# Vorlesung Wissensentdeckung

## Stützvektormethode

Katharina Morik, Claus Weihs

LS 8 Informatik,
Computergestützte Statistik
Technische Universität Dortmund

21.5.2015





## Gliederung







## Lineare Modelle

Wir erinnern uns: Lineare Modelle trennen positive und negative Beispiele durch eine Funktion $f(\vec{x})$. Einfachster Fall:

$$y = f(x) = mx + b \quad \text{Gerade im } \mathbb{R}^2$$

Allerdings betrachten wir als Beispielraum den $\mathbb{R}^p$, d.h. wir brauchen eine verallgemeinerte Form:

$$y = f(\vec{x}) = \sum_{i=1}^{p} \beta_i x_i + \beta_0 \quad \text{mit } \beta_0 \in \mathbb{R}, \vec{x}, \vec{\beta} \in \mathbb{R}^p \tag{1}$$

Die Funktion $f$ wird also durch $\vec{\beta}$ und $\beta_0$ festgelegt und sagt uns für ein gegebenes $\vec{x}$ das entsprechende $y$ voraus.





## Veranschaulichung

Bevor wir uns an die Wahl des passenden $\vec{\beta}$ machen, zunächst einige Vorüberlegungen.

Betrachten wir dazu die binäre Klassifikation ($Y = \{-1, +1\}$):
- Was passiert dabei eigentlich anschaulich?
- Wie klassifiziert unser $\hat{f}$ die Daten?
- Wie wirkt sich die Wahl von $\vec{\beta}$ aus?





## Zur Erinnerung: Ebenengleichung

Sei $V = \mathbb{R}^p$ ein Vektorraum, dann ist eine Hyperebene $H$ ein $(p-1)$-dimensionaler affiner Untervektorraum.

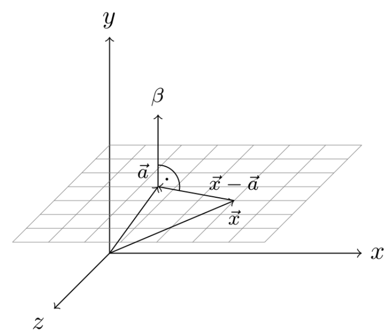
$H$ lässt sich über einen Stützvektor $\vec{a}$ und einen Normalenvektor $\vec{\beta}$ mit der Ebenengleichung schreiben

$$H = \left\{ x \in \mathbb{R}^p \mid \left\langle \vec{\beta}, \vec{x} - \vec{a} \right\rangle = 0 \right\}$$





## Beispiel Ebene, Stützvektor, Normalenvektor




(Hyper-) Ebene im $\mathbb{R}^3$ mit Normalenvektor $\vec{\beta}$ und Stützvektor $\vec{a}$. Falls $\langle \vec{\beta}, \vec{x} - \vec{a} \rangle = 0$, also $\vec{\beta}$ und $\vec{x} - \vec{a}$ orthogonal zueinander, befindet sich $\vec{x}$ auf der Ebene.

## Hesse Normalform

Multiplizieren wir die Ebenengleichung aus und setzen $\beta_0 = \left\langle \vec{\beta}\,,\, \vec{a} \right\rangle$, dann ist

$$\left\langle \vec{\beta}\,,\, \vec{x} \right\rangle - \beta_0 = 0$$

in Hesse Normalform, falls $||\vec{\beta}|| = 1$.





## Zur Erinnerung: Skalarprodukt

Das Skalarprodukt ist definiert durch

$$\langle \vec{v}\,,\, \vec{w} \rangle = \vec{v}^T \vec{w} = \sum_{i=1}^{p} v_i w_i$$

$$\begin{array}{r|l} & \vec{w}: \\ & 4 \\ & 5 \\ & 6 \\ \hline \vec{v}^T: 1 \quad 2 \quad 3 & 1 \cdot 4 + 2 \cdot 5 + 3 \cdot 6 = 32 \end{array}$$

- aber auch durch den Kosinus mit

$$\langle \vec{v}, \vec{w} \rangle = \|\vec{v}\| \cdot \|\vec{w}\| \cdot \cos(\measuredangle(\vec{v}, \vec{w}))$$





## Zur Erinnerung: Euklidsche Länge

Euklidsche Länge oder Norm, auch $L_2$-Norm

$$\parallel \vec{\beta} \parallel = \sqrt{\sum_{i=1}^{p} \beta_i^2} = \sqrt{\vec{\beta}^T \vec{\beta}} = \sqrt{\left\langle \vec{\beta}\,,\, \vec{\beta} \right\rangle}$$

weil $\parallel \vec{\beta} \parallel^2 = x_1^2 + ... x_p^2$ (Pythagoras)

Beispiel: $\vec{\beta} = \begin{pmatrix} 1 \\ 2 \\ 3 \end{pmatrix}$

$$\parallel \vec{\beta} \parallel = \sqrt{1^2 + 2^2 + 3^2} = \sqrt{14}$$

Normiert heißt ein Vektor, wenn er die (Euklidsche) Länge 1 hat.





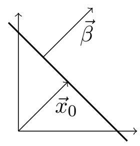
## Abstandsberechnung durch Hesse Normalform

Sei $\vec{x}_0$ der Vektor, dessen Länge der Abstand vom Ursprung zur Ebene in Hesse Normalform ist. Dieser muss orthogonal zur Ebene liegen und somit parallel zu $\vec{\beta}$. Seien nun $\vec{\beta}$ und $\vec{x}_0$ gleichgerichtet, dann gilt

$$\cos(\measuredangle(\vec{\beta}, \vec{x}_0)) = 1$$

und $||\beta|| = 1$ und somit

$$\begin{aligned} \left\langle \vec{\beta}\,,\, \vec{x}_0 \right\rangle - \beta_0 &= 0 \\ \Leftrightarrow \quad \|\vec{\beta}\| \cdot \|\vec{x}_0\| \cdot \cos(\measuredangle(\vec{\beta}, \vec{x}_0)) &= \beta_0 \\ \Leftrightarrow \quad \|\vec{x}_0\| &= \beta_0 \end{aligned}$$




Daraus folgt, dass $\beta_0$ der Abstand der Ebene zum Ursprung ist.





## Hesse Normalform

Für die Hesse Normalform muss $||\vec{\beta}|| = 1$ gelten, damit der Abstand zum Ursprung leicht abgelesen werden kann. Wir normieren den Normalenvektor auf die Euklidsche Länge 1

$$\vec{\beta} = \frac{\vec{\beta}'}{||\vec{\beta}'||}$$

und erhalten die Ebenengleichung in Hesse Normalform

$$\left\langle \vec{\beta}\,,\, \vec{x} \right\rangle - \beta_0 = 0 \qquad (2)$$

wobei

$$\beta_0 = \left\langle \vec{\beta}\,,\, \vec{a} \right\rangle > 0$$

Dann ist $\beta_0$ der Abstand zum Ursprung.





## Beispiel Normalisierung

Sei $\vec{a} = \begin{pmatrix} 4 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}$ und $\vec{\beta}' = \begin{pmatrix} 1 \\ 2 \\ 3 \end{pmatrix}$ dann ist die Ebenengleichung nicht in Hesse Normalform, weil $||\vec{\beta}'|| = \sqrt{14} \neq 1$. Wir normalisieren

$$\vec{\beta} = \frac{\vec{\beta}'}{||\vec{\beta}'||} \qquad \frac{1}{\sqrt{14}} \begin{pmatrix} 1 \\ 2 \\ 3 \end{pmatrix}$$

$$\left\langle \vec{\beta}\,,\, \vec{x} \right\rangle - \beta_0 = 0 \qquad \frac{1}{\sqrt{14}} x_1 + \frac{1}{\sqrt{14}} x_2 + \frac{1}{\sqrt{14}} x_3 - \frac{4}{\sqrt{14}} = 0$$

Jetzt ist $\beta_0 = \frac{-4}{\sqrt{14}}$ der Abstand der Ebene zum Ursprung.

## Übersicht über die Stützvektormethode (SVM)

Eigenschaften der Stützvektormethode (SVM) (Support Vector Machine)

- Maximieren der Breite einer separierenden Hyperebene – maximum margin method – ergibt eindeutige, optimale trennende Hyperebene.
- Transformation des Datenraums durch Kernfunktion behandelt Nichtlinearität.
- Regularisierung minimiert nicht nur den Fehler, sondern auch die Komplexität des Modells.





## Einführende Literatur

- Vladimir Vapnik “The Nature of Statistical Learning Theory” Springer Vg. 1995
- W.N. Wapnik, A. Tscherwonenkis “Theorie der Zeichenerkennung” Akademie Vg. 1979
- Christopher Burges ”A Tutorial on Support Vector Machines for Pattern Recognition” in: Data Mining and Knowledge Discovery 2, 1998, 121-167

Vertiefung: Bernhard Schölkopf, Alexander Smola “Learning with Kernels”, MIT Press, 2002





## Probleme der Empirischen Risikominimierung

Empirische Risikominimierung: Bisher haben wir lineare Modelle

$$\hat{Y} = \hat{\beta}_0 + \sum_{j=1}^{p} X_j \hat{\beta}_j$$

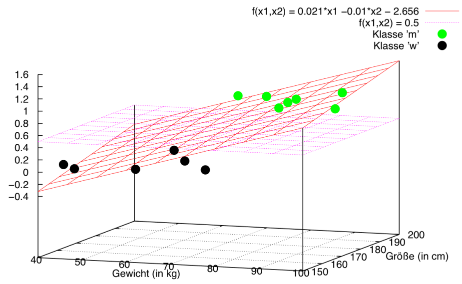
auf die Fehlerminimierung hin optimiert:

$$RSS(\hat{\vec{\beta}}) = \sum_{i=1}^{N} (y_i - \vec{x}_i^T \hat{\beta})^2$$





## Wo trennen wir die Daten?




Problem: Mehrere Funktionen mit minimalem Fehler existieren. Welche wählen?

- 1. Schritt: Verbessertes Kriterium: maximum margin.
- 2. Schritt: Zusätzliches Kriterium: möglichst geringe Komplexität des Modells (Regularisierung)





## Klassifikationsproblem

Gegeben sei ein Klassifikationsproblem mit $Y = \{-1; +1\}$ und $\mathbf{X} \subseteq \mathbb{R}^p$.

Sei $\mathbf{X} = C_+ \dot{\cup} C_-$ die Menge der Trainingsbeispiele mit

$$C_+ = \{(\vec{x}, y) \mid y = +1\} \quad \text{und} \quad C_- = \{(\vec{x}, y) \mid y = -1\}$$

Zur Klassifikation ist nun eine Hyperebene

$$H = \left\{ \vec{x} \mid \beta_0 + \left\langle \vec{x}, \vec{\beta} \right\rangle = 0 \right\}$$

gesucht, die die Mengen $C_+$ und $C_-$ *bestmöglichst* trennt

Für eine gegebene Hyperebene $H$ erfolgt die Klassifikation dann durch

$$\hat{y} = \text{sign}\left(\beta_0 + \left\langle \vec{x}, \vec{\beta} \right\rangle\right)$$





## Notationen...

**Und warum jetzt $\left\langle \vec{x}, \vec{\beta} \right\rangle$ statt $\vec{x}^T \vec{\beta}$?**

Wir bewegen uns derzeit in einem $\mathbb{R}$-Vektorraum der Beispiele mit dem Standardskalarprodukt

$$\left\langle \vec{x}, \vec{\beta} \right\rangle = \underbrace{\vec{x}^T \vec{\beta}}_{Matrixmultiplikation} = \underbrace{\vec{x}\vec{\beta}}_{ImplizitesSkalarprodukt}$$

**Und warum jetzt $\beta_0 + \left\langle \vec{x}, \vec{\beta} \right\rangle$ statt $\left\langle \vec{x}, \vec{\beta} \right\rangle - \beta_0$?**

Warum nicht? Vorher $\beta_0 = \left\langle \vec{\beta}, \vec{a} \right\rangle > 0$, es geht auch $\beta_0 < 0$.

## Klassifikation mit Hyperebenen

Die vorzeichenbehaftete Distanz eines Punktes $\vec{x}$ zu einer Hyperebene $H$ mit dem Stützvektor $\vec{a}$ und Normalenvektor $\vec{\beta}$ ist

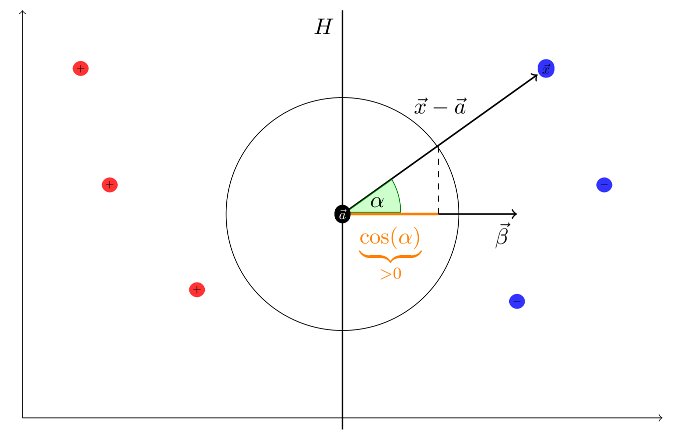
$$
\begin{aligned}
d(\vec{x}, H) &= \left\langle \vec{x}, \vec{\beta} \right\rangle - \beta_0 && (3)\\
&= \left\langle \vec{x}, \vec{\beta} \right\rangle - \left\langle \vec{a}, \vec{\beta} \right\rangle && (4)\\
&= \left\langle \vec{x} - \vec{a}, \vec{\beta} \right\rangle && (5)\\
&= \underbrace{\|\vec{x} - \vec{a}\| \cdot \|\vec{\beta}\|}_{>0} \cdot \cos(\measuredangle(\vec{x} - \vec{a}, \vec{\beta})) && (6)
\end{aligned}
$$

Nur $\cos(\measuredangle(\vec{x} - \vec{a}, \vec{\beta}))$ kann negativ werden und bestimmt die Klassifizierung.





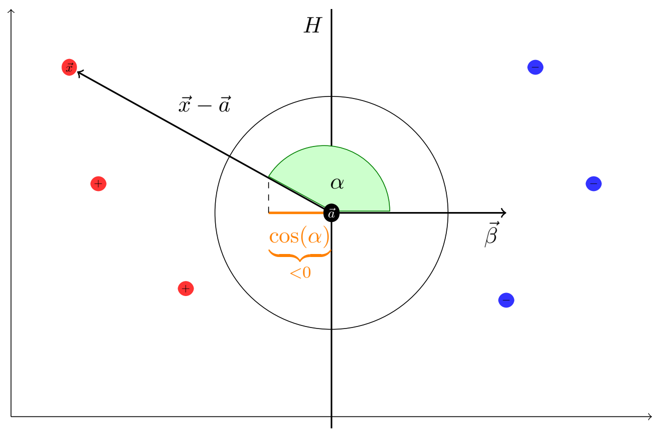
## Klassifikation mit Hyperebenen








## Klassifikation mit Hyperebenen








## Klassifikation mit Hyperebenen

Die vorzeichenbehaftete Distanz $d(\vec{x}, H)$ drückt aus

1. den Abstand $|d(\vec{x}, H)|$ von $\vec{x}$ zu Ebene $H$
2. die Lage von $\vec{x}$ relativ zur Orientierung ($\vec{\beta}$) von $H$, d.h.

$$
\operatorname{sign}(d(\vec{x}, H)) = \begin{cases} +1 & d(\vec{x}, H) > 0, \cos \measuredangle(\vec{x}, \vec{\beta}) > 0 \\ -1 & d(\vec{x}, H) < 0, \cos \measuredangle(\vec{x}, \vec{\beta}) < 0 \end{cases}
$$

Auf diese Weise lassen sich die Punkte klassifizieren mit

$$
\hat{y} = \operatorname{sign}\left(\beta_0 + \left\langle \vec{x}, \vec{\beta} \right\rangle\right)
$$

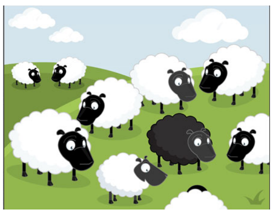
Bei $y = -1$ liegen die Punkte $\vec{x}_i$ im Halbraum des Ursprungs.





## Einführung von Schölkopf/Smola

Gegeben eine Menge von Schafen, packe immer die ähnlichen zusammen! Vorgehen: Schafe vergleichen!







## Einfacher Ansatz nach Schölkopf/Smola

Ein einfacher Ansatz zu einer separierenden Hyperebene zu kommen, geht über die Zentroiden von $C_+$ und $C_-$:

Seien

$$
\vec{c}_+ := \frac{1}{|C_+|} \sum_{(\vec{x}, y) \in C_+} \vec{x} \quad \text{und} \quad \vec{c}_- := \frac{1}{|C_-|} \sum_{(\vec{x}, y) \in C_-} \vec{x}
$$

Wähle nun

$$
\vec{a} := \frac{\vec{c}_+ + \vec{c}_-}{2} \quad \text{und} \quad \vec{\beta} := \vec{c}_+ - \vec{c}_-
$$

als Hyperebene mit Normalenvektor $\vec{\beta}$ durch den Punkt $\vec{x}_0$

## Separierende Hyperebene über Zentroiden

Durch $\vec{\beta}$ und $\vec{a}$ ist die Hyperebene gegeben als

$$\tilde{H} = \left\{ \vec{x} \mid \left\langle \vec{x} - \vec{a}, \vec{\beta} \right\rangle = 0 \right\} = \left\{ \vec{x} \mid \left\langle \vec{x}, \vec{\beta} \right\rangle - \underbrace{\left\langle \vec{a}, \vec{\beta} \right\rangle}_{=:-\beta_0} = 0 \right\}$$

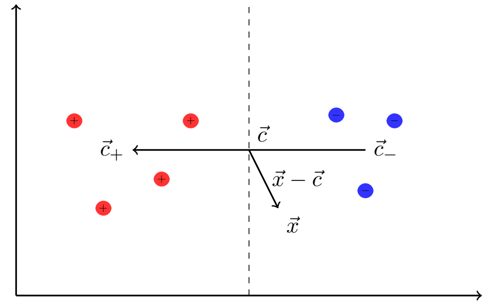
Damit erfolgt die Klassifikation durch

$$\begin{aligned} \hat{y} &= \operatorname{sign}\left(\left\langle \vec{x} - \vec{c}, \vec{\beta} \right\rangle\right) \\ &= \operatorname{sign}\left(\langle \vec{x}, \vec{c}_+ \rangle - \langle \vec{x}, \vec{c}_- \rangle + \beta_0\right) \end{aligned}$$





## Lernalgorithmus im Bild








## Fast...

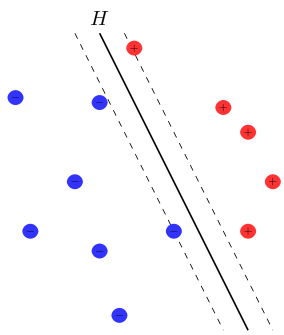
... wäre das schon die Stützvektormethode. Aber:

- Einfach den Mittelpunkt der Beispiele einer Klasse zu berechnen ist zu einfach, um ein ordentliches $\vec{\beta}$ zu bekommen.
- Man erhält so nicht die optimale Hyperebene.





## Die optimale Hyperebene




Eine Menge von Beispielen heißt linear trennbar, falls es eine Hyperebene $H$ gibt, die die positiven und negativen Beispiele trennt.

**5.1: Optimale Hyperebene**

Eine separierende Hyperebene $H$ heißt optimal, wenn ihr minimaler Abstand $d$ zu allen Beispielen maximal ist.

**5.2: Satz (Eindeutigkeit)**

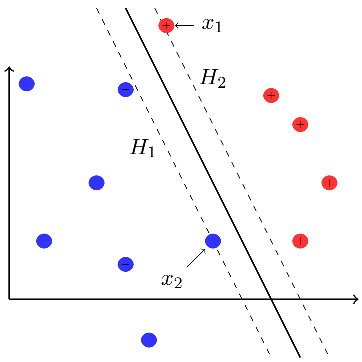
Es existiert eine eindeutig bestimmte optimale Hyperebene.





## Bild

$$H^* = \left\{ \vec{x} \mid \left\langle \vec{x}, \vec{\beta} \right\rangle + \beta_0 = 0 \right\}$$




Nach 5.1 wird die optimale Hyperebene durch die nächstliegenden Punkte aus $C_+$ und $C_-$ bestimmt.

Skalierung von $\vec{\beta}$ und $\beta_0$, so dass für die nächstliegenden Punkte $x_i$ zu $H^*$ gilt:

$$|\left\langle \vec{\beta}, \vec{x}_i \right\rangle + \beta_0| = 1$$

Die Beispiele am nächsten zur Hyperebene liefern die beiden Hyperebenen $H_1$ und $H_2$

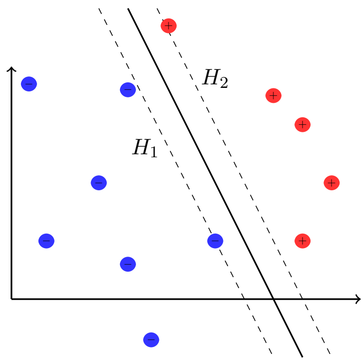
$$H_j = \left\{ \vec{x} \mid \left\langle \vec{x}, \vec{\beta} \right\rangle + \beta_0 = (-1)^j \right\}$$





## Abstand der Hyperebenen zum Ursprung

$$H^* = \left\{ \vec{x} \mid \left\langle \vec{x}, \vec{\beta} \right\rangle + \beta_0 = 0 \right\}$$




Der Abstand der mittleren Ebene $H^*$ zum Ursprung beträgt

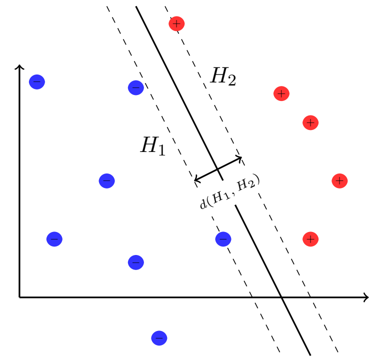
$$d(\vec{0}, H^*) = \frac{\beta_0}{\|\vec{\beta}\|}$$

Der Abstand zwischen den Ebenen $H_1$ und $H_2$ ist

$$\begin{aligned} d(H_1, H_2) &= \frac{\beta_0 + 1}{\|\vec{\beta}\|} - \frac{\beta_0 - 1}{\|\vec{\beta}\|} \\ &= \frac{\beta_0 - \beta_0 + 1 + 1}{\|\vec{\beta}\|} \\ &= \frac{2}{\|\vec{\beta}\|} \end{aligned}$$

## Margin

$$H^* = \left\{ \vec{x} \mid \left\langle \vec{x}, \vec{\beta} \right\rangle + \beta_0 = 0 \right\}$$




Nach Konstruktion liegt kein Beispiel zwischen $H_1$ und $H_2$, d.h.

$$\langle \vec{x}, \vec{\beta} \rangle + \beta_0 \geq +1 \, \forall \vec{x} \in C_+ \quad (7)$$

$$\langle \vec{x}, \vec{\beta} \rangle + \beta_0 \leq -1 \, \forall \vec{x} \in C_- \quad (8)$$

Der Abstand

$$d(H_1, H_2) = \frac{2}{||\vec{\beta}||}$$

heißt Margin und soll maximiert werden!





## Maximum Margin

Mit der Maximierung des Margin finden wir eine optimale Hyperebene innerhalb der Menge der möglichen trennenden Hyperebenen.

Konvexes, quadratisches Optimierungsproblem:

- Es existiert eine eindeutig bestimmte, optimale Hyperebene

$$H^* = \left\{ \vec{x} \mid \left\langle \vec{x}, \vec{\beta} \right\rangle + \beta_0 = 0 \right\}$$

- unter der Bedingung, dass $\frac{1}{2}||\vec{\beta}||^2$ minimal ist.

Das Optimierungsproblem läßt sich in Zeit $O(N^3)$ lösen.





## Optimierungsaufgabe

Nach diesen Vorüberlegungen haben wir also (nur noch) die folgende Optimierungsaufgabe zu lösen:

**Optimierungsaufgabe Hyperebene mit max margin**

Minimiere

$$\frac{1}{2}||\vec{\beta}||^2$$

unter den Nebenbedingungen

$$\left\langle \vec{x}, \vec{\beta} \right\rangle + \beta_0 \geq +1 \quad \forall \, \vec{x} \in C_+$$

$$\left\langle \vec{x}, \vec{\beta} \right\rangle + \beta_0 \leq -1 \quad \forall \, \vec{x} \in C_-$$

Die Nebenbedingungen lassen sich zusammenfassen zu

$$y(\left\langle \vec{x}, \vec{\beta} \right\rangle + \beta_0) - 1 \geq 0 \quad \forall (\vec{x}, y) \in \mathbf{X} \qquad (9)$$





## Optimierung mit Nebenbedingungen

Sei die optimierende Funktion $f : \mathbb{R} \to \mathbb{R}$ gegeben als

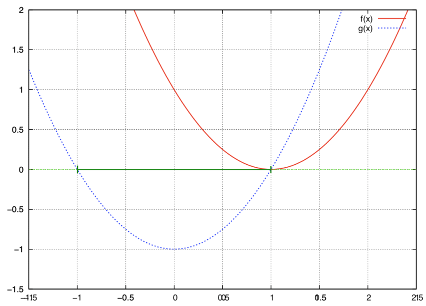
$$f(x) = (x-1)^2$$

unter der einzigen Nebenbedingung

$$g(x) = x^2 - 1,$$

d.h. für die möglichen Lösungen $\tilde{x}$ muss gelten

$$\tilde{x} \in \{x \in \mathbb{R} \mid g(x) \leq 0\}$$



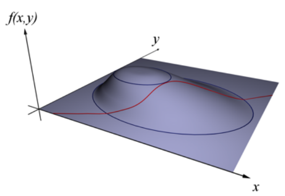





## Beispiel Lagrange Multiplikatoren zur Optimierung

Gegeben: Funktion $f(x, y)$, Nebenbedingung $g(x, y) = c$,
Optimierungsziel: maximiere $c$.
Notwendige Bedingung: $f(x, y) = c$ und $g(x, y) = c$.
Lagrangefunktion

$$L(x, y, \lambda) = f(x, y) + \lambda(g(x, y) - c)$$




http://de.wikipedia.org/wiki/Lagrange-Multiplikator





## Optimierung mit Lagrange

Die Optimierung nach Lagrange formuliert die Optimierung einer Funktion $f(x)$ unter Nebenbedingungen um in eine Optimierung ohne Nebenbedingungen.

Mit der Lagrange-Methode lassen sich Nebenbedingungen $g_i$ und $h_j$ der Art

$$g_i(x) \leq 0 \quad \text{und} \quad h_j(x) = 0$$

in die zu optimierende Funktion $f$ hinzufügen, im Falle eines Minimierungsproblems als

$$\min f(x) + \sum_i \alpha_i g_i(x) + \sum_j \mu_j h_j(x) \quad \text{mit } \alpha_i, \mu_j \geq 0 \, \forall \, i, j$$

Die $\alpha_i$ und $\mu_j$ heißen auch Lagrange-Multiplikatoren.

## Lagrange-Funktion

Die Umformung der Nebenbedingungen (9) erlaubt nun die Anwendung von Lagrange (nur Ungleichheitsbedingungen):

**Lagrange-Funktion**

Sei das Optimierungsproblem gegeben, $f(\vec{\beta})$ zu minimieren unter den Nebenbedingungen $g_i(\vec{\beta}) \geq 0, i = 1, ..., m$ dann ist die Lagrange-Funktion:

$$L\left(\vec{\beta}, \vec{\alpha}\right) = f(\vec{\beta}) - \sum_{i=1}^{m} \alpha_i g_i(\vec{\beta}) \quad (10)$$

Dabei muss gelten $\alpha_i \geq 0$, Gleichheitsbedingungen sind nicht gegeben.





## SVM Optimierungsfunktion als Lagrange

Die Nebenbedingungen $g_i$ sind gegeben durch

$$g_i(\vec{\beta}, \beta_0) = y_i\left(\left\langle \vec{x}_i\,,\, \vec{\beta}\right\rangle + \beta_0\right) - 1 \geq 0 \;\forall\, \vec{x}_i \in \mathbf{X}$$

Die Formulierung des Optimierungsproblems nach Lagrange wird auch als Primales Problem bezeichnet:

**Primales Problem**

Die Funktion

$$L_P(\vec{\beta}, \beta_0, \vec{\alpha}) = \frac{1}{2}||\vec{\beta}||^2 - \sum_{i=1}^{N} \alpha_i \left(y_i \left(\left\langle \vec{x}_i\,,\, \vec{\beta}\right\rangle + \beta_0\right) - 1\right) \quad (11)$$

soll $L_P$ bezüglich $\vec{\beta}$ und $\beta_0$ *minimiert* und bezüglich $\vec{\alpha}$ *maximiert* werden!





## Karush-Kuhn-Tucker Bedingungen

Durch die partiellen Ableitung nach $\vec{\beta}$ und $\beta_0$ erhalten wir

$$\frac{\partial}{\partial \vec{\beta}} L_P(\vec{\beta}, \beta_0, \vec{\alpha}) = \vec{\beta} - \sum_i \alpha_i y_i \vec{x}_i \quad \text{und} \quad \frac{\partial}{\partial \beta_0} L_P(\vec{\beta}, \beta_0, \vec{\alpha}) = -\sum_i \alpha_i y_i$$

Nullsetzen der Ableitungen und die Berücksichtigung der Nebenbedingungen führt zu den KKT-Bedingungen für eine Lösung für $L_P$:

$$\vec{\beta} = \sum_{i=1}^{N} \alpha_i y_i \vec{x}_i \quad \text{und} \quad \sum_{i=1}^{N} \alpha_i y_i = 0 \quad (12)$$

$$\alpha_i \geq 0 \;\forall\, i = 1, \ldots, N \quad (13)$$

$$\alpha_i \left(y_i \left(\left\langle \vec{x}_i\,,\, \vec{\beta}\right\rangle + \beta_0\right) - 1\right) = 0 \;\forall\, i = 1, \ldots, N \quad (14)$$





## Duales Problem

Das primale Problem soll bezüglich $\vec{\beta}$ und $\beta_0$ minimiert und bezüglich $\vec{\alpha}$ maximiert werden:

Mit den Bedingungen aus $\frac{\partial L_P}{\partial \vec{\beta}}$ und $\frac{\partial L_P}{\partial \beta_0}$ erhalten wir den *dualen Lagrange-Ausdruck* $L_D(\vec{\alpha})$

- Der duale Lagrange-Ausdruck $L(\vec{\alpha})$ soll maximiert werden.
- Das Minimum des ursprünglichen Optimierungsproblems tritt genau bei jenen Werten von $\vec{\beta}$,$\beta_0$,$\vec{\alpha}$ auf wie das Maximum des dualen Problems.





## Umformung des primalen in das duale Problem

$$\begin{aligned}
&\frac{1}{2}||\vec{\beta}||^2 - \sum_{i=1}^{N} \alpha_i && \left[y_i \left(\left\langle \vec{x}_i\,,\, \vec{\beta}\right\rangle + \beta_0\right) - 1\right] && \\
=&\frac{1}{2}||\vec{\beta}||^2 - \sum_{i=1}^{N} \alpha_i && y_i \left(\left\langle \vec{x}_i\,,\, \vec{\beta}\right\rangle + \beta_0\right) && + \sum_{i=1}^{N} \alpha_i \\
=&\frac{1}{2}||\vec{\beta}||^2 - \sum_{i=1}^{N} \alpha_i y_i \left\langle \vec{x}_i\,,\, \vec{\beta}\right\rangle && - \sum_{i=1}^{N} \alpha_i y_i \beta_0 && + \sum_{i=1}^{N} \alpha_i \\
\overset{(12)}{=}&\frac{1}{2}||\vec{\beta}||^2 - \sum_{i=1}^{N} \alpha_i y_i \left\langle \vec{x}_i\,,\, \vec{\beta}\right\rangle && && + \sum_{i=1}^{N} \alpha_i
\end{aligned}$$





## Umformung II

Einsetzen von $\vec{\beta} = \sum_{i=1}^{N} \alpha_i y_i \vec{x}_i$ führt zu

$$\begin{aligned}
&\frac{1}{2}||\vec{\beta}||^2 && - \sum_{i=1}^{N} \alpha_i y_i \left\langle \vec{x}_i\,,\, \vec{\beta}\right\rangle && + \sum_{i=1}^{N} \alpha_i \\
=&\frac{1}{2}\sum_{i=1}^{N}\sum_{j=1}^{N} \alpha_i \alpha_j y_i y_j \left\langle \vec{x}_i\,,\, \vec{x}_j\right\rangle && - \sum_{i=1}^{N}\sum_{j=1}^{N} \alpha_i \alpha_j y_i y_j \left\langle \vec{x}_i\,,\, \vec{x}_j\right\rangle && + \sum_{i=1}^{N} \alpha_i \\
=&+\sum_{i=1}^{N} \alpha_i && - \frac{1}{2}\sum_{i=1}^{N}\sum_{j=1}^{N} \alpha_i \alpha_j y_i y_j \left\langle \vec{x}_i\,,\, \vec{x}_j\right\rangle &&
\end{aligned}$$

unter den Nebenbedingungen $0 = \sum_{i=1}^{N} \alpha_i y_i$ und $\alpha_i \geq 0 \;\forall i$

## SVM Optimierungsproblem (Duales Problem)

Die Umformungen führen nach Einsetzen der KKT-Bedingungen zum dualen Problem:

**Duales Problem**

Maximiere

$$L_D(\vec{\alpha}) = \sum_{i=1}^{N} \alpha_i - \frac{1}{2} \sum_{i=1}^{N} \sum_{j=1}^{N} y_i y_j \alpha_i \alpha_j \langle \vec{x}_i \,, \vec{x}_j \rangle \qquad (15)$$

unter den Bedingungen

$$\alpha_i \geq 0 \; \forall \, i = 1, \ldots, N \quad \text{und} \quad \sum_{i=1}^{N} \alpha_i y_i = 0$$





## Stützvektoren

Die Lösung $\vec{\alpha}^*$ des dualen Problems

$$L_D(\vec{\alpha}) = \sum_{i=1}^{N} \alpha_i - \frac{1}{2} \sum_{i=1}^{N} \sum_{j=1}^{N} y_i y_j \alpha_i \alpha_j \langle \vec{x}_i \,, \vec{x}_j \rangle$$

muss die KKT-Bedingungen erfüllen, d.h. es gilt unter anderem

$$\alpha_i \left( y_i \left( \left\langle \vec{x}_i \,, \vec{\beta} \right\rangle + \beta_0 \right) - 1 \right) = 0 \; \forall \, i = 1, \ldots, N$$

$\vec{\alpha}^*$ enthält für jedes Beispiel $\vec{x}_i$ genau ein $\alpha_i$ mit

$\alpha_i = 0$ , falls $\vec{x}_i$ im richtigen Halbraum liegt
$\alpha_i > 0$ , falls $\vec{x}_i$ auf der Hyperebene $H_1$ oder $H_2$ liegt

Ein Beispiel $\vec{x}_i$ mit $\alpha_i > 0$ heißt Stützvektor.





## Optimale Hyperebene

Haben wir das optimale $\vec{\alpha}^*$ bestimmt, erhalten wir unsere optimale Hyperebene:

Nach (12) gilt

$$\vec{\beta} = \sum \alpha_i y_i \vec{x}_i$$

d.h. der optimale Normalenvektor $\vec{\beta}$ ist eine Linearkombination von Stützvektoren.

Um $\beta_0$ zu bestimmen können wir

$$\alpha_i \left( y_i \left( \left\langle \vec{x}_i \,, \vec{\beta} \right\rangle + \beta_0 \right) - 1 \right) = 0$$

für ein beliebiges $i$ und unser berechnetes $\vec{\beta}$ nutzen.





## Berechnung der $\alpha_i$?

Das prinzipielle Vorgehen ist bei der SVM wie bei anderen Lernverfahren auch:

- Parametrisierung der Modelle, hier über Umwege durch $\vec{\alpha}$
- Festlegung eines Optimalitätskriteriums, hier: Maximum Margin
- Formulierung als Optimierungsproblem

Das finale Optimierungsproblem läßt sich mit unterschiedlichen Ansätzen lösen

- Numerische Verfahren (*quadratic problem solver*)
- *Sequential Minimal Optimization* (SMO, [J. C. Platt, 1998])
- Evolutionäre Algorithmen (EvoSVM, [I. Mierswa, 2006])





## Zusammenfassung der Lagrange-Optimierung für SVM

Das Lagrange-Optimierungs-Problem (11) ist definiert als:

$$L_P = \frac{1}{2} \|\vec{\beta}\|^2 - \sum_{i=1}^{N} \alpha_i \left[ y_i (\left\langle \vec{x}_i \,, \vec{\beta} \right\rangle + \beta_0) - 1 \right]$$

mit den *Lagrange-Multiplikatoren* $\vec{\alpha}_i \geq 0$.
Notwendige Bedingung für ein Minimum liefern die Ableitungen nach $\vec{\beta}$ und $\beta_0$

$$\frac{\partial L_P}{\partial \vec{\beta}} = \vec{\beta} - \sum_{i=1}^{N} \alpha_i y_i \vec{x}_i \quad \text{und} \quad \frac{\partial L_P}{\partial \beta_0} = \sum_{i=1}^{N} \alpha_i y_i$$

Diese führen zum *dualen Problem* (15)

$$L_D = \sum_{i=1}^{N} \alpha_i - \frac{1}{2} \sum_{i=1}^{N} \sum_{i'=1}^{N} \alpha_i \alpha_{i'} y_i y_{i'} \langle \vec{x}_i \,, \vec{x}_{i'} \rangle$$





## Was wissen wir jetzt?

- Maximieren des Margins einer Hyperebene ergibt eine eindeutige Festlegung der optimalen trennenden Hyperebene.
- Dazu minimieren wir die Länge des Normalenvektors $\vec{\beta}$
  - Formulierung als Lagrange-Funktion
  - Formulierung als duales Optimierungsproblem
- Das Lernergebnis ist eine Linearkombination von Stützvektoren.
- Mit den Beispielen müssen wir nur noch das Skalarprodukt rechnen.