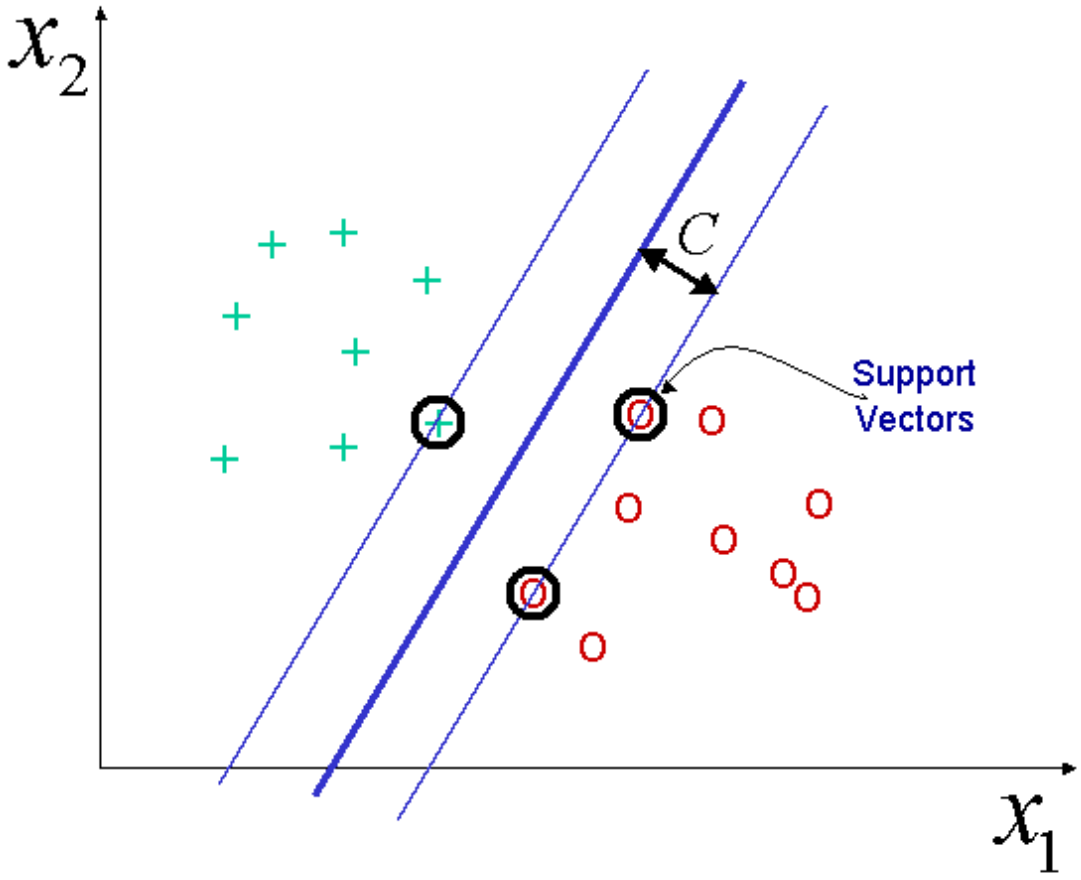
# Optimal-trennende Hyperebenen und die Support Vector Machine

Volker Tresp

# (Vapnik's) Optimal-trennende Hyperebenen (Optimal Separating Hyperplanes)

- Wir betrachten wieder einen linearen Klassifikator mit $y_i \in \{-1, 1\}$
- Mit Ausnahme der Perzeptrons trennen die soweit vorgestellten Algorithmen nicht notwendigerweise zwei Klassen, auch wenn diese separabel sind
- Dies ist auch unter Umständen richtig, da Klassen sich überlappen können
- Dennoch ist es wünschenswert, auch Algorithmen im Repertoire zu haben, die trennbare Klassen auch trennen
- Vapnik stellte einen Algorithmus vor, der trennbare Klassen trennt; falls Klassen sich nicht trennen lassen, wird die Anzahl der Missklassifikationen klein gehalten
- Ziel ist es, die Klassen zu trennen und dabei den Margin $\mathcal{C}$ zu maximieren (falls Klassen separabel sind)

# Optimal-trennende Hyperebenen (2D)



# Kostenfunktion mit Nebenbedingungen

- Man verlangt Erfüllung der Nebenbedingungen

$$y_i(\mathbf{x}_i^T\mathbf{w}) = y_i \sum_{j=0}^{M-1} w_j x_{i,j} \geq 1 \quad i = 1, \ldots, N$$

  erfüllt sind

- Von allen Gewichtsvektoren, die zu einer Lösung führen, die die Nebenbedingungen erfüllen wählt man denjenigen, für den gilt

$$\mathbf{w}_{opt} = \arg\min_{\mathbf{w}} \tilde{\mathbf{w}}^T\tilde{\mathbf{w}} = \arg\min_{\mathbf{w}} \sum_{j=1}^{M-1} w_j^2$$

  wobei $\tilde{\mathbf{w}} = (w_1, \ldots, w_{M-1})$. (D.h. bei $\tilde{\mathbf{w}}$ fehlt der Offset $w_0$); $y_i \in \{-1, 1\}$. Beachte: man minimiert dennoch in Bezug auf (ganz) $\mathbf{w}$

## Margin und Support-Vektoren

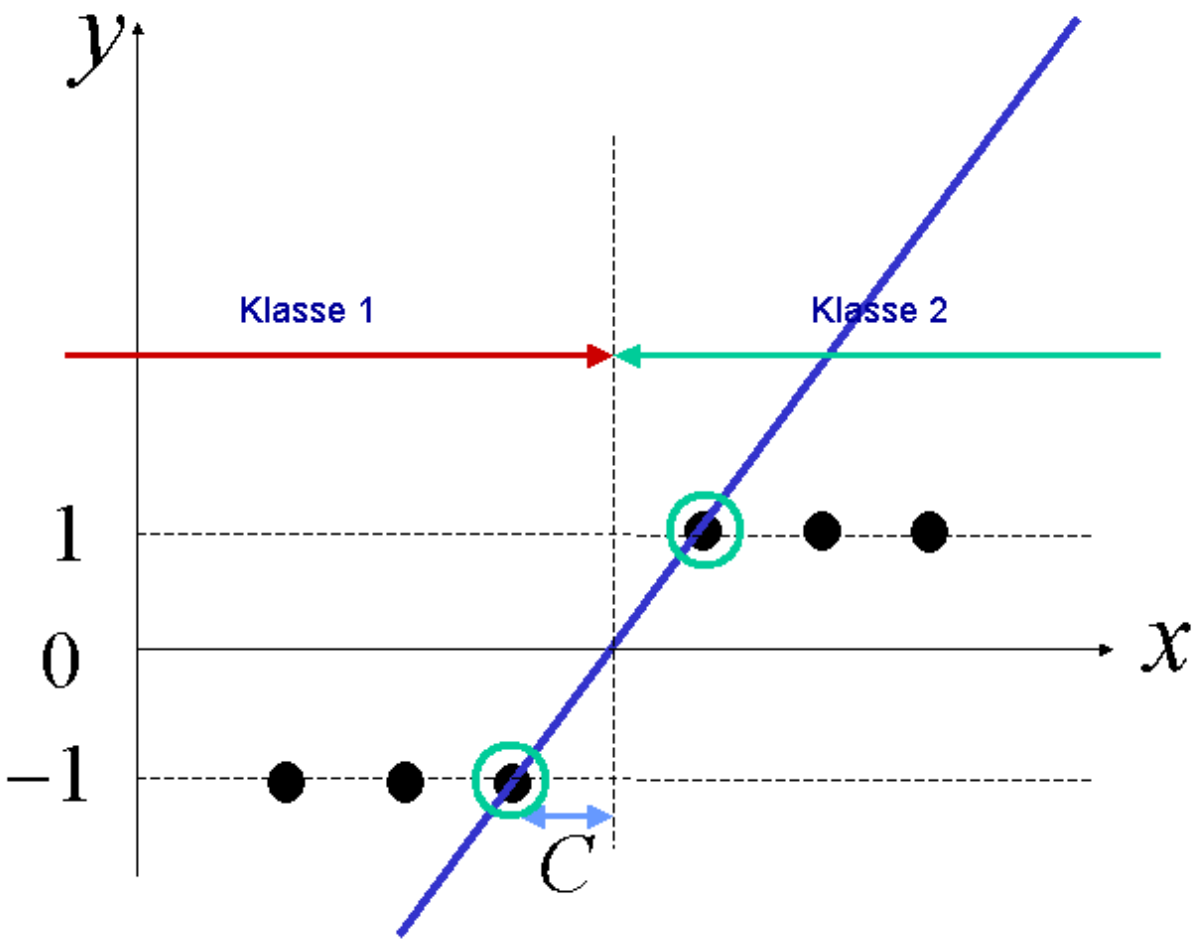
- Der Margin wird dann

$$\mathcal{C} = \frac{1}{||\tilde{\mathbf{w}}_{opt}||}$$

- Für die *Support-Vektoren* gilt,

$$y_i(\mathbf{x}_i^T \mathbf{w}_{opt}) = 1$$

# Optimal-rennende Hyperebenen (1D)



# Optimierung: Optimal Separating Hyperplane

- Zur Optimierung mit Randbedingungen (Ungleichheiten) definiert man die Lagrange Funktion

$$L_P = \frac{1}{2}\tilde{\mathbf{w}}^T\tilde{\mathbf{w}} - \sum_{i=1}^{N} \alpha_i [y_i(\mathbf{x}_i^T\mathbf{w}) - 1]$$

- Die Lagrange Funktion wird in Bezug auf (ganz) $\mathbf{w}$ minimiert und in Bezug auf die Lagrange Multiplikatoren $\alpha_i \geq 0$ maximiert (Sattelpunktlösung).

- Intuition:

  - Wenn eine Nebenbedingung nicht erfüllt ist, so ist $[y_i(\mathbf{x}_i^T\mathbf{w}) - 1] < 0$ und $\alpha_i$ wird anwachsen (beachte negatives Vorzeichen des 2ten Terms)
  - Die Adaption der Gewichte wird versuchen, den Term in den eckigen Klammern zu maximieren bis dieser gleich Null wird
  - Wenn eine Nebenbedingung erfüllt ist, so ist $[y_i(\mathbf{x}_i^T\mathbf{w}) - 1] \geq 0$ und $\alpha_i$ wird Null werden und die Nebenbedingung wird inaktiv

# Karush-Kuhn-Tucker (KKT)-Bedingungen

- Dies bedeutet, es muss gelten (Karush-Kuhn-Tucker (KKT)-Bedingung (1))

$$\alpha_i[y_i(\mathbf{x}_i^T\mathbf{w} - 1)] = 0 \quad \forall i$$

  Entweder $\alpha_i$ ist Null oder der Term in den eckigen Klammern ist Null (wir lassen jetzt den Subskript $opt$) weg)

- Durch Null-Setzen der Ableitungen von $L_P$ nach $\tilde{\mathbf{w}}$ erhält man KKT (2)

$$\tilde{\mathbf{w}} = \sum_{i=1}^{N} \alpha_i y_i \tilde{\mathbf{x}}_i$$

  und nach $w_0$ KKT (3)

$$0 = \sum_{i=1}^{N} \alpha_i y_i$$

- Beachte, dass KKT (2) bedeutet, dass man die optimalen Parameter als lineare gewichtete Summe der Eingangsvektoren schreiben kann (Kern-Trick)!

KKT (4) ist

$$\alpha_i \geq 0 \quad \forall i$$

(1), (2), (3),(4) und bilden die Karush-Kuhn-Tucker Bedingungen.

# Wolfe-Dual

Durch einsetzen von KTT (2) erhält man (Wolfe-Dual) das duale Optimierungsproblem (beachte: $\mathbf{w} = (w_0, \tilde{\mathbf{w}}^T)^T$, $\mathbf{x}_i = (1, \tilde{\mathbf{x}}_i^T)^T$,

$$L_D = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^{N} \alpha_i y_i \tilde{\mathbf{x}}_i^T \sum_{i=1}^{N} \alpha_i y_i \tilde{\mathbf{x}}_i - \sum_{i=1}^{N} \alpha_i [y_i (\mathbf{x}_i^T \mathbf{w}) - 1]$$

$$= \frac{1}{2} \sum_{i=1}^{N} \sum_{k=1}^{N} \alpha_i \alpha_k y_i y_k \tilde{\mathbf{x}}_i^T \tilde{\mathbf{x}}_k - \sum_{i=1}^{N} \sum_{k=1}^{N} \alpha_i \alpha_k y_i y_k \tilde{\mathbf{x}}_i^T \tilde{\mathbf{x}}_k$$

$$-w_0 \sum_{i=1}^{N} \alpha_i y_i + \sum_{i=1}^{N} \alpha_i$$

Die ersten beiden Terme sind gleich bis auf die Konstante. Der dritte Term ist im Optimum gleich Null (KKT (3)).

# Optimierung: Zusammenfassung

- Man löst schließlich: Maximiere in Bezug auf die $\alpha_i$

$$L_D = \sum_{i=1}^{N} \alpha_i - \frac{1}{2} \sum_{i=1}^{N} \sum_{k=1}^{N} \alpha_i \alpha_k y_i y_k \tilde{\mathbf{x}}_i^T \tilde{\mathbf{x}}_k$$

mit den Nebenbedingungen (KKT (4))

$$\alpha_i \geq 0$$

und (KKT (3))

$$0 = \sum_{i=1}^{N} \alpha_i y_i$$

## Primale Lösung

- Nachdem die optimalen $\alpha_i$ gefunden sind, setzt man diese in KKT (2) und erhält die optimalen Gewichte.
- Für einen neuen Eingang $\mathbf{z}$ erhält man die Vorhersage

$$\hat{t} = \text{sign}(\tilde{\mathbf{z}}^T \tilde{\mathbf{w}} + w_0)$$

# Duale Lösung

- Alternativ lässt sich die Lösung schreiben (mit KKT (2)) als gewichtete Summe über die Support-Vektoren,

$$\hat{t} = \text{sign}\left(\sum_{i \in SV} y_i \alpha_i \tilde{\mathbf{x}}_i^T \tilde{\mathbf{z}} + w_0\right) = \text{sign}\left(\sum_{i \in SV} y_i \alpha_i k(\tilde{\mathbf{z}}, \tilde{\mathbf{x}}_i) + w_0\right)$$

  mit Kern

$$k(\tilde{\mathbf{z}}, \tilde{\mathbf{x}}_i) = \tilde{\mathbf{z}}^T \tilde{\mathbf{x}}_i$$

- Diese Schreibweise begründet den Begriff *Support Vector Machine*

- Beachte, dass natürlich ebenso mit Basisfunktionen gearbeitet werden kann, wo dann der Kern wird

$$k(\mathbf{z}, \mathbf{x}_i) = \phi(\mathbf{z})^T \phi(\mathbf{x}_i)$$

# Optimal-trennende Hyperebenen: Nicht-trennbare Klassen

- Bei sich überlappenden Klassen führt man *slack* Variablen $\xi_i$ ein:
- Die optimale Trennebene kann gefunden werden als

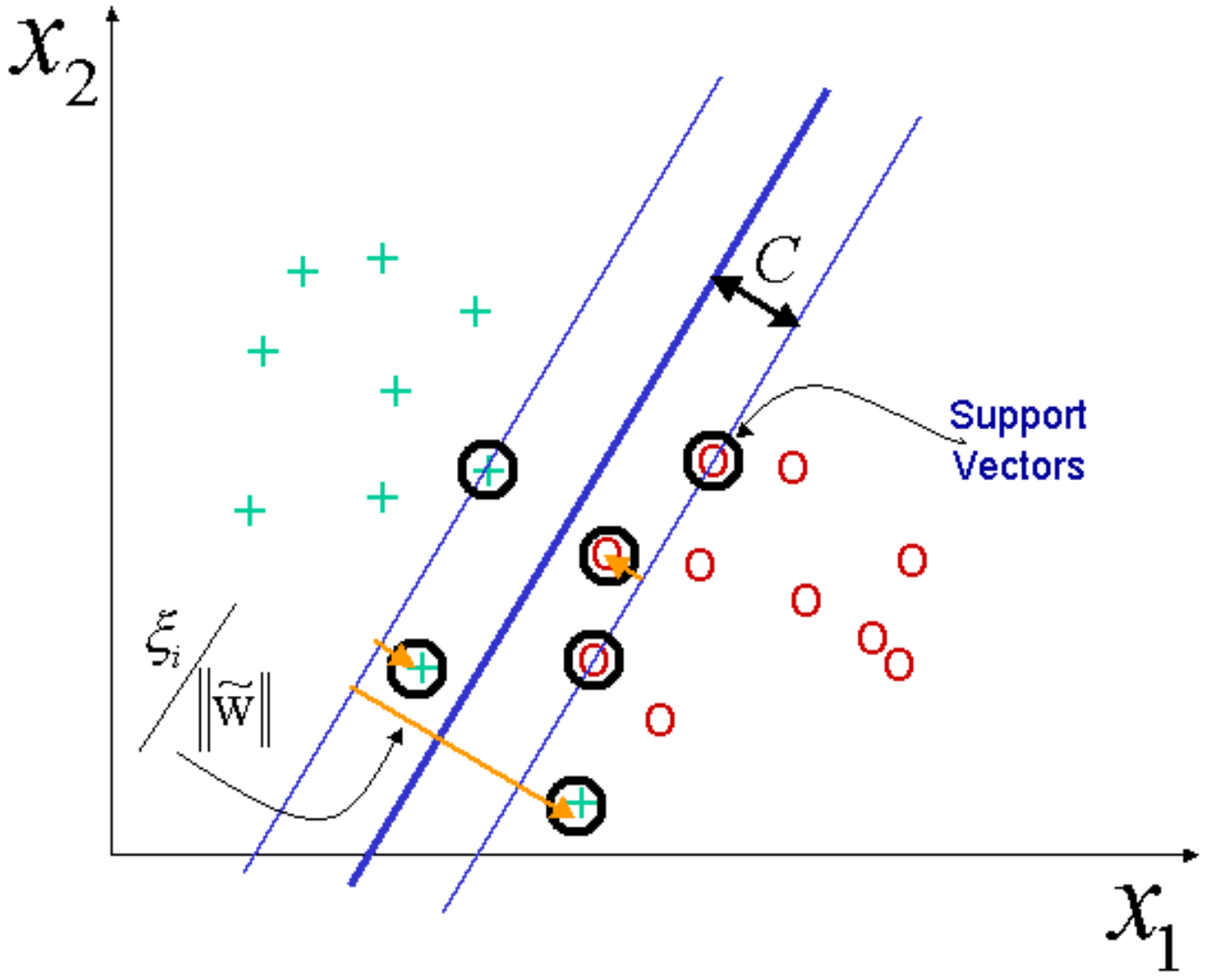
$$\mathbf{w}_{opt} = \arg\min_{\mathbf{w}} \tilde{\mathbf{w}}^T \tilde{\mathbf{w}}$$

unter den Nebenbedingungen, dass

$$y_i(\mathbf{x}_i^T \mathbf{w}) \geq 1 - \xi_i \quad i = 1, \ldots, N$$

$$\xi_i \geq 0 \quad \sum_{i=1}^{N} \xi_i \leq 1/\gamma$$

- $\gamma > 0$ bestimmt den Kompromiss zwischen Trennbarbeit von Klassen und Überlappungsgrad. Für $\gamma \longrightarrow \infty$ erhält man den separierbaren Fall


$x_2$
$C$
Support
Vectors
$\frac{\xi_i}{\|\tilde{w}\|}$
$x_1$

## Optimal-trennende Hyperebenen: Kommentare

- Die optimale Trennebene wird gefunden über eine trickreiche Optimierung des resultierenden quadratischen Optimierungsproblems mit linearen Nebenbedingungen
- $\gamma$ ist ein zu optimierender Hyperparameter (Kreuzvalidierung)

# Optimierung über Penalty/Barrier Method

- Ziel: Transformation eines Optimierungsproblems mit Nebenbedingungen in ein Problem ohne Nebenbedingungen
- In der Penalty Methode wird ein Strafterm (penalty) zur Zielfunktion addiert für Punkte, die die Nebenbedingungen verletzen
- Die Barrier Methode (interior point method) ist ähnlich, nur dass der Strafterm unendlich ist für Punkte, die die Nebenbedingungen verletzen und endlich für Punkte "fast" die Nebenbedingungen verletzen
- Für unser Optimierungsproblem wählt man:

$$\arg\min_{\mathbf{w}} 2\gamma \sum |1 - y_i(\mathbf{x}_i^T \mathbf{w})|_+ + \tilde{\mathbf{w}}^T \tilde{\mathbf{w}}$$

wobei $|arg|_+ = \max(arg, 0)$. Man beginnt in der Optimierung mit kleinem $\gamma$ und lässt es langsam anwachsen. Für $\gamma \to \infty$ verlangt man, dass alle Nebenbedingungen in der Lösung erfüllt sind. Lässt man $\gamma$ endlich, dann erlaubt man "Slack"

# Vergleich: Musterbasiertes Lernen

- Perzeptron

$$w_j \longleftarrow w_j + \eta \left( y(t) - \text{sign} \left( x(t)^T w \right) \right) x_j(t)$$

$y(t) \in \{-1, 1\}$. Beachte, dass die Klammer Null ist, wenn richtig klassifiziert. Ansonsten ist der Term entweder gleich 2 oder gleich -2. Auch

$$w_j \longleftarrow w_j + \eta y(t) x_j(t)$$

für falsch klassifizierte Muster

- Logistic regression: Die "natürliche" kontinuierliche Verallgemeinerung

$$w_j \longleftarrow w_j + \eta \left( y(t) - \text{sig} \left( x(t)^T w \right) \right) x_j(t)$$

- Neuronale Netze

$$w_j \longleftarrow w_j + \eta \left( y(t) - \text{sig} \left( x(t)^T w \right) \right) \text{ sig}' \left( x(t)^T w \right) \ x_j(t)$$

Wird ein Muster mit hoher Sicherheit falsch klassifiziert, ist der Gradient nahezu Null!

- Regression (ADALINE)

$$w_j \longleftarrow w_j + \eta \left( y(t) - \left( x(t)^T w \right) \right) x_j(t)$$

- Vapniks optimal-trennende Hyperebenen

$$w_j \longleftarrow w_j + \eta y(t) x_j(t) \quad \text{wenn} \;\; y(t) \left( x(t)^T w \right) - 1 > 0$$

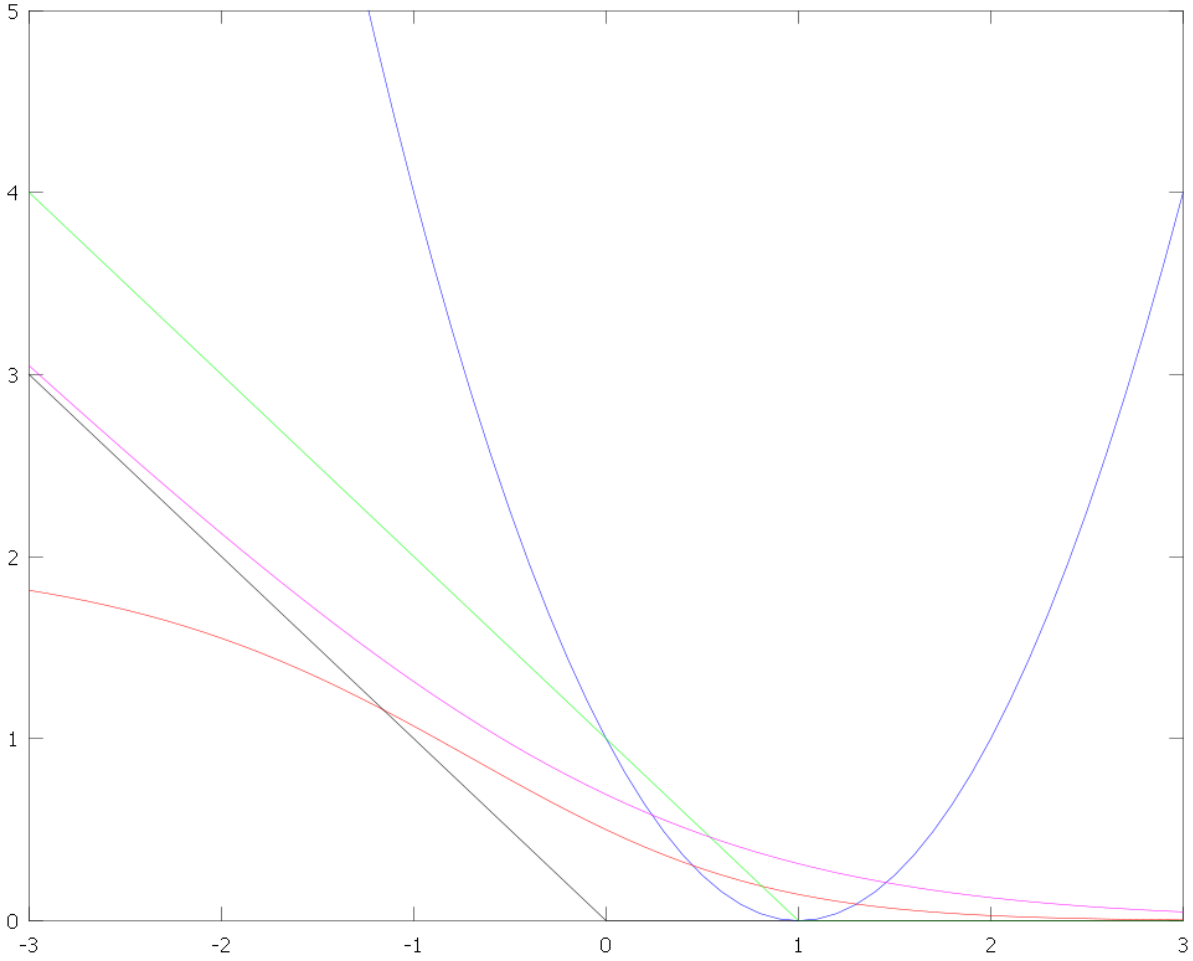
Beachte die große Ähnlichkeit zur Perzeptron Lernregel! Beachte, dass hier die Lösung durch die Regularisierung eindeutig ist!

- Bei allen Iterationen kann man einen regularisierenden *weight-decay* Term mit hinzunehmen, das heißt den Adaptionsschritt

$$w_j \longleftarrow w_j - \eta w_j$$

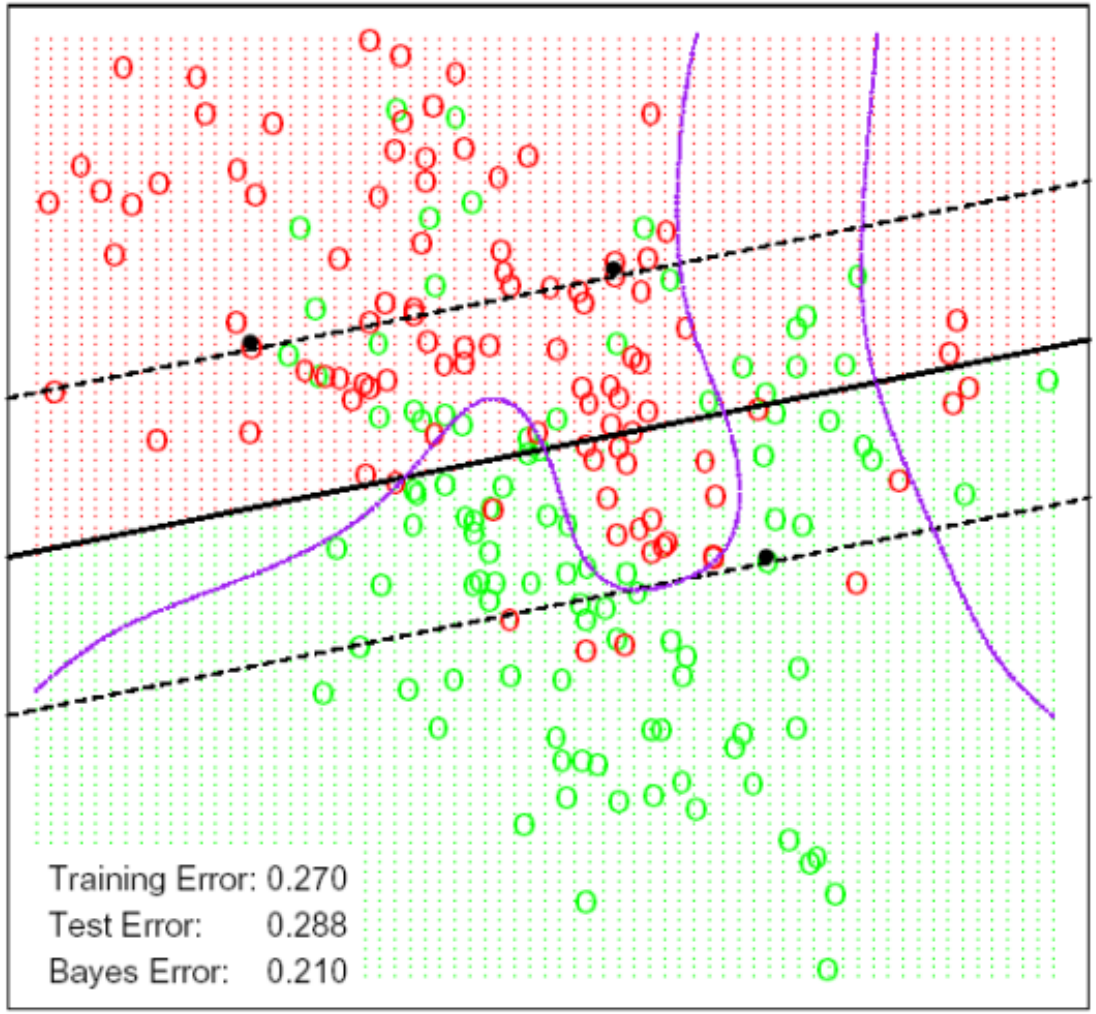
## Vergleich Der Kostenfunktionen

- Betrachten wir der Einfachheit einen Datenpunkt der Klasse 1
- Der Beitrag zur Kostenfunktion ist:
  - Quadratische Kostenfunktion (blau) : $(1 - (\mathbf{x}_i^T \mathbf{w}))^2$
  - Perzeptron (schwarz) $| - (\mathbf{x}_i^T \mathbf{w})|_+$
  - Vapniks Hyperebenen (grün): $|1 - (\mathbf{x}_i^T \mathbf{w})|_+$
  - Logistische Regression (magenta): $\log(1 + \exp(-\mathbf{x}_i^T \mathbf{w}))$
  - Neuronales Netz (rot): $(1 - \mathrm{sig}(\mathbf{x}_i^T \mathbf{w}))^2$


5
4
3
2
1
0
-3
-2
-1
0
1
2
3

## Künstliches Beispiel

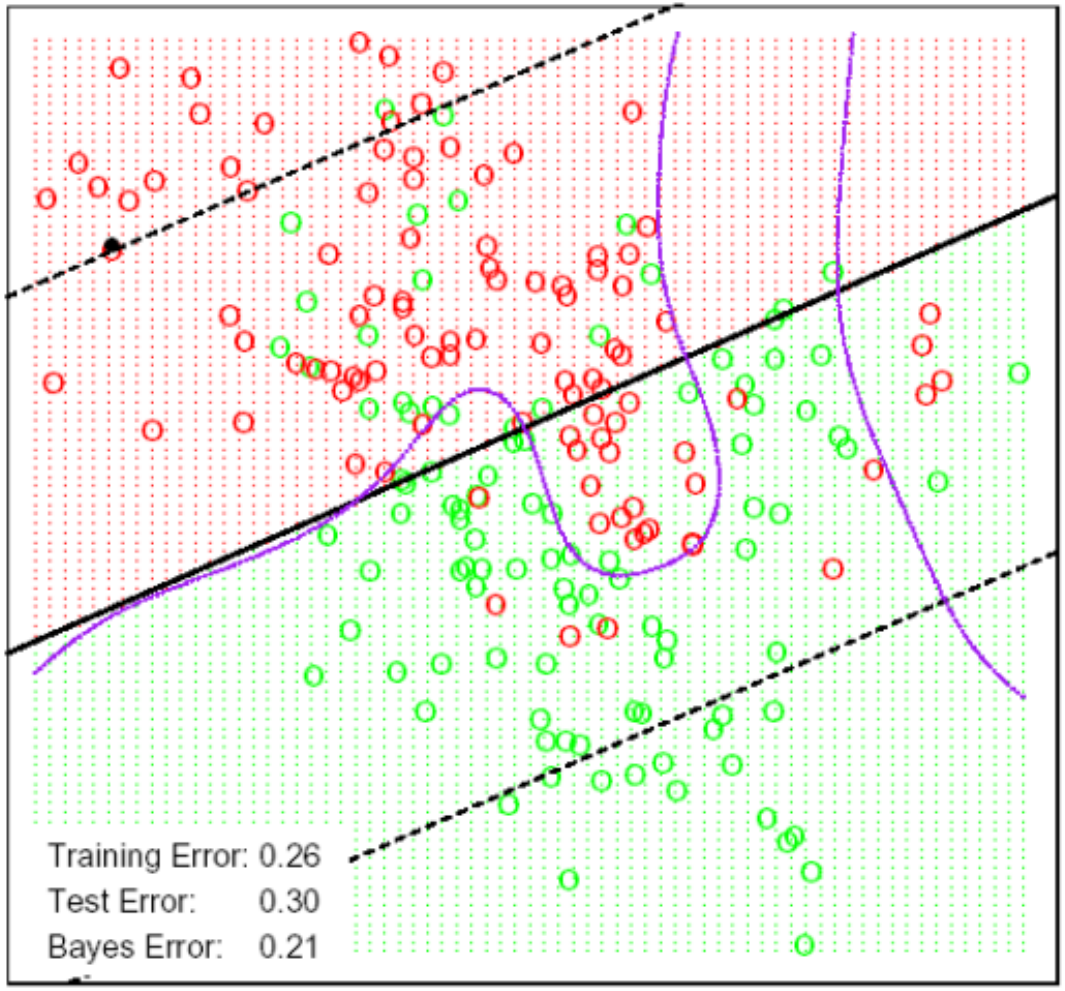
- Daten von zwei Klassen (rote, grüne Kringel) werden generiert
- Die Klassen überlappen
- Die optimale Klassifikationsgrenze ist gestrichelt gezeigt
- Gezeigt ist die Trennebene der linearen SVM mit großem $\gamma$




$\gamma = 10000$

## Künstliches Beispiel

- Gezeigt ist die Trennebene der linearen SVM mit kleinem $\gamma$

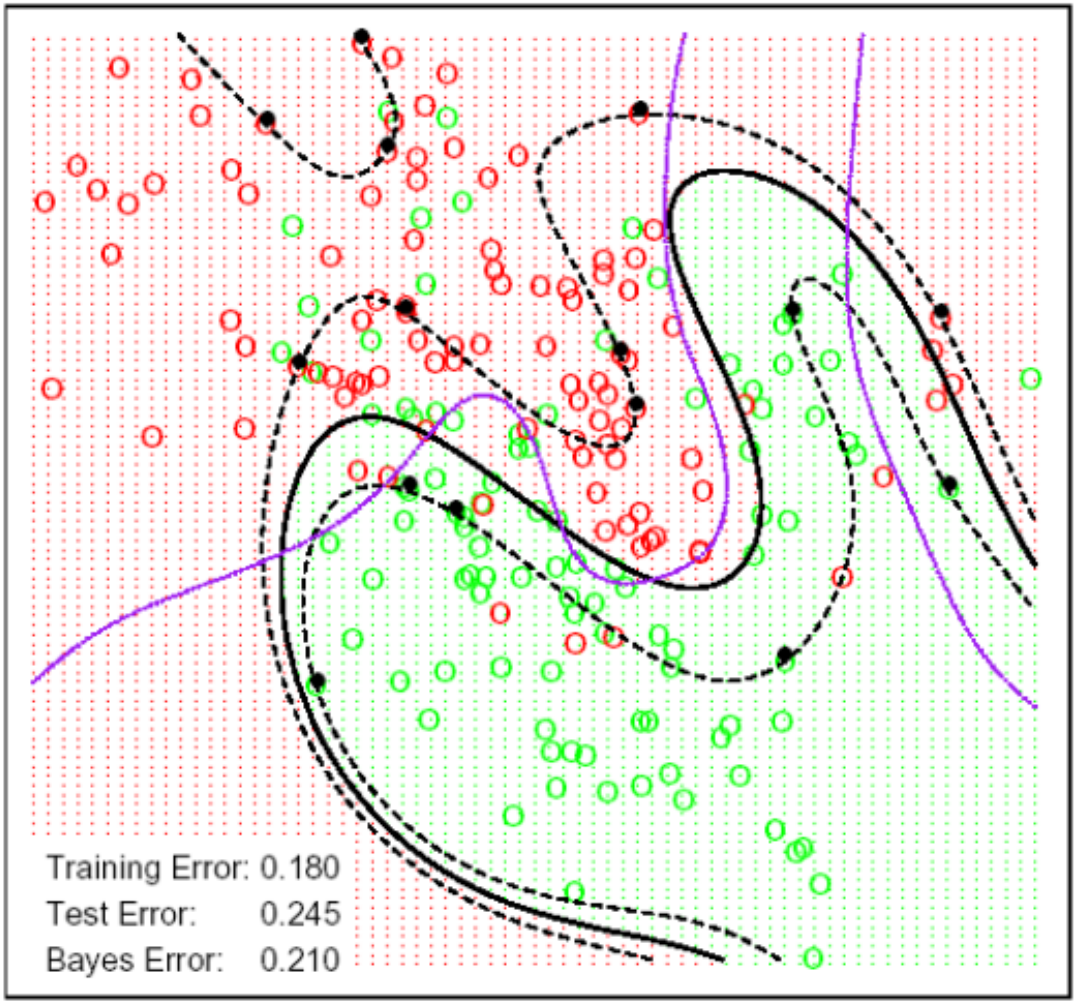



$\gamma = 0.01$

## Künstliches Beispiel

- Mit polynomialen Basisfunktionen

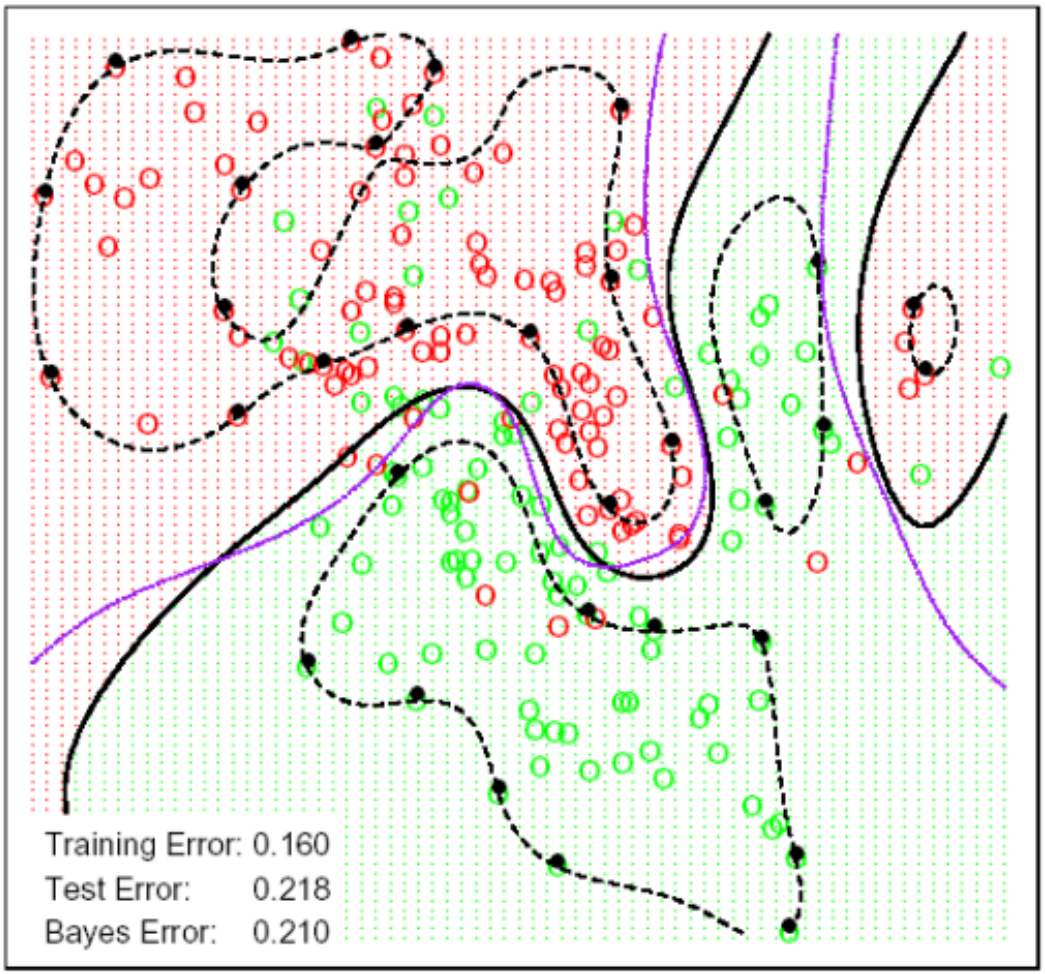
SVM - Degree-4 Polynomial in Feature Space



## Künstliches Beispiel

- Mit radialen Basisfunktionen den besten Testfehler

SVM - Radial Kernel in Feature Space



## Bemerkungen

- Der "Kern-Trick" erlaubt es, in unendlich hohen Dimensionen zu arbeiten
- Dennoch können durch die Regularisierung sehr gute Ergebnisse erzielt werden; z.B. hängt die Generalisierung einer SVM vom Margin ab und nicht von der Dimensionalität des Problems