



# Vorlesung Wissensentdeckung

## Stützvektormethode

Katharina Morik, Claus Weihs

LS 8 Informatik,  
Computergestützte Statistik  
Technische Universität Dortmund

21.5.2015



# Gliederung

- 1 Hinführungen zur SVM
  - Geometrie linearer Modelle: Hyperebenen
  - Einführung von Schölkopf/Smola
  
- 2 Maximum Margin Methode
  - Lagrange-Optimierung



## 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:

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

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?



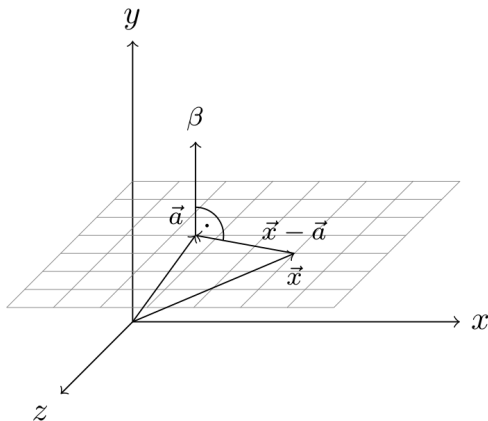
## Zur Erinnerung: Ebenengleichung

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

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

# 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  $\beta_0 = \langle \vec{\beta}, \vec{a} \rangle$ , dann ist

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

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



## Zur Erinnerung: Skalarprodukt

Das Skalarprodukt ist  
definiert durch

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

				$\vec{w} :$
				4
				5
				6
$\vec{v}^T :$	1	2	3	$1 \cdot 4 + 2 \cdot 5 + 3 \cdot 6 = 32$

- aber auch durch den Kosinus mit

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



## Zur Erinnerung: Euklidische Länge

### Euklidische Länge oder Norm, auch $L_2$ -Norm

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

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

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

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

**Normiert** heißt ein Vektor, wenn er die (Euklidische) 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

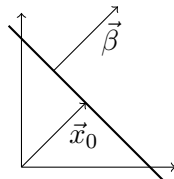
$$\cos(\angle(\vec{\beta}, \vec{x}_0)) = 1$$

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

$$\langle \vec{\beta}, \vec{x}_0 \rangle - \beta_0 = 0$$

$$\Leftrightarrow \|\vec{\beta}\| \cdot \|\vec{x}_0\| \cdot \cos(\angle(\vec{\beta}, \vec{x}_0)) = \beta_0$$

$$\Leftrightarrow \|\vec{x}_0\| = \beta_0$$



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 Euklidische Länge 1

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

und erhalten die Ebenengleichung in **Hesse Normalform**

$$\langle \vec{\beta}, \vec{x} \rangle - \beta_0 = 0 \tag{2}$$

wobei

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

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

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

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

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

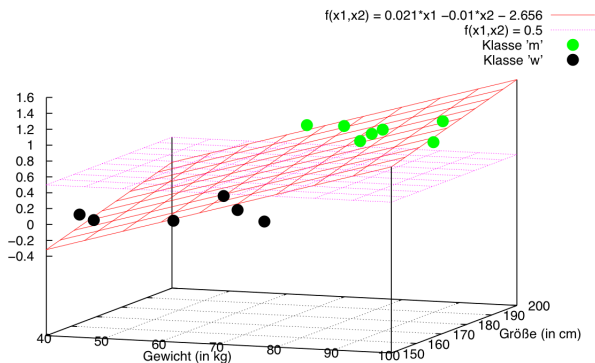
**Empirische Risikominimierung:** Bisher haben wir lineare Modelle

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

auf die Fehlerminimierung hin optimiert:

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

# 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

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

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

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

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



## Notationen...

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

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

$$\langle \vec{x}, \vec{\beta} \rangle = \underbrace{\vec{x}^T \vec{\beta}}_{\text{Matrixmultiplikation}} = \underbrace{\vec{x} \vec{\beta}}_{\text{Implizites Skalarprodukt}}$$

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

Warum nicht? Vorher  $\beta_0 = \langle \vec{\beta}, \vec{a} \rangle > 0$ , 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

$$d(\vec{x}, H) = \langle \vec{x}, \vec{\beta} \rangle - \beta_0 \quad (3)$$

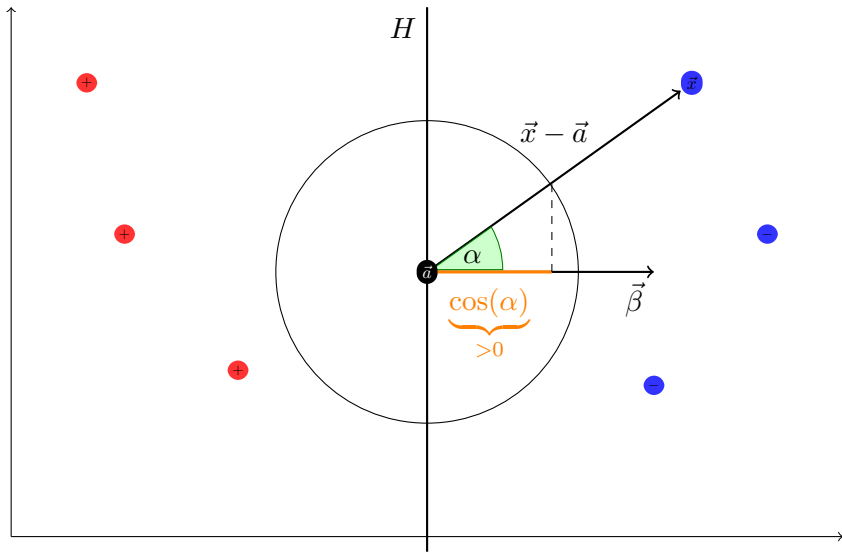
$$= \langle \vec{x}, \vec{\beta} \rangle - \langle \vec{a}, \vec{\beta} \rangle \quad (4)$$

$$= \langle \vec{x} - \vec{a}, \vec{\beta} \rangle \quad (5)$$

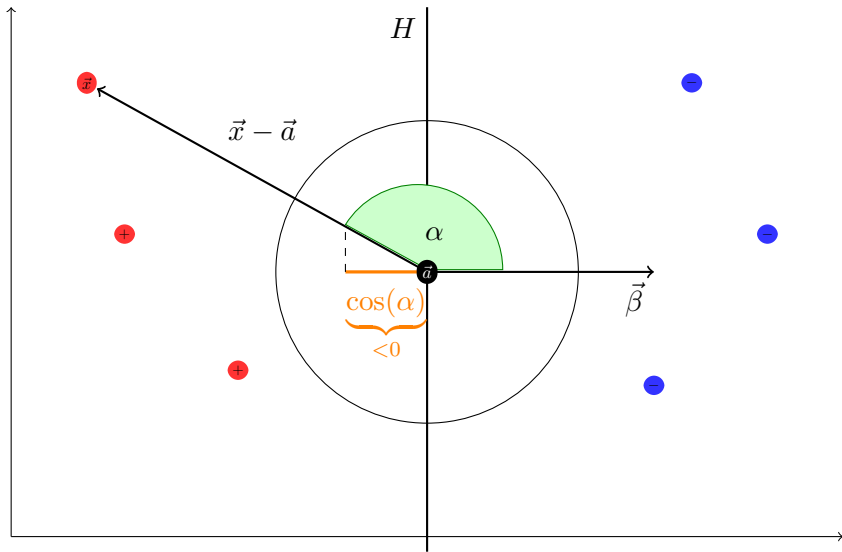
$$= \underbrace{\|\vec{x} - \vec{a}\| \cdot \|\vec{\beta}\|}_{>0} \cdot \cos(\angle(\vec{x} - \vec{a}, \vec{\beta})) \quad (6)$$

Nur  $\cos(\angle(\vec{x} - \vec{a}, \vec{\beta}))$  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.

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

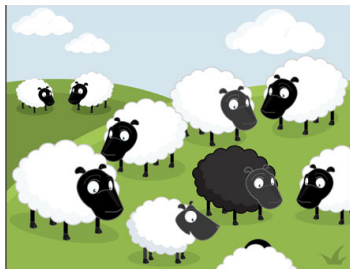
Auf diese Weise lassen sich die Punkte klassifizieren mit

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

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

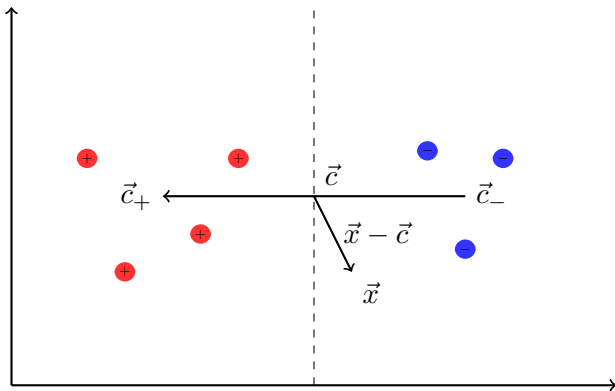
$$\tilde{H} = \left\{ \vec{x} \mid \langle \vec{x} - \vec{a}, \vec{\beta} \rangle = 0 \right\} = \left\{ \vec{x} \mid \langle \vec{x}, \vec{\beta} \rangle - \underbrace{\langle \vec{a}, \vec{\beta} \rangle}_{=:-\beta_0} = 0 \right\}$$

Damit erfolgt die Klassifikation durch

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



# Lernalgorithmus im Bild

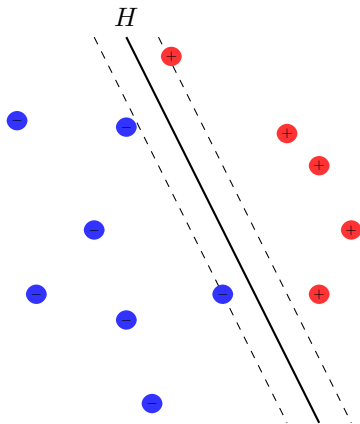




## Fast...

- ... 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.

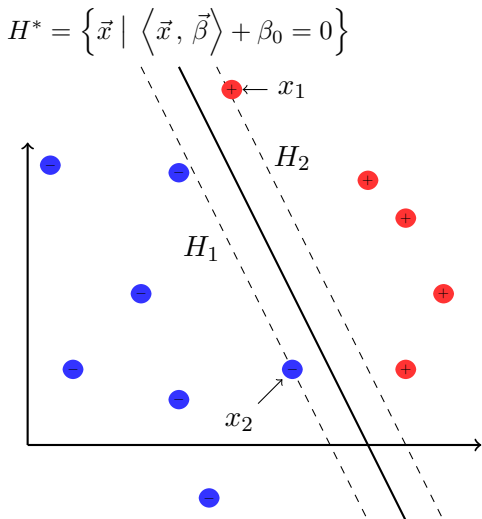
### 5.1: Optimale Hyperebene

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



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:

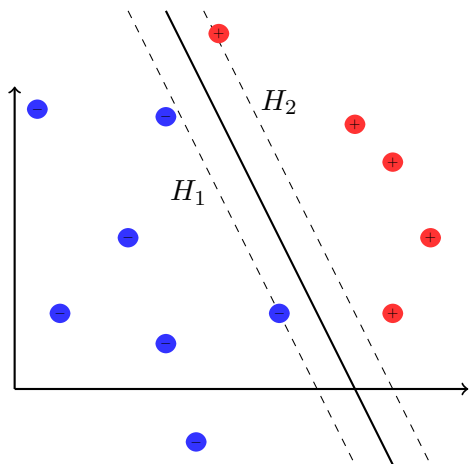
$$|\langle \vec{\beta}, \vec{x}_i \rangle + \beta_0| = 1$$

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

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

## Abstand der Hyperebenen zum Ursprung

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



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

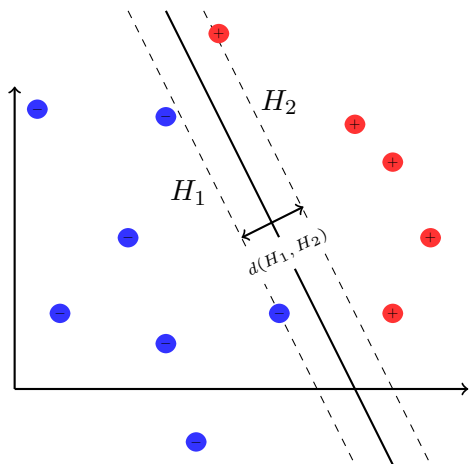
$$d(\vec{0}, H^*) = \frac{\beta_0}{\|\vec{\beta}\|}$$

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

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



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

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

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

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

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

- 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

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

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

Die Nebenbedingungen lassen sich zusammenfassen zu

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

# Optimierung mit Nebenbedingungen

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

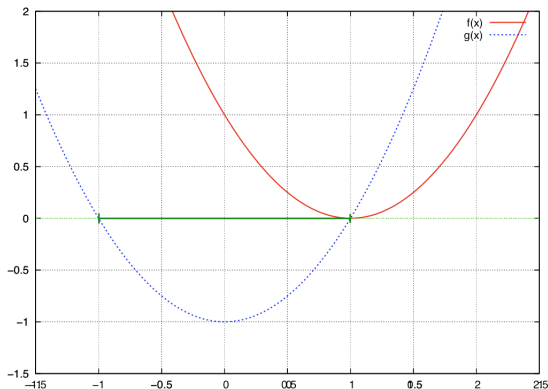
$$f(x) = (x - 1)^2$$

unter der einzigen Nebenbedingung

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

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

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



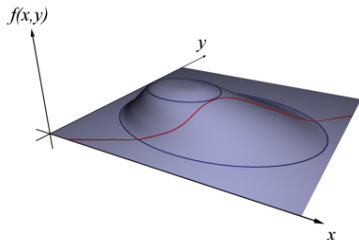
## Beispiel Lagrange Multiplikatoren zur Optimierung

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

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

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  $g_i(\vec{\beta}) \geq 0, i = 1, \dots, m$  dann ist die Lagrange-Funktion:

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

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



## SVM Optimierungsfunktion als Lagrange

Die Nebenbedingungen  $g_i$  sind gegeben durch

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

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

### Primales Problem

Die Funktion

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

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  $L_P$ :

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

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

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



## 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

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

## Umformung II

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

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

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

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

unter den Bedingungen

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



# 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

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

$\vec{\alpha}^*$  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

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

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:

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

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.