Vorlesung Maschinelles Lernen

Stützvektormethode

Katharina Morik

LS 8 Informatik
Technische Universität Dortmund

12.11.2013

Gliederung

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.

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.

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

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

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

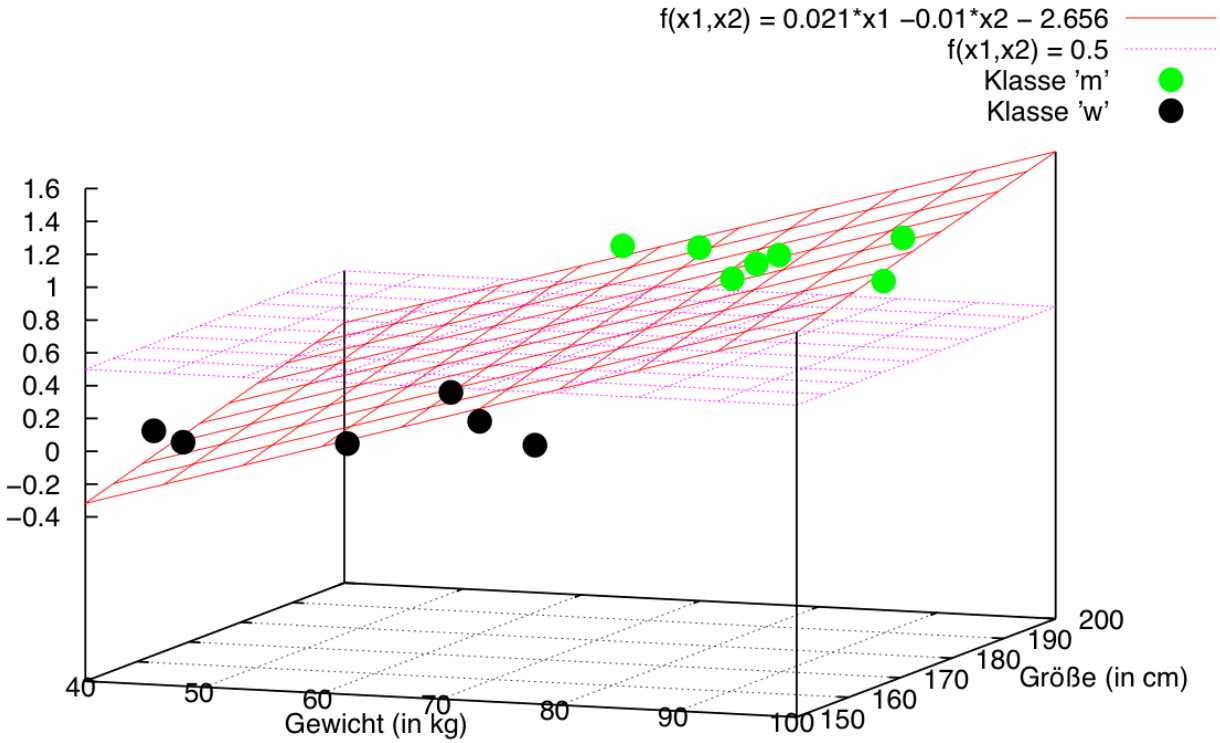
Empirische Risikominimierung: Bisher haben wir lineare Modelle

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

auf die Fehlerminimierung hin optimiert:

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

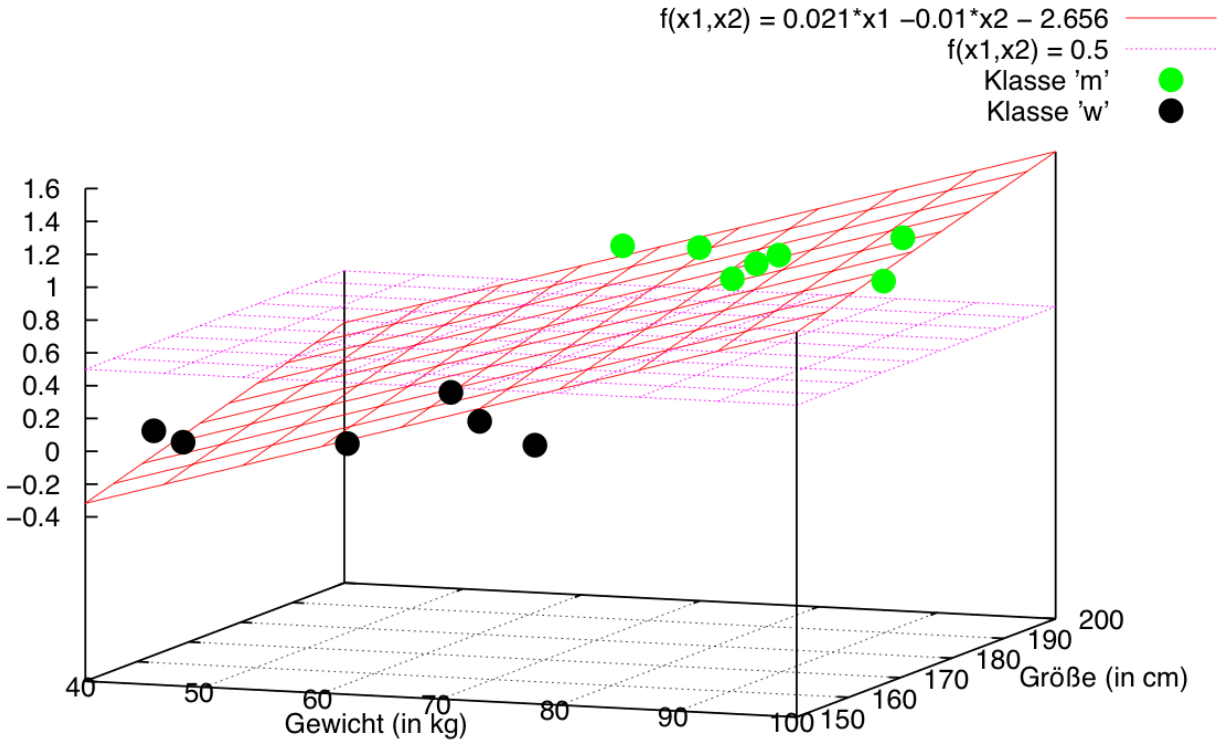
Wo trennen wir die Daten?



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

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

Wo trennen wir die Daten?



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

- 1. Ausweg: Verbessertes Kriterium: maximum margin.
- 2. Ausweg: 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

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

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 $\beta_0 < 0$.

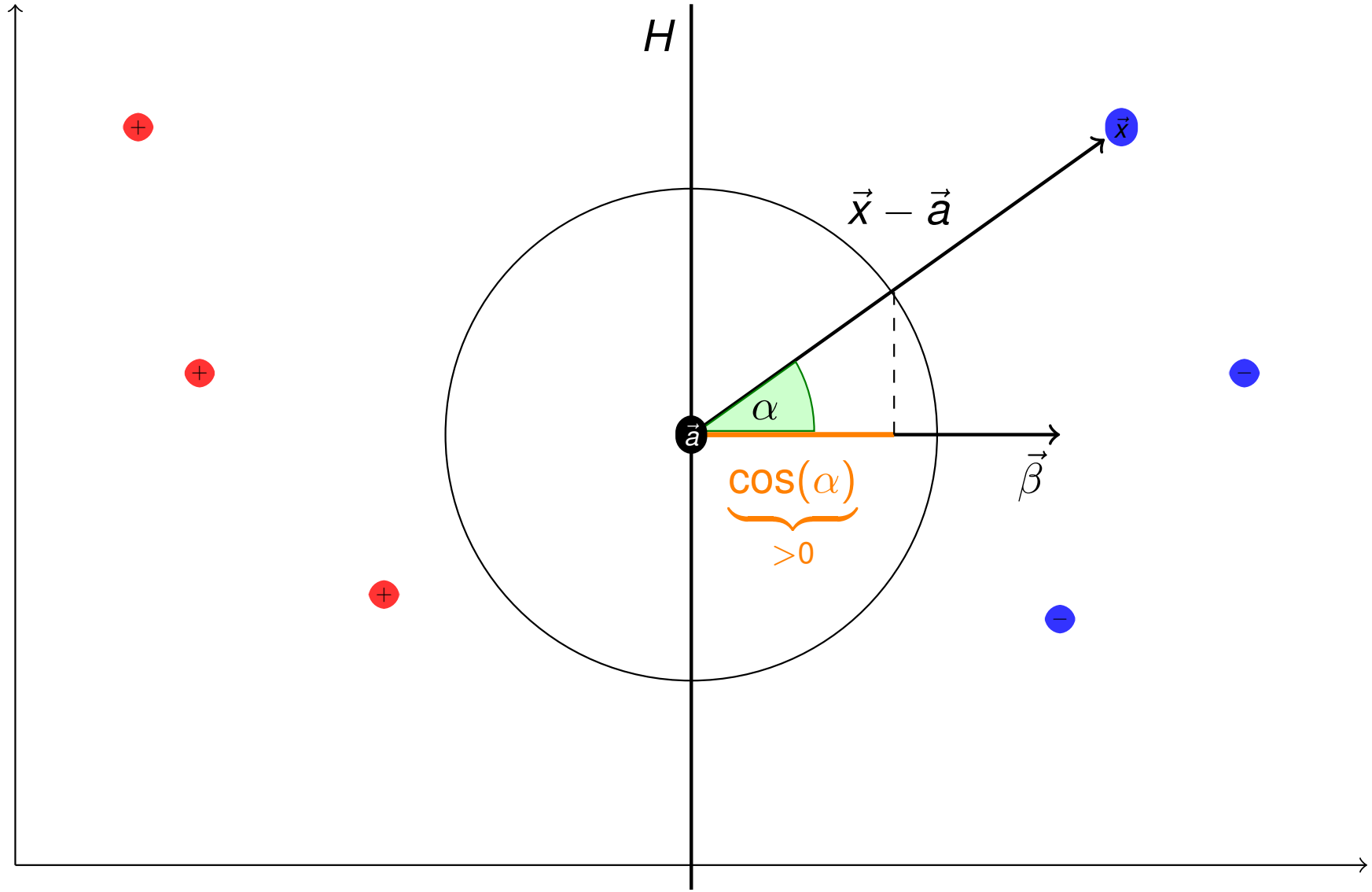
Klassifikation mit Hyperebenen

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

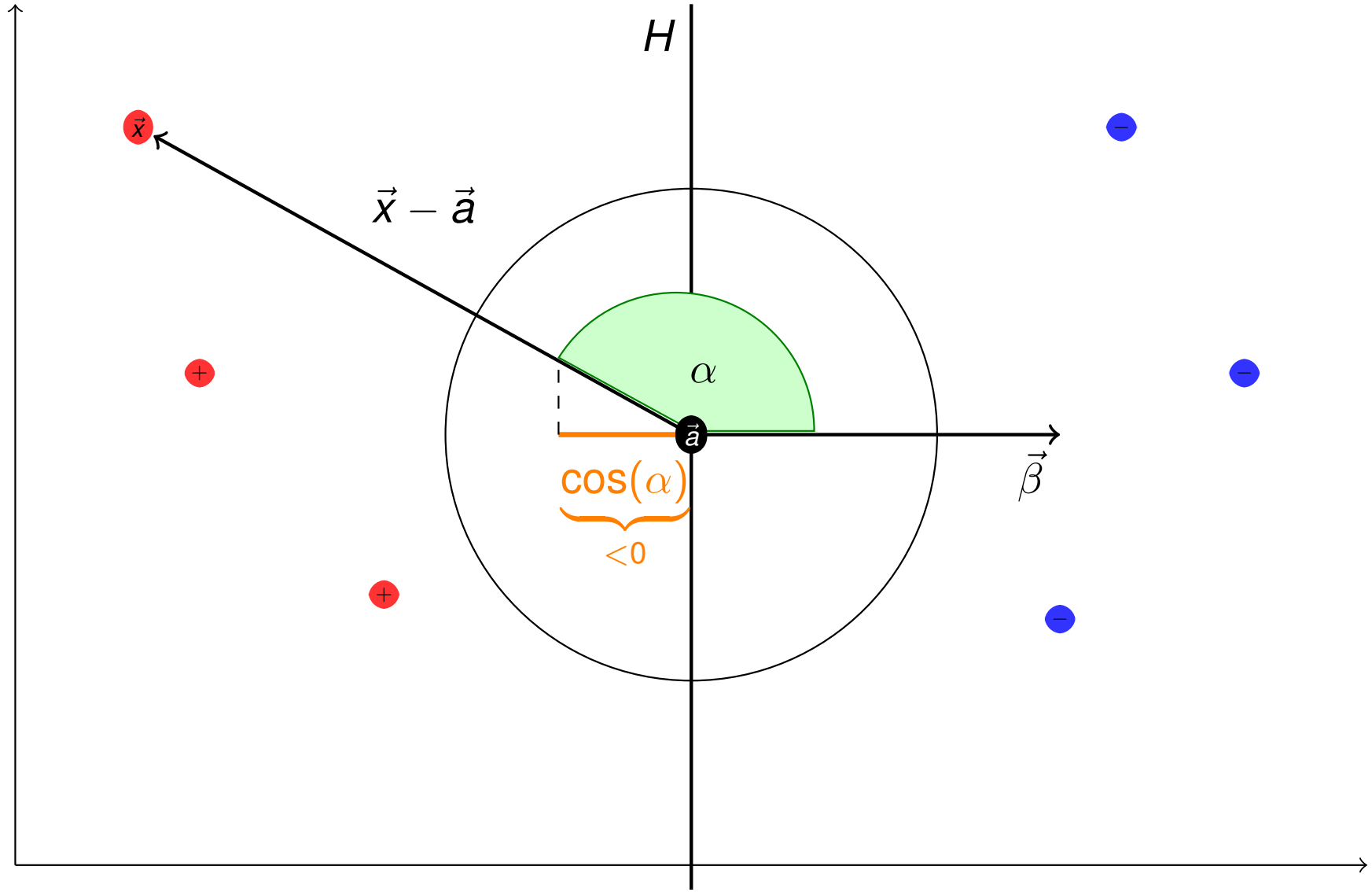
$$
\begin{aligned}
d(\vec{x}, H) &= \left\langle \vec{x}\,, \vec{\beta} \right\rangle - \beta_0 && (1)\\
&= \left\langle \vec{x}\,, \vec{\beta} \right\rangle - \left\langle \vec{a}\,, \vec{\beta} \right\rangle && (2)\\
&= \left\langle \vec{x} - \vec{a}\,, \vec{\beta} \right\rangle && (3)\\
&= \underbrace{\|\vec{x} - \vec{a}\| \cdot \|\vec{\beta}\|}_{>0} \cdot \cos(\measuredangle(\vec{x} - \vec{a}, \vec{\beta})) && (4)
\end{aligned}
$$

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.

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

Auf diese Weise lassen sich die Punkte klassifizieren mit

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

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

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.

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

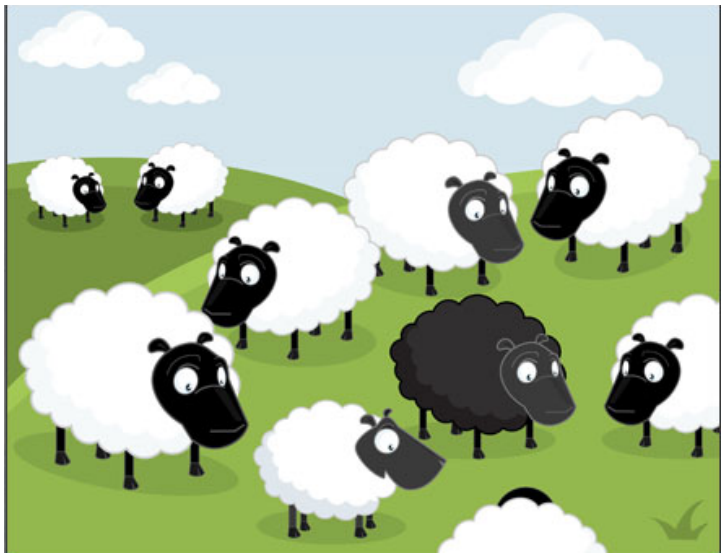
Auf diese Weise lassen sich die Punkte klassifizieren mit

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

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

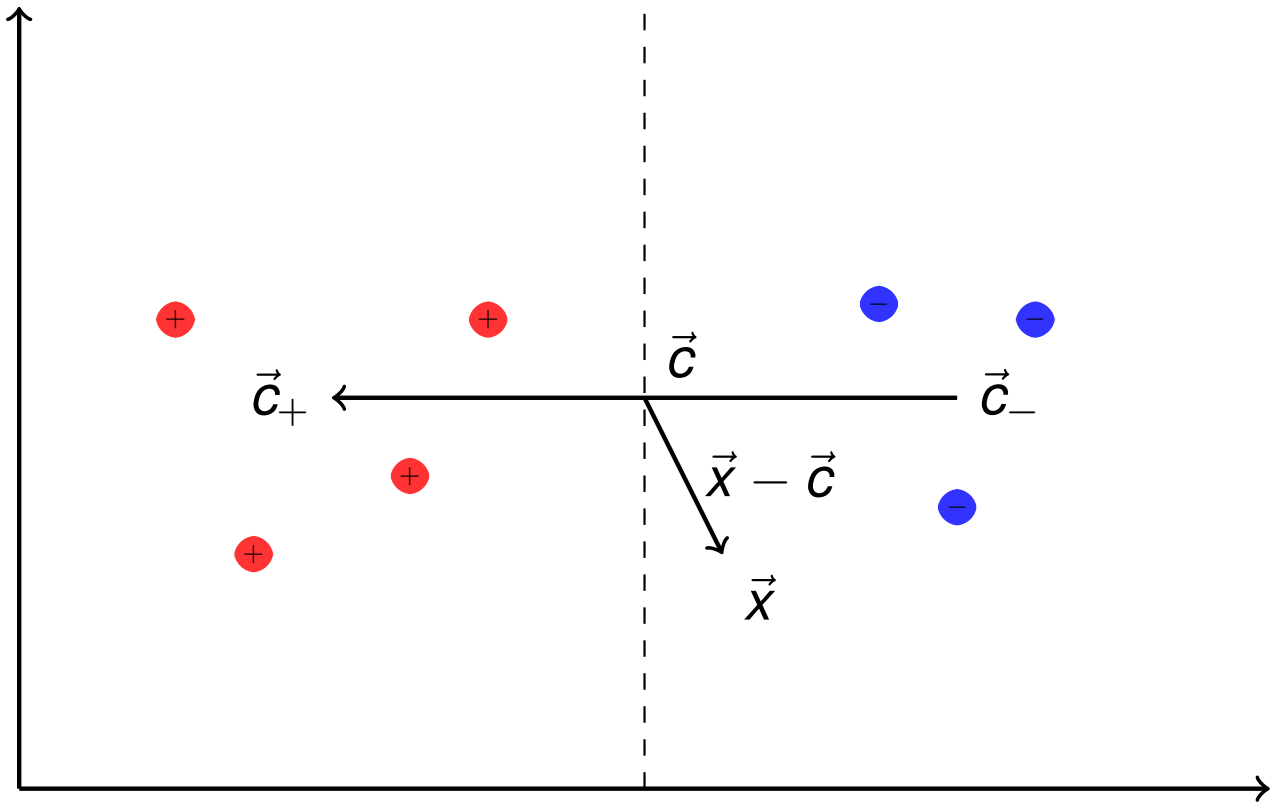
Durch $\vec{\beta}$ und $\vec{a}$ ist die Hyperebene gegeben als

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

Damit erfolgt die Klassifikation durch

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

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.

Fast...

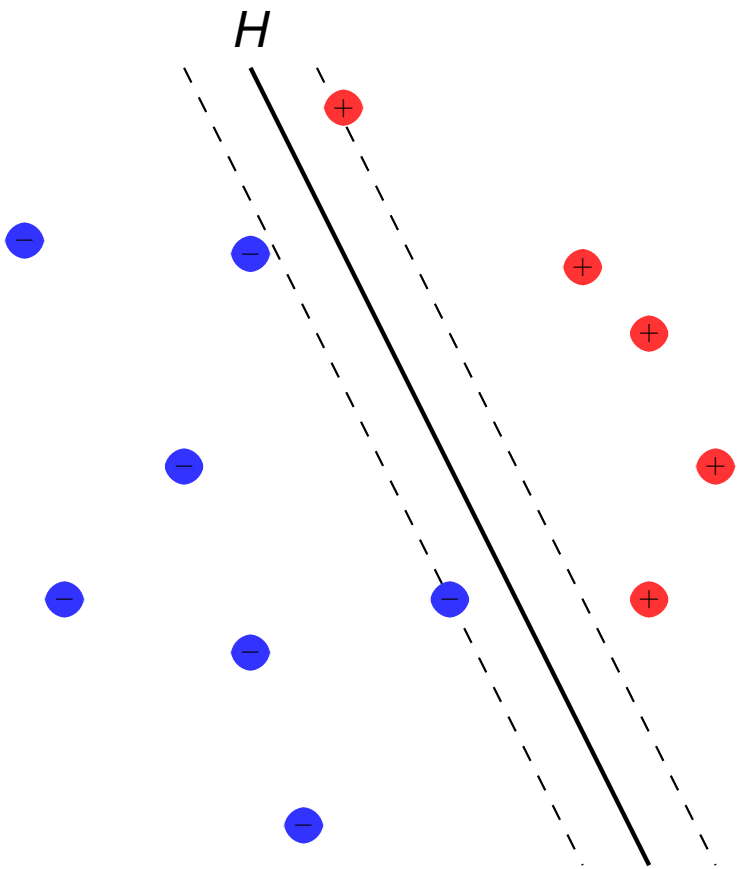
... wäre das schon die Stützvektormethode. Aber:

- 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.

Die optimale Hyperebene

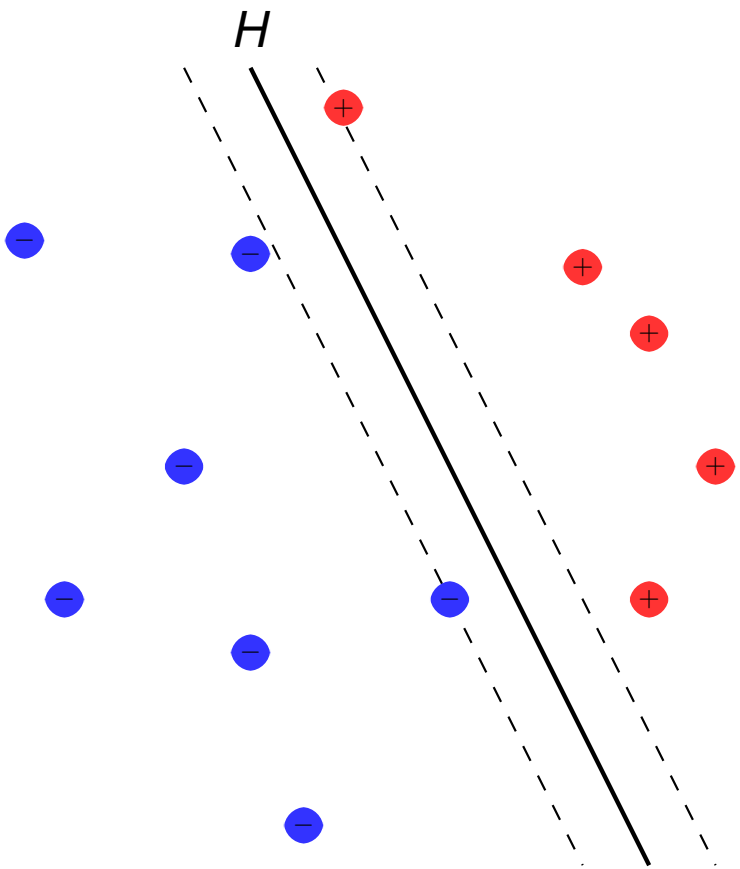


Eine Menge von Beispielen heißt linear trennbar, falls es eine Hyperebene H gibt, die die positiven und negativen Beispiele trennt.

5.1: Optimale Hyperebene

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

Die optimale Hyperebene



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

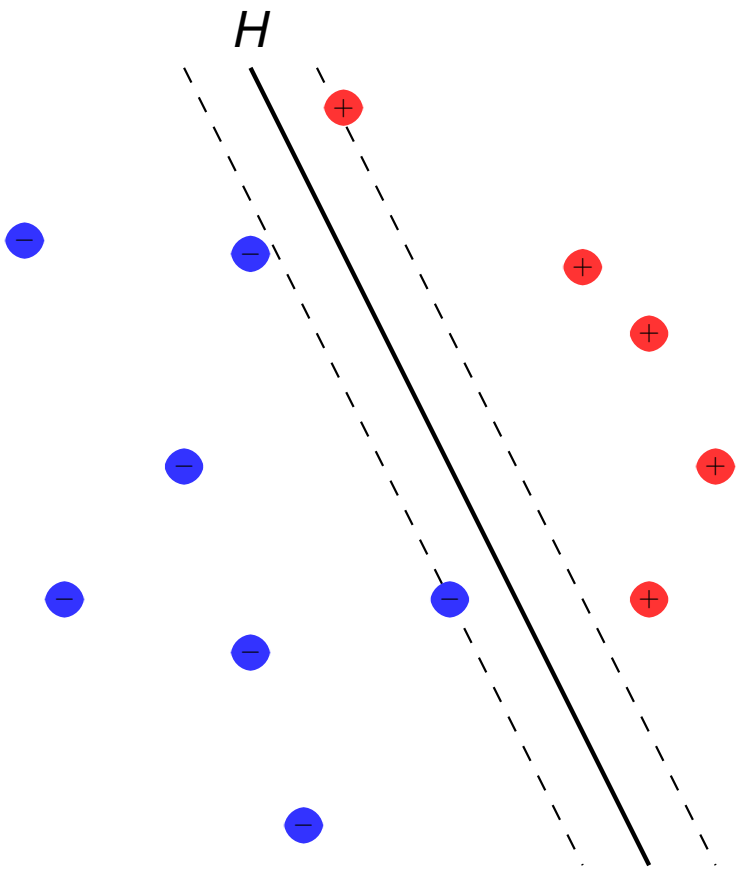
5.1: Optimale Hyperebene

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.

Die optimale Hyperebene



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

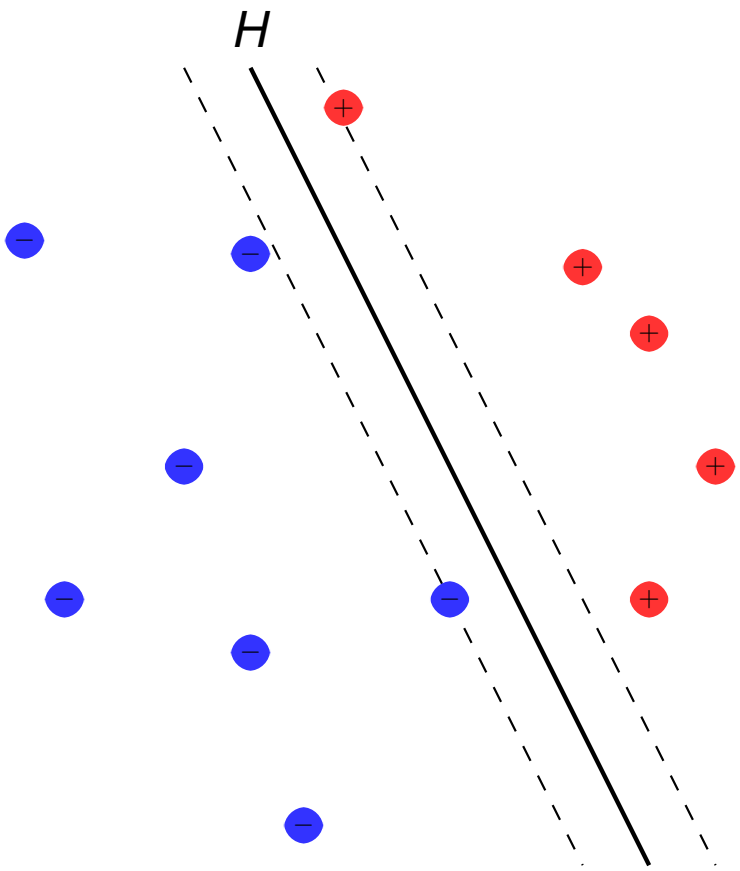
5.1: Optimale Hyperebene

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.

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 β_0, so dass für die nächstliegenden Punkte x_i zu H^* gilt:

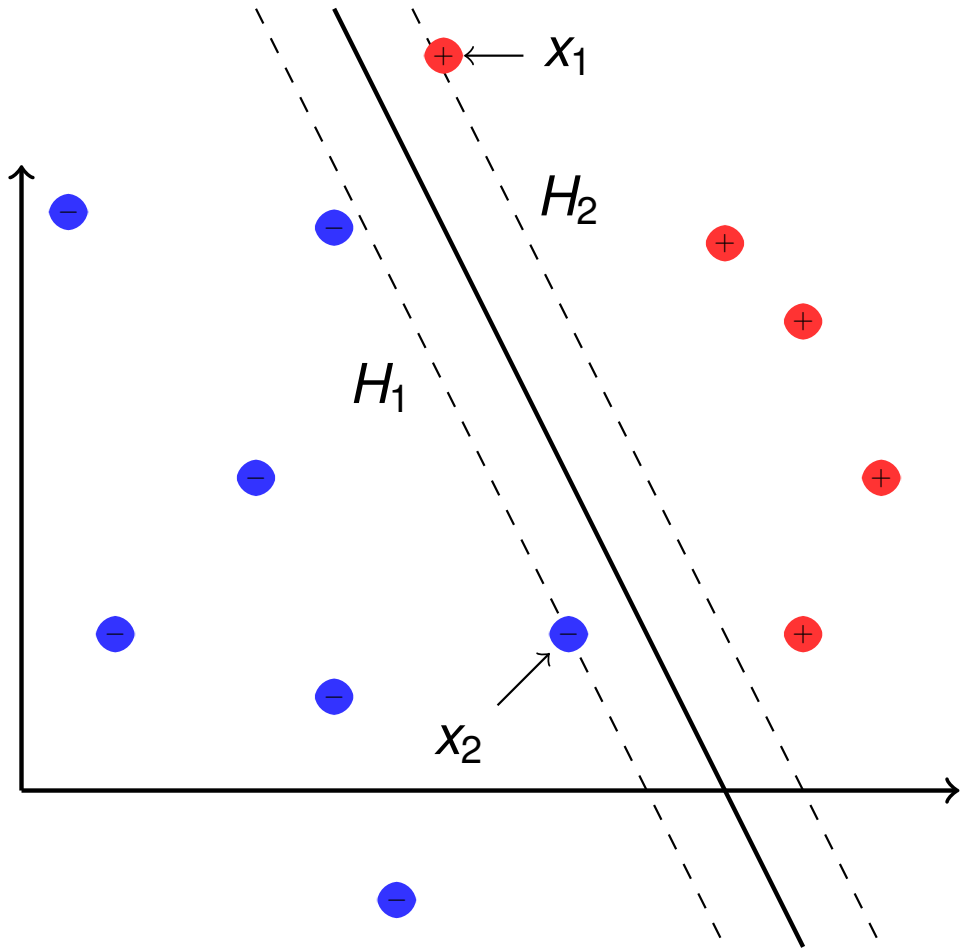
$$\left| \left\langle \vec{\beta}, \vec{x}_i \right\rangle + \beta_0 \right| = 1$$

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

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

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 β_0, so dass für die nächstliegenden Punkte x_i zu H^* gilt:

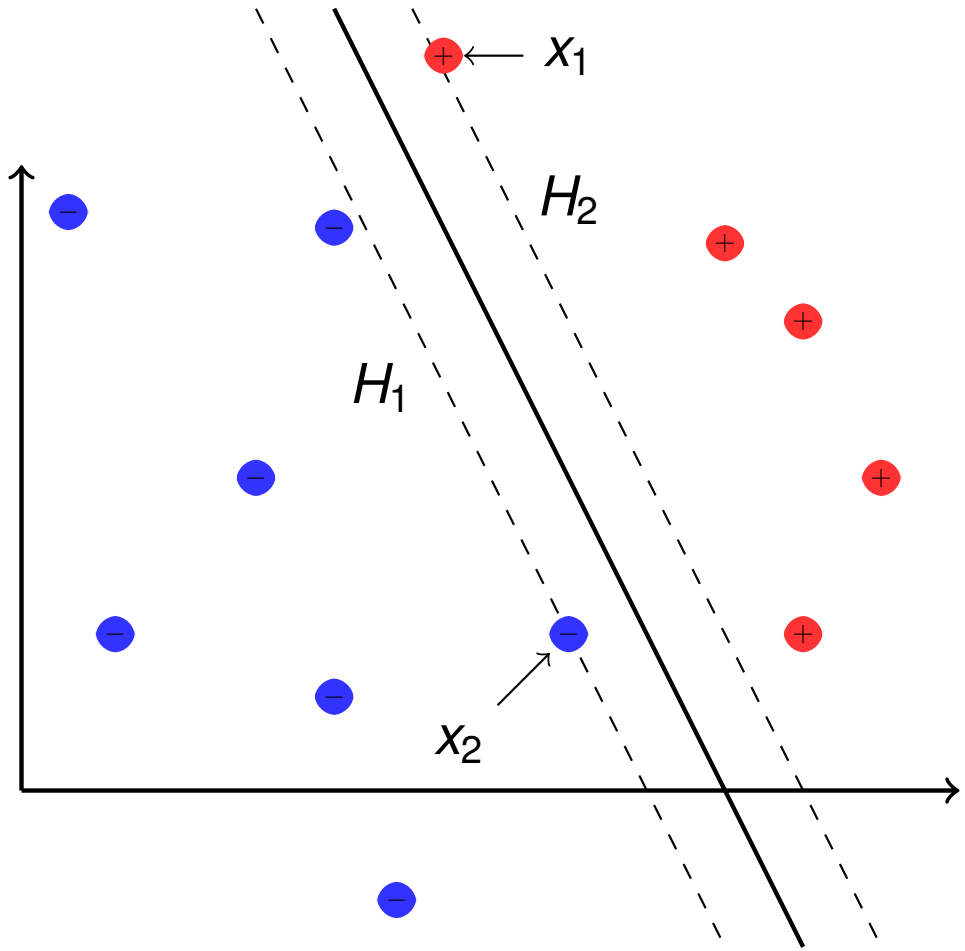
$$\left| \left\langle \vec{\beta}, \vec{x}_i \right\rangle + \beta_0 \right| = 1$$

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

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

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 β_0, so dass für die nächstliegenden Punkte x_i zu H^* gilt:

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

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

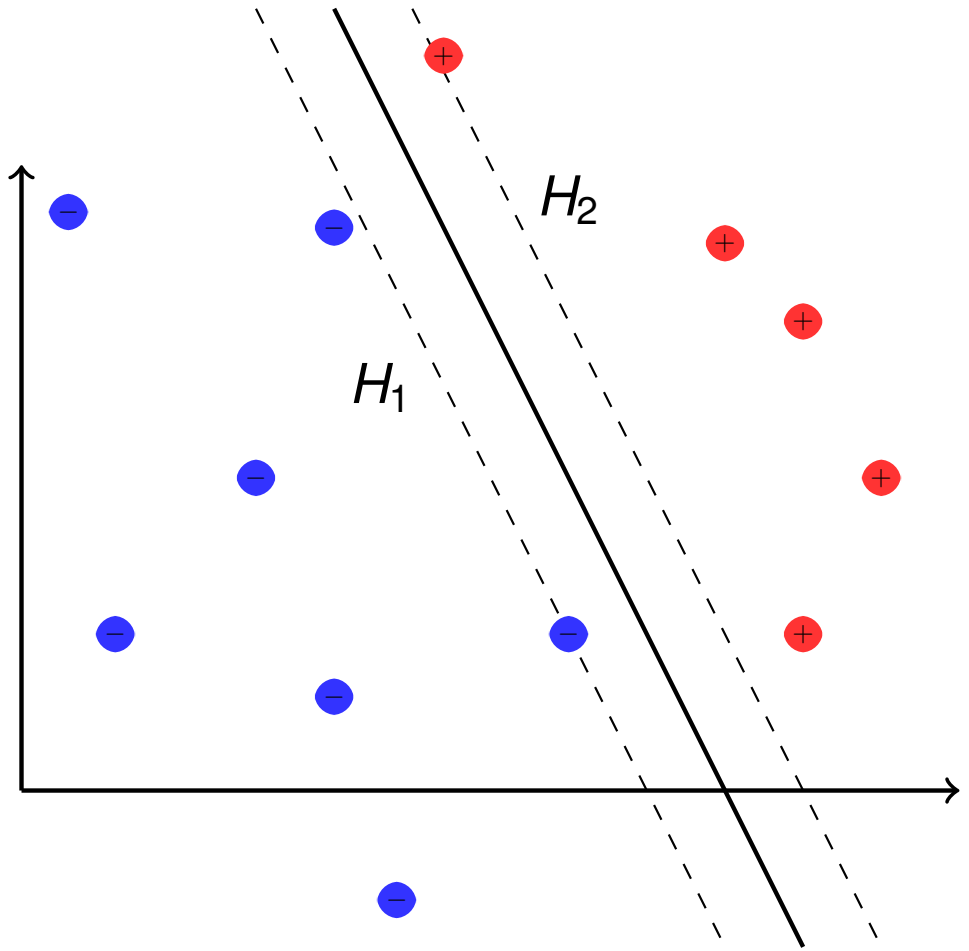
$$d(\vec{0}, H^*) = \frac{\beta_0}{\|\vec{\beta}\|}$$

Der Abstand zwischen den Ebenen H_1 und H_2 ist

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

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

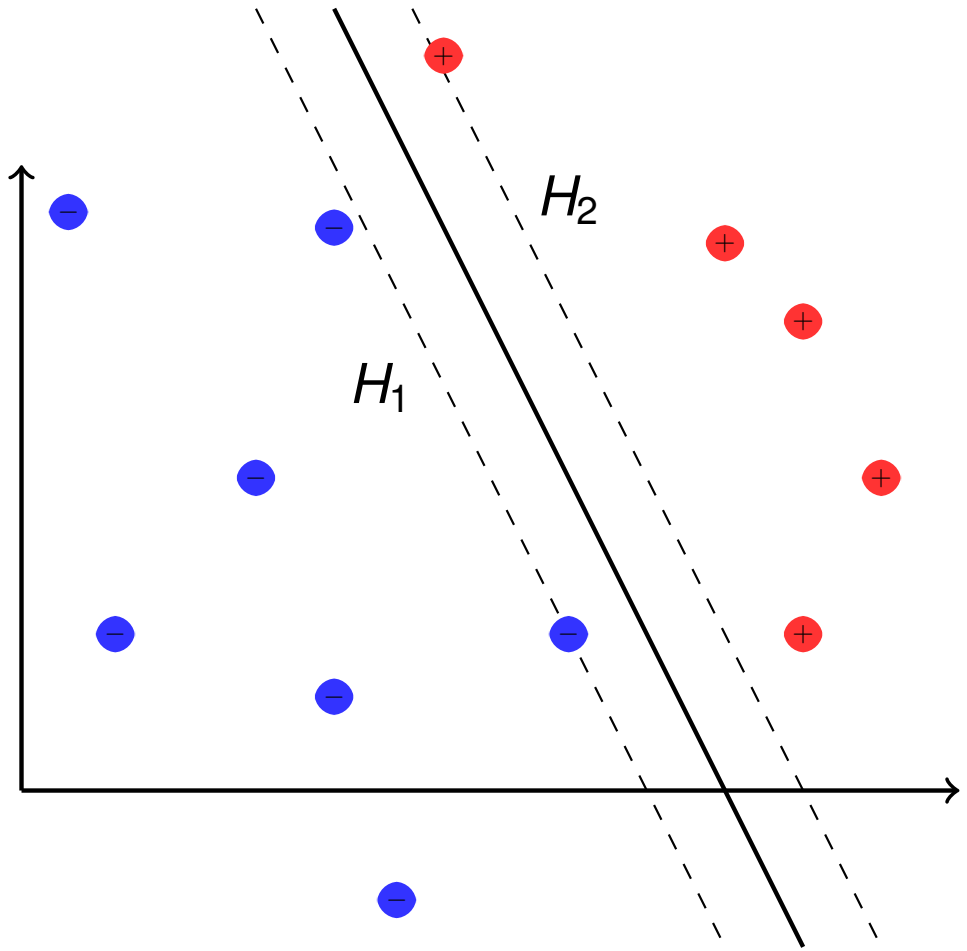
$$d(\vec{0}, H^*) = \frac{\beta_0}{\|\vec{\beta}\|}$$

Der Abstand zwischen den Ebenen H_1 und H_2 ist

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

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.

$$\langle \vec{x}, \vec{\beta} \rangle + \beta_0 \geq +1 \; \forall \vec{x} \in C_+ \quad (5)$$

$$\langle \vec{x}, \vec{\beta} \rangle + \beta_0 \leq -1 \; \forall \vec{x} \in C_- \quad (6)$$

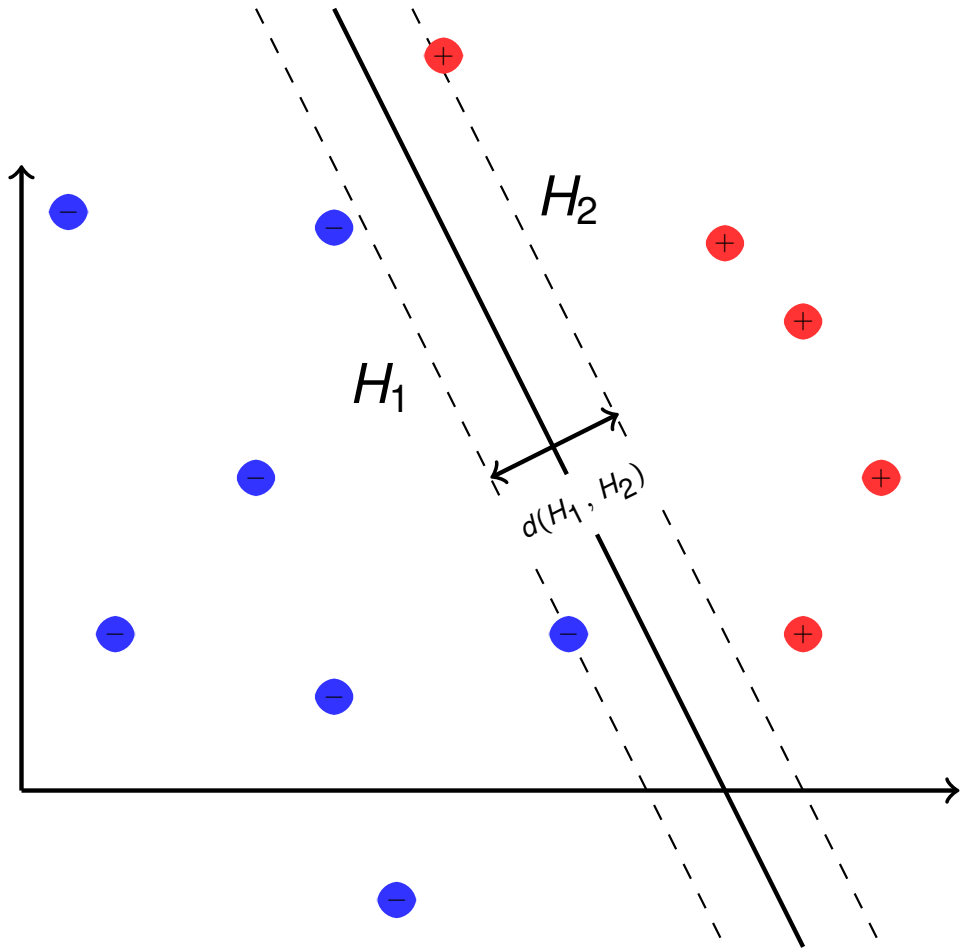
Der Abstand

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

heißt Margin und soll maximiert werden!

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.

$$\langle \vec{x}, \vec{\beta} \rangle + \beta_0 \geq +1 \; \forall \vec{x} \in C_+ \quad (5)$$

$$\langle \vec{x}, \vec{\beta} \rangle + \beta_0 \leq -1 \; \forall \vec{x} \in C_- \quad (6)$$

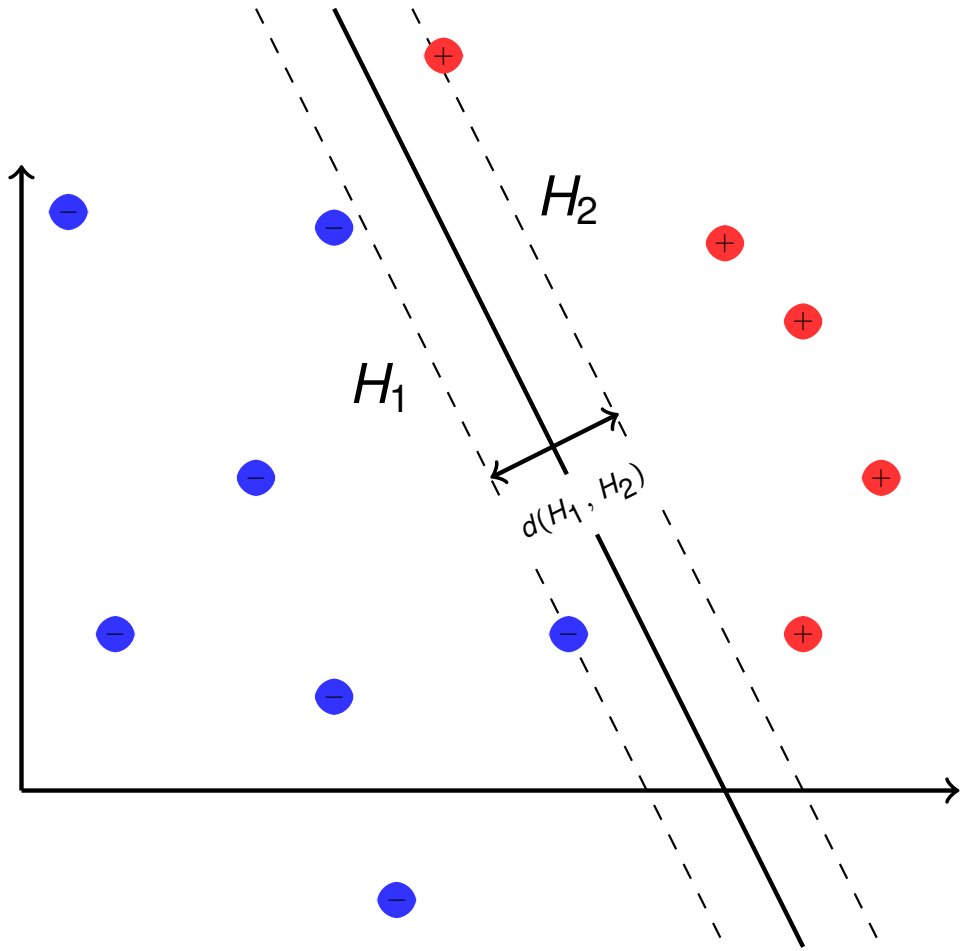
Der Abstand

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

heißt Margin und soll maximiert werden!

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.

$$\langle \vec{x}, \vec{\beta} \rangle + \beta_0 \geq +1 \; \forall \vec{x} \in C_+ \quad (5)$$

$$\langle \vec{x}, \vec{\beta} \rangle + \beta_0 \leq -1 \; \forall \vec{x} \in C_- \quad (6)$$

Der Abstand

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

heißt Margin und soll maximiert werden!

Maximimum 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.

Maximimum 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

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

$$y(\left\langle \vec{x}\,,\,\vec{\beta} \right\rangle + \beta_0) - 1 \geq 0 \quad \forall (\vec{x}, y) \in \mathbf{X} \tag{7}$$

Optimierung mit Nebenbedingungen

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

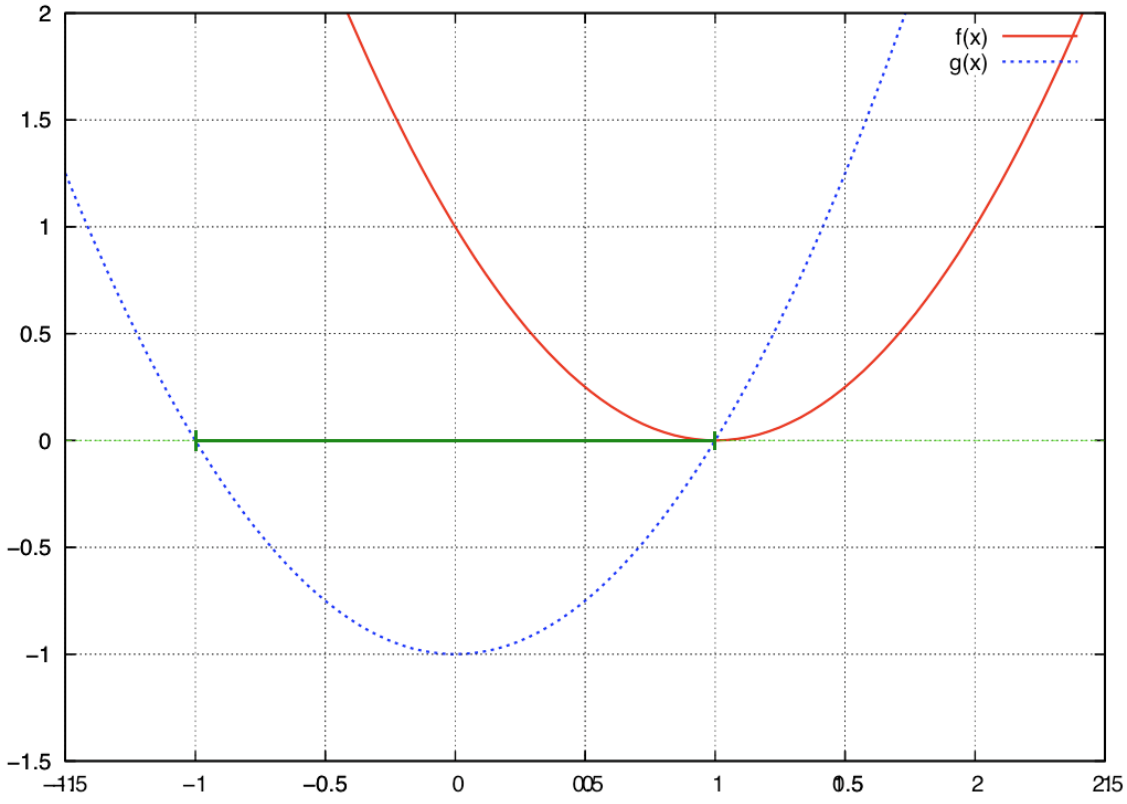
$$f(x) = (x-1)^2$$

unter der einzigen Nebenbedingung

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

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

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



Optimierung mit Nebenbedingungen

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

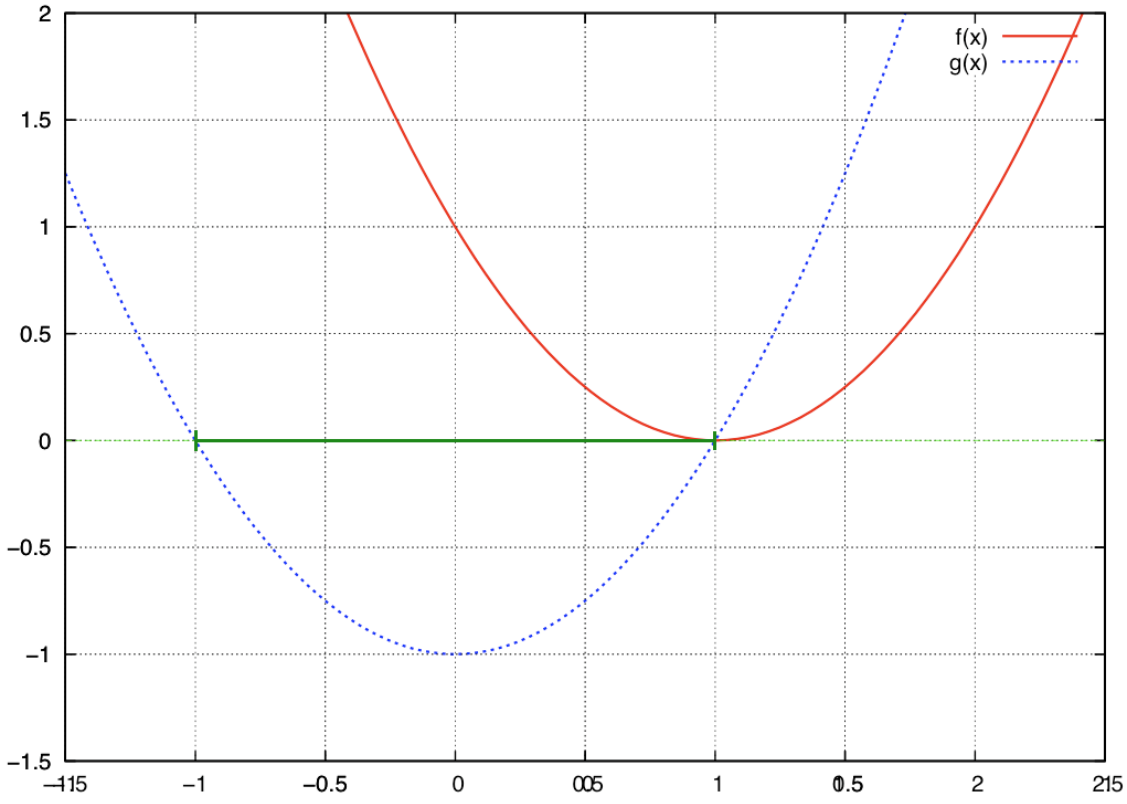
$$f(x) = (x-1)^2$$

unter der einzigen Nebenbedingung

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

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

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



Optimierung mit Nebenbedingungen

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

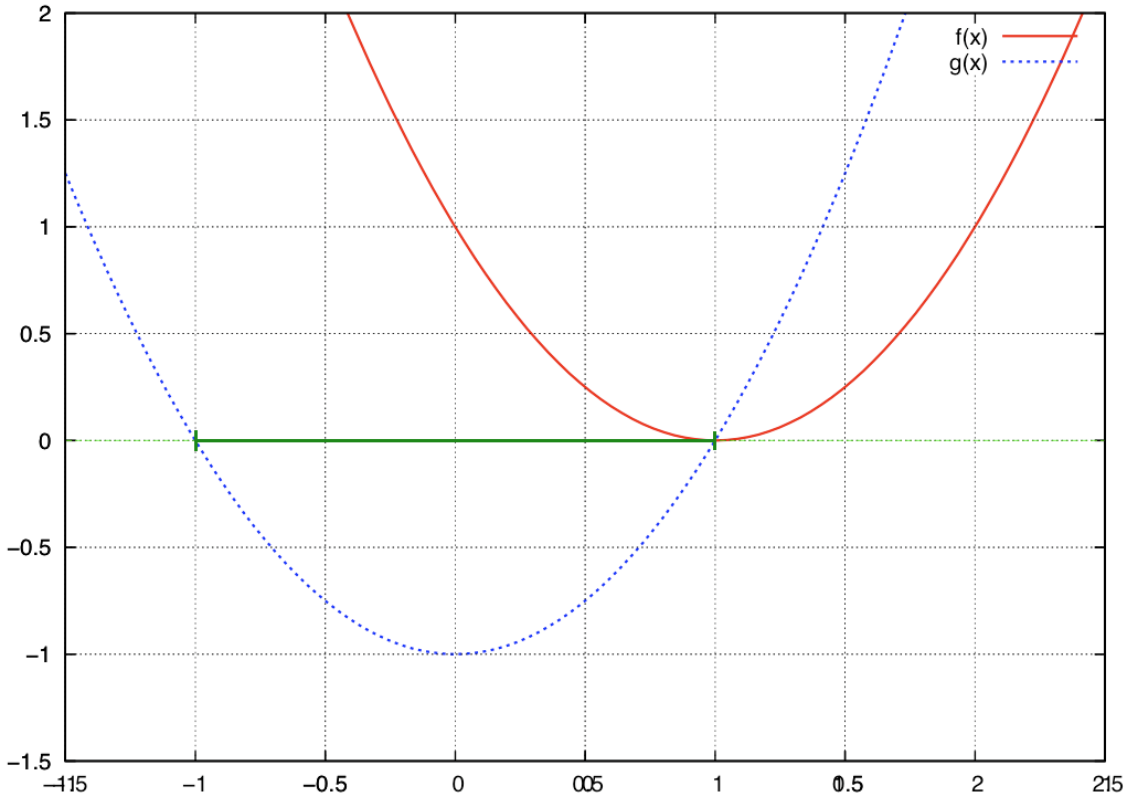
$$f(x) = (x-1)^2$$

unter der einzigen Nebenbedingung

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

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

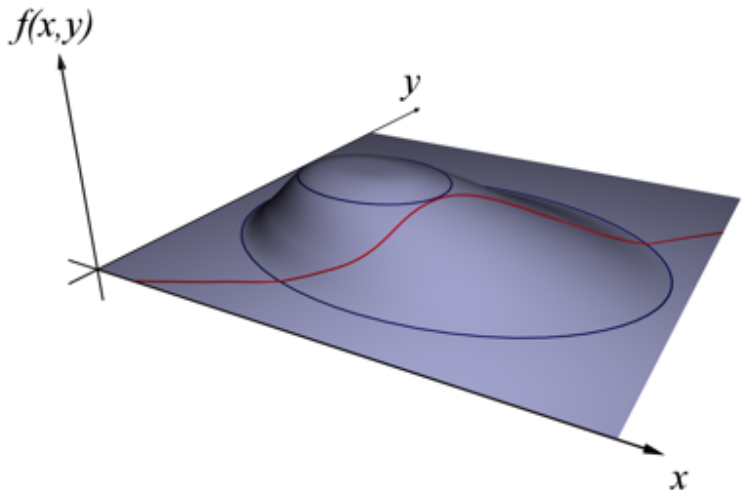
$$\tilde{x} \in \{x \in \mathbb{R} \mid g(x) \leq 0\}$$



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 α_i und μ_j heißen auch Lagrange-Multiplikatoren.

Lagrange-Funktion

Die Umformung der Nebenbedingungen (7) 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:

$$L\left(\vec{\beta}, \vec{\alpha}\right) = f(\vec{\beta}) - \sum_{i=1}^{m} \alpha_i g_i(\vec{\beta}) \tag{8}$$

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

$$L_P(\vec{\beta}, \beta_0, \vec{\alpha}) = \frac{1}{2} \|\vec{\beta}\|^2 - \sum_{i=1}^{N} \alpha_i \left(y_i \left(\left\langle \vec{x}_i \, , \, \vec{\beta} \right\rangle + \beta_0 \right) - 1 \right) \tag{9}$$

soll L_P bezüglich $\vec{\beta}$ und β_0 *minimiert* und bezüglich $\vec{\alpha}$ *maximiert* werden!

Karush-Kuhn-Tucker Bedingungen

Durch die partiellen Ableitung nach $\vec{\beta}$ und β_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:

$$\vec{\beta} = \sum_{i=1}^{N} \alpha_i y_i \vec{x}_i \quad \text{und} \quad \sum_{i=1}^{N} \alpha_i y_i = 0 \tag{10}$$

$$\alpha_i \geq 0 \; \forall \, i = 1, \ldots, N \tag{11}$$

$$\alpha_i \left(y_i \left(\left\langle \vec{x}_i \, , \, \vec{\beta} \right\rangle + \beta_0 \right) - 1 \right) = 0 \; \forall \, i = 1, \ldots, N \tag{12}$$

Duales Problem

Das primale Problem soll bezüglich $\vec{\beta}$ und β_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 $\vec{\beta}$,β_0,$\vec{\alpha}$ auf wie das Maximum des dualen Problems.

Duales Problem

Das primale Problem soll bezüglich $\vec{\beta}$ und β_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 $\vec{\beta}$,β_0,$\vec{\alpha}$ auf wie das Maximum des dualen Problems.

Umformung des primalen in das duale Problem

$$
\begin{aligned}
& \frac{1}{2}||\vec{\beta}||^2 - \sum_{i=1}^{N} \alpha_i && \left[y_i \left(\left\langle \vec{x}_i \, , \, \vec{\beta} \right\rangle + \beta_0 \right) - 1 \right] && \\
= & \frac{1}{2}||\vec{\beta}||^2 - \sum_{i=1}^{N} \alpha_i && y_i \left(\left\langle \vec{x}_i \, , \, \vec{\beta} \right\rangle + \beta_0 \right) && + \sum_{i=1}^{N} \alpha_i \\
= & \frac{1}{2}||\vec{\beta}||^2 - \sum_{i=1}^{N} \alpha_i y_i \left\langle \vec{x}_i \, , \, \vec{\beta} \right\rangle && - \sum_{i=1}^{N} \alpha_i y_i \beta_0 && + \sum_{i=1}^{N} \alpha_i \\
\overset{(10)}{=} & \frac{1}{2}||\vec{\beta}||^2 - \sum_{i=1}^{N} \alpha_i y_i \left\langle \vec{x}_i \, , \, \vec{\beta} \right\rangle && && + \sum_{i=1}^{N} \alpha_i
\end{aligned}
$$

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

$$L_D(\vec{\alpha}) = \sum_{i=1}^{N} \alpha_i - \frac{1}{2} \sum_{i=1}^{N} \sum_{j=1}^{N} y_i y_j \alpha_i \alpha_j \left\langle \vec{x}_i \, , \, \vec{x}_j \right\rangle \tag{13}$$

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

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

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 α_i mit

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

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 (10) gilt

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

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

Um β_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 α_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])

Berechnung der α_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])

Berechnung der α_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])

Berechnung der α_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])

Berechnung der α_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])

Berechnung der α_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 (9) 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 β_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* (13)

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

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.

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.

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.

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.

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.

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.

Literatur I