5.6 Support Vector Maschines (SVM)

übernommen von

Stefan Rüping, Katharina Morik, Universität Dortmund

Vorlesung Maschinelles Lernen und Data Mining, WS 2002/03

und

Katharina Morik, Claus Weihs, Universität Dortmund

Wissensentdeckung in Datenbanken, SS 2006

Funktionslernen

Gegeben:

Beispiele X in LE

- die anhand einer Wahrscheinlichkeitsverteilung P auf X erzeugt wurden und
- mit einem Funktionswert Y = t(X) versehen sind (alternativ: Eine Wahrscheinlichkeitsverteilung P(Y|X) der möglichen Funktionswerte - verrauschte Daten).

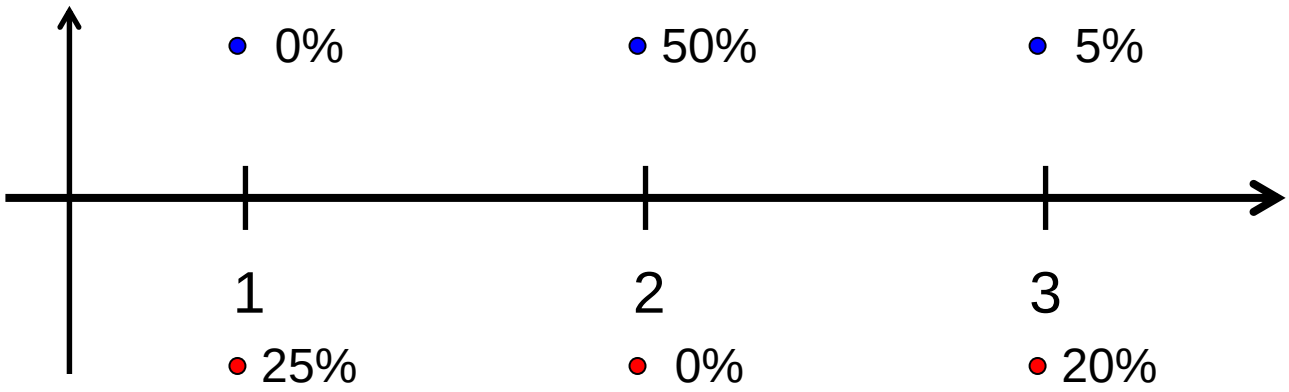
H die Menge von Funktionen in LH.

Ziel: Eine Hypothese h(X) $\in$ H, die das erwartete Fehlerrisiko R(h) minimiert.

Risiko:

$$R(h) = \sum_x Q(x,h)P(x)$$

Beispiel: Funktionenlernen



$H = \{ f_a \mid f_a(x) = 1, \text{für } x \geq a, f_a(x) = -1 \text{ sonst}, a \in \Re \}$

$R(f_0) = 0{,}25 + 0 + 0{,}20 = 0{,}45$

$R(f_{1,5}) = 0 + 0 + 0{,}20 = 0{,}20$

$R(f_{3,5}) = 0 + 0{,}5 + 0{,}05 = 0{,}55$

Reale Beispiele

Klassifikation: Q(x,h) = 0, falls t(x) = h(x), 1 sonst

- Textklassifikation (x = Worthäufigkeiten)
- Handschriftenerkennung (x = Pixel in Bild)
- Vibrationsanalyse in Triebwerken (x = Frequenzen)
- Intensivmedizinische Alarmfunktion (x = Vitalzeichen)

Regression: $Q(x,h) = (t(x)-h(x)))^2$

- Zeitreihenprognose (x = Zeitreihe, t(x) = nächster Wert)

Erinnerung: Minimierung des beobachteten Fehlers

Funktionslernaufgabe nicht direkt lösbar. Problem:

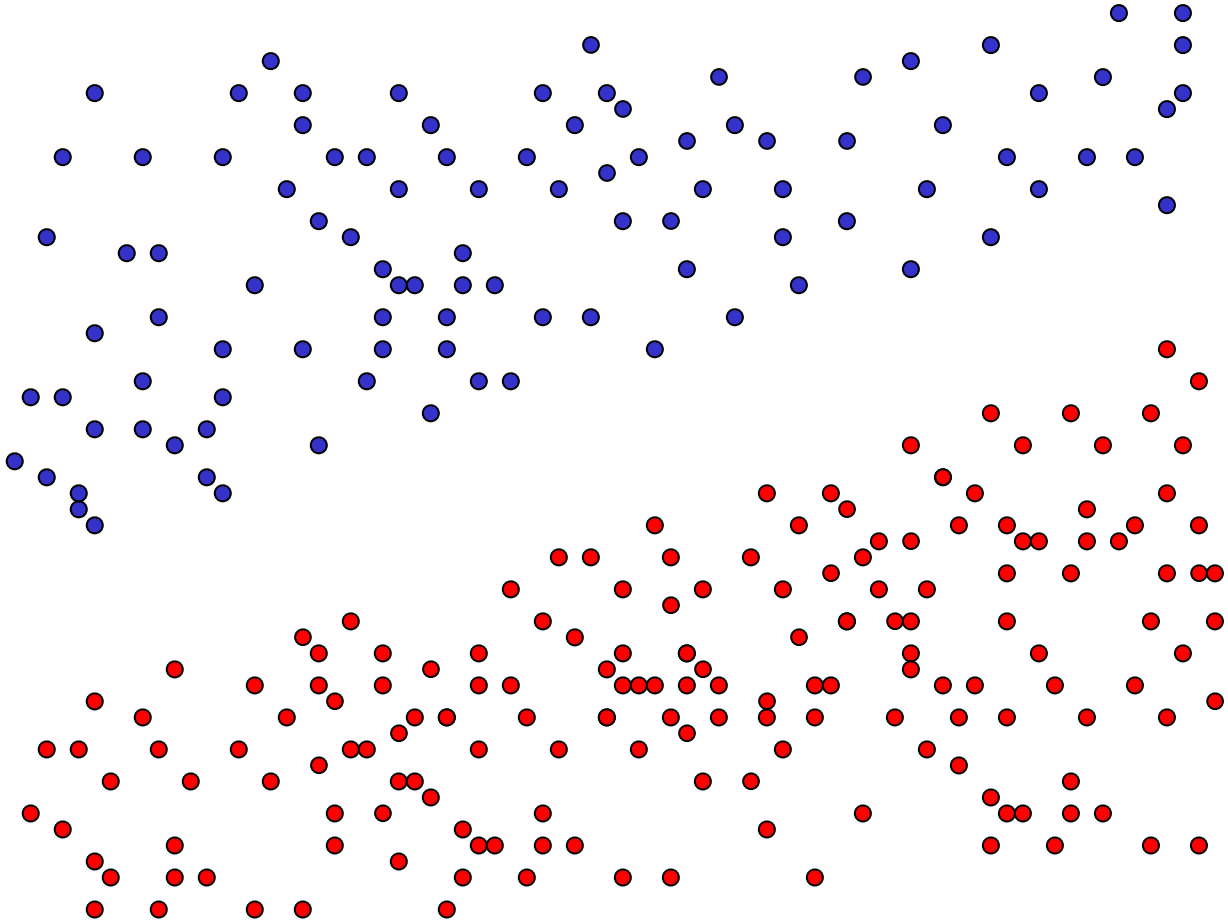
- Die tatsächliche Funktion t(X) ist unbekannt.
- Die zugrunde liegende Wahrscheinlichkeit ist unbekannt.

Ansatz:

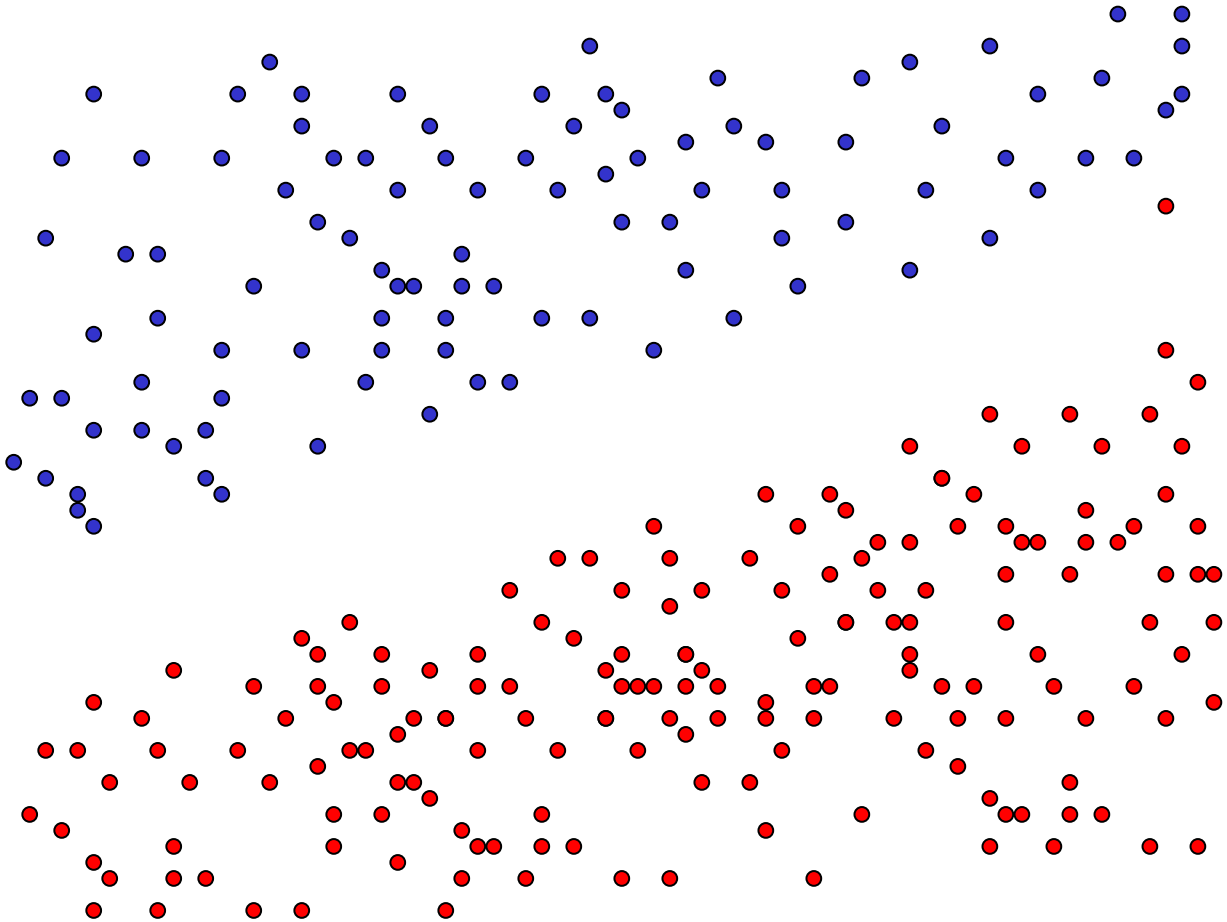
- eine hinreichend große Lernmenge nehmen und für diese den Fehler minimieren.

$\Rightarrow$ Empirical Risk Minimization

Beispiel



Beispiel II

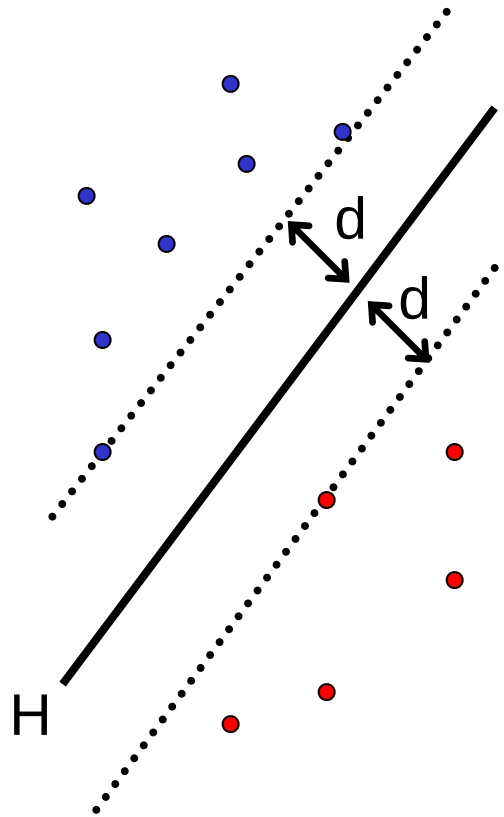


Probleme der ERM

- Aufgabe ist nicht eindeutig beschrieben: Mehrere Funktionen mit minimalem Fehler existieren. Welche wählen?
- Overfitting: Verrauschte Daten und zu wenig Beispiele führen zu falschen Ergebnissen.

Die optimale Hyperebene

- Beispiele heißen linear trennbar, wenn es eine Hyperebene H gibt, die die positiven und negativen Beispiele voneinander trennt.
- H heißt optimale Hyperebene, wenn ihr Abstand d zum nächsten positiven und zum nächsten negativen Beispiel maximal ist.
- Satz: Es existiert eine eindeutig bestimmte optimale Hyperebene.

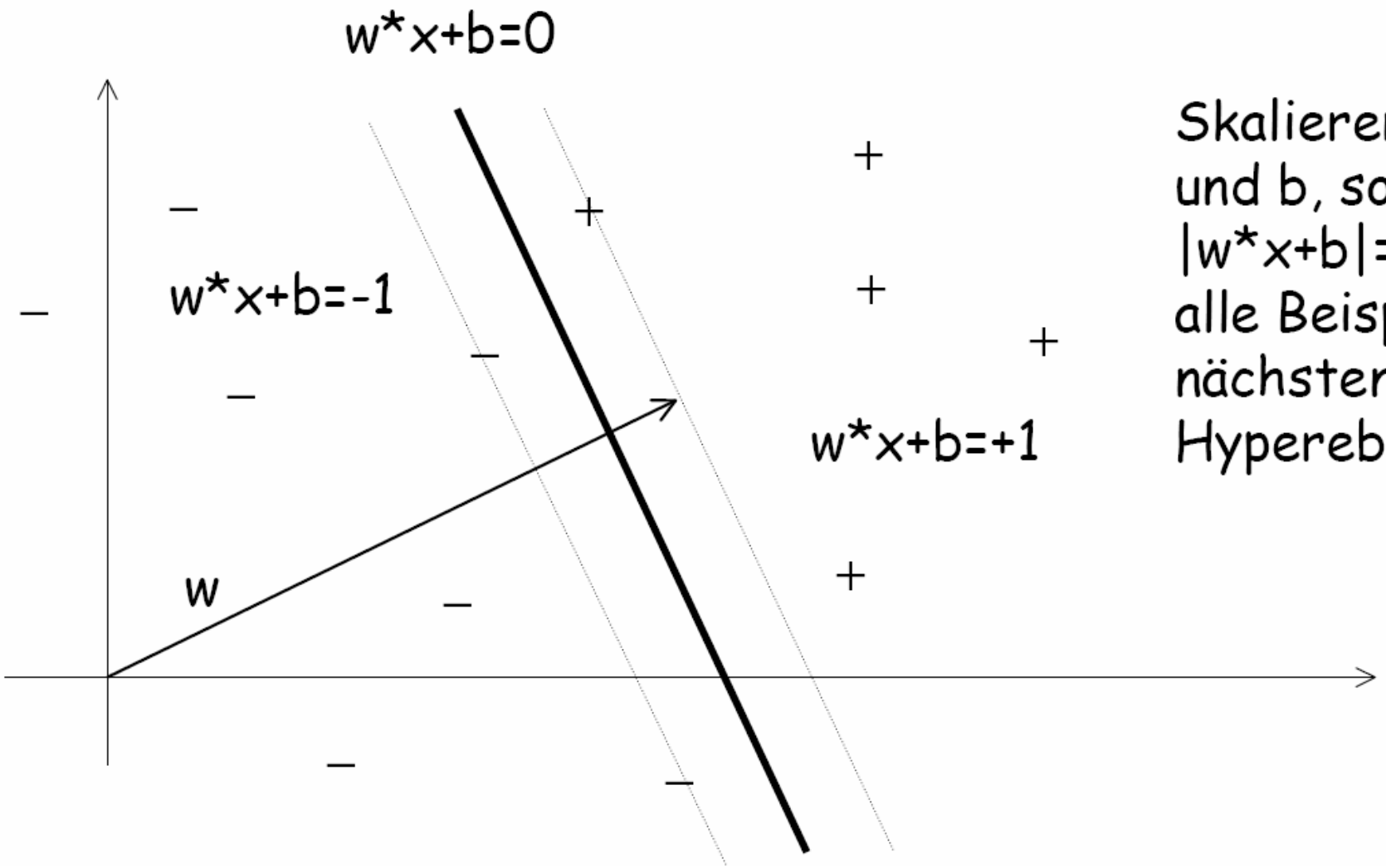


Grundbegriffe II

- Der Normalenvektor steht senkrecht auf allen Vektoren der Hyperebene. Es gilt:

$$w * x + b \begin{cases} > 0 \ falls \ x \ im \ positiven \ Raum \\ = 0 \ falls \ x \ auf \ H \\ < 0 \ falls \ x \ im \ negativen \ Raum \end{cases}$$

Bild



Skalieren von w und b, so dass |w*x+b|=1 für alle Beispiele am nächsten zur Hyperebene.

Separierende Hyperebene

- Beispiele in Form von Vektoren x aus $\Re^p$ und Klassifikation y=+1 (positive Beispiele) oder y=-1 (negative Beispiele)
  $E=\{ [x_1,y_1], [x_2,y_2], \ldots, [x_m,y_m]\}$
- Separierende Hyperebene H:
  positive Beispiele im positiven Halbraum,
  negative Beispiele im negativen Halbraum,
  x*w+b=0 für Punkte auf der Hyperebene.
- Der Abstand von H zum Ursprung ist b / ||w||
- Die Separierbarkeit erfüllen viele Hyperebenen.

Margin für separierbare Beispiele

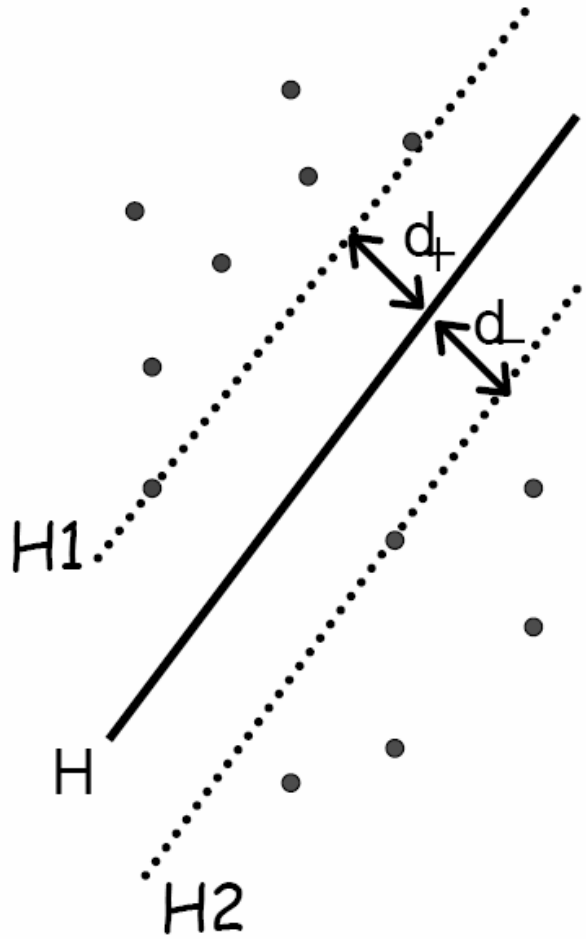
- Abstand d_+ von H zum nächsten positiven Beispiel
- Abstand d_- von H zum nächsten negativen Beispiel
- Margin: $d_+ + d_-$
- H1 $x_i * w + b \geq +1 \; bei \; y_i = +1$
- H2 $x_i * w + b \leq -1 \; bei \; y_i = -1$

  zusammengefasst: $\forall x_i : y_i \left(w * x_i + b \right) - 1 > 0$
- Der Abstand von H1 zum Ursprung ist |1-b | / ||w||
- Der Abstand von H2 zum Ursprung ist |-1-b | / ||w||
- $d_+ = d_- = 1 / ||w||$ und margin = 2 / ||w||

Margin

- H1 und H2 sind parallel, haben denselben Normalenvektor w.
- Per Konstruktion liegt kein Beispiel zwischen H1 und H2.
- Um 2 / ||w|| zu maximieren, müssen wir ||w|| minimieren.
- Die Nebenbedingungen müssen eingehalten werden:

$$\forall i : y_i \left(x_i * w + b \right) - 1 \geq 0$$



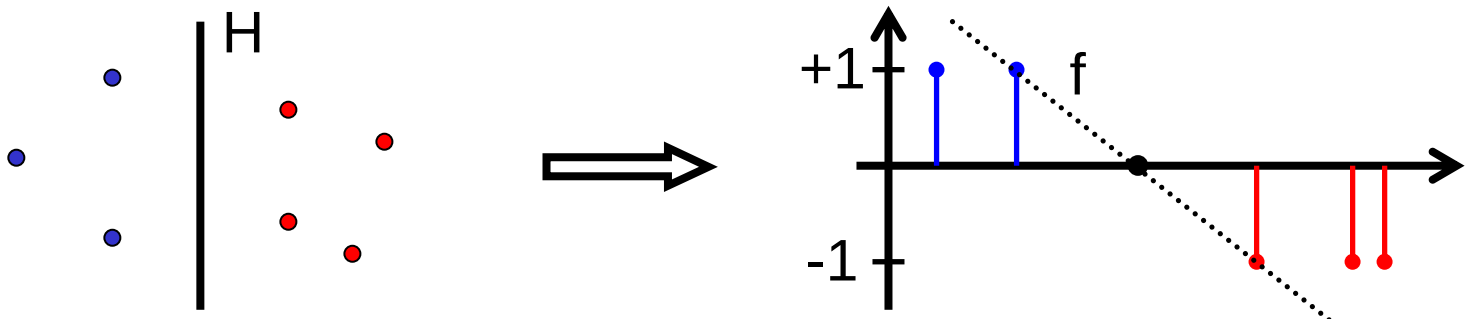
Minimieren der Länge

- Um die geometrische Breite $\frac{1}{\|w\|}$ zu maximieren, müssen wir die Länge von w minimieren.
  Wir können genauso gut w*w minimieren.
- So finden wir nun eine eindeutige Hyperebene aus den vielen möglichen trennenden.
- Für alle Beispiele ist sie richtig: $f(x_i)>0$ gdw. $y_i>0$
- Wir können sie anwenden, um neue unklassifizierte Beobachtungen zu klassifizieren:
  $f(x)=w*x+b$
  das Vorzeichen gibt die Klasse an.

Berechnung der opt. Hyperebene

- Hyperebene
  $H = \{x \mid w*x+b = 0\}$
- H trennt (x_i,y_i), $y_i \in \{\pm 1\}$
- H ist optimale Hyperebene

- Entscheidungsfunktion $f(x) = w*x+b$
- $f(x_i) > 0 \Leftrightarrow y_i > 0$
- $||w||$ minimal und
  $f(x_i) \geq 1$, wenn $y_i = 1$
  $f(x_i) \leq -1$, wenn $y_i = -1$



Optimierungsaufgabe der SVM

- Minimiere $\|w\|^2$
- so dass für alle i gilt:
  $f(x_i) = w*x_i+b \geq 1$ für $y_i = 1$ und
  $f(x_i) = w*x_i+b \leq -1$ für $y_i = -1$
- Äquivalente Nebenbedingung: $y_i*f(x_i) \geq 1$
- Konvexes, quadratisches Optimierungsproblem $\Rightarrow$ eindeutig in $O(n^3)$ lösbar.
- Satz: $\|w\| = 1/d$, d = Abstand der optimalen Hyperebene zu den Beispielen.

Lagrange-Funktion

- Sei das Optimierungsproblem gegeben, f(w) zu minimieren unter der Nebenbedingung $g_i(w) \geq 0$ i=1,...,m, dann ist die Lagrange-Funktion

$$L(w,\alpha) = f(w) - \sum_{i=1}^{m} \alpha_i g_i(w)$$

- Dabei muss gelten $\alpha_i \geq 0$
- Für Ungleichheitsbedingungen werden α-Multiplikatoren eingeführt, Gleichheitsbedingungen werden direkt eingesetzt.
- Es ist leichter, Vektor α zu bestimmen, als direkt nach der Erfüllung der Bedingungen zu suchen.

Optimierungsfunktion als Lagrange

- Minimiere L(w,b,α)!

$$L(w,b,\alpha) = \frac{1}{2}\|w\|^2 - \sum_{i=1}^{m} \alpha_i \left(y_i \left(x_i * w + b\right) - 1\right)$$

- Eine optimale Lösung zeichnet sich durch die folgenden notwendigen Bedingungen an α aus:

$$w = \sum_{i=1}^{m} \alpha_i y_i x_i \qquad \sum_{i=1}^{m} \alpha_i y_i = 0$$

- L soll bezüglich w und b minimiert, bezüglich α maximiert werden.

Karush-Kuhn-Tucker Bedingungen

- Für das primale Optimierungsproblem gelten die KKT Bedingungen gdw. w, b, α die Lösung ist.

$$\frac{\partial}{\partial w_v} L(w,b,\alpha) = w_v - \sum_i \alpha_i y_i x_{i,v} = 0 \qquad v = 1,\ldots,d$$

$$\frac{\partial}{\partial b} L(w,b,\alpha) = -\sum_i \alpha_i y_i = 0$$

$$y_i\left(x_i * w + b\right) - 1 \geq 0$$

$$\forall i : \alpha_i \geq 0$$

$$\forall i : \alpha_i\left(y_i\left(w * x_i + b\right) - 1\right) = 0$$

i Beispiele, v Attribute der Beispiele=Komponenten der Vektoren

Duales Problem

- Die Gleichheitsbedingungen werden in $L(w,b,\alpha)$ eingesetzt.
- Der duale Lagrange-Ausdruck $L(\alpha)$ soll maximiert werden.
- Das Minimum des ursprünglichen Optimierungsproblems tritt genau bei jenen Werten von w,b,α auf wie das Maximum des dualen Problems.

Umformung

$$\frac{1}{2} w * w \quad - \sum_{i=1}^{m} \alpha_i \qquad \left[y_i \left(x_i * w + b \right) \quad - 1 \right]$$

$$= \frac{1}{2} w * w \quad - \sum_{i=1}^{m} \alpha_i \qquad y_i \left(x_i * w + b \right) \quad + \sum_{i=1}^{m} \alpha_i$$

$$= \frac{1}{2} w * w \quad - \sum_{i=1}^{m} \alpha_i y_i x_i * w \quad - \sum_{i=1}^{m} \alpha_i y_i b \qquad + \sum_{i=1}^{m} \alpha_i$$

$$= \frac{1}{2} w * w \quad - \sum_{i=1}^{m} \alpha_i y_i x_i * w \qquad + \sum_{i=1}^{m} \alpha_i$$

Bei gutem α muss gelten $\quad 0 = \sum_{i=1}^{m} \alpha_i y_i$

Umformung II

- Es gilt für optimalen Vektor α $w = \sum_{i=1}^{m} \alpha_i y_i x_i$ wir ersetzen

$$\frac{1}{2} w * w \qquad - \sum_{i=1}^{m} \alpha_i y_i x_i * w \qquad + \sum_{i=1}^{m} \alpha_i$$

$$= \frac{1}{2} \sum_{i=1}^{m} \sum_{j=1}^{m} \alpha_i \alpha_j y_i y_j x_i * x_j \qquad - \sum_{i=1}^{m} \sum_{j=1}^{m} \alpha_i \alpha_j y_i y_j x_i * x_j \qquad + \sum_{i=1}^{m} \alpha_i$$

$$= + \sum_{i=1}^{m} \alpha_i \qquad - \frac{1}{2} \sum_{i=1}^{m} \sum_{j=1}^{m} \alpha_i \alpha_j y_i y_j x_i * x_j$$

- Mit den Nebenbedingungen:

$$0 = \sum_{i=1}^{m} \alpha_i y_i \qquad \text{und } \alpha_i \geq 0$$

SVM Optimierungsproblem

- Maximiere
  unter $0 \leq \alpha_i$ für alle i und $\sum \alpha_i y_i = 0$

$$L(\alpha) = \sum_{i=1}^{n} \alpha_i - \frac{1}{2} \sum_{i=1}^{n} \sum_{j=1}^{n} y_i y_j \alpha_i \alpha_j \left(x_i * x_j \right)$$

- Für jedes Beispiel gibt es ein α in der Lösung.
  - $0 = \alpha_i$ heißt, dass das Beispiel x_i im passenden Halbraum liegt.
  - $0 < \alpha_i$ heißt, dass das Beispiel x_i auf H1 oder H2 liegt (Stützvektor).
- Es gilt $w = \sum \alpha_i y_i x_i$,
  - Also $f(x) = \sum \alpha_i y_i (x_i * x) + b$
  - Also ist der beste Normalenvektor w eine Linearkombination von Stützvektoren ($\alpha_i \neq 0$).

Optimierungsalgorithmus

s = Gradient von W(α) // $s_i = \sum \alpha_j (x_j * x_i)$

while(nicht konvergiert(s)) // auf ε genau

WS = working_set(s) // suche k „gute“ Variablen

α‘ = optimiere(WS) // k neue α-Werte

s = update(s, α‘) // s = Gradient von W(α‘)

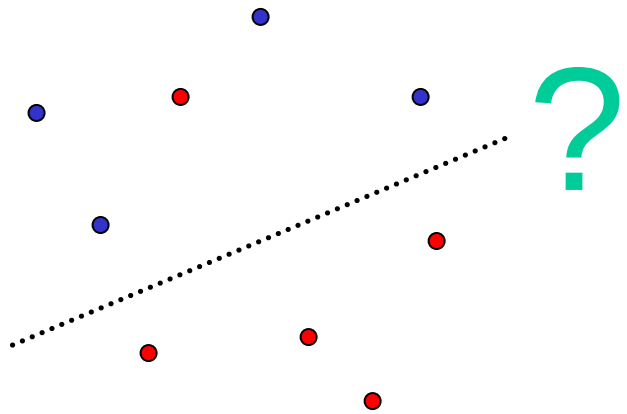
- Gradientensuchverfahren
- Trick: Stützvektoren allein definieren Lösung
- Weitere Tricks: Shrinking, Caching von $x_i * x_j$

Was wissen wir jetzt?

- Maximieren des Margins einer Hyperebene ergibt eine eindeutige Festlegung der optimalen trennenden Hyperebene.
- Dazu minimieren wir die Länge des Normalenvektors w.
  - 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.

Nicht linear trennbare Daten

- In der Praxis sind linear trennbare Daten selten.
- 1. Ansatz: Entferne eine minimale Menge von Datenpunkten, so dass die Daten linear trennbar werden (minimale Fehlklassifikation).
- Problem: Algorithmus wird exponentiell.



Weich trennende Hyperebene

Praktikable Lösung, wenn Daten „fast“ linear separabel sind:

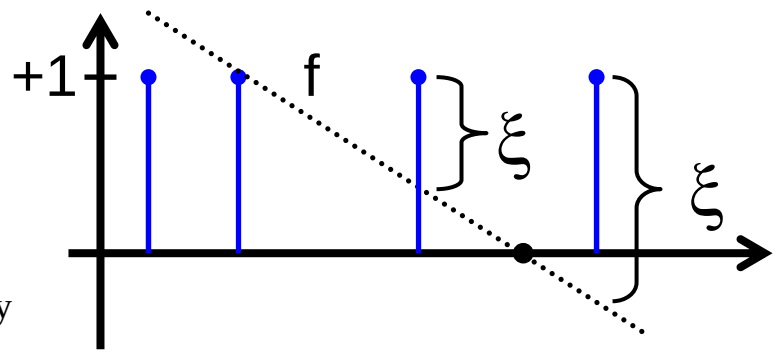
- Wähle $C \in \Re_{>0}$ und minimiere $\|w\|^2 + C\sum_{i=1}^{n} \xi_i$

- so dass für alle i gilt:

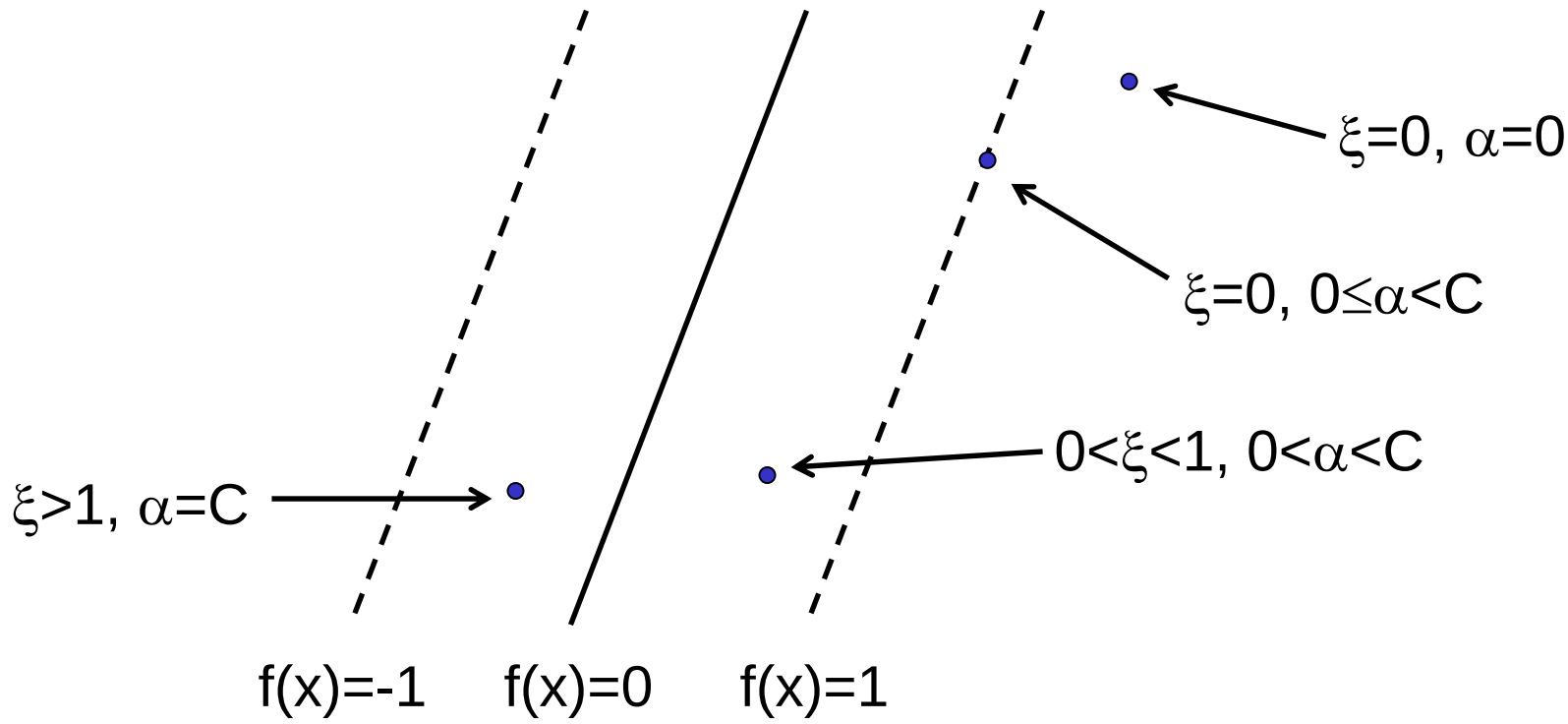
  $f(x_i) = w*x_i+b \geq 1-\xi_i$ für $y_i = 1$ und

  $f(x_i) = w*x_i+b \leq -1+\xi_i$ für $y_i = -1$

- Äquivalent: $y_i*f(x_i) \geq 1- \xi_i$



Bedeutung von ξ und α



Beispiele x_i mit $\alpha_i>0$ heißen Stützvektoren $\Rightarrow$ SVM

Kernel-Methoden

- Problem: Daten sind oft nicht linear trennbar.

- Lösungsidee:
  1. Nicht-lineare Einbettung in einen höher-dimensionalen Raum
  2. Dort Suchen der optimal trennenden Hyperebene
  3. Rücktransformation

Kernel-Methoden

Beispiel:

ϕ: $\mathbf{R}^3 \rightarrow \mathbf{R}^6$ mit $\phi_1(\boldsymbol{x})=x_1$, $\phi_2(\boldsymbol{x})=x_2$, $\phi_3(\boldsymbol{x})=x_3$,

$\phi_4(\boldsymbol{x})=(x_1)^2$, $\phi_5(\boldsymbol{x})= x_1 x_2$, $\phi_6(\boldsymbol{x})= x_1 x_3$,

für $\boldsymbol{x}=(x_1, x_2, x_3) \in \mathbf{R}^3$.

Eine trennende Hyperebene im $\mathbf{R}^6$ hat die Form $d(\boldsymbol{z}) = \boldsymbol{w}\boldsymbol{z}+b$.

Wir lösen das Problem für $\boldsymbol{w}$ und b und übersetzen die Lösung zurück:

$d(\boldsymbol{z}) = w_1z_1+w_2z_2+w_3z_3+w_4z_4+w_5z_5+w_6z_6+b$

$= w_1x_1+w_2x_2+w_3x_3+w_4(x_1)^2+w_5x_1x_2+w_{6x1}x_3+b$

Kernel-Methoden

Probleme:

- Welche Einbettung verwenden?
- Das Skalarprodukt im hochdimensionalen Raum ist teuer.

Lösung: Kernel-Funktion:

- Die Trainingsdaten tauchen nur in der Form $\phi(\boldsymbol{x}_i)\cdot\phi(\boldsymbol{x}_j)$ auf.
- Eine Kernelfunktion $K(\boldsymbol{x}_i,\boldsymbol{x}_j)$ ist eine Funktion mit $K(\boldsymbol{x}_i,\boldsymbol{x}_j) = \phi(\boldsymbol{x}_i)\cdot\phi(\boldsymbol{x}_j)$.
- Sie kann im niedrigdimensionalen Raum berechnet werden!

Typische Kernelfunktionen:

- $K(\boldsymbol{x}_i,\boldsymbol{x}_j) = (\boldsymbol{x}_i\cdot\boldsymbol{x}_j + 1)^h$, für $h \in \mathrm{N}$
- $K(\boldsymbol{x}_i,\boldsymbol{x}_j) = e^{-\|x_i - x_j\|^2/2\sigma^2}$
- $K(\boldsymbol{x}_i,\boldsymbol{x}_j) = \tanh(\kappa\boldsymbol{x}_i\cdot\boldsymbol{x}_j - \delta)$