SVM – Support Vector Machines
Metoda wektorów nośnych

JERZY STEFANOWSKI
Institute of Computing Sciences,
Poznań University of Technology

UM – slajdy dodatkowe do wykładu

Plan wykładu

1. Liniowa separowalność w statystycznej klasyfikacji
2. Podstawy metody SVM
3. Uogólnienie SVM (nie w pełni separowalne liniowo)
4. Funkcje jądrowe (kernal functions)
5. SVM dla danych separowalnych nieliniowo
6. Podsumowanie
7. Gdzie szukać więcej

Formalizacja problemu klasyfikacji

- W przestrzeni danych (ang. measurement space) Ω znajdują się wektory danych **x** stanowiące próbkę uczącą *D*, należące do dwóch klas

$$D = \left\{ \left(\mathbf{x}_i , c_i \right) \mid x_i \in R^p , c_i \in \{1, -1\} \right\}_{i=1}^{N}$$

- Szukamy klasyfikatora pozwalającego na podział całej przestrzeni Ω na dwa rozłączne obszary odpowiadającej klasom {1,-1} oraz pozwalającego jak najlepiej klasyfikować nowe obiekty x do klas
- Podejście opiera się na znalezieniu tzw. granicy decyzyjnej między klasami $\rightarrow$ g(**x**)

Separowalność liniowa

- Dwie klasy są liniowo separowalne, jeśli istnieje hiperpłaszczyzna H postaci g(**x**)

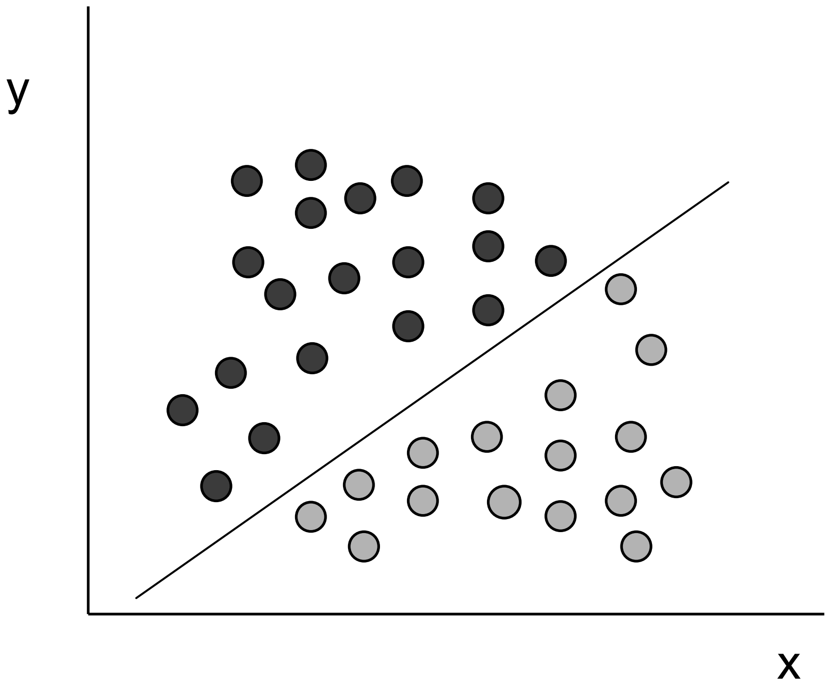
$$g(\mathbf{x}) = \mathbf{w}^T \mathbf{x} + b$$

- przyjmująca wartości

$$\begin{cases} g(\mathbf{x}_i) > 0 & \mathbf{x}_i \in 1 \\ g(\mathbf{x}_i) < 0 & \mathbf{x}_i \in -1 \end{cases}$$

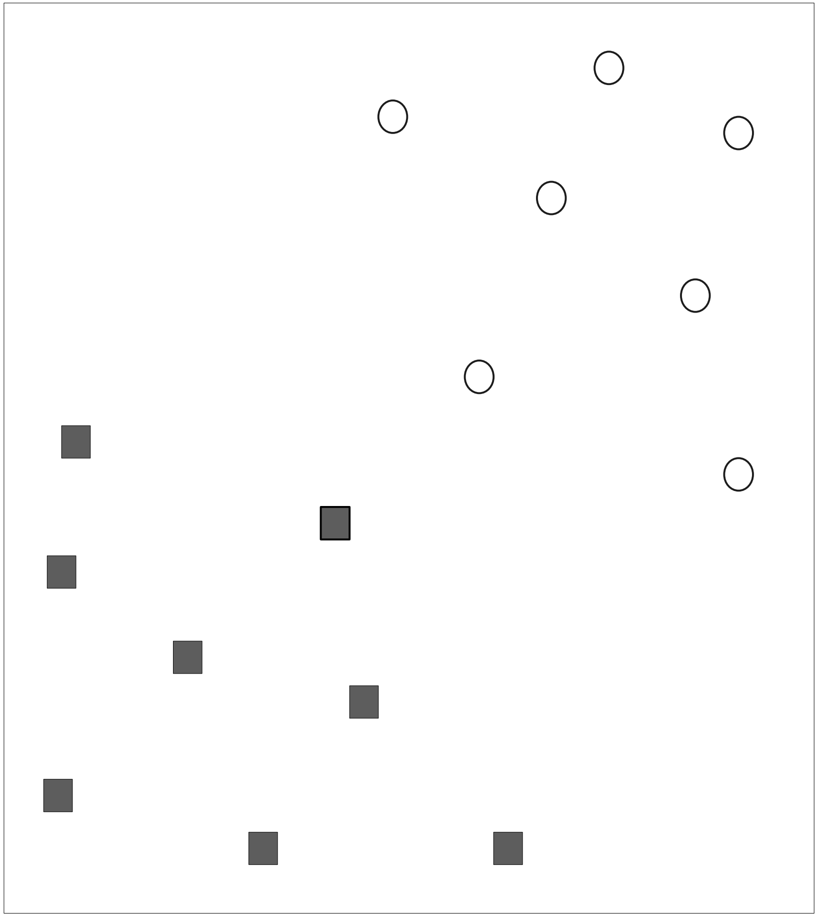
- Jak poszukiwać takiej hiperpłaszczyzny granicznej?

Liniowa funkcja separująca



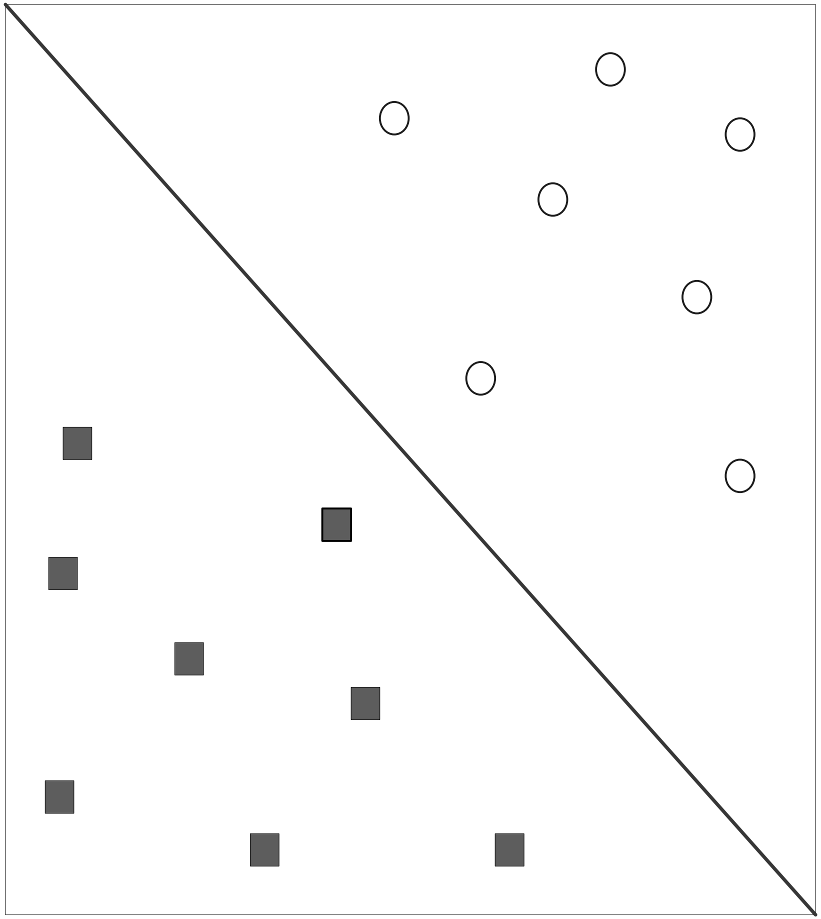
- Funkcja liniowa separująca
- Wyznacza podział przestrzeni na obszary odpowiadające dwóm klasom decyzyjnym.
- Oryginalna propozycja Fisher, ale także inne metody (perceptron, itp..)
- Uogólnienia dla wielu klas.

Support Vector Machines



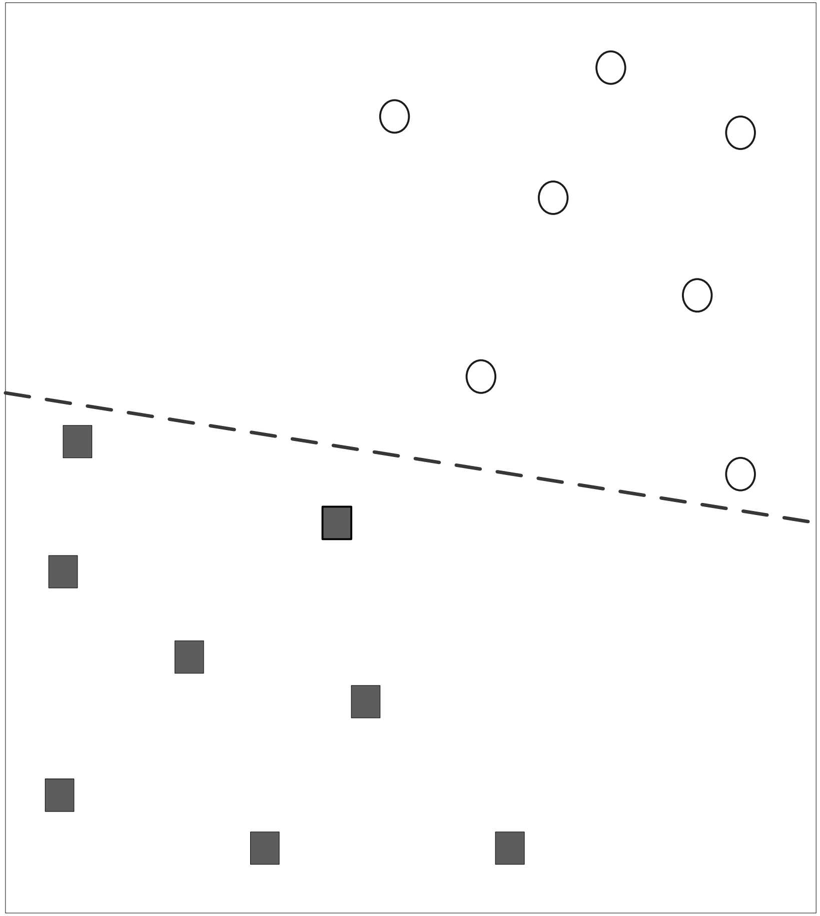
- Znajdź liniową hiperpłaszczyznę (decision boundary) oddzielające obszary przykładów z dwóch różnych klas

Support Vector Machines



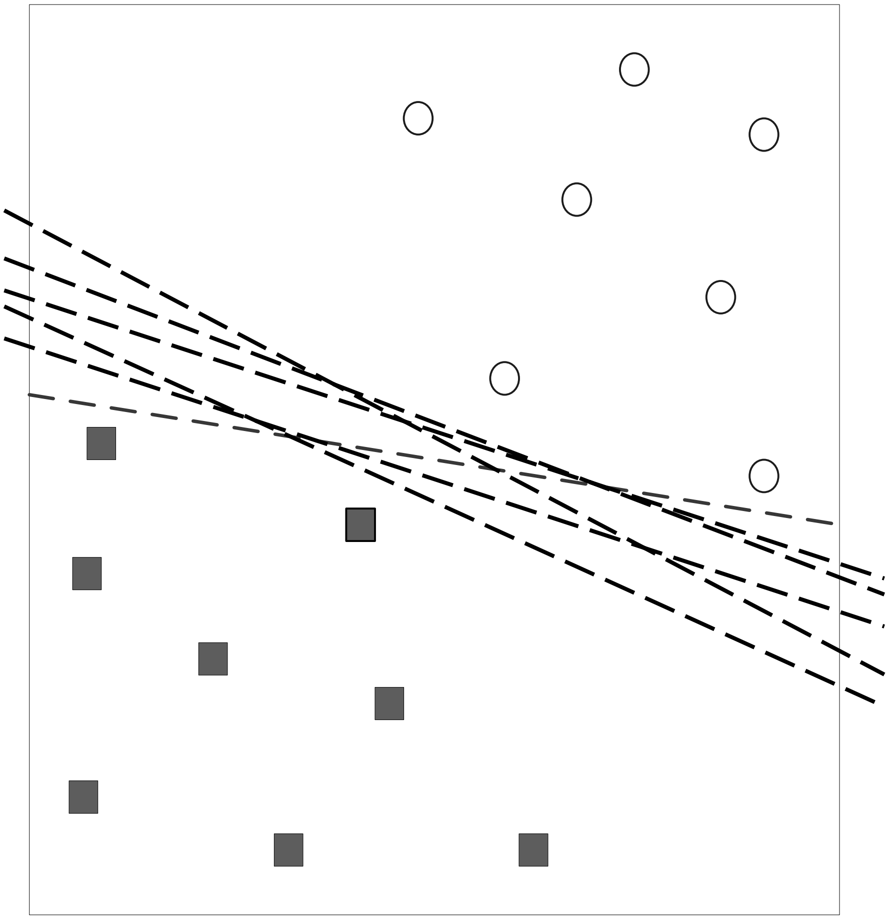
- Jedno z możliwych rozwiązań

Support Vector Machines



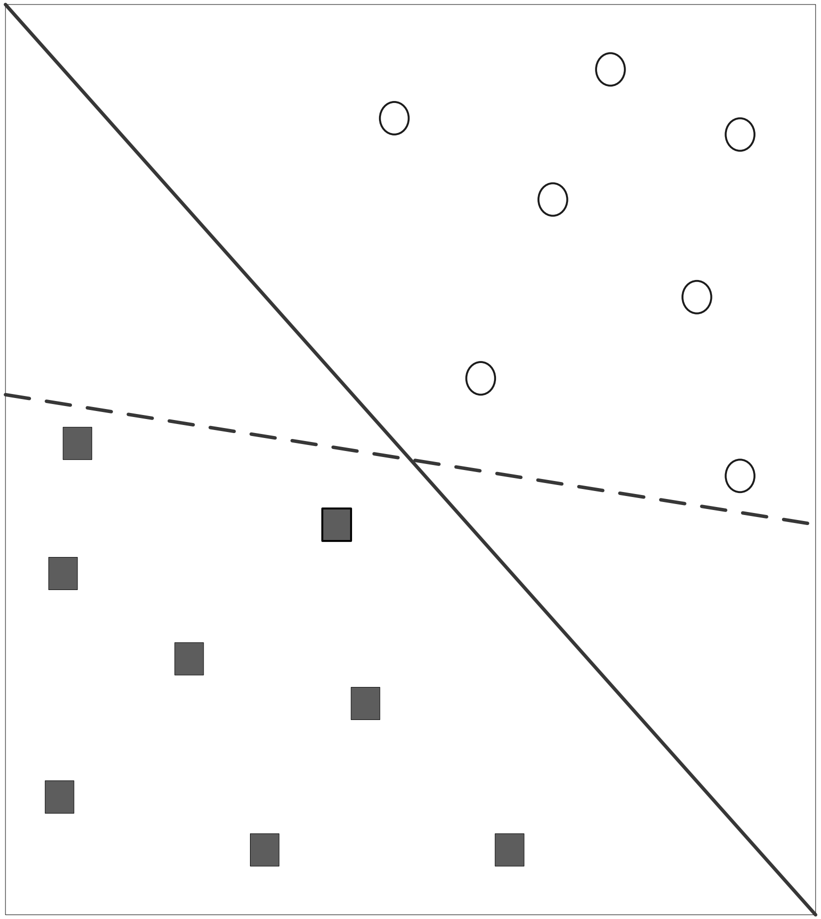
- Inne możliwe rozwiązanie

Support Vector Machines



- Zbiór wielu możliwych rozwiązań

Support Vector Machines



- Którą z hiperpłaszczyzn należy wybrać? B1 or B2?
- Czy można to formalnie zdefiniować?

Uwagi o marginesie

- Hiperpłaszczyzny b_{i1} i b_{i2} są otrzymane przez równoległe przesuwanie hiperpłaszczyzny granicznej aż do pierwszych punktów z obu klas.
- Odległość między nimi – **margines** klasyfikatora liniowego
- Jaki margines wybierać?

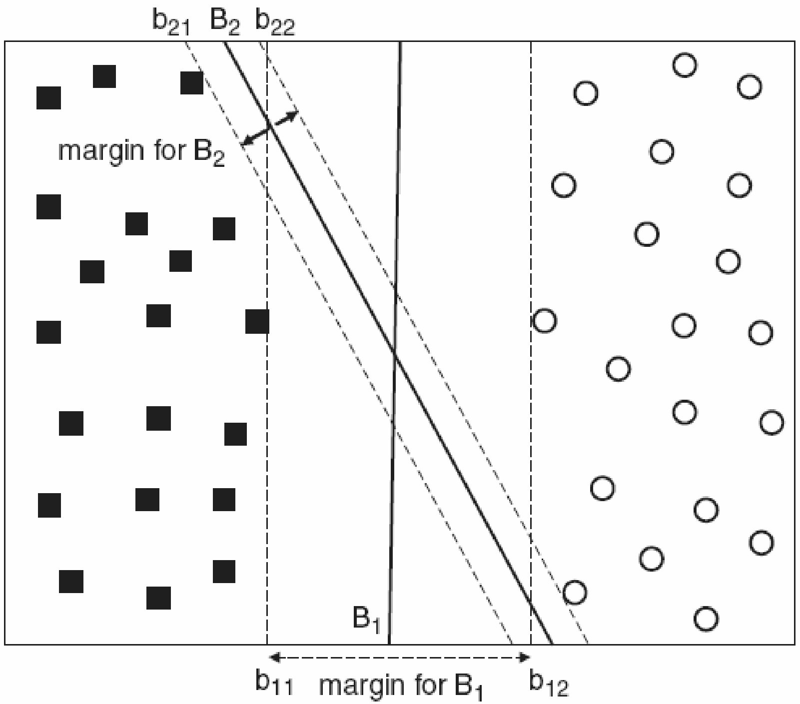
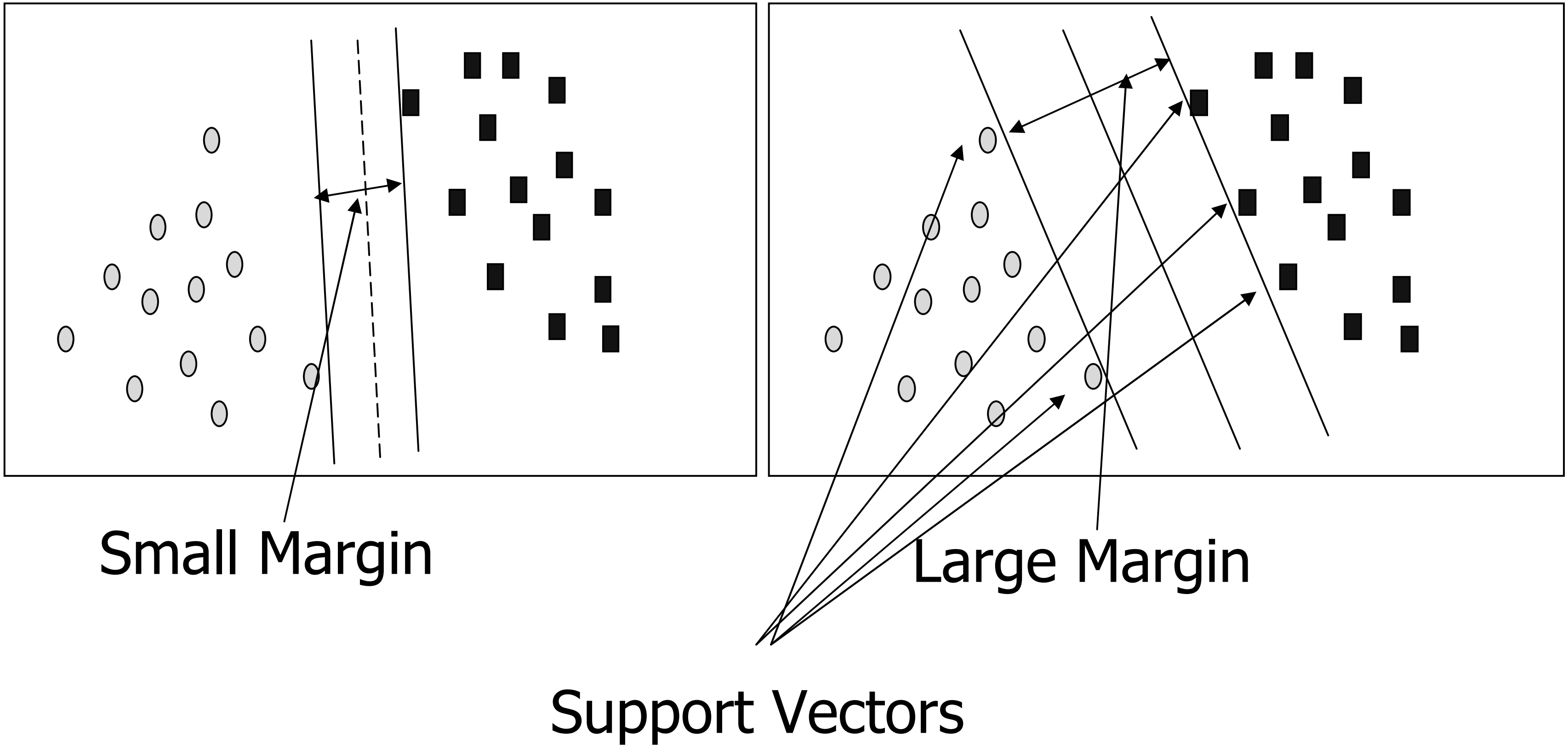


Figure 5.22. Margin of a decision boundary.

Węższe czy szersze marginesy?

- Szerszy margines → lepsze własności generalizacji, mniejsza podatność na ew. przeuczenie (overfitting)
- Wąski margines – mała zmiana granicy, radykalne zmiany klasyfikacji



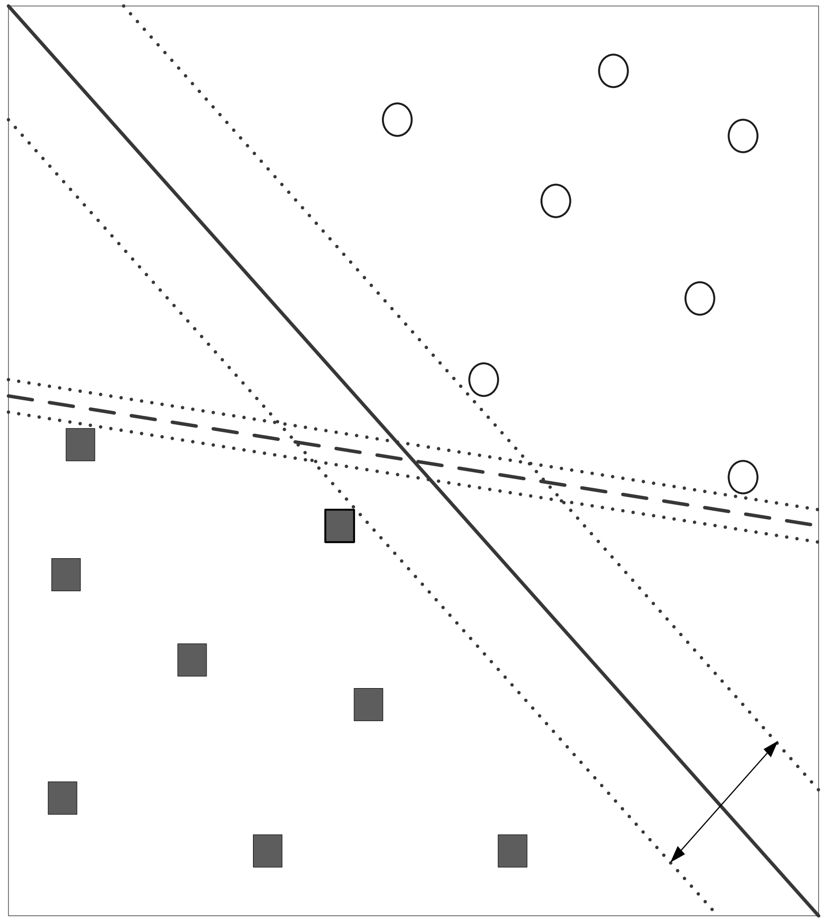
Teoria „Structural risk minimization”

- Oszacowanie górnej granicy błędu ze względu na błąd uczący R_e, liczbę przykładów N i tzw. model complexity h z prawdopodobieństwem 1-η „generalization error” nie przekroczy:

$$R \leq R_e + \varphi(\frac{h}{N}, \frac{\log(\eta)}{N})$$

- Prace teoretyczne – h complexity dla modelu liniowego:
- „Models with small margins have higher capacity -complexity because they are more flexivle and can fit many training sets”
- Także „The hypothesis space with minimal VC-dimension according to SRM”
- Reasumując modele o wiekszej complexity mają gorsze oszacowanie błędu
- Dlatego wybieraj większy margines!

Support Vector Machines



- Znajdź hiperpłaszyczną, która maksymalizuje tzw. **margines** => B1 jest lepsze niż B2

Liniowe SVM hiperpłaszczyzna graniczna

- Vapnik – poszukuj „maximal margin classifier”

$$\mathbf{w} \cdot \mathbf{x} + \mathbf{b} = 0$$

gdzie **w** i **b** są parametrami modelu

$$y = \begin{cases} 1 & \mathbf{w} \cdot \mathbf{x} + \mathbf{b} > 0 \\ -1 & \mathbf{w} \cdot \mathbf{x} + \mathbf{b} < 0 \end{cases}$$

- Parametry granicy wyznaczaj tak, aby maksymalne marginesy b_{i1} i b_{i2} były miejscem geometrycznym punktów **x** spełniających warunki

$$b_{i1} \quad \mathbf{w} \cdot \mathbf{x} + \mathbf{b} = 1$$

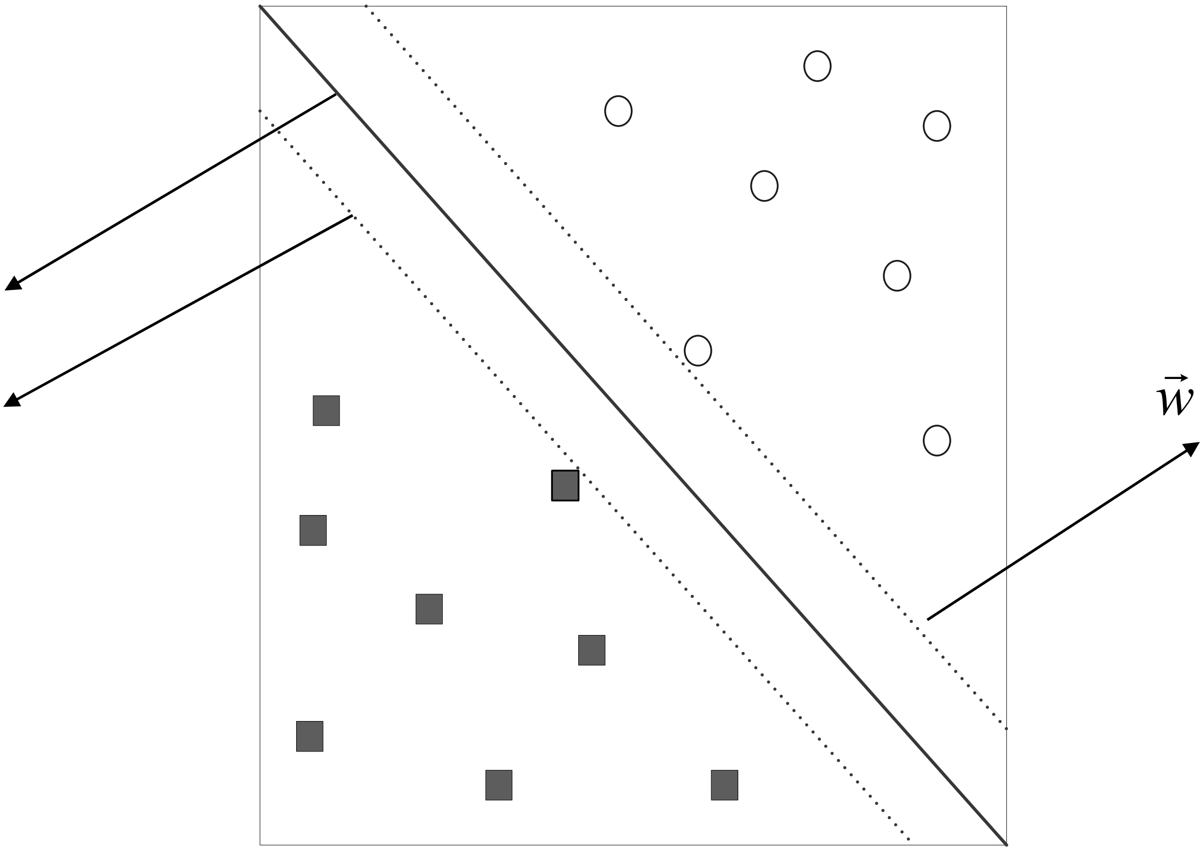
$$b_{i2} \quad \mathbf{w} \cdot \mathbf{x} + \mathbf{b} = -1$$

- Margines – odległość między płaszczyznami b_{i1} i b_{i2}

Poszukiwanie parametrów hiperpłaszczyzny

$\vec{w} \bullet \vec{x} + b = 0$

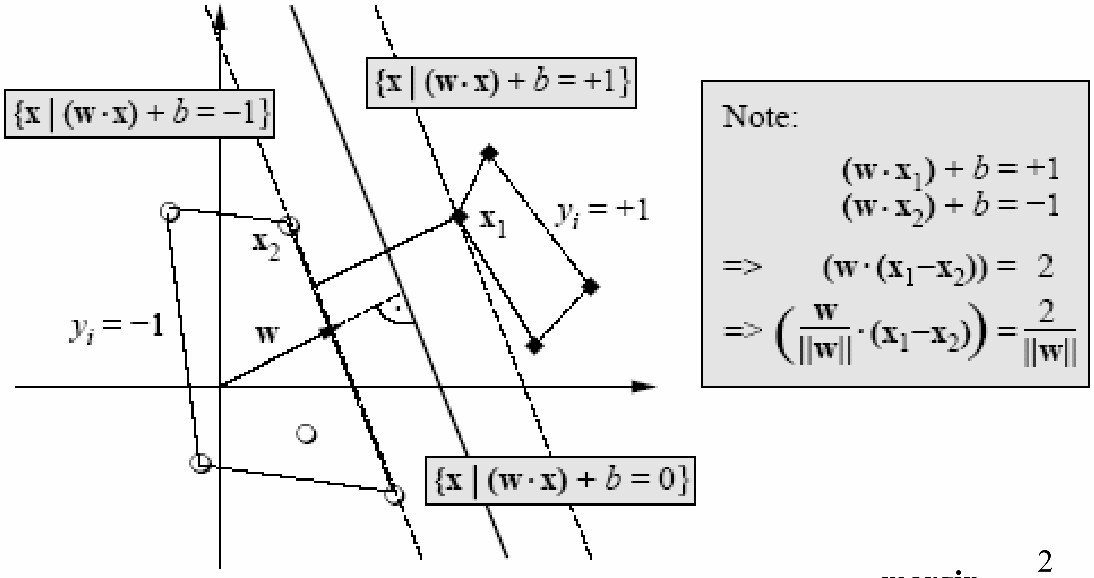
$\vec{w} \bullet \vec{x} + b = -1$



$\vec{w} \bullet \vec{x} + b = +1$

$$f(\vec{x}) = \begin{cases} 1 & \text{if } \vec{\mathrm{w}} \bullet \vec{\mathrm{x}} + \mathrm{b} \geq 1 \\ -1 & \text{if } \vec{\mathrm{w}} \bullet \vec{\mathrm{x}} + \mathrm{b} \leq -1 \end{cases}$$

Ilustracje i sposób przekształceń



$$\textbf{margin} = \frac{2}{\|\mathbf{w}\|}$$

Fig. 2. A binary classification toy problem: separate balls from diamonds. The *optimal hyperplane* is orthogonal to the shortest line connecting the convex hulls of the two classes (dotted), and intersects it half-way between the two classes. The problem is separable, so there exists a weight vector $\mathbf{w}$ and a threshold b such that $y_i \cdot ((\mathbf{w}\cdot\mathbf{x}_i) + b) > 0$ $(i = 1, \ldots, m)$. Rescaling $\mathbf{w}$ and b such that the point(s) closest to the hyperplane satisfy $|(\mathbf{w}\cdot\mathbf{x}_i) + b| = 1$, we obtain a *canonical* form $(\mathbf{w}, b)$ of the hyperplane, satisfying $y_i \cdot ((\mathbf{w}\cdot\mathbf{x}_i) + b) \geq 1$. Note that in this case, the *margin*, measured perpendicularly to the hyperplane, equals $2/\|\mathbf{w}\|$. This can be seen by considering two points $\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2$ on opposite sides of the margin, i.e., $(\mathbf{w}\cdot\mathbf{x}_1) + b = 1$, $(\mathbf{w}\cdot\mathbf{x}_2) + b = -1$, and projecting them onto the hyperplane normal vector $\mathbf{w}/\|\mathbf{w}\|$ (from [29]).

$$\textbf{margin} = \frac{2}{\|\mathbf{w}\|}$$

$$\|\mathbf{w}\| \equiv \sqrt{w_1^2 + \ldots + w_p^2}$$

Cel: Maksymalizuj margines!

$$\frac{2}{\|\mathbf{w}\|} \longrightarrow \frac{\|\mathbf{w}\|}{2} \longrightarrow \frac{\|\mathbf{w}\|^2}{2}$$

maximize **minimize** **minimize**

Linear Support Vector Machines

- Sformułowanie mat. problemu:

$$\min_{\mathbf{w}} = \frac{\|\mathbf{w}\|^2}{2}$$

- Przy warunkach ograniczających

$$y_i(w \cdot x_i + b) \geq 1 \quad i = 1,2,\ldots,N$$

- Jest to problem optymalizacji kwadratowej z liniowymi ogr. $\rightarrow$ uogólnione zadanie optymalizacji rozwiązywany metodą mnożników Lagrange'a (tak aby np. nie dojść do w $\rightarrow$ 0)

LSVM

- Minimalizuj funkcję Lagrange'a

$$L(w,b,\alpha) = \frac{1}{2}\|\mathbf{w}\|^2 - \sum_{i=1}^{N} \alpha_i (y_i(\mathbf{w}\mathbf{x}_i + b) - 1)$$

- parametry $\alpha \geq 0$ mnożniki Lagrange'a
- Powinno się różniczkować L po w i b – nadal trudności w rozwiązaniu
- Przy przekształceniach wykorzystuje się ograniczenia Karush-Kuhn-Tucker na mnożniki:

$$\alpha_i \geq 0$$
$$\alpha_i [y_i (w \cdot x_i + b) - 1] = 0$$

- W konsekwencji α_i są niezerowe wyłącznie dla wektorów nośnych **x**, pozostałe są zerowe
- Rozwiązanie parametrów **w** i *b* zależy wyłącznie od wektorów nośnych.

LSVM – sformułowanie dualne

- Nadal zbyt wiele parametrów w,b,α do oszacowania
- Przechodzi się na postać dualną zadania optymalizacji
- Maksymalizuj L(α)

$$\sum_{i=1}^{N} \alpha_i - \frac{1}{2}\sum_{i=1}^{N}\sum_{j=1}^{N}\alpha_i \alpha_j y_i y_j \left(\mathbf{x}_i \cdot \mathbf{x}_j\right)$$

- Przy ograniczeniach

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

- Rozwiązanie (α>0 dla i$\in$SV) ; b – odpowiednio uśredniane

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

- Hiperpłaszczyzna decyzyjna

$$\sum_{i=1}^{N}\alpha_i y_i \mathbf{x}_i \cdot \mathbf{x} + b = 0$$

Rozwiązanie LSVM

- Klasyfikacja – funkcja decyzyjna

$$f(x) = sign(\sum_{i=1}^{N} \alpha_i y_i \mathbf{x}_i \cdot \mathbf{x} + b)$$

- O ostatecznej postaci hiperpłaszczyzny decydują wyłącznie wektory nośne (α_i >0)
- Im większa wartość α_i tym większy wpływ wektora na granicę decyzyjną
- Klasyfikacja zależy od iloczynu skalarnego nowego **x** z wektorami nośnymi $\mathbf{x}_i$ ze zbioru uczącego
- Pewne założenie metody – starać się zbudować klasyfikator liniowy używając możliwie minimalną liczbę wektorów z danych treningowych (wektory nośne)
- Funkcjonalnie klasyfikator podobny do niektórych sieci neuronowej, metod jądrowych Parzena

Przykład

x_1	x_2	y	Lagrange Multiplier
0.3858	0.4687	1	65.5261
0.4871	0.611	−1	65.5261
0.9218	0.4103	−1	0
0.7382	0.8936	−1	0
0.1763	0.0579	1	0
0.4057	0.3529	1	0
0.9355	0.8132	−1	0
0.2146	0.0099	1	0

Obliczmy wagi

$$w_1 = \sum_i \alpha_i y_i x_{i1} = 65.5621 \cdot 1 \cdot 0.3858 + 65.5621 \cdot (-1) \cdot 0.4871 = -6.64$$

$$w_2 = \sum_i \alpha_i y_i x_{i2} = 65.5621 \cdot 1 \cdot 0.4687 + 65.5621 \cdot (-1) \cdot 0.611 = -9.32$$

$$b^{'} = 1 - (-6.64) \cdot 0.3858 - (-9.32)(0.4687) = 7.930$$

$$b^{''} = -1 - (-6.64) \cdot 0.4871 - (-9.32)(0.611) = 7.928$$

$$b = 0.5 \cdot (b^{'} + b^{''}) = 7.93$$

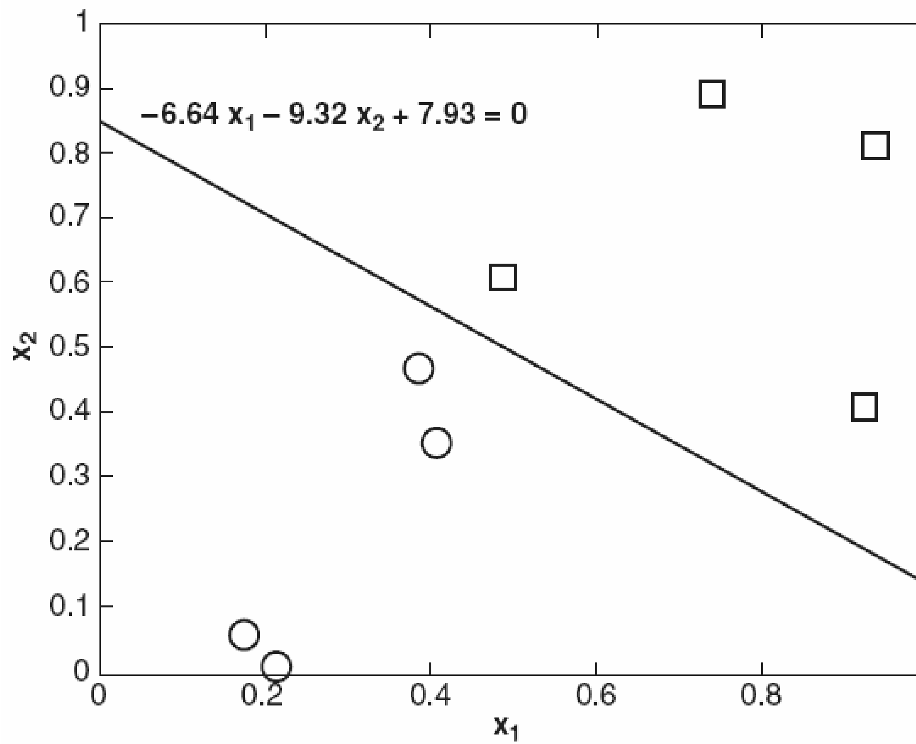
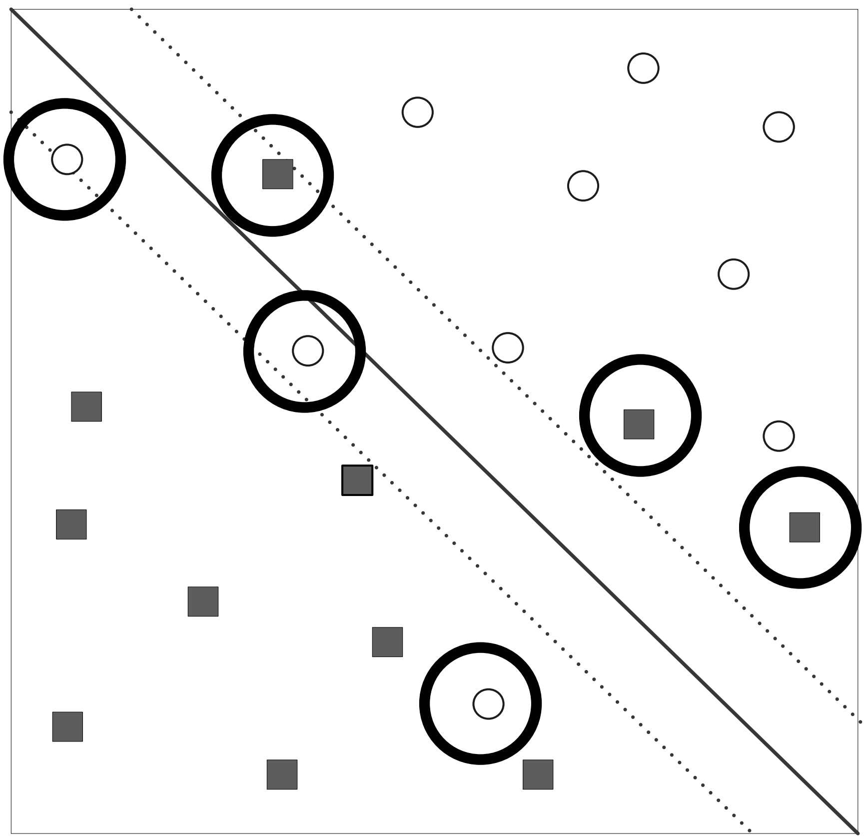


Figure 5.24. Example of a linearly separable data set.

Support Vector Machines

- Co robić z LSVM gdy dane nie są w pełni liniowo separowalne?



Jak użyć SVM dla dane liniowo nieseparowalnych

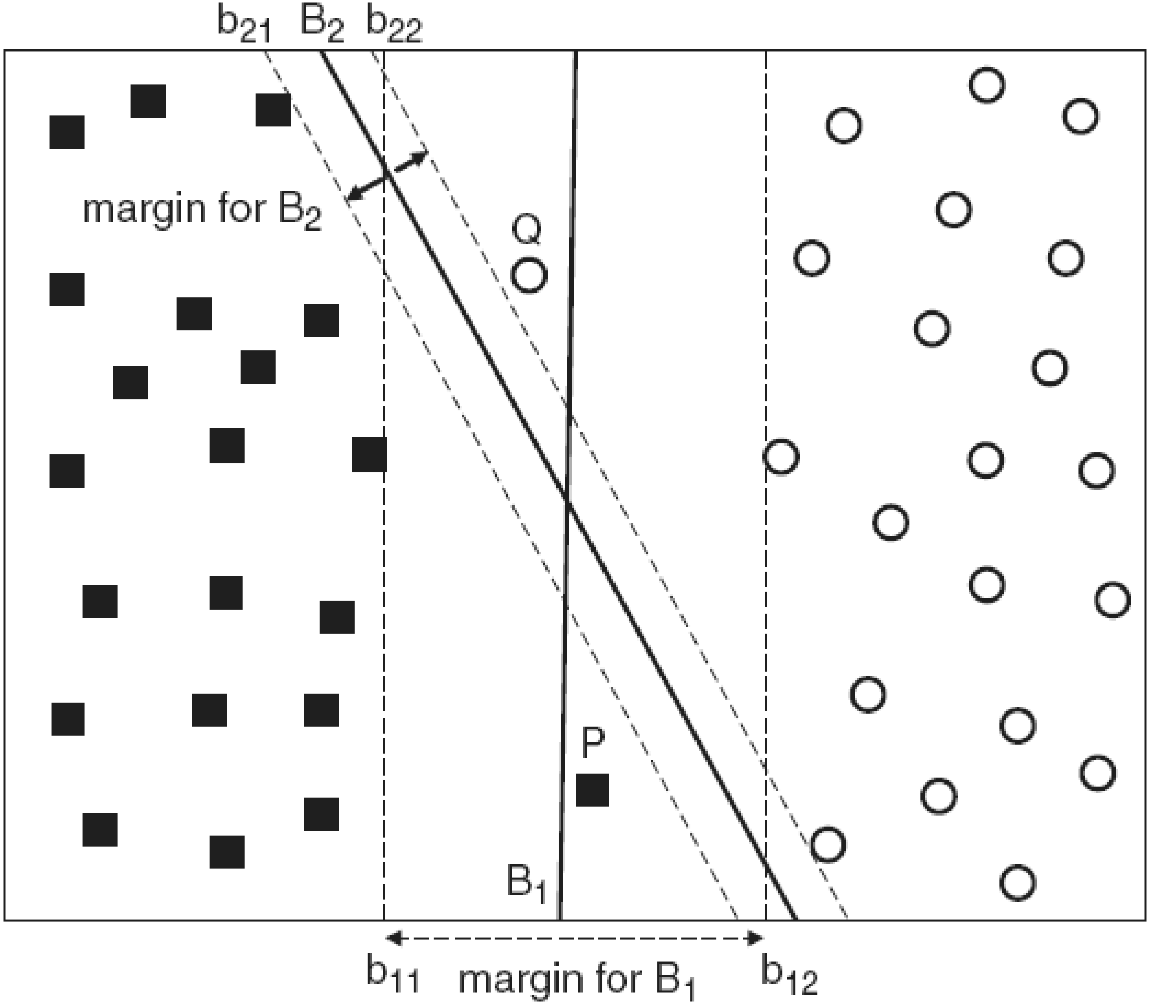


Figure 5.25. Decision boundary of SVM for the nonseparable case.

Zmienne dopełniające

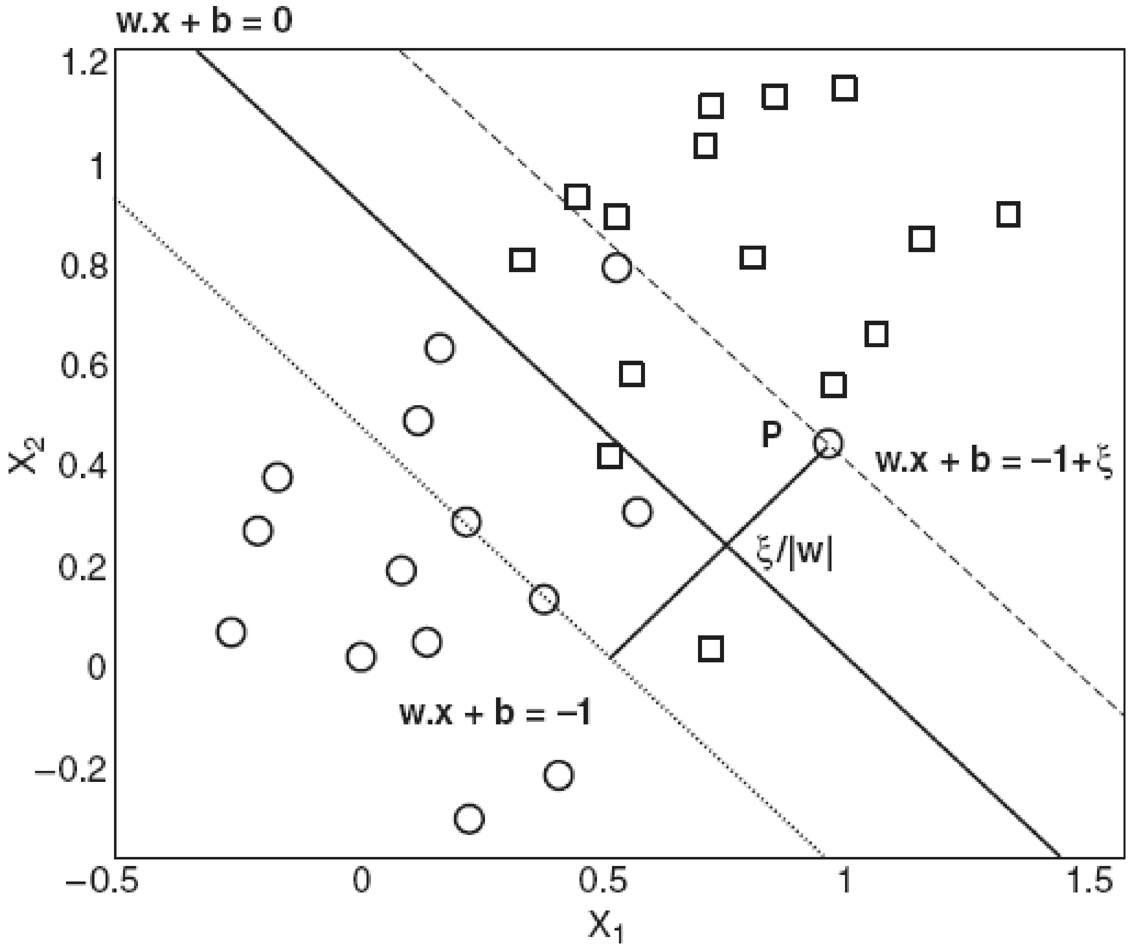


Figure 5.26. Slack variables for nonseparable data.

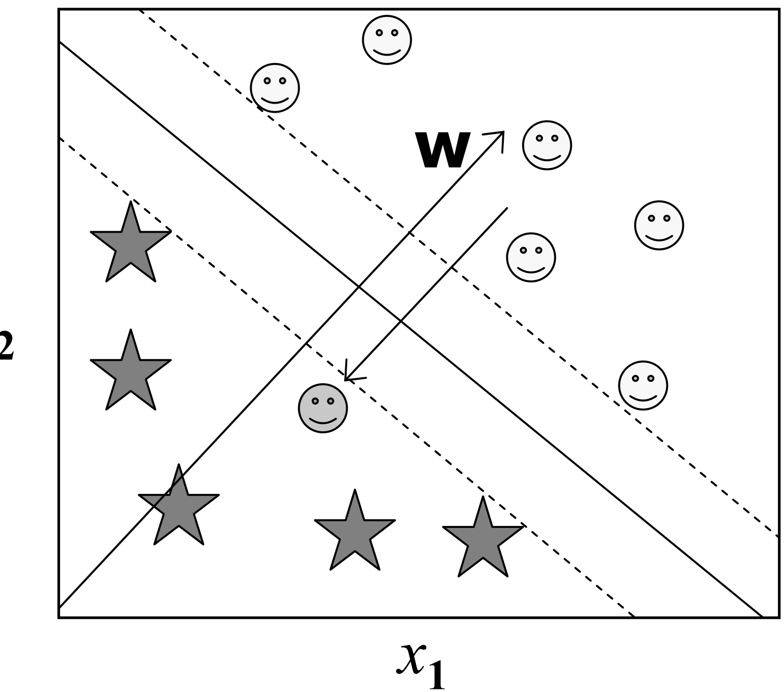
Zmienne osłabiające - interpretacja

- Zmienne $\xi_i \geq 0$ dobiera się dla każdego przykładu uczącego. Jej wartość zmniejsza margines separacji. (rodzaj „zwisu” punktu poza hiperpłaszczyzną nośną)
- Jeżeli $0 \leq \xi_i \leq 1$, to punkt danych $(\mathbf{x}_i, d_i)$ leży wewnątrz strefy separacji, ale po właściwej stronie
- Jeżeli $\xi_i > 1$, punkt po niewłaściwej stronie hiperpłaszczyzny i wystąpi błąd klasyfikacji
- Modyfikacja wymagań dla wektorów nośnych

$$b_{i1} \quad \mathbf{w} \cdot \mathbf{x} + \mathbf{b} = 1 - \xi$$

$$b_{i2} \quad \mathbf{w} \cdot \mathbf{x} + \mathbf{b} = -1 + \varsigma$$

Linear SVM – niepełna separowalność



- For all 

$$w_1 * x_1 + w_2 * x_2 \geq b + 1$$

- For 

$$w_1 * x_1 + w_2 * x_2 \geq b + 1 - \xi$$

...for some positive ξ

- Task: Maximize the margin *and* minimise training errors

$$\frac{\|\mathbf{w}\|^2}{2} \xrightarrow{\text{BECOMES}} \frac{\|\mathbf{w}\|^2}{2} + C(\sum_i \xi_i)$$

minimize **minimize**

SVM z dodatkowymi zmiennymi

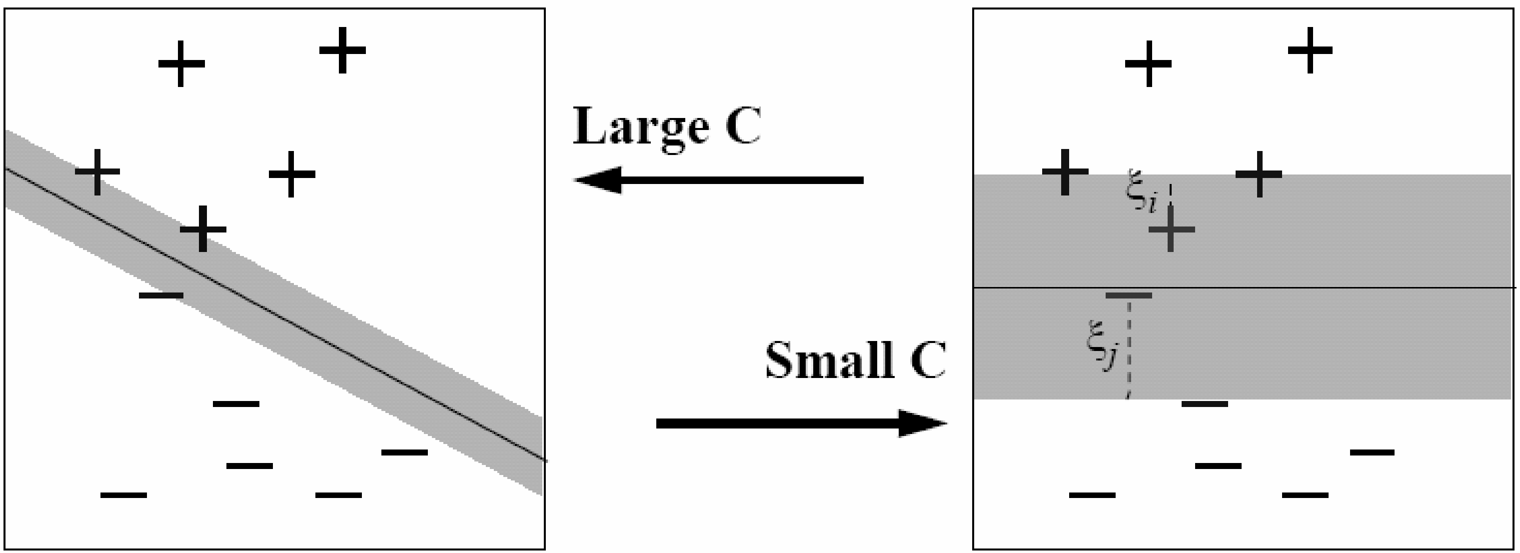
- Jak przedefiniować sformułowanie? Z dodatkowymi zmiennymi dopełniającym oraz kosztem błędu na danych uczących
  - Mimimalizuj wyrażenie: $$L(w) = \frac{\|\vec{w}\|^2}{2} + C\left(\sum_{i=1}^{N} \xi_i^k\right)$$
  - z ograniczeniami:
  - $$f(\vec{x}_i) = \begin{cases} 1 & \text{if } \vec{\mathrm{w}} \bullet \vec{\mathrm{x}}_{\mathrm{i}} + \mathrm{b} \geq 1 - \xi_{\mathrm{i}} \\ -1 & \text{if } \vec{\mathrm{w}} \bullet \vec{\mathrm{x}}_{\mathrm{i}} + \mathrm{b} \leq -1 + \xi_{\mathrm{i}} \end{cases}$$
  - Drugi czynnik odpowiada za ew. błędy testowania (górne oszacowanie tych błędów
  - Parametr C ocena straty związanej z każdym błędnie klasyfikowanym punktem dla które ξ>0
  - Przetarg „szeroki margines” to dużo błędów i odwrotnie

Controlling Soft-Margin Separation

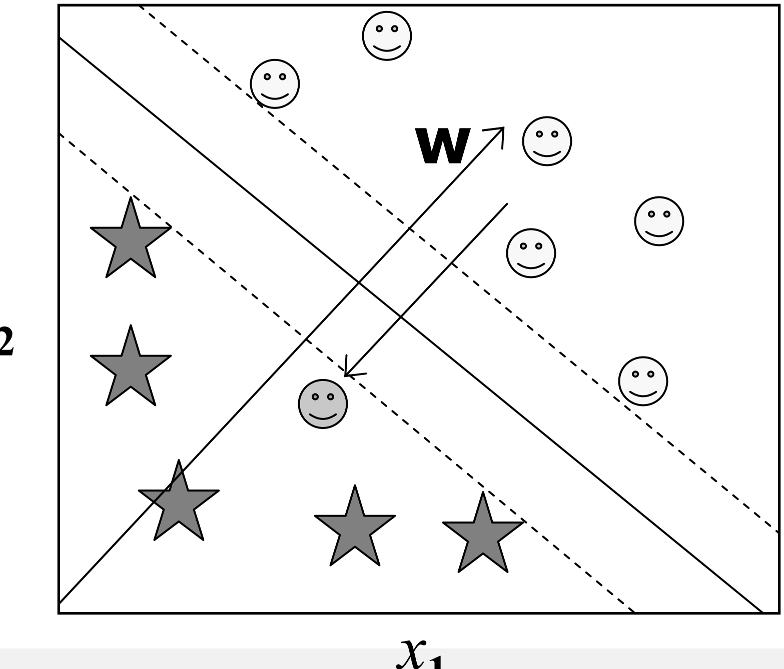
Soft Margin: minimize $P(\vec{w}, b, \vec{\xi}) = \frac{1}{2}\vec{w} \cdot \vec{w} + C \sum_{i=1}^{n} \xi_i$

s. t. $y_i[\vec{w} \cdot \vec{x}_i + b] \geq 1 - \xi_i$ *and* $\xi_i \geq 0$

- $\sum \xi_i$ is an upper bound on the number of training errors.
- C is a parameter that controls trade-off between margin and error.



Rozwiązanie problemu



- Ponownie dojdziemy do dualnego problemu:

Max: $W(\alpha) =$

$$\sum_{i=1}^{m} \alpha_i - \frac{1}{2} \sum_{i=1}^{m} \sum_{j=1}^{m} \alpha_i \alpha_j y_i y_j \left(\mathbf{x}_i \bullet \mathbf{x}_j \right)$$

ogranicz:

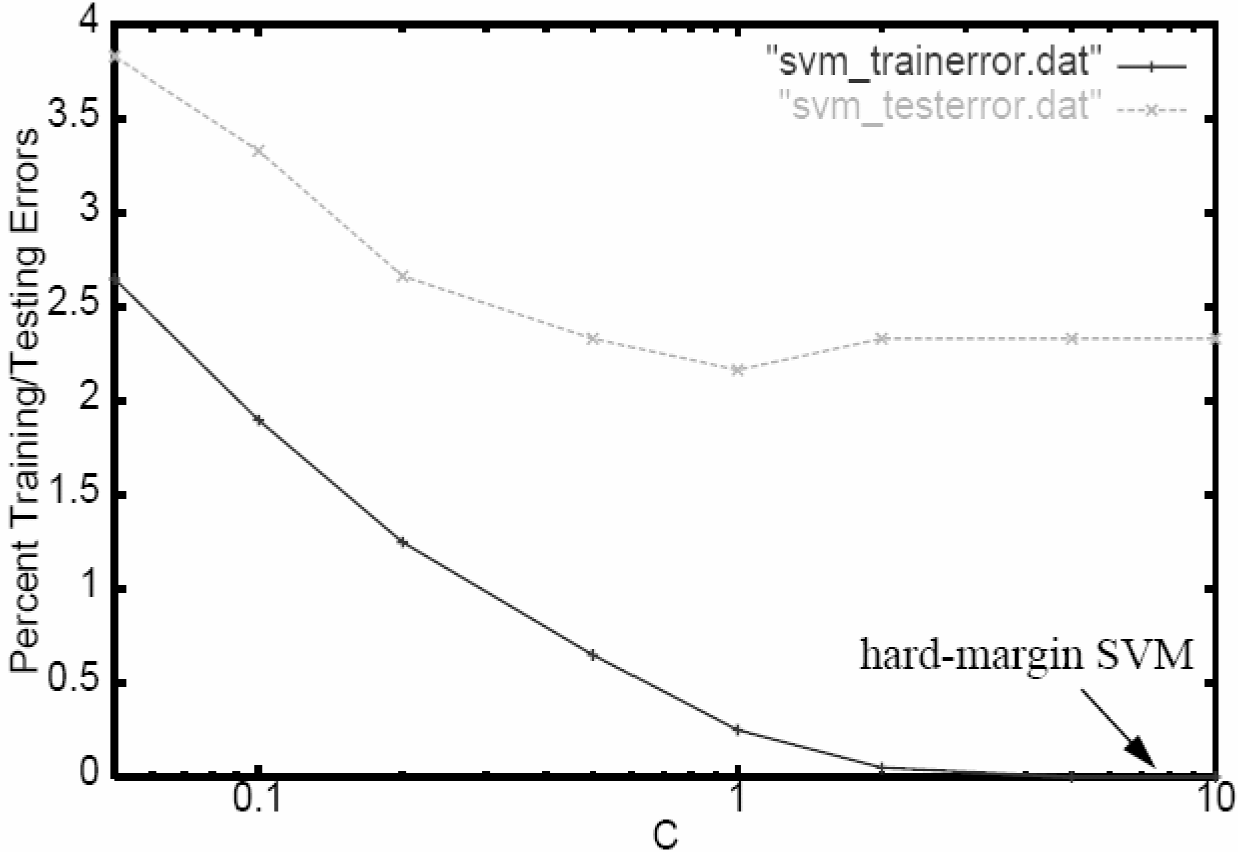
(1) $0 \leq \alpha_i \leq C, \ \forall i$

(2) $\sum_{i=1}^{m} \alpha_i y_i = 0$

Programowanie kwadratowe (QP) : trudności rozwiazania $\rightarrow$ przeformułuj problem

Globalne max α_i może być odnalezione

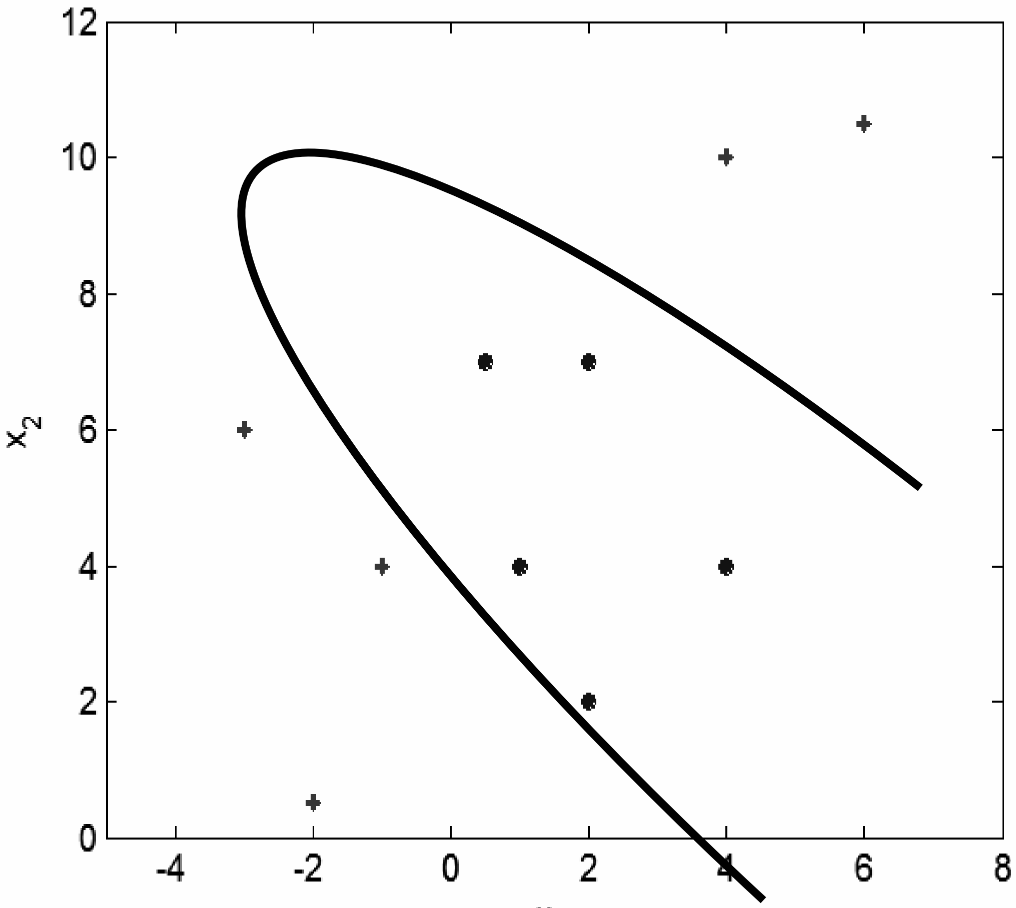
Example Reuters "acq": Varying C



Observation: Typically no local optima, but not necessarily...

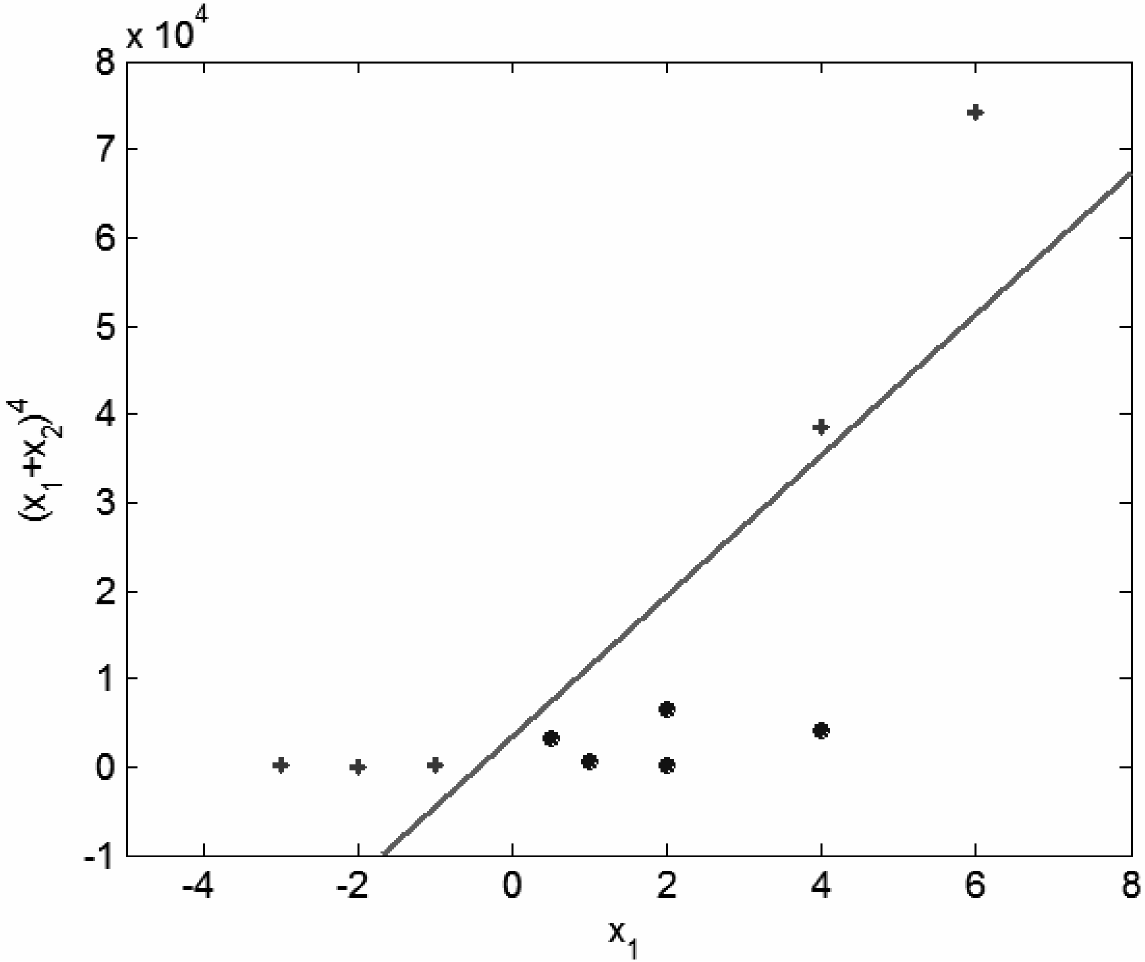
Nonlinear Support Vector Machines

- Co zrobić gdy próby uczące powinny być nieliniowo separowalne?



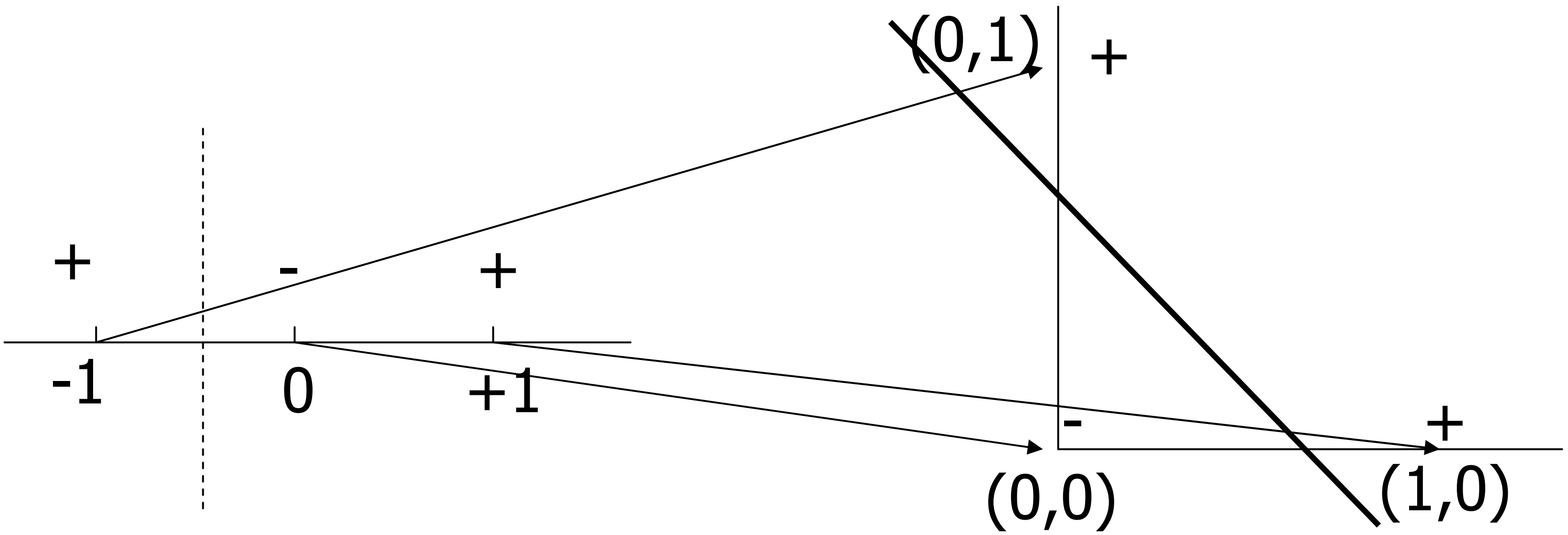
Nonlinear Support Vector Machines

- Transformacja do wysoce wielowymiarowej przestrzeni

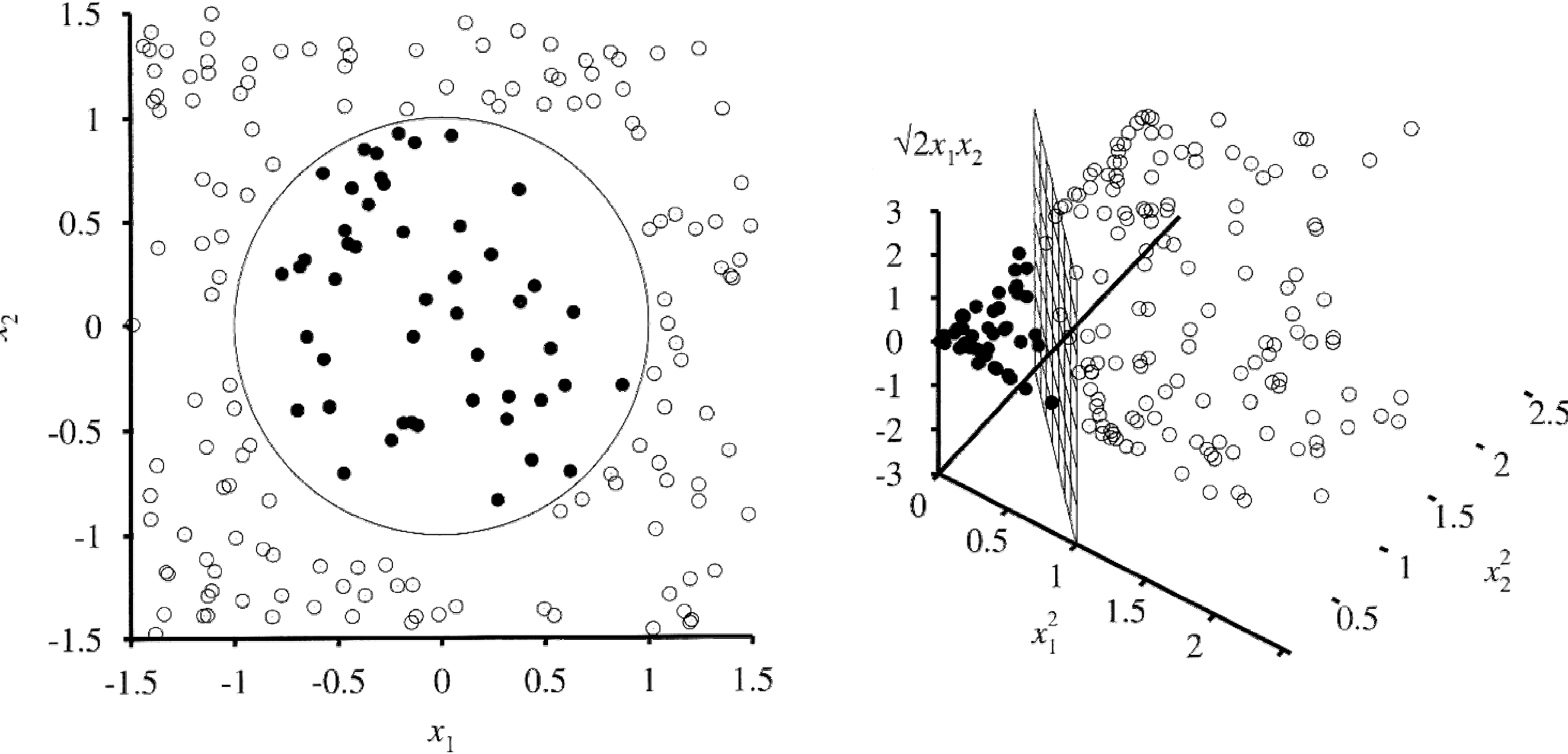


SVM – Transformacje

- Przykład transformacji 1D$\rightarrow$ 2D
- Projekcja danych oryginalnych $x \in R^p$ w nową m>p wielowymiarową przestrzeń, w której z dużym prawdopodobieństwem będą separowalne liniowo (Twierdzenia matem. np. Covera)
- Przykład przekształcenia wielomianowe wyższego stopnia gdzie do zmiennych x dołącza się ich p-te potęgi oraz iloczyny mieszane.



Przykład transformacji wielomianowej



Przykład transformacji wielomianowej

- Oryginalna funkcja celu

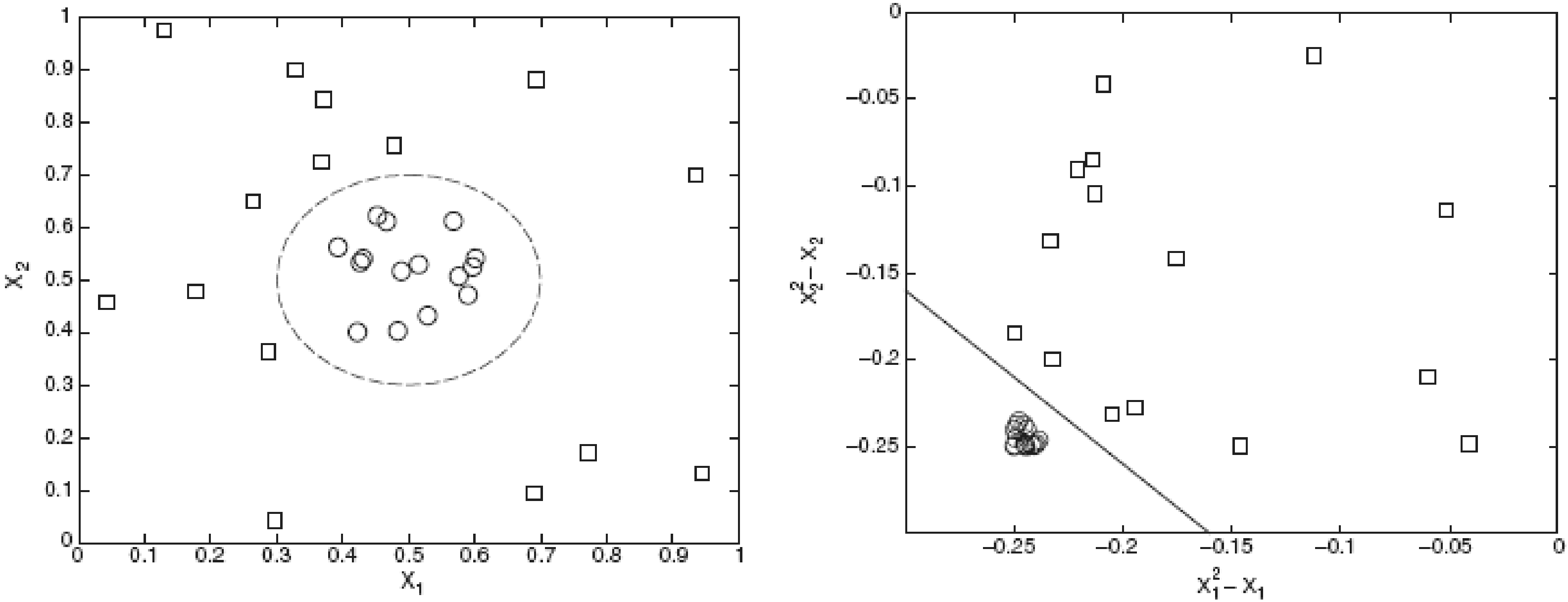
$$y(x_1, x_2) = \begin{cases} 1 & \sqrt{(x_1 - 0.5)^2 + (x_2 - 0.5)^2} > 0.2 \\ -1 & otherwise \end{cases}$$

- Transformacja $\Phi : (x_1, x_2) \rightarrow (x_1^2, x_2^2, \sqrt{2}x_1, \sqrt{2}x_2, 1)$
- Poszukujemy parametrów

$$w_4 x_1^2 + w_3 x_2^2 + w_2 \sqrt{2} x_1 + w_1 \sqrt{2} x_2 + w_0 = 0$$

- Rozwiązanie

$$x_1^2 - x_1 + x_2^2 - x_2 = -0.46$$



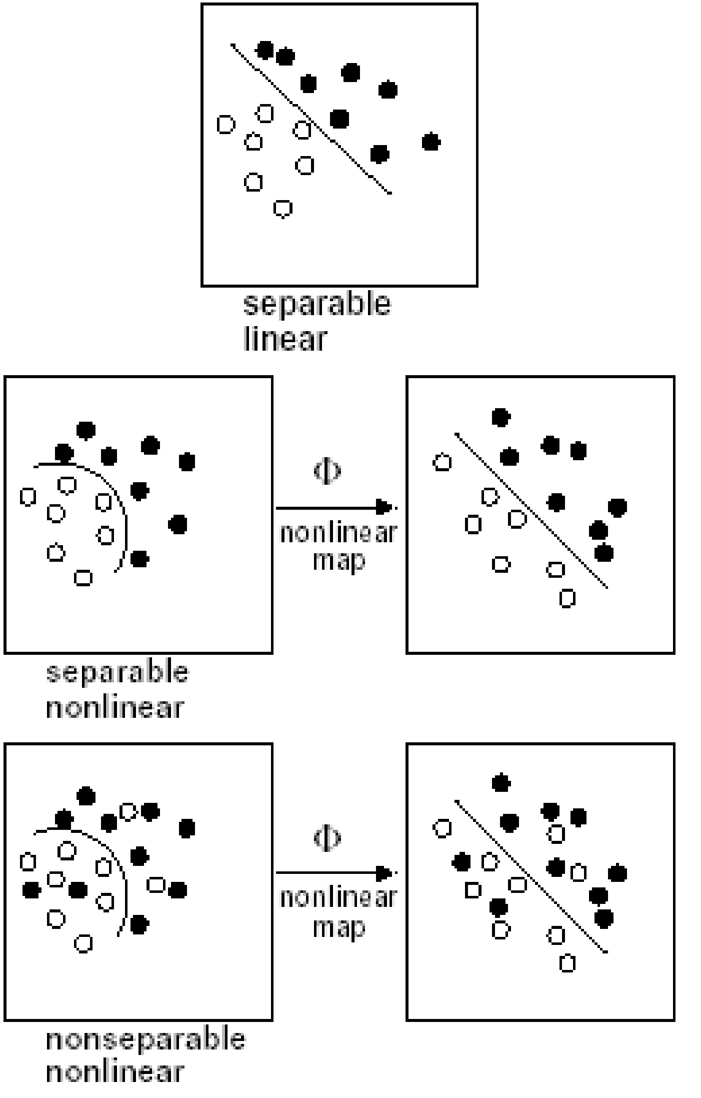
(a) Decision boundary in the original two-dimensional space.

(b) Decision boundary in the transformed space.

Figure 5.28. Classifying data with a nonlinear decision boundary.

Kilka definicji

- Przykłady danych do klasyfikacji



Model nieliniowy SVM

- Funkcja decyzyjna po przekształceniu $g(\mathbf{x}) = \mathbf{w}\varphi(\mathbf{x}) + b$
- Zasady klasyfikacji $\begin{array}{ll} +1 & g(\mathbf{x}) > 0 \\ -1 & g(\mathbf{x}) < 0 \end{array}$
- Sformułowanie problemu nieliniowego SVM

$$\min_{\mathbf{w}} = \frac{\|\mathbf{w}\|^2}{2} \qquad y_i(w \cdot \Phi(x_i) + b) \geq 1 \quad i = 1,2,\ldots,N$$

- Podobnie jak poprzednio optymalizujemy funkcje z mnożnikami Lagrange'a

$$\sum_{i=1}^{N} \alpha_i - \frac{1}{2}\sum_{i=1}^{N}\sum_{j=1}^{N} \alpha_i \alpha_j y_i y_j \left(\Phi(\mathrm{x}_i)\Phi(\mathrm{x}_j)\right)$$

- Funkcja klasyfikująca

$$f(x) = sign(\sum_{i=1}^{N} \alpha_i y_i \Phi(\mathbf{x}_i) \cdot \Phi(\mathbf{x}) + b)$$

Curse of dimensionality and …

- Oblicz $\Phi(\mathbf{x}_i)\cdot\Phi(\mathbf{x}_j)$
- **Problem:** Trudne obliczeniowo do wykonania!
- Wiele parametrów do oszacowania - wielomian stopnia *p* dla *N* atrybutów w oryginalnej przestrzeni prowadzi do $O(N^P)$ atrybutów w nowej rozszerzonej *F* feature space
- Skorzystaj z dot product (iloczynu skalarnego) na wektorach wejściowych jako miary podobieństwa wektorów
- Iloczyn $\Phi(\mathbf{x}_i)\cdot\Phi(\mathbf{x}_j)$ może być odniesiony do podobieństwa wektorów $\mathbf{x}_i \cdot \mathbf{x}_j$ w transformowanej rozszerzonej przestrzeni
- Idea kerneli (funkcji jądrowych)
  - Proste funkcje *K* dwóch argumentów wektorowych pozwalają obliczyć wartość iloczynu skalarnego w rozszerzonej przestrzeni

Co to są funkcje jądrowe (Kernel function)

- Wywodzą się z badań liniowych przestrzeni wektorowych, przestrzeni Hilberta, Banacha
- Intuicyjnie są to stosunkowo proste symetryczne $K(\mathbf{x}_i,\mathbf{x}_j)$ zależne od odległości między $\mathbf{x}_i$ i $\mathbf{x}_j$ które spełniają pewne wymagania matem.

$$K(u) \geq 0, \int K(u)du = 1, \sigma_K^2 = \int uK(u)du > 0$$

Niech X oznacza niepusty zbiór wektorów danych.

- Funkcję $\psi: \ X \times X \mapsto R$ nazywamy dodatnio określonym kernelem (p.d. Mercel kernel), wtedy i tylko wtedy gdy

$$\sum_{i=1}^{n}\sum_{k=1}^{n} c_j c_k \psi(\mathrm{x}_j, \mathrm{x}_k) \geq 0$$

dla wszystkich $n \in N$, $\mathrm{x}_1, \ldots, \mathrm{x_n} \subseteq X$, oraz $c_1, \ldots, c_n \subseteq R$.

Wniosek z twierdzenia Mercera

• Twierdzenie. Niech $K(\mathbf{x}, \mathbf{y})$ oznacza funkcję symetryczną dwóch wektorów będącą kernelem, taką że $\forall \mathbf{x}, \mathbf{y} \in X$, $X \subseteq R$. Wtedy możemy określić przekształcenie $\phi : X \mapsto \mathcal{F}$, takie że

$$K(\mathbf{x}, \mathbf{y}) = \phi(\mathbf{x}) \cdot \phi(\mathbf{y}).$$

Przestrzeń $\mathcal{F}$, do której następuje mapowanie, jest nazywana przestrzenią zmiennych przekształconych (**Feature space**).

- Własność podstawą tzw. triku kernelowego (*kernel trick*) :
- „... map the data into some other scalar product space (feature space) *F* by means of a nonlinear mapping like the above, and perform the linear algorithm (like decision boundary for 2 classes) in the feature space *F*. In many cases the mapping Φ cannot be explicitly computed, due to the high-dimensionality of *F*. But this is not an obstacle, when the decision function requires the evaluation of scalar products Φ(x)$\cdot\Phi$(y), and not the pattern Φ(x) in explicit form.”[Camastra]
- „every dot product is replaced by a non-linear kernel function. „

Typowo stosowane jądra

Dopuszczalne typy jąder związane z SVM

Normalne (Gaussowskie)	$K(\mathbf{x}_i, \mathbf{x}_j) = \exp\{-\frac{(\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j)}{2\sigma^2}\}$
Wielomianowe	$K(\mathbf{x}_i, \mathbf{x}_j) = (\mathbf{x}_i \cdot \mathbf{x}_j + d)^p$
sigmoidalne	$K(\mathbf{x}_i, \mathbf{x}_j) = tgh(\kappa \mathbf{x}_i \cdot \mathbf{x}_j - \delta)$

Konstruujemy wektory zmiennych rozszerzonych za pomocą przekształcenia wielomianowego stopnia drugiego ($p1 = 2$):

$\Phi(\mathrm{x}) = (1, \sqrt{2}x_1, \sqrt{2}x_2, x_1^2, x_2^2, \sqrt{2}x_1x_2)$

$\Phi(\mathrm{y}) = (1, \sqrt{2}y_1, \sqrt{2}y_2, y_1^2, y_2^2, \sqrt{2}y_1y_2)$.

Wtedy okazuje się że iloczyn skalarny w przestrzeni zmiennych przekształconych można wyrazić jako funkcję iloczynu skalarnego zmiennych obserwowanych w R^d:

$(\Phi(\mathrm{x}) \cdot \Phi(\mathrm{y})) = (1 + \mathrm{x} \cdot \mathrm{y})^{\mathbf{2}}$.

SVM: the kernel trick

Przykład prostego przekształcenia wielomianowego

The kernel trick:

$$K(\mathbf{x}_i,\mathbf{x}_j) = (\mathbf{x}_i \bullet \mathbf{x}_j)^2 = \left(x_{i1}^2, \sqrt{2}x_{i1}x_{i2}, x_{i2}^2\right)\bullet\left(x_{j1}^2, \sqrt{2}x_{j1}x_{j2}, x_{j2}^2\right)$$

$$= \Phi(\mathbf{x}_i)\cdot\Phi(\mathbf{x}_j)$$

Original optimization function:

$$\sum_{i=1}^{N}\alpha_i - \frac{1}{2}\sum_{i=1}^{N}\sum_{j=1}^{N}\alpha_i\alpha_j y_i y_j K\left(\mathbf{x}_i\cdot\mathbf{x}_j\right)$$

Nie musimy znać funkcji Φ, wystarczy znać jądro (kernel) i można pracować w nowej przestrzeni.

Funkcja decyzyjna

- Wykorzystanie funkcji jądrowych

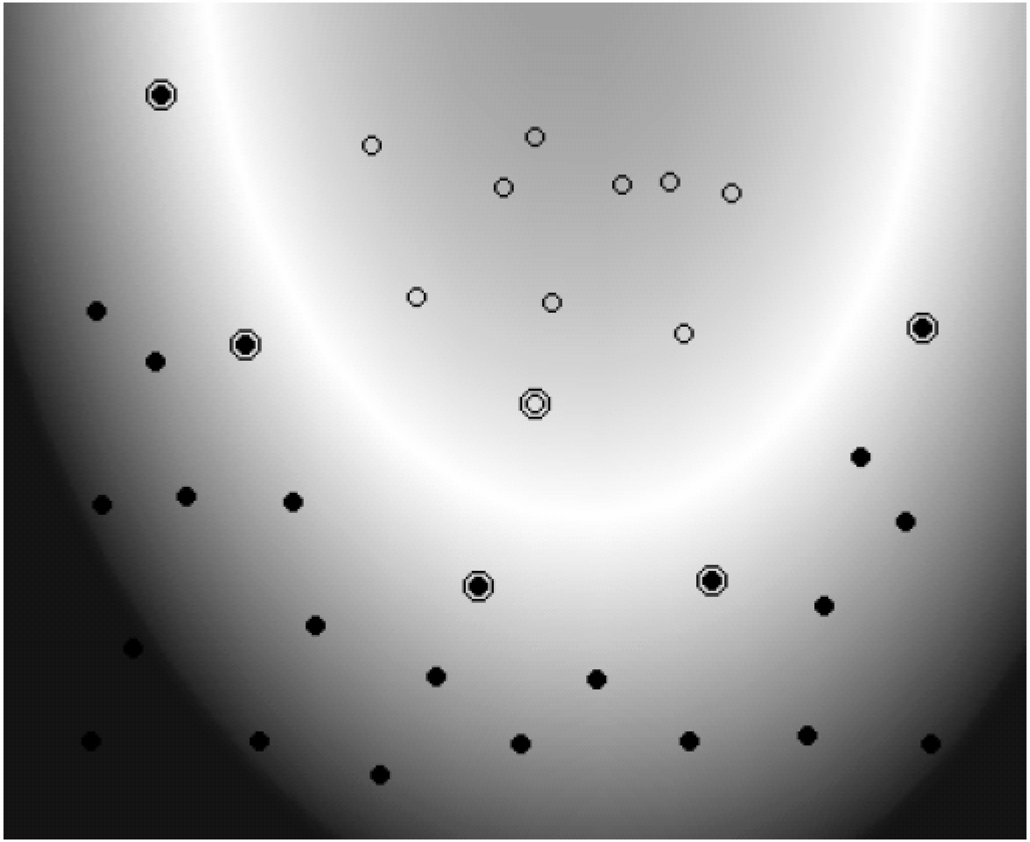
$$f(\mathbf{x}) = \quad sign\left(\sum_{i=1}^{N} \alpha_i y_i \Phi(\mathbf{x}_i)\Phi(\mathbf{x}) + b\right)$$
$$sign\left(\sum_{i=1}^{N} \alpha_i y_i K(\mathbf{x}_i, \mathbf{x}) + b\right)$$

- Model klasyfikacji binarnej rozszerza się na zagadnienie wieloklasowe K > 2
  - Specyficzne konstrukcje złożone:
    - one-versus-all
    - Pairwise classification (Hastie,…)

Example: SVM with Polynomial of Degree 2

Kernel: $K(\vec{x}_i, \vec{x}_j) = [\vec{x}_i \cdot \vec{x}_j + 1]^2$

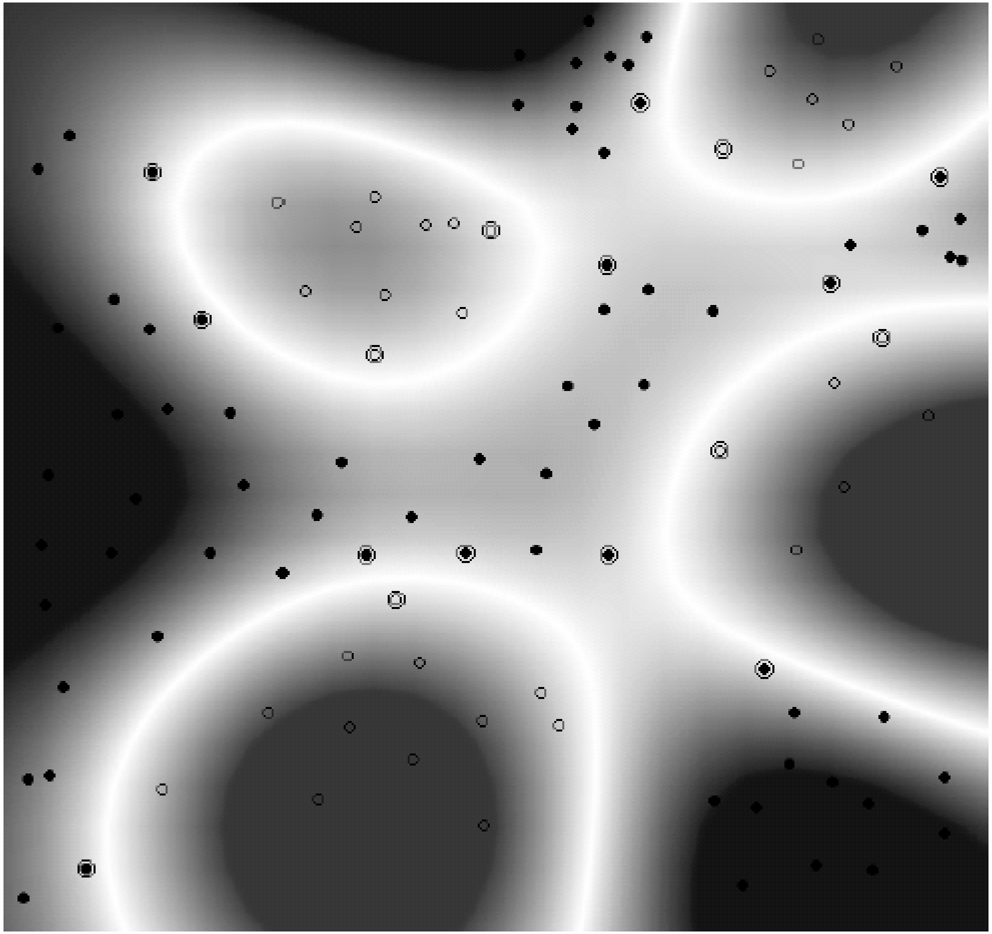
plot by Bell SVM applet



Example: SVM with RBF-Kernel

Kernel: $K(\vec{x}_i, \vec{x}_j) = \exp(-|\vec{x}_i - \vec{x}_j|^2 / \sigma^2)$

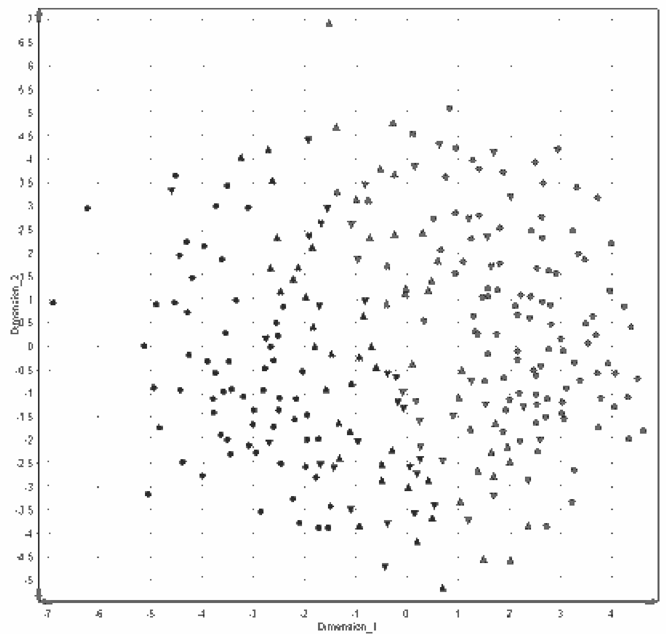
plot by Bell SVM applet

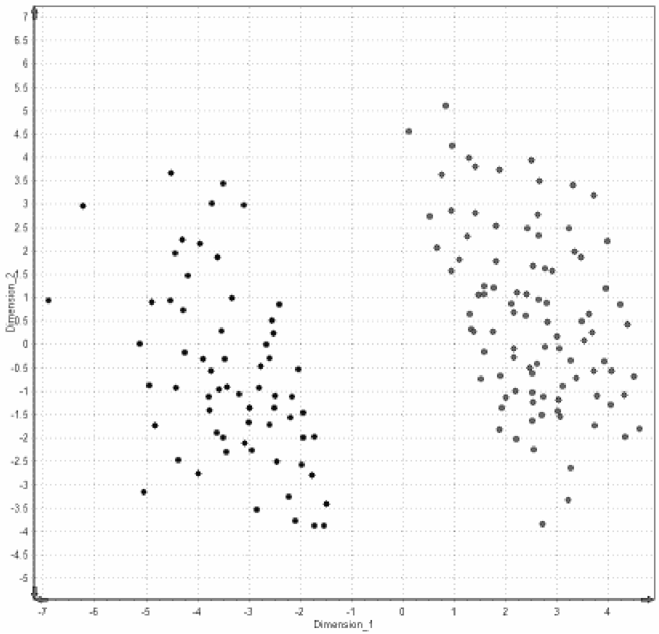


Example 2: Cleveland heart data

Left: 2D MDS features, linear SVM, C=1, acc. 81.9%

Right: support vectors removed, margin is clear.





Gaussian kernel, C=10000, 10xCV, 100% train, 79.3 ± 7.8 test
Gaussian kernel, C=1, 10xCV, 93.8% train, 82.6 ± 8.0 test
Auto C=32 and Gaussian dispersion 0.004: about 84.4 ± 5.1 on test

Przykładowe zastosowania

Można się zapoznać z listą:

http://www.clopinet.com/isabelle/Projects/SVM/applist.html

A few interesting applications, with highly competitive results:

- On-line Handwriting Recognition, zip codes
- 3D object recognition
- Stock forecasting
- Intrusion Detection Systems (IDSs)
- Image classification
- Detecting Steganography in digital images
- Medical applications: diagnostics, survival rates ...
- Technical: Combustion Engine Knock Detection
- Elementary Particle Identification in High Energy Physics
- Bioinformatics: protein properties, genomics, microarrays
- Information retrieval, text categorization

Trochę historii

- Wczesne lata sześćdziesiąte – została opracowana metoda “support vectors” w celu konstruowania hiperpłaszczyzn do rozpoznawania obrazu (Vapnik i Lerner 1963, Vapnik i Czervonenkis 1964) – liniowa SVM.
- Początek lat 1990-siątych: uogólnienie metody pozwalające na konstruowanie nieliniowych funkcji separujących (Boser 1992, Cortes i Vapnik 1995).
- 1995: dalsze rozszerzenie pozwalające otrzymać estymację funkcji ciągłej na wyjściu – regresja (Vapnik 1995).

Kilka zagadn. efektywnego stosowania SVM

- Normalizuj sygnały wejściowe
- Dobrze wybierz wartość C
- Wybór funkcji jądrowej
- Uogólnienia dla problemów wieloklasowych
- … co jeszcze?
- Na ile są skuteczne SVM w analizie danych niezrównoważonych

Parę uwag podsumowujących

- Dane odwzorowane (przy pomocy funkcji jądrowych) w nową przestrzeń cech – silna przewaga nad innymi metodami
- W nowej przestrzeni dane powinny być liniowo separowalne
- W porównaniu do innych podejść wielowymiarowość przekształcenia jest „rozwiązana” przez trick kernelowy
- Pośrednio ogranicza się niebezpieczeństwo przeuczenia
- Teoretycznie poszukują minimum globalnego a nie lokalnego (jak podejścia heurystyczne – MLP)
- Ograniczenia
    - Dobór parametrów
    - Skrajne podejście „black box”

Mocne strony SVM

Stopień skomplikowania/pojemność jest niezależna od liczby wymiarów.

Bardzo dobra podbudowa statystyczno-teoretyczna

Znajdowanie minimum glonalnego. Minimalizujemy funkcję kwadratową co gwarantuje zawsze znalezienie minimum. Algorytm jest wydajny i SVM generuje prawie optymalny klasyfikator. Nie jest tez czuły na przetrenowanie.

Dobre uogólnianie dzięki wielowymiarowej “feature space”.

Najważniejsze: poprzez użycie odpowiedniej funkcji jądra SVM bardzo duża skuteczność w praktyce

Jianfeng Feng, Sussex University

Słabe strony SVM

Powolny trening – minimalizacja funkcji, szczególnie dokuczliwy przy dużej ilości danych użytych do treningu.

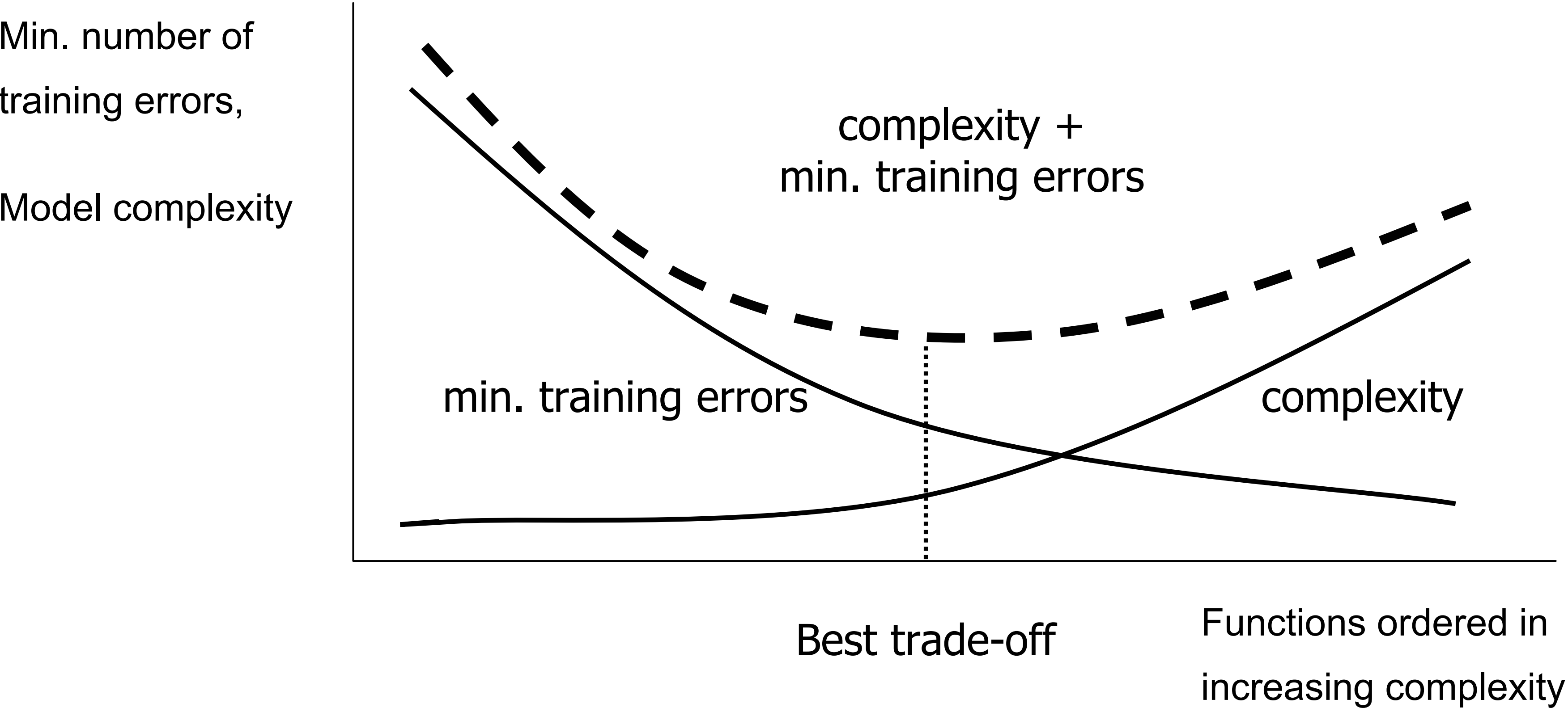
Rozwiązania też są skomplikowane (normalnie >60% wektorów użytych do nauki staje się wektorami wspierającymi), szczególnie dla dużych ilości danych.

> *Przykład (Haykin): poprawa o 1.5% ponad wynik osiągnięty przez MLP. Ale MLP używał 2 ukrytych węzłów, a SVM 285 wektorów.*

Trudno dodać własną wiedzę (prior knowledge)

Jianfeng Feng, Sussex University

Przetarg między złożonością modelu a minimalizacją błędów



Odnośniki literaturowe

- T.Hastie, R.Tibshirani, J.Friedman: The Elements of Statistical Learning. Springer → poszukaj wersji elektronicznej pdf
- J.Koronacki, J.Ćwik: Statystyczne systemy uczące się (rozdz. 6)
- M.Krzyśko, W.Wołyński, T.Górecki,M.Skorzybut: Systemy uczące się.
- S.Osowski: Sieci neuronowe w przetwarzaniu informacji.

Inne materiały - internet

- A.Bartkowiak: Wykłady nt. Sieci Neuronowych: w11 Kernele, siecie SVM i sieci GDA.
  - http://www.ii.uni.wroc.pl/~aba/
- W.Duch: wyklady nt. Computational Intelligence
  - http://www.fizyka.umk.pl/~duch/Wyklady/NN_plan.html
- Angielska wersja Wikipedii
- Thorsten Joachims: Support Vector and Kernel Methods - SIGIR 2003 Tutorial

SVM Related Links

- SVM Website
  - http://www.kernel-machines.org/
- Representative implementations
  - **LIBSVM**: an efficient implementation of SVM, multi-class classifications, nu-SVM, one-class SVM, including also various interfaces with java, python, etc.
  - SVM-light: simpler but performance is not better than LIBSVM, support only binary classification and only C language
  - SVM-torch: another recent implementation also written in C.

Inne odnośniki do literatury anglojęzycznej

- "Statistical Learning Theory" by Vapnik: extremely hard to understand, containing many errors too.
- C. J. C. Burges. A Tutorial on Support Vector Machines for Pattern Recognition. *Knowledge Discovery and Data Mining*, 2(2), 1998.
  - Better than the Vapnik's book, but still written too hard for introduction, and the examples are so not-intuitive
- The book "An Introduction to Support Vector Machines" by N. Cristianini and J. Shawe-Taylor
  - Also written hard for introduction, but the explanation about the mercer's theorem is better than above literatures
- The neural network book by Haykins
  - Contains one nice chapter of SVM introduction