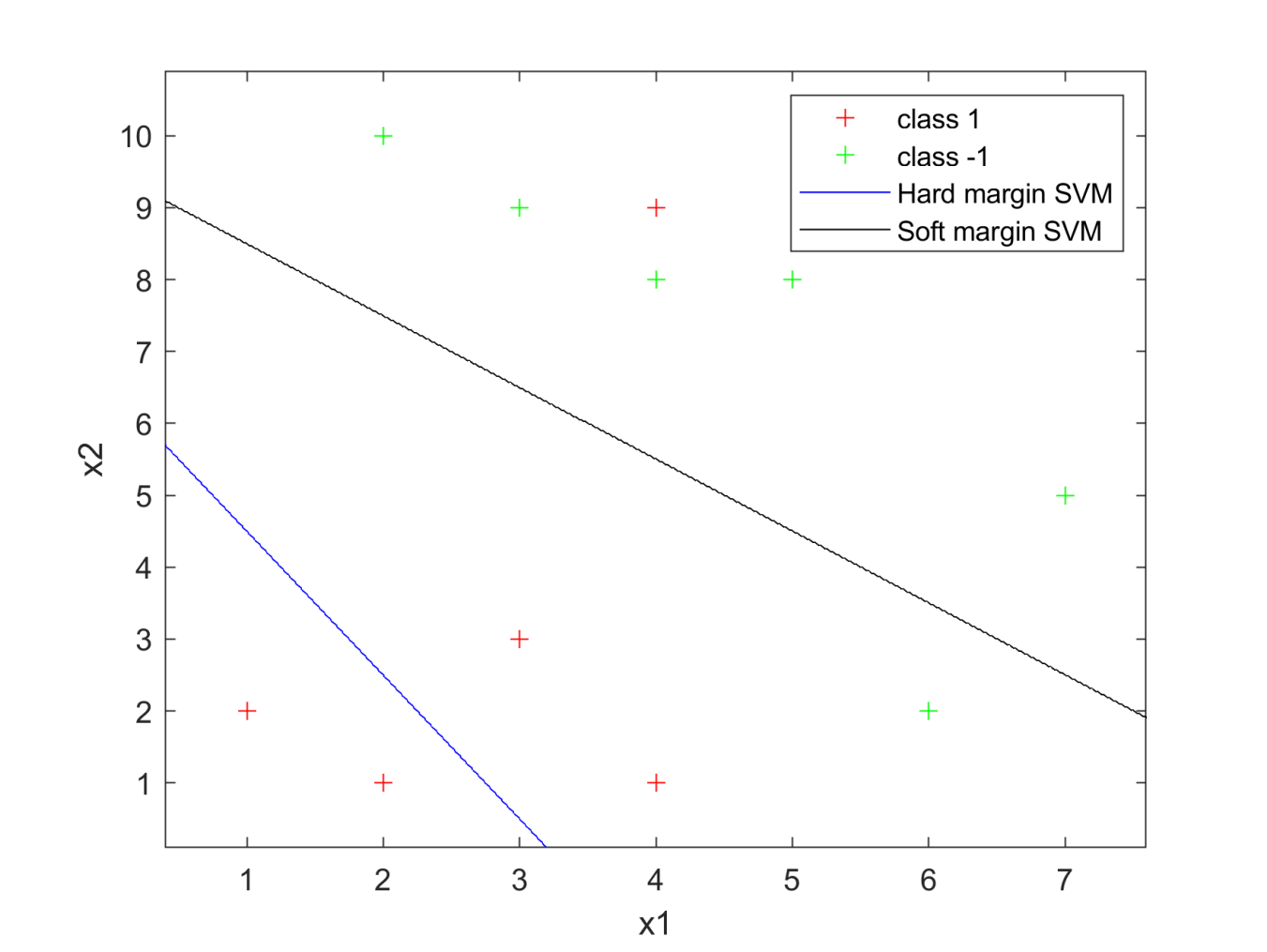
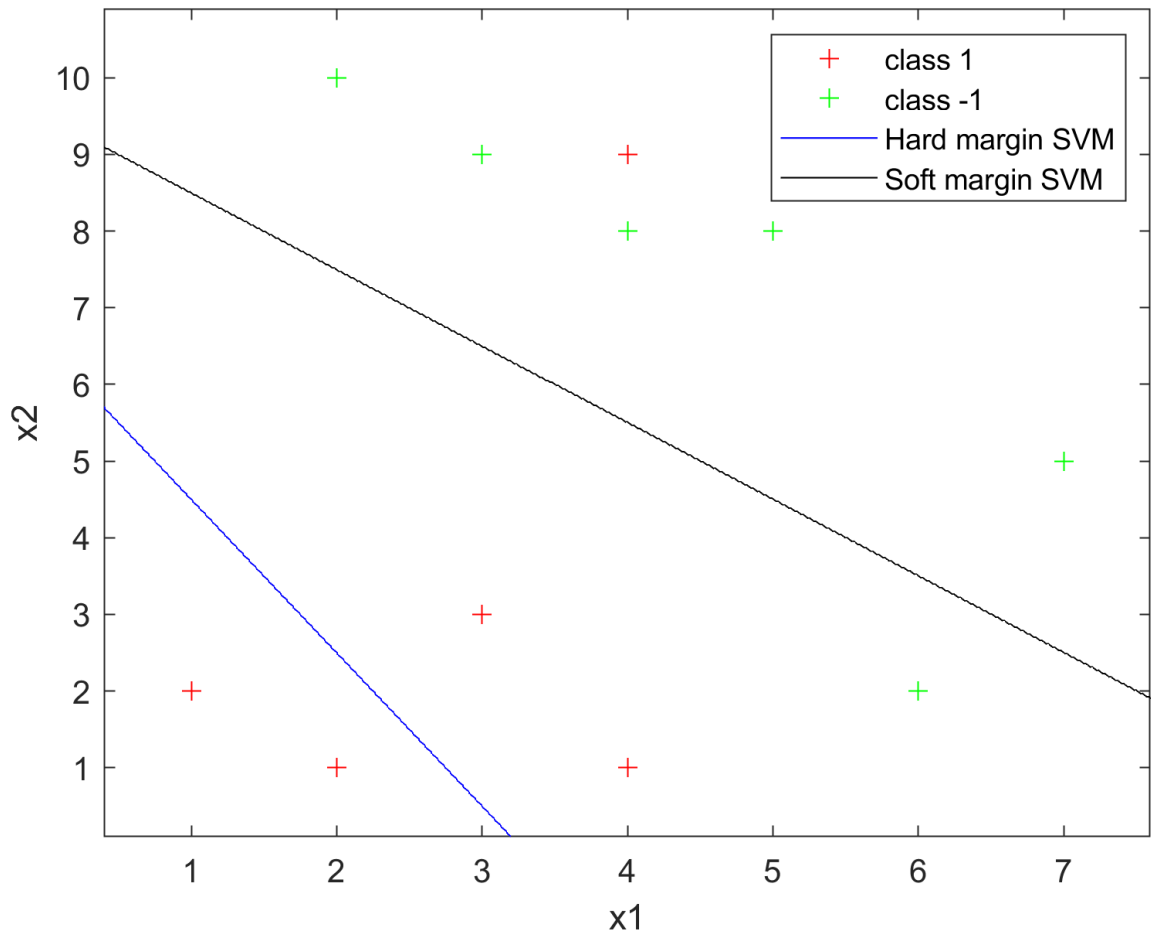



**Abbildung 3:** Trenngrenze nichtlineares Problem mit Hard-Margin und Soft-Margin SVM

# 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 |
| $Q = (yy^T)K$ | 2 |

# Pseudocode Kernel-Trick

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

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

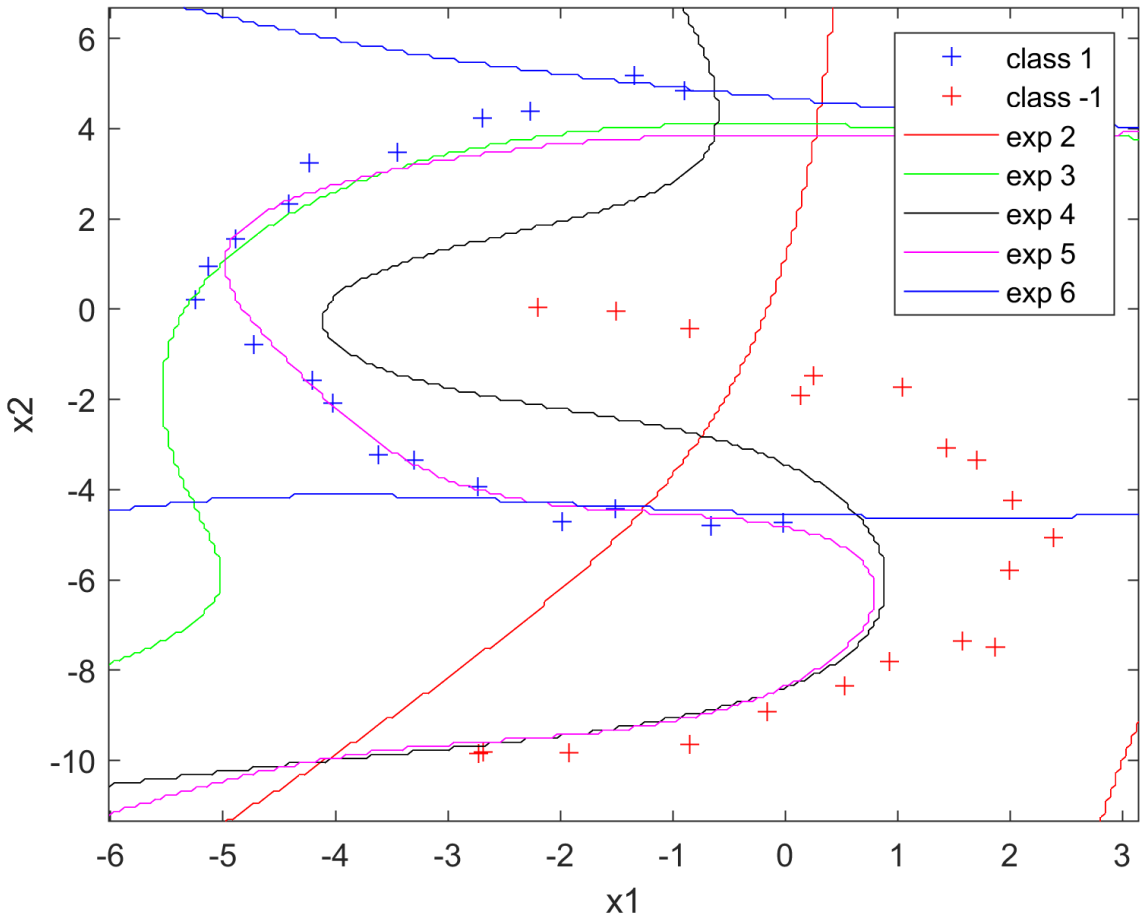



**Abbildung 4:** Trenngrenzen für polynomiellen Kernel mit verschiedenen Exponenten $Q$

# Beispiel Polynomieller Kernel mit $Q = 4$

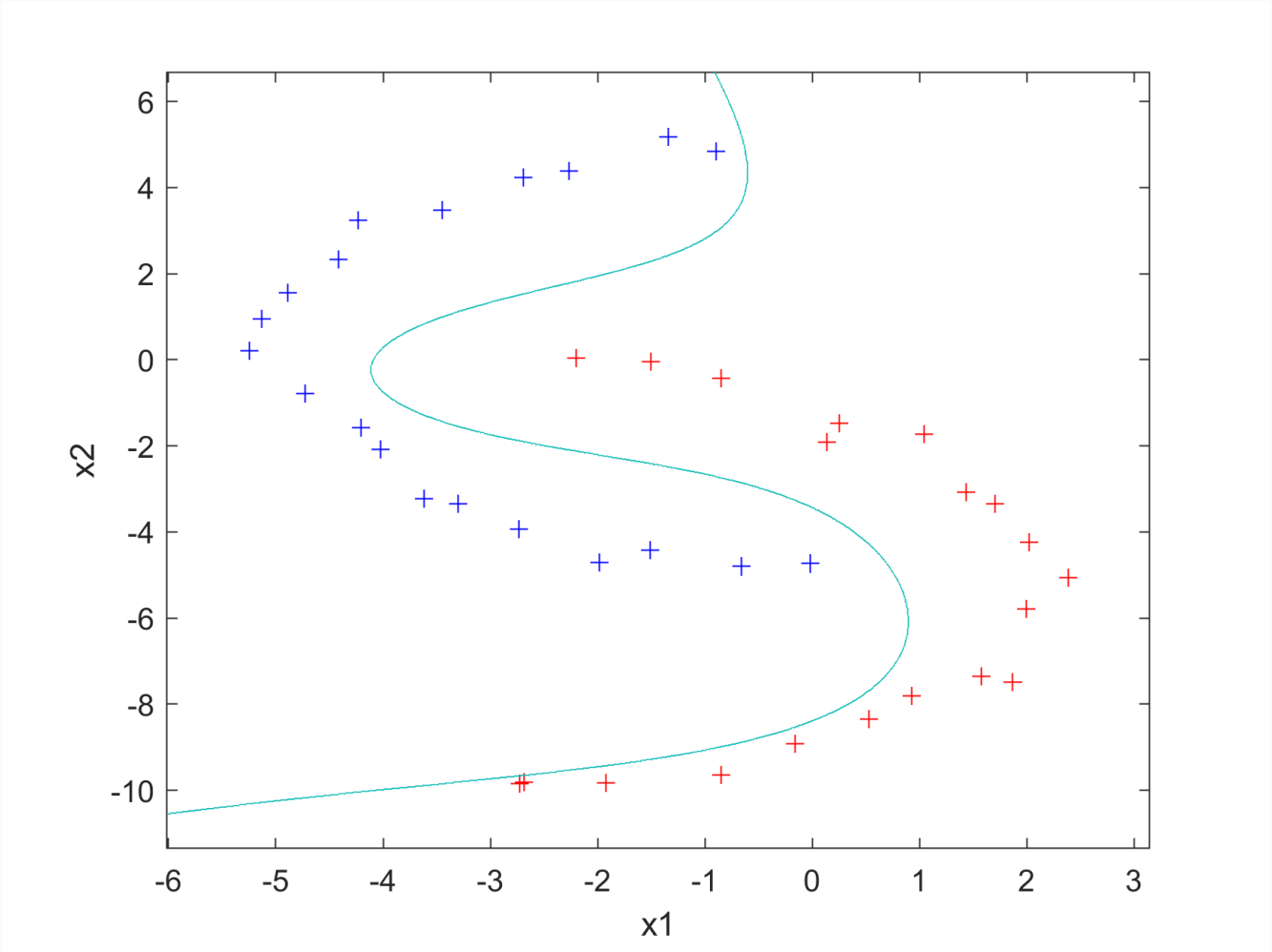



**Abbildung 5:** Trenngrenzen für polynomiellen Kernel $(ax^T x' + b)^Q$ mit $Q = 4$

# Beispiel RBF Kernel

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

# Beispiel RBF Kernel

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

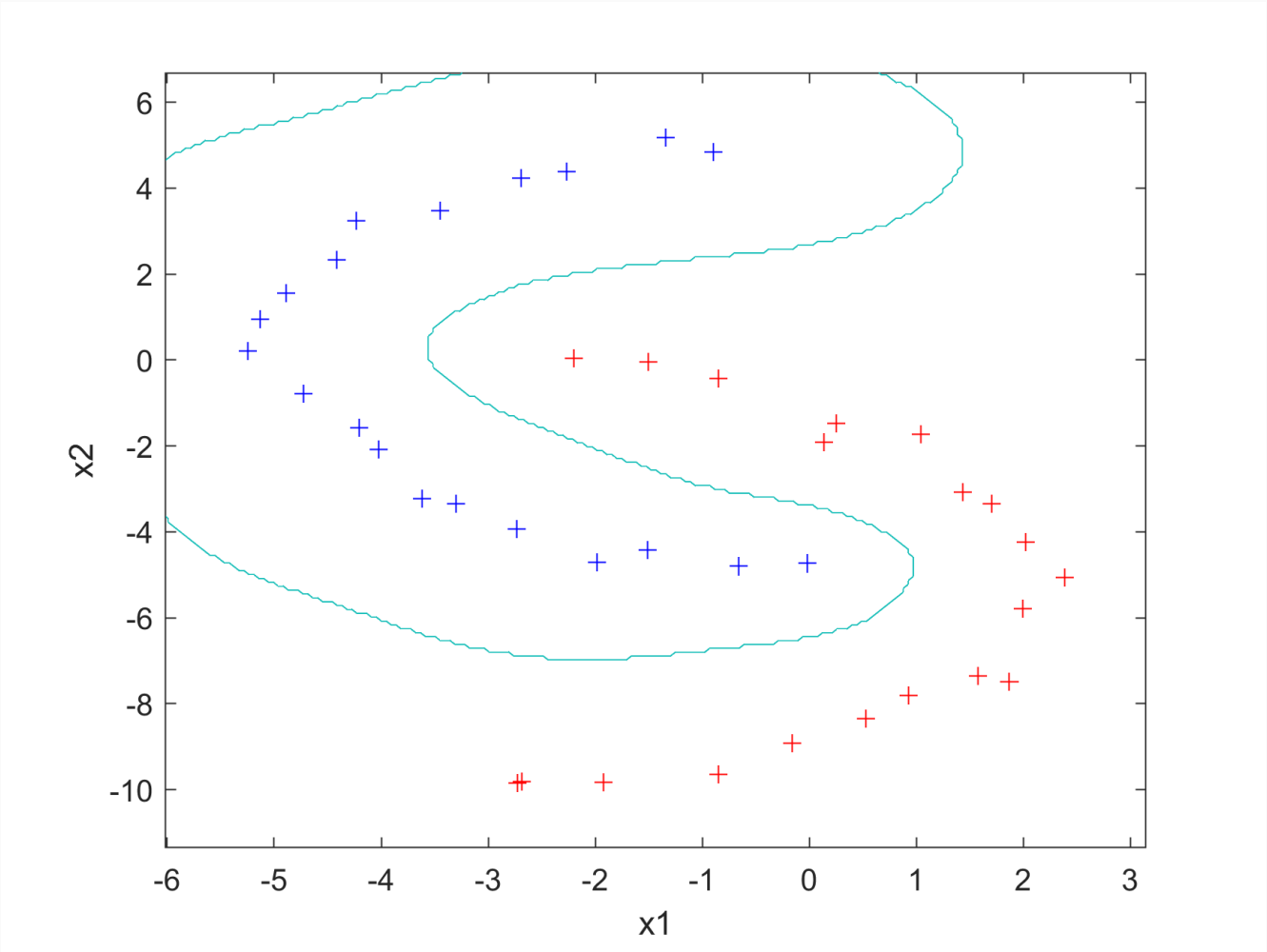
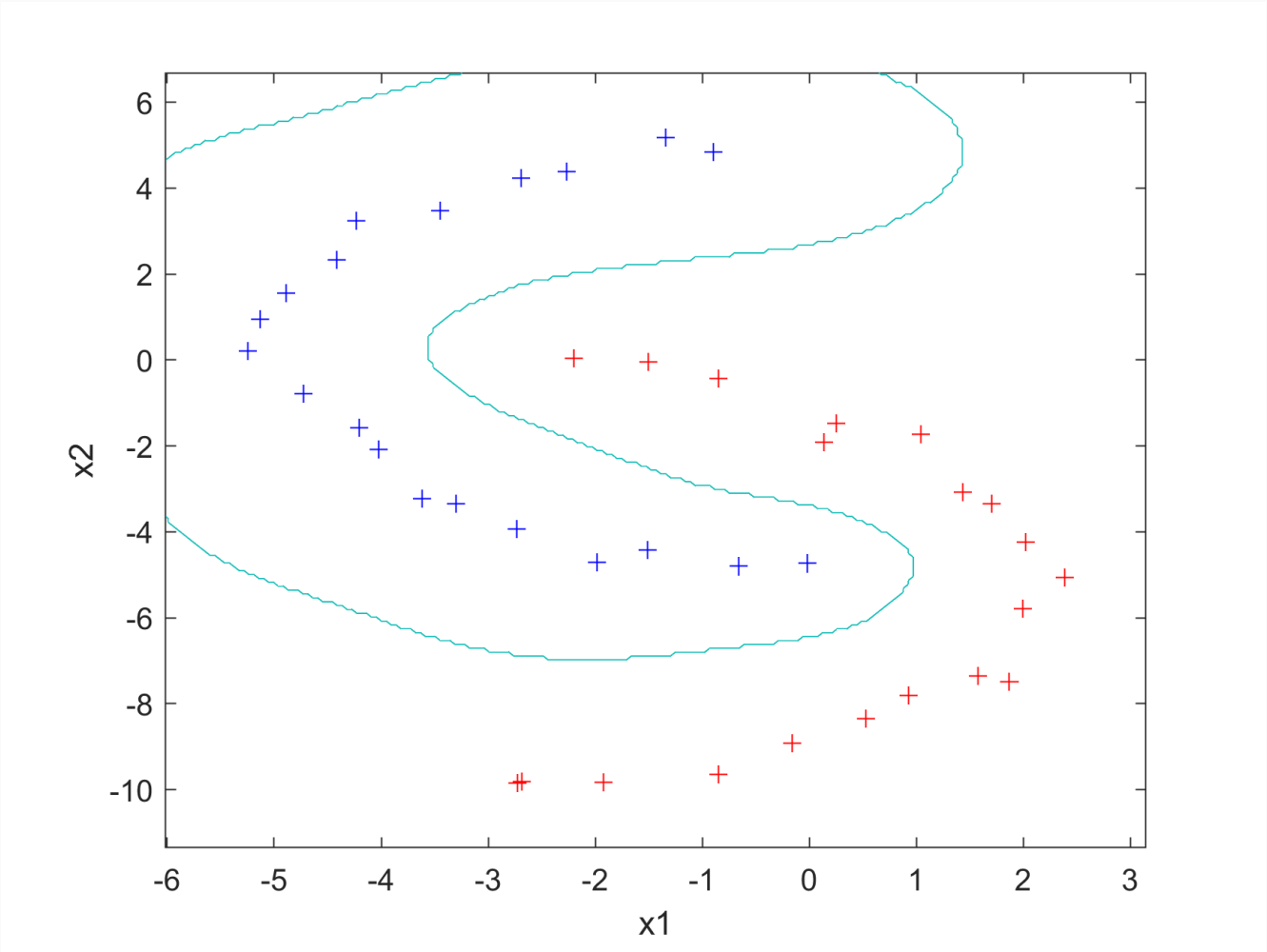



**Abbildung 6:** Trenngrenzen für RBF Kernel mit $\gamma = 1$ auf nicht linear trennbarem Datensatz

# Beispiel RBF Kernel

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

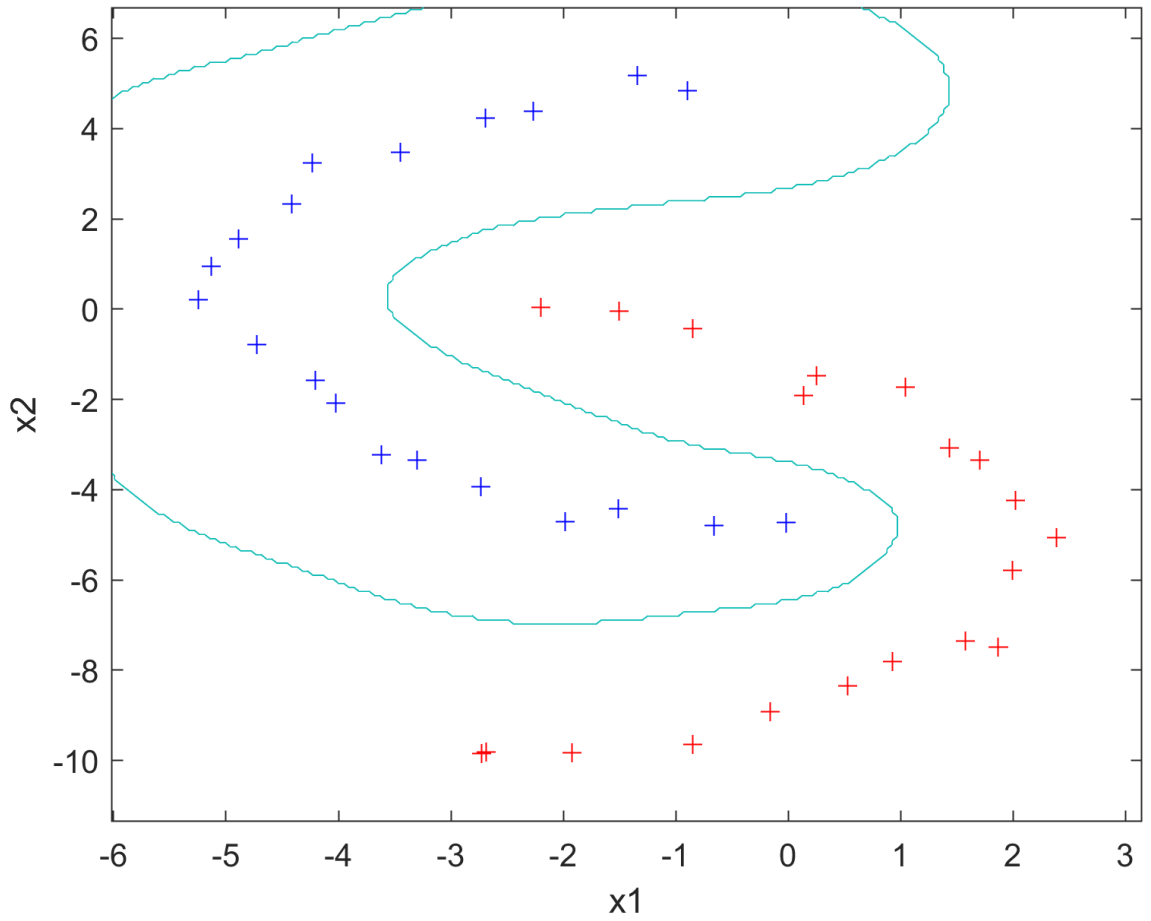



Blaue Punkte umschlossen

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

# Beispiel RBF Kernel

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




Blaue Punkte umschlossen

$\gamma$ nicht korrekt -> z.B. eigene Grenze für jeden Punkt

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

Fragen?