

# Neuronale Netze

Prof. Dr. Rudolf Kruse

Computational Intelligence  
Institut für Intelligente Kooperierende Systeme  
Fakultät für Informatik  
[rudolf.kruse@ovgu.de](mailto:rudolf.kruse@ovgu.de)



# Überwachtes Lernen / Support Vector Machines

# Überwachtes Lernen, Diagnosesystem für Krankheiten

**Trainingsdaten:** Expressionsprofile von Patienten mit bekannter Diagnose

Durch die bekannte Diagnose ist eine Struktur in den Daten vorgegeben, die wir auf zukünftige Daten verallgemeinern wollen.

**Lernen/Trainieren:** Leite aus den Trainingsdaten eine Entscheidungsregel ab, die die beiden Klassen voneinander trennt.

**Generalisierungsfähigkeit:** wie gut ist die Entscheidungsregel darin, zukünftige Patienten zu diagnostizieren?

**Ziel: finde eine Entscheidungsregel mit hoher Generalisierungsfähigkeit!**

# Lernen von Beispielen

**Gegeben:**  $X = \{x_i, y_i\}_{i=1}^n$ , Trainingsdaten von Patienten mit bekannter Diagnose

**bestehend aus:**

$x_i \in \mathbb{R}^g$  (Punkte, Expressionsprofile)

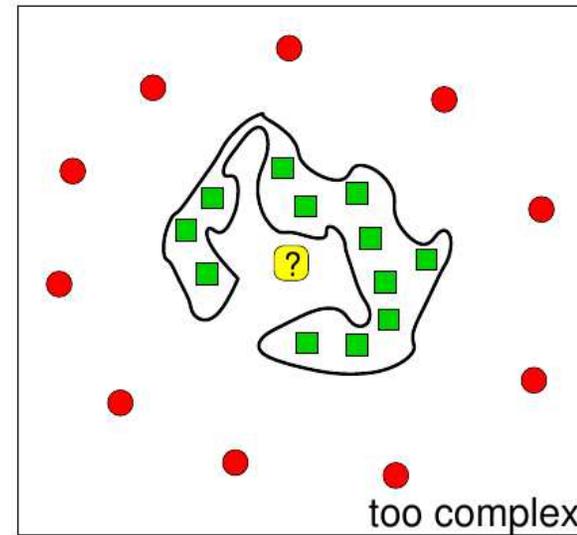
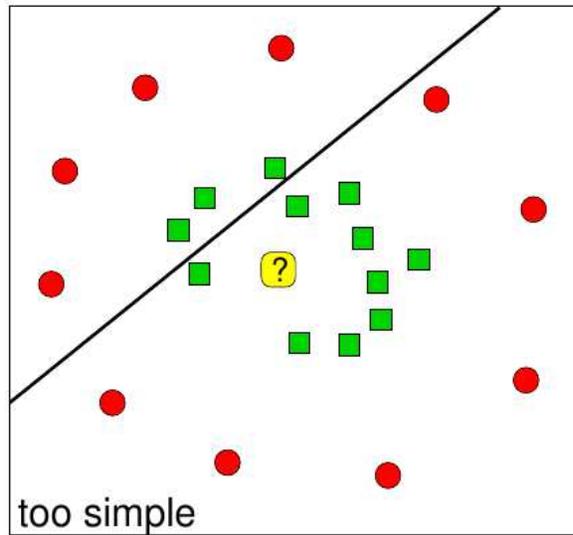
$y_i \in \{+1, -1\}$  (Klassen, 2 Arten von Krebs)

**Entscheidungsfunktion:**

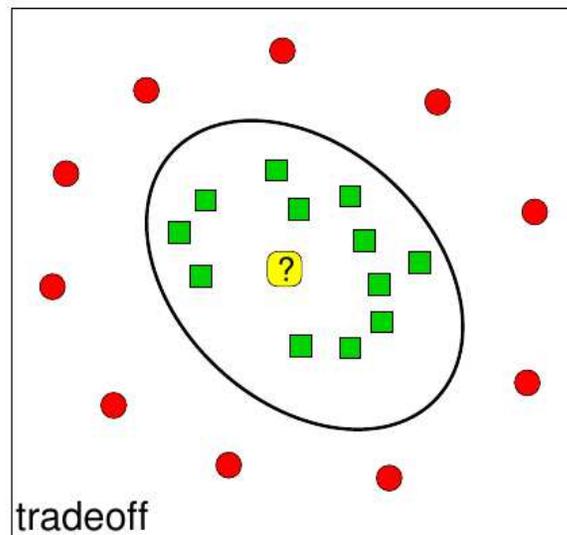
$$f_X : \mathbb{R}^g \rightarrow \{+1, -1\}$$

$$\text{Diagnose} = f_X(\text{neuer Patient})$$

# Underfitting / Overfitting



- negative example
- positive example
- Ⓜ new patient



# Lineare Trennung der Trainingsdaten

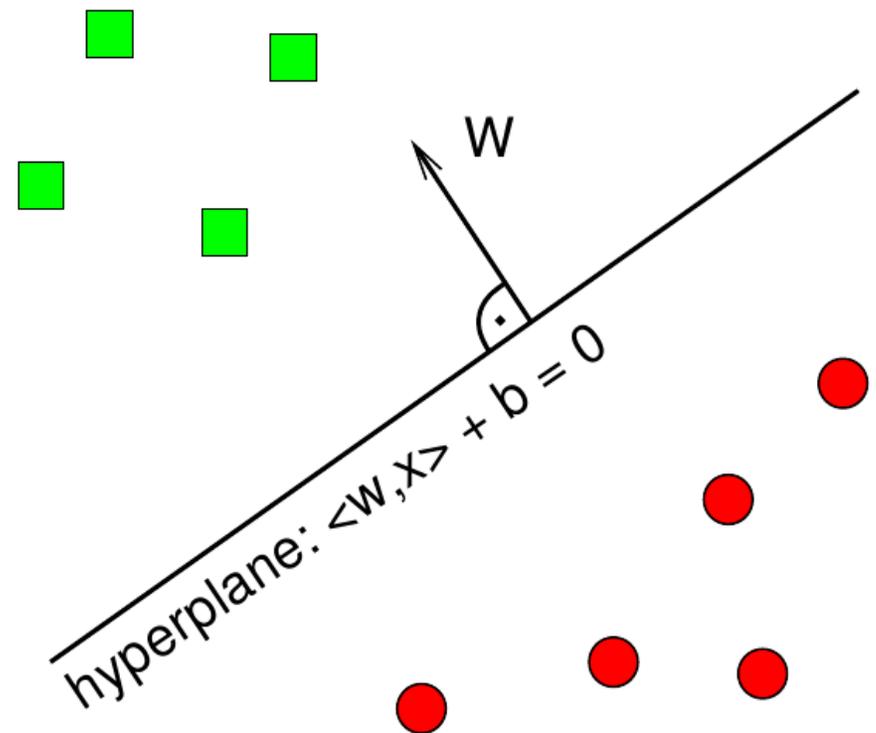
**Wir fangen mit linearer Trennung an und vergrößern die Komplexität in einem zweiten Schritt durch Kernel-Funktionen.**

Eine trennende Hyperebene ist definiert durch

den Normalenvektor  $w$  und  
die Verschiebung  $b$ :

$$\text{Hyperebene } \mathcal{H} = \{x \mid \langle w, x \rangle + b = 0\}$$

$\langle \cdot, \cdot \rangle$  nennt man inneres Produkt  
oder Skalarprodukt



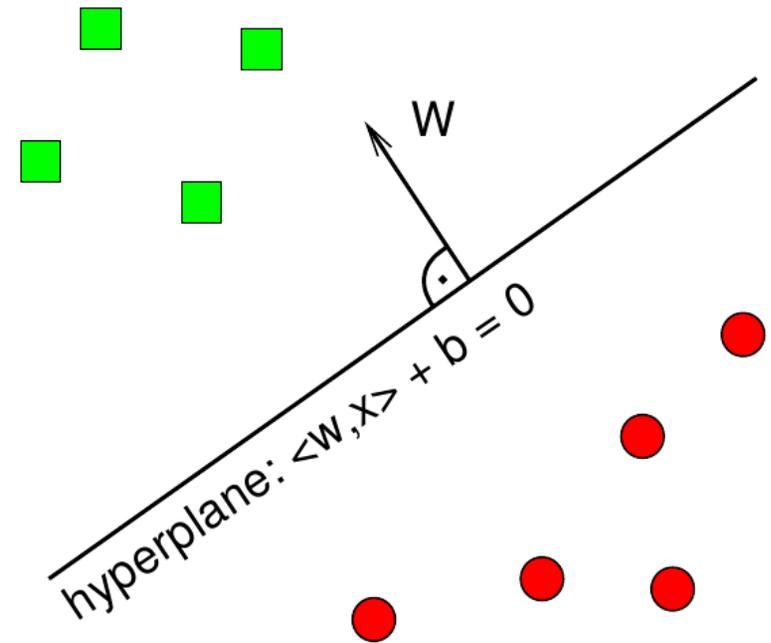
# Vorhersage der Klasse eines neuen Punktes

**Training:** Wähle  $w$  und  $b$  so, daß die Hyperebene die Trainingsdaten trennt.

**Vorhersage:** Auf welcher Seite der Hyperebene liegt der neue Punkt?

Punkte in Richtung des Normalenvektors diagnostizieren wir als **POSITIV**.

Punkte auf der anderen Seite diagnostizieren wir als **NEGATIV**.



# Motivation

Ursprung in statistischer Lerntheorie; Klasse optimaler Klassifikatoren

Zentrales Problem der statistischen Lerntheorie: Generalisierungsfähigkeit: Wann führt ein niedriger Trainingsfehler zu einem niedrigen echten Fehler?

**Zweiklassenproblem:**

Klassifikationsvorgang  $\equiv$  Zuordnungsfunktion  $f(x, u) : x \rightarrow y \in \{+1, -1\}$

$x$ : Muster aus einer der beiden Klassen

$u$ : Parametervektor des Klassifikators

Lernstichprobe mit  $l$  Beobachtungen  $x_1, x_2, \dots, x_l$

mit entsprechender Klassenzugehörigkeit  $y_1, y_2, \dots, y_l$

→ das **empirische Risiko** (Fehlerrate) für gegebenen Trainingsdatensatz:

$$R_{emp}(u) = \frac{1}{2l} \sum_{i=1}^l |y_i - f(x_i, u)| \in [0, 1]$$

Viele Klassifikatoren, z.B. neuronale Netze, minimieren das empirische Risiko

# Motivation

Erwartungswert des Zuordnungsfehlers (expected risk):

$$R(u) = E\{R_{test}(u)\} = E\left\{\frac{1}{2}|y - f(x, u)|\right\} = \int \frac{1}{2}|y - f(x, u)|p(x, y) dx dy$$

$p(x, y)$ : Verteilungsdichte aller möglichen Samples  $x$  mit entsprechender Klassenzugehörigkeit  $y$  (Dieser Ausdruck nicht direkt auswertbar, da  $p(x, y)$  nicht zur Verfügung steht)

Optimale Musterklassifikation:

Deterministische Zuordnungsfunktion  $f(x, u) : x \rightarrow y \in \{+1, -1\}$  gesucht, so dass das Expected Risk minimiert wird

Zentrale Frage der Musterklassifikation:

Wie nah ist man nach  $l$  Trainingsbeispielen am *echten* Fehler? Wie gut kann aus dem empirischen Risiko  $R_{emp}(u)$  das echte Risiko  $R(u)$  abgeschätzt werden? (Structural Risk Minimization statt Empirical Risk Minimization)

Antwort durch Lerntheorie von Vapnik-Chervonenkis  $\rightarrow$  SVM

# SVM für linear trennbare Klassen

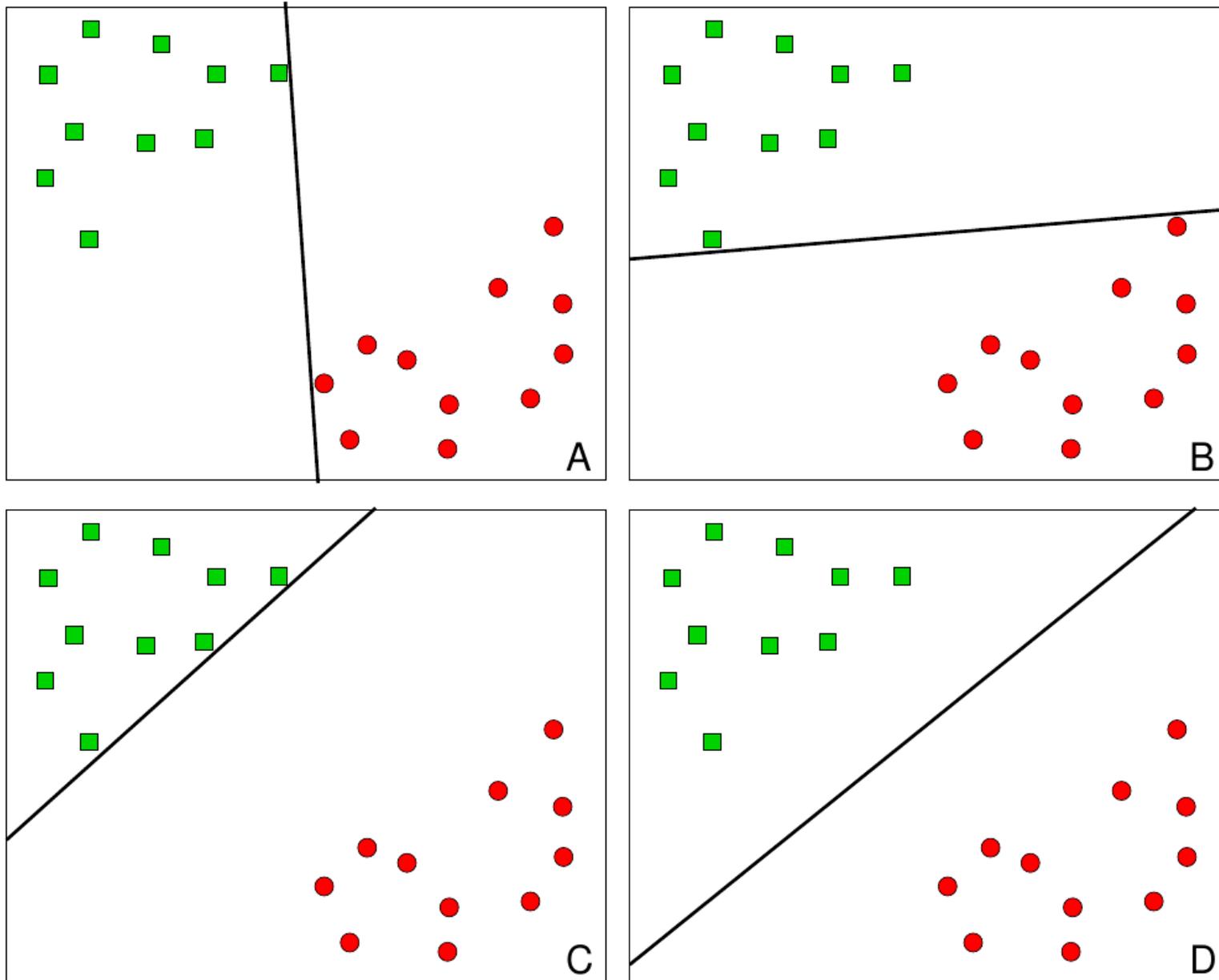
Bisherige Lösung:

Allgemeine Hyperebene:  $wx + b = 0$

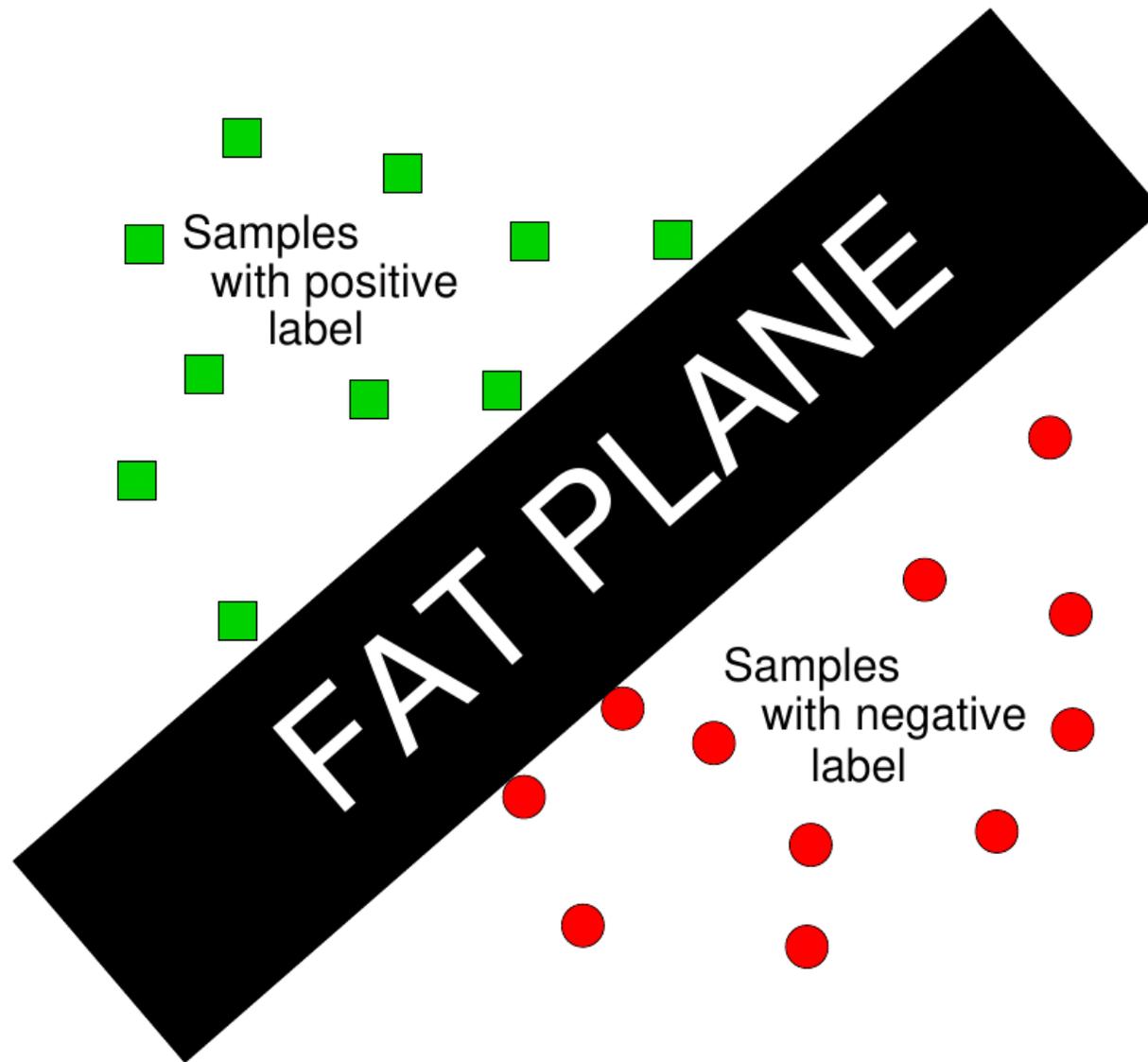
Klassifikation:  $\text{sgn}(wx + b)$

Training z.B. mittels Perzeptron-Algorithmus (iteratives Lernen, Korrektur nach jeder Fehlklassifikation; keine Eindeutigkeit der Lösung)

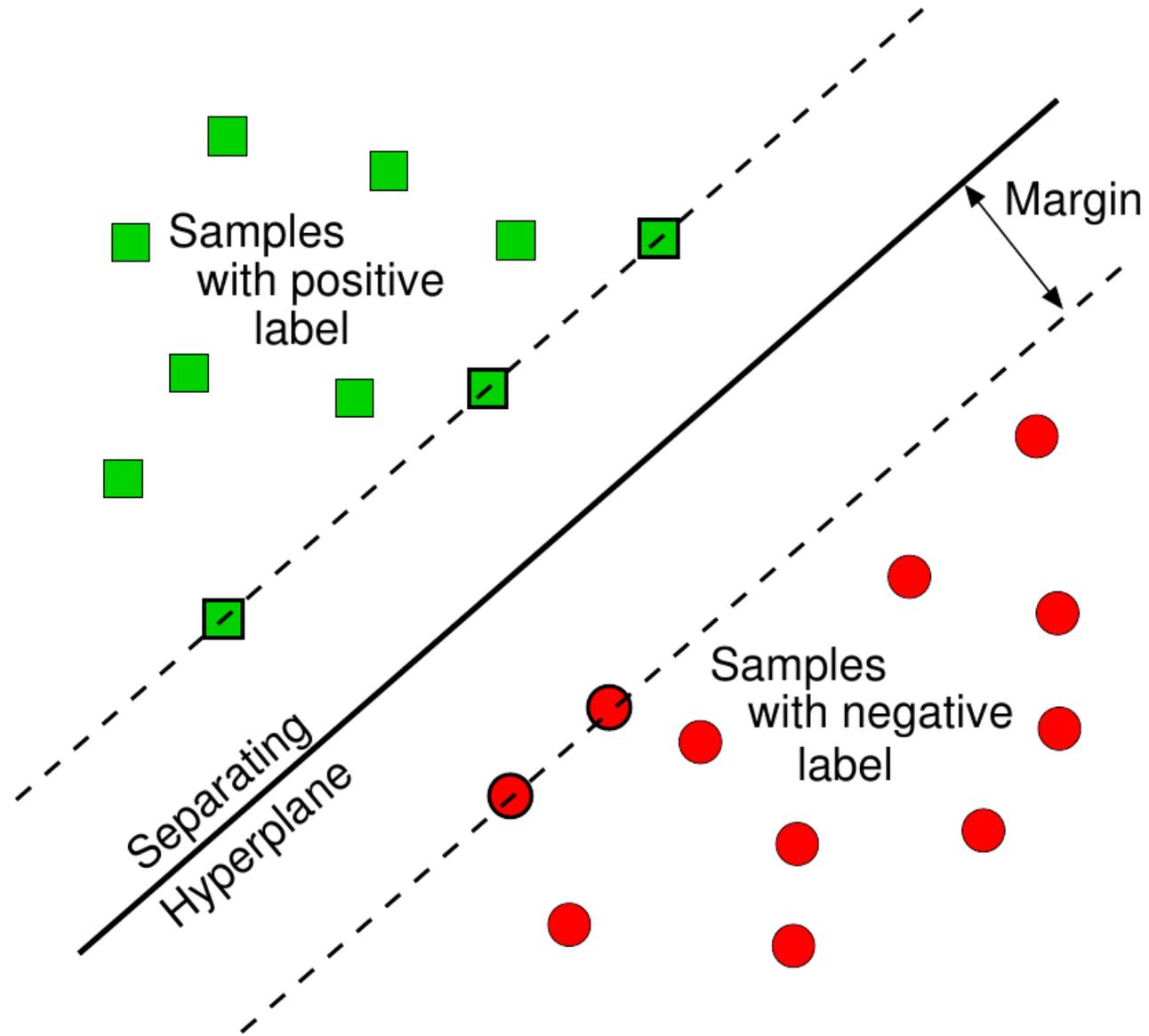
# Welche Hyperebene ist die beste? Und warum?



Keine scharfe Trennung, sondern eine ...

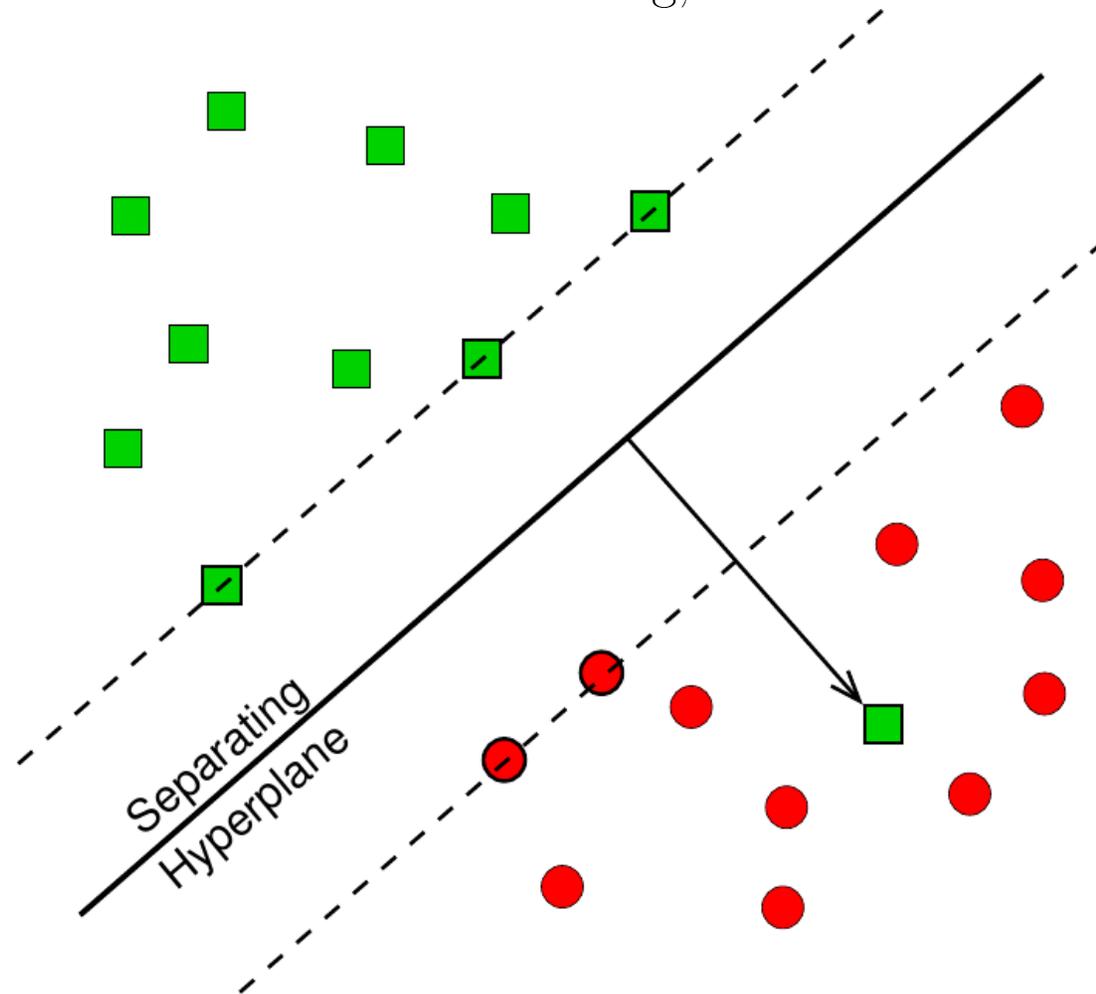


# Trenne die Trainingsdaten mit maximaler Trennschance



# Trenne die Trainingsdaten mit maximaler Trennspanne

Versuche eine lineare Trennung, aber lasse Fehler zu:



**Strafe für Fehler:** Abstand zur Hyperebene multipliziert mit Fehlergewicht  $C$

# SVM für linear trennbare Klassen

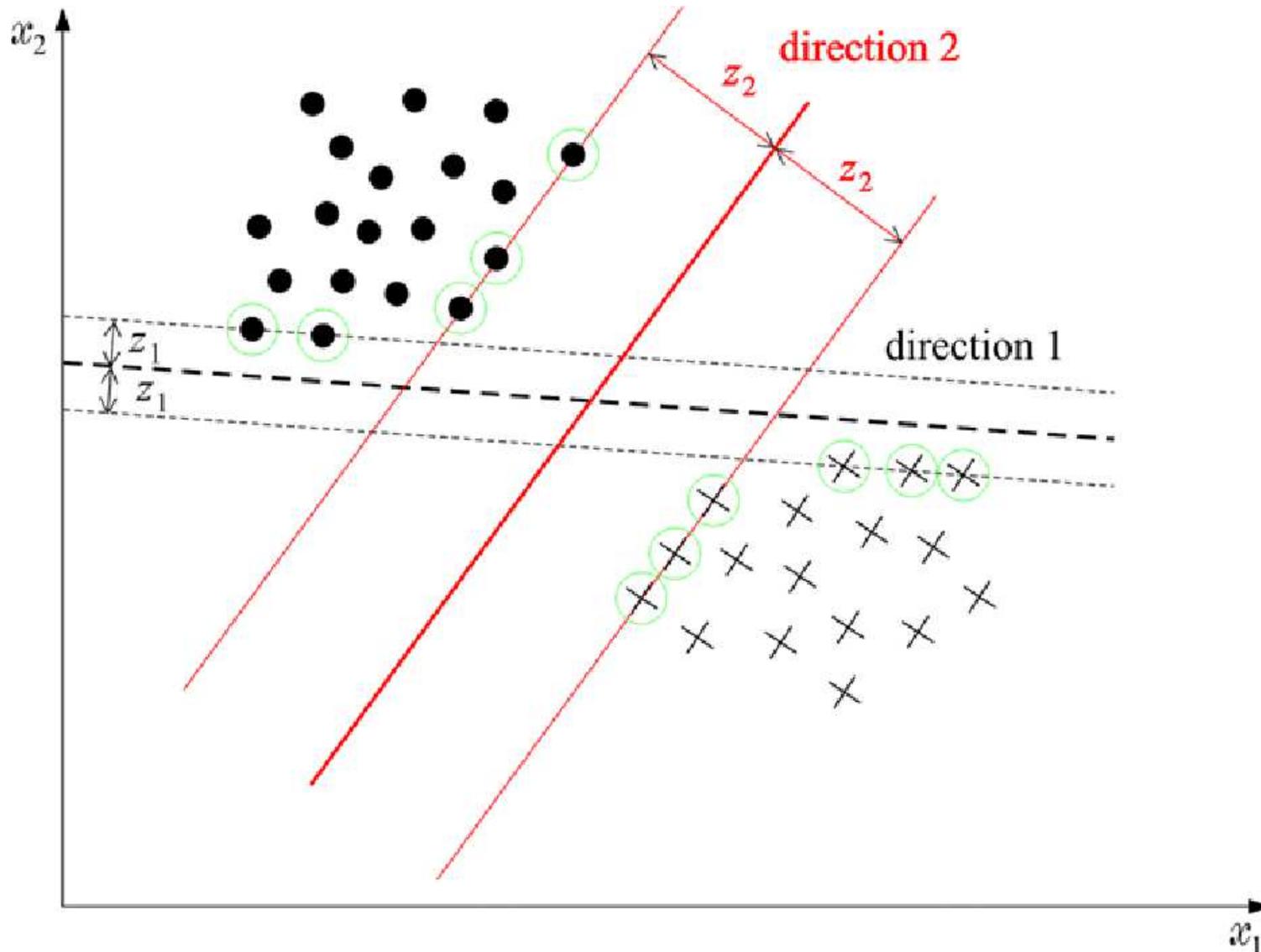
Bei SVM wird eine trennende Hyperebene mit maximalem Rand gesucht. *Optimal*: diejenige mit größtem  $2\delta$  von allen möglichen Trennebenen.

Anschaulich sinnvoll (Bei konstanter Intraklassenstreuung wächst Klassifikations-sicherheit mit wachsendem Interklassenabstand)

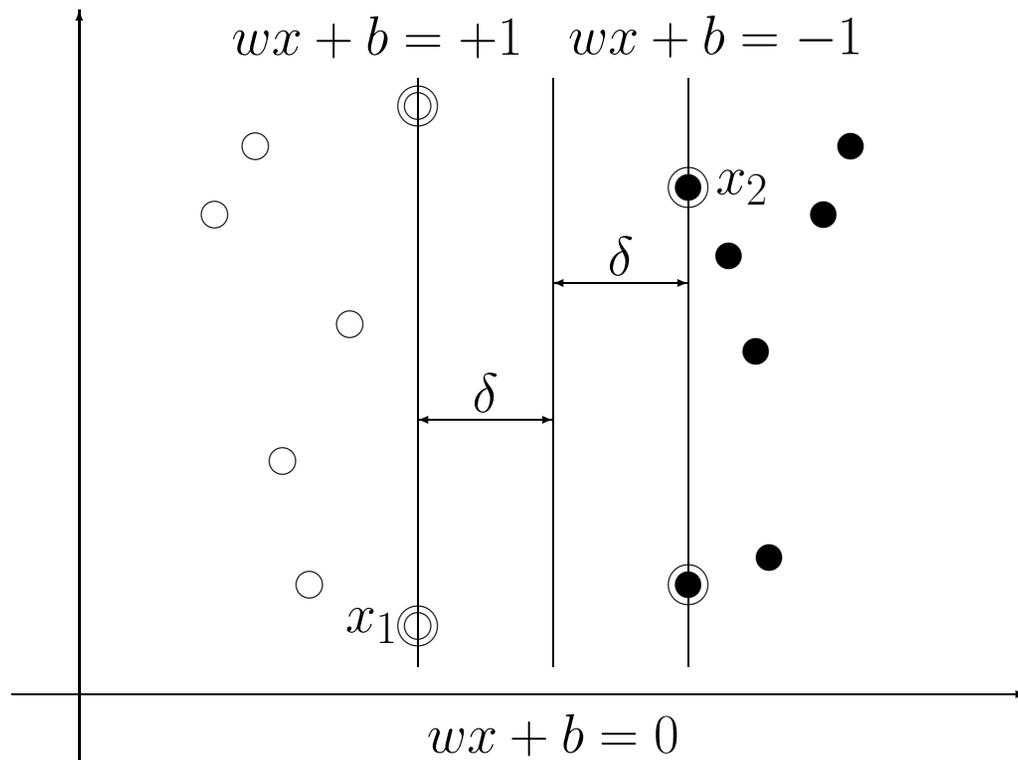
Theoretisch sind SVM durch statistische Lerntheorie begründet

# SVM für linear trennbare Klassen

Large-Margin Klassifikator: Trennlinie 2 besser als Trennlinie 1



# SVM für linear trennbare Klassen



## Problem:

Die optimale Hyperebene

$\mathcal{H} = \{x | \langle w, x \rangle + b = 0\}$   
ist nicht eindeutig.

Für  $c \neq 0$  :  $\{x | \langle w, x \rangle + b = 0\} = \{x | \langle cw, x \rangle + cb = 0\}$

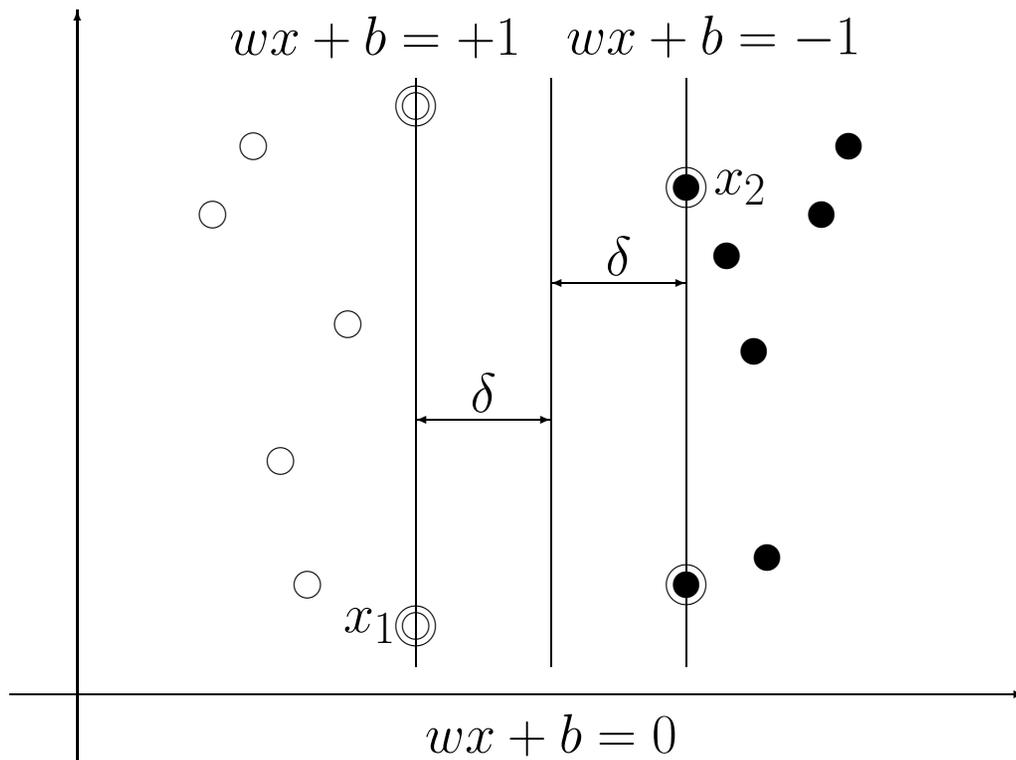
Also:  $(cw, cb)$  beschreibt die gleiche Hyperebene wie  $(w, b)$ .

Deshalb: Skalieren  $(w, b)$  relativ zu den Trainingsdaten  $X = \{x_i, y_i\}_{i=1}^n$ , so dass

$$\min_{x_i \in X} |\langle w, x_i \rangle + b| = 1$$

Diese Hyperebene ist die **kanonische Hyperebene**

# SVM für linear trennbare Klassen



Trainingsdaten werden dann korrekt klassifiziert, falls:

$$y_i(wx_i + b) \geq 1$$

wobei:

$$\begin{cases} wx_i + b = +1; & \text{(Klasse mit } y_i = +1) \\ wx_i + b = -1; & \text{(Klasse mit } y_i = -1) \end{cases}$$

Der Abstand zwischen den kanonischen Hyperebenen ergibt sich durch Projektion von  $x_1 - x_2$  auf den Einheitsnormalenvektor  $\frac{w}{\|w\|}$ :

$$2\delta = \frac{2}{\|w\|}; \quad \text{d.h. } \delta = \frac{1}{\|w\|}$$

→ Maximierung von  $\delta \equiv$  Minimierung von  $\|w\|^2$

# SVM für linear trennbare Klassen

Optimale Trennebene durch Minimierung einer quadratischen Funktion unter linearen Nebenbedingungen:

**Primales Optimierungsproblem:**

$$\text{minimiere: } J(w, b) = \frac{1}{2} \|w\|^2$$

$$\text{unter Nebenbedingungen } \forall i [y_i(w x_i + b) \geq 1], \quad i = 1, 2, \dots, l$$

Einführung einer Lagrange-Funktion:

$$L(w, b, \alpha) = \frac{1}{2} \|w\|^2 - \sum_{i=1}^l \alpha_i [y_i(w x_i + b) - 1]; \quad \alpha_i \geq 0$$

führt zum *dualen Problem*: maximiere  $L(w, b, \alpha)$  bezüglich  $\alpha$ , unter den Nebenbedingungen:

$$\frac{\partial L(w, b, \alpha)}{\partial w} = 0 \quad \Longrightarrow \quad w = \sum_{i=1}^l \alpha_i y_i x_i$$

$$\frac{\partial L(w, b, \alpha)}{\partial b} = 0 \quad \Longrightarrow \quad \sum_{i=1}^l \alpha_i y_i = 0$$

# SVM für linear trennbare Klassen

Einsetzen dieser Terme in  $L(w, b, \alpha)$ :

$$\begin{aligned}L(w, b, \alpha) &= \frac{1}{2} \|w\|^2 - \sum_{i=1}^l \alpha_i [y_i (w x_i + b) - 1] \\&= \frac{1}{2} w \cdot w - w \cdot \sum_{i=1}^l \alpha_i y_i x_i - b \cdot \sum_{i=1}^l \alpha_i y_i + \sum_{i=1}^l \alpha_i \\&= \frac{1}{2} w \cdot w - w \cdot w + \sum_{i=1}^l \alpha_i \\&= -\frac{1}{2} w \cdot w + \sum_{i=1}^l \alpha_i \\&= -\frac{1}{2} \sum_{i=1}^l \sum_{j=1}^l y_i y_j \alpha_i \alpha_j x_i x_j + \sum_{i=1}^l \alpha_i\end{aligned}$$

# SVM für linear trennbare Klassen

Duales Optimierungsproblem:

$$\text{maximiere: } L'(\alpha) = \sum_{i=1}^l \alpha_i - \frac{1}{2} \sum_{i=1}^l \sum_{j=1}^l y_i y_j \alpha_i \alpha_j x_i x_j$$

$$\text{unter Nebenbedingungen } \alpha_i \geq 0 \text{ und } \sum_{i=1}^l y_i \alpha_i = 0$$

Dieses Optimierungsproblem kann mithilfe der konvexen quadratischen Programmierung numerisch gelöst werden

# SVM für linear trennbare Klassen

Lösung des Optimierungsproblems:

$$w^* = \sum_{i=1}^l \alpha_i y_i x_i = \sum_{x_i \in SV} \alpha_i y_i x_i$$

$$b^* = -\frac{1}{2} \cdot w^* \cdot (x_p + x_m)$$

für beliebiges  $x_p \in SV$ ,  $y_p = +1$ , und  $x_m \in SV$ ,  $y_m = -1$

wobei

$$SV = \{x_i \mid \alpha_i > 0, i = 1, 2, \dots, l\}$$

die Menge aller Support-Vektoren darstellt

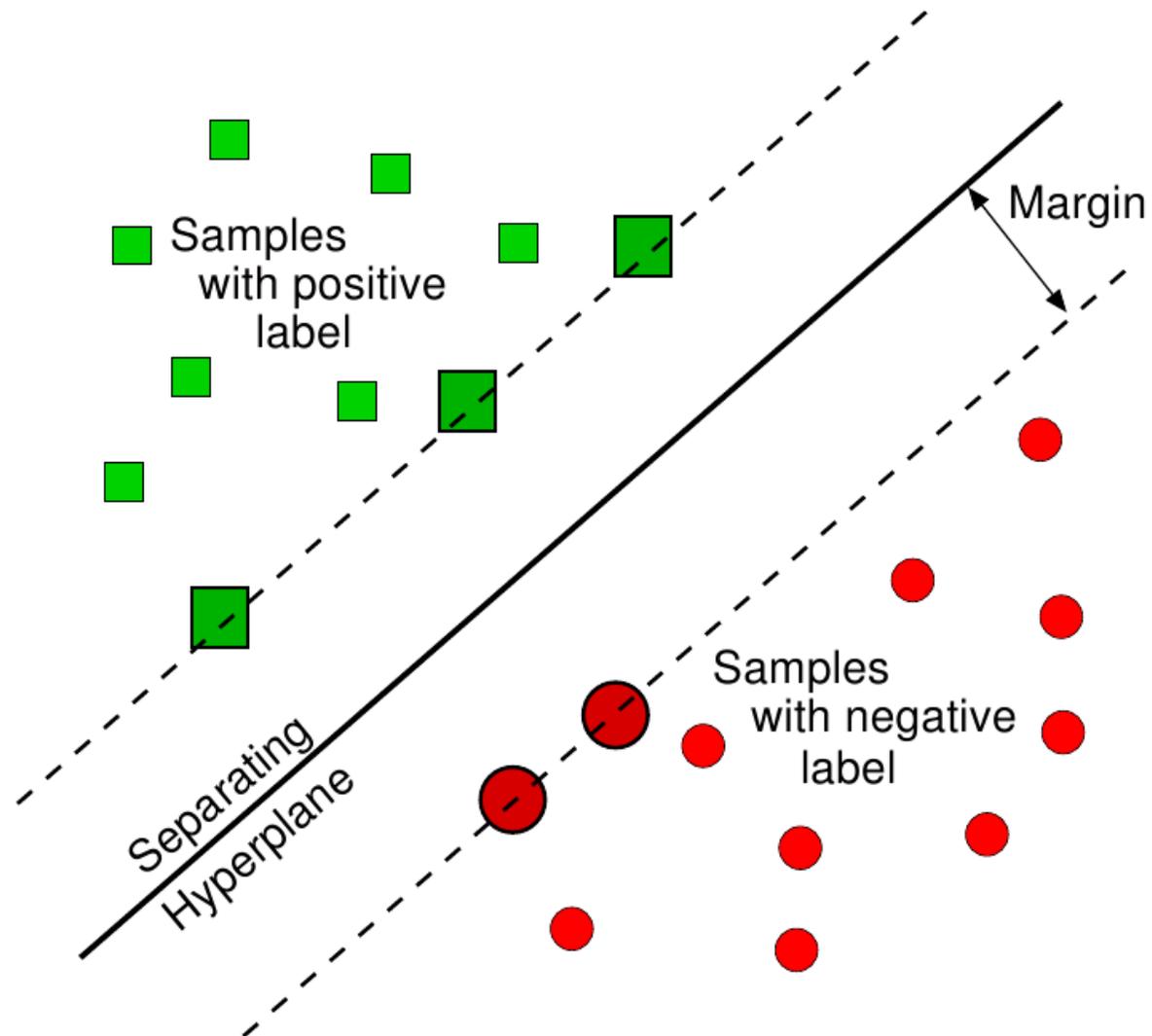
Klassifikationsregel:

$$\text{sgn}(w^* x + b^*) = \text{sgn}\left[\left(\sum_{x_i \in SV} \alpha_i y_i x_i\right)x + b^*\right]$$

Die Klassifikation hängt nur von den Support-Vektoren ab!

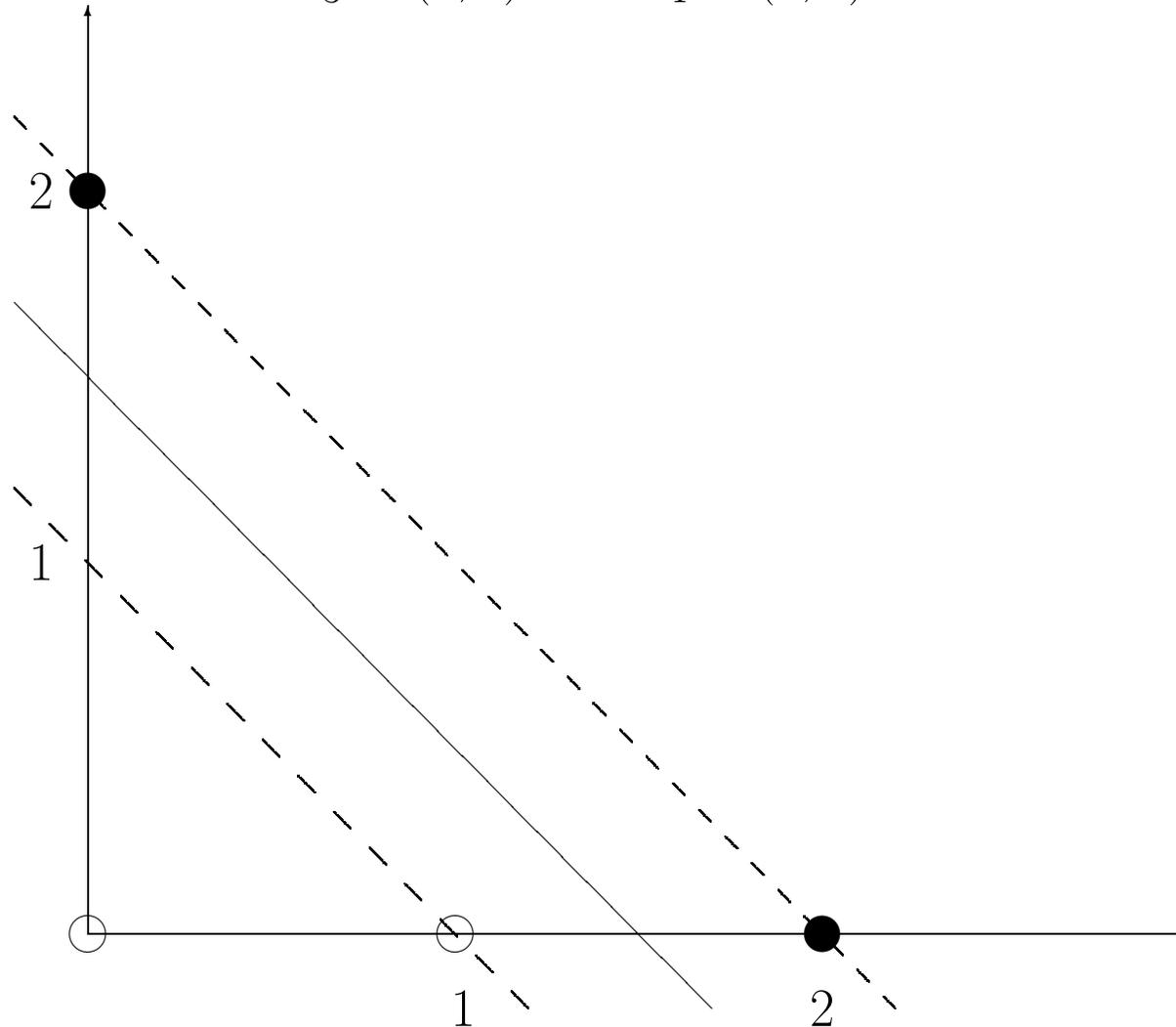
# SVM für linear trennbare Klassen

Beispiel: Support-Vektoren



# SVM für linear trennbare Klassen

Beispiel: Klasse +1 enthält  $x_1 = (0, 0)$  und  $x_2 = (1, 0)$ ;  
Klasse -1 enthält  $x_3 = (2, 0)$  und  $x_4 = (0, 2)$



# SVM für linear trennbare Klassen

Das duale Optimierungsproblem lautet:

$$\begin{aligned} \text{maximiere: } L'(\alpha) &= (\alpha_1 + \alpha_2 + \alpha_3 + \alpha_4) - \frac{1}{2}(\alpha_2^2 - 4\alpha_2\alpha_3 + 4\alpha_3^2 + 4\alpha_4^2) \\ \text{unter Nebenbedingungen } \alpha_i &\geq 0 \text{ und } \alpha_1 + \alpha_2 - \alpha_3 - \alpha_4 = 0 \end{aligned}$$

Lösung:

$$\alpha_1 = 0, \quad \alpha_2 = 1, \quad \alpha_3 = \frac{3}{4}, \quad \alpha_4 = \frac{1}{4}$$

$$SV = \{(1, 0), (2, 0), (0, 2)\}$$

$$w^* = 1 \cdot (1, 0) - \frac{3}{4} \cdot (2, 0) - \frac{1}{4} \cdot (0, 2) = \left(-\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}\right)$$

$$b^* = -\frac{1}{2} \cdot \left(-\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}\right) \cdot ((1, 0) + (2, 0)) = \frac{3}{4}$$

Optimale Trennlinie:  $x + y = \frac{3}{2}$

# SVM für linear trennbare Klassen

Beobachtungen:

Für die Support-Vektoren gilt:  $\alpha_i > 0$

Für alle Trainingsdaten außerhalb des Randes gilt:  $\alpha_i = 0$

Support-Vektoren bilden eine “sparse” Darstellung der Stichprobe und sind ausreichend für die Klassifikation

Die Lösung entspricht dem globalen Optimum und ist eindeutig

Der Optimierungsvorgang benötigt nur Skalarprodukte  $x_i x_j$

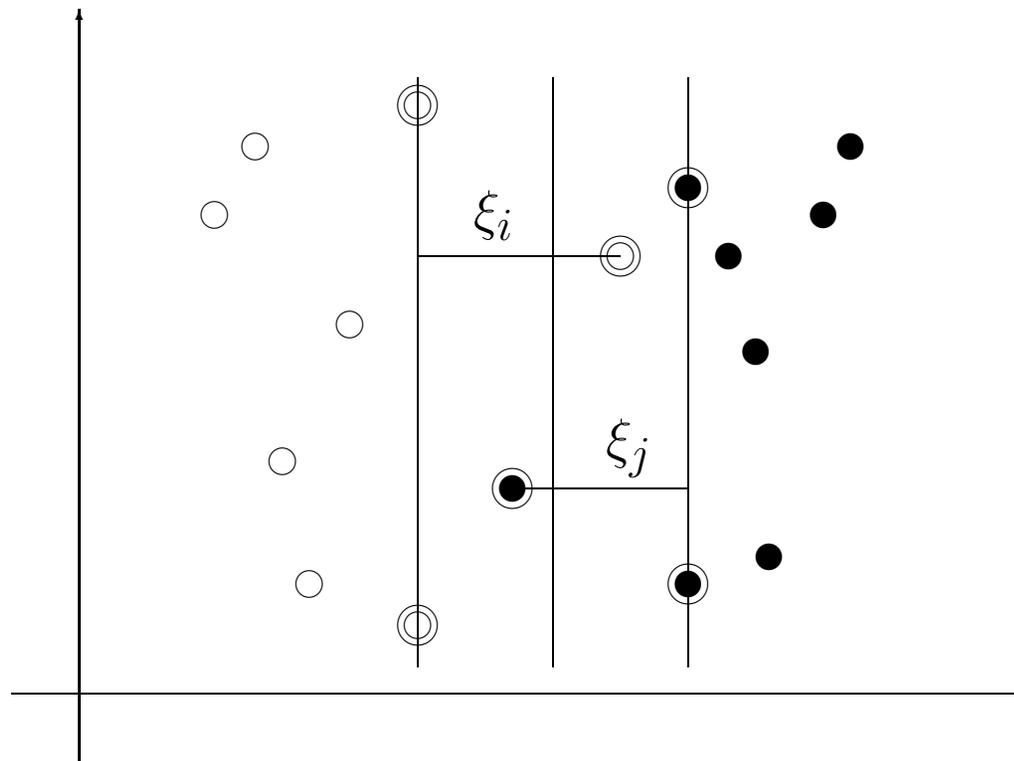
# SVM für nicht linear separierbare Klassen

Motivation für Verallgemeinerung:

Keine Lösung mit bisherigem Ansatz für nicht trennbare Klassen

Verbesserung der Generalisierung bei Ausreißern in der Randzone

**Soft-Margin SVM:** Einführung von Schlupf-Variablen



# SVM für nicht linear separierbare Klassen

Bestrafen von Randverletzungen via “slack”-Variablen

Primales Optimierungsproblem:

$$\text{minimiere: } J(w, b, \xi) = \frac{1}{2} \|w\|^2 + C \sum_{i=1}^l \xi_i$$

$$\text{unter Nebenbedingungen } \forall i [y_i(w x_i + b) \geq 1 - \xi_i, \xi_i \geq 0]$$

Duales Optimierungsproblem:

$$\text{maximiere: } L'(\alpha) = \sum_{i=1}^l \alpha_i - \frac{1}{2} \sum_{i=1}^l \sum_{j=1}^l y_i y_j \alpha_i \alpha_j x_i x_j$$

$$\text{unter Nebenbedingungen } 0 \leq \alpha_i \leq C \text{ und } \sum_{i=1}^l y_i \alpha_i = 0$$

(Weder die slack-Variablen noch deren Lagrange-Multiplier tauchen im dualen Optimierungsproblem auf!)

Einziger Unterschied zum linear trennbaren Fall: Konstante  $C$  in den Nebenbedingungen

# SVM für nicht linear separierbare Klassen

Lösung des Optimierungsproblems:

$$w^* = \sum_{i=1}^l \alpha_i y_i x_i = \sum_{x_i \in SV} \alpha_i y_i x_i$$
$$b^* = y_k(1 - \xi_k) - w^* x_k; \quad k = \arg \max_i \alpha_i$$

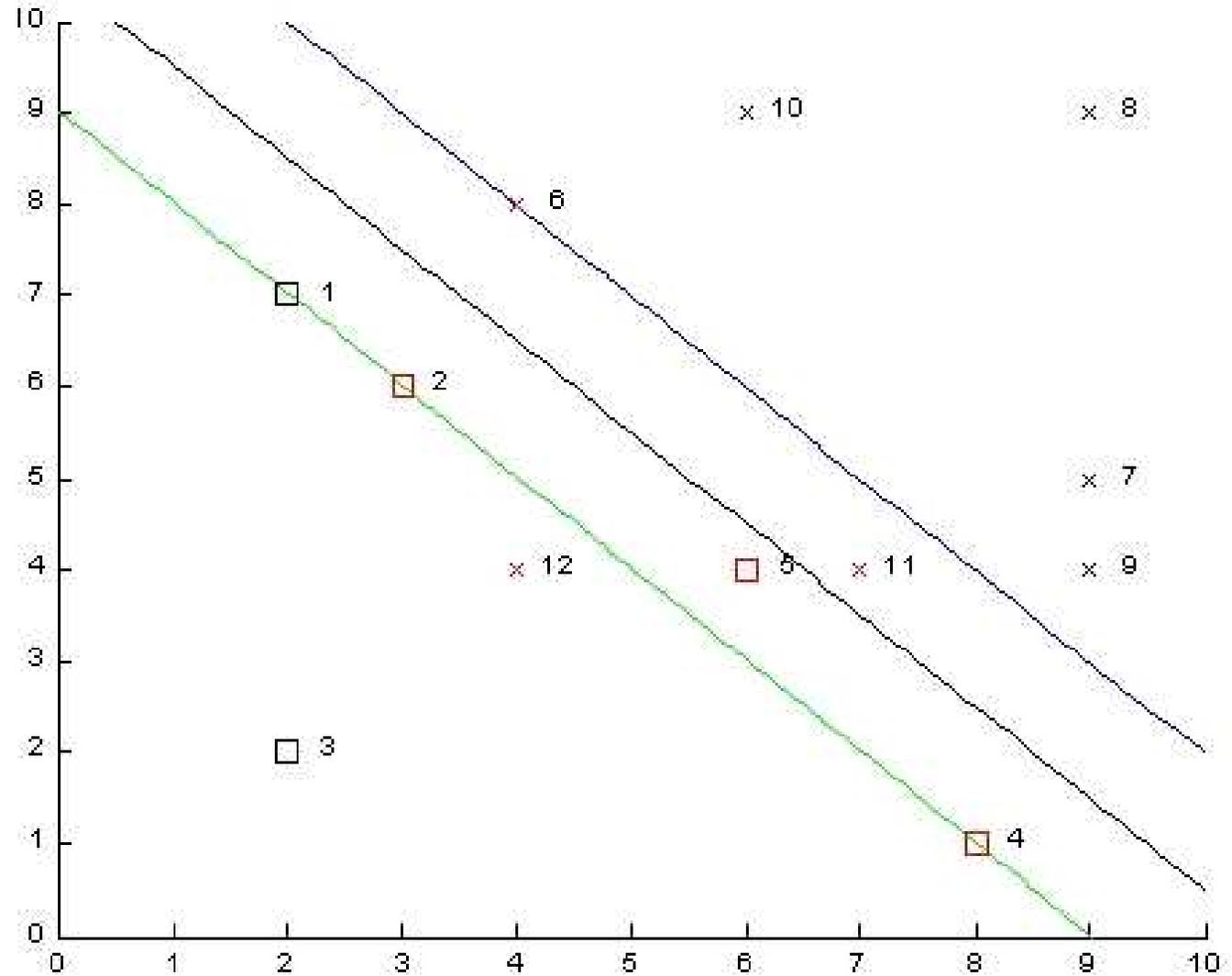
wobei

$$SV = \{x_i \mid \alpha_i > 0, i = 1, 2, \dots, l\}$$

die Menge aller Support-Vektoren darstellt

# SVM für nicht linear separierbare Klassen

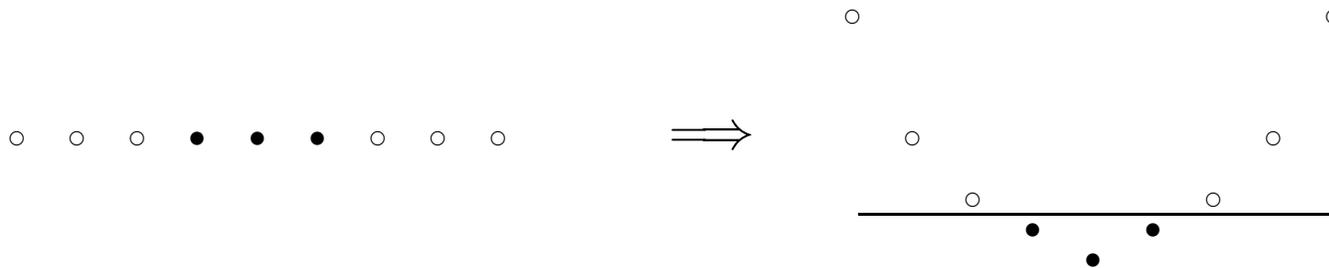
Beispiel: nicht linear trennbare Klassen



# Nichtlineare SVM

Nichtlineare Klassengrenzen: Hyperebene  $\rightarrow$  keine hohe Genauigkeit

Beispiel: Transformation  $\Psi(x) = (x, x^2) \rightarrow C_1$  und  $C_2$  linear trennbar



Idee: Merkmale  $x \in \mathbb{R}^n$  durch

$$\Psi : \mathbb{R}^n \longrightarrow \mathbb{R}^m$$

in einen höherdimensionalen Raum  $\mathbb{R}^m$ ,  $m > n$ , transformieren und in  $\mathbb{R}^m$  eine optimale lineare Trennebene finden

Transformation  $\Psi$  steigert die lineare Trennbarkeit!

Trennende Hyperebene in  $\mathbb{R}^m \equiv$  nichtlineare Trennfläche in  $\mathbb{R}^n$

Beispiel: 2D  $\rightarrow$  3D

# Nichtlineare SVM

**Problem:** Sehr hohe Dimension des Merkmalsraums  $\mathfrak{R}^m$   
Z.B. Polynome  $p$ -ten Grades über  $\mathfrak{R}^n \rightarrow \mathfrak{R}^m$ ,  $m = O(n^p)$

**Trick mit Kernelfunktionen:**

Ursprünglich in  $\mathfrak{R}^n$ : nur Skalarprodukte  $x_i x_j$  erforderlich  
neu in  $\mathfrak{R}^m$ : nur Skalarprodukte  $\Psi(x_i) \Psi(x_j)$  erforderlich

**Lösung:**

$\Psi(x_i) \Psi(x_j)$  müssen nicht explizit ausgerechnet werden, sondern können mit reduzierter Komplexität mit Kernelfunktionen ausgedrückt werden

$$K(x_i, x_j) = \Psi(x_i) \Psi(x_j)$$

# Nichtlineare SVM

Beispiel: Für die Transformation  $\Psi : \mathbb{R}^2 \longrightarrow \mathbb{R}^6$

$$\Psi((y_1, y_2)) = (y_1^2, y_2^2, \sqrt{2}y_1, \sqrt{2}y_2, \sqrt{2}y_1y_2, 1)$$

berechnet die Kernelfunktion

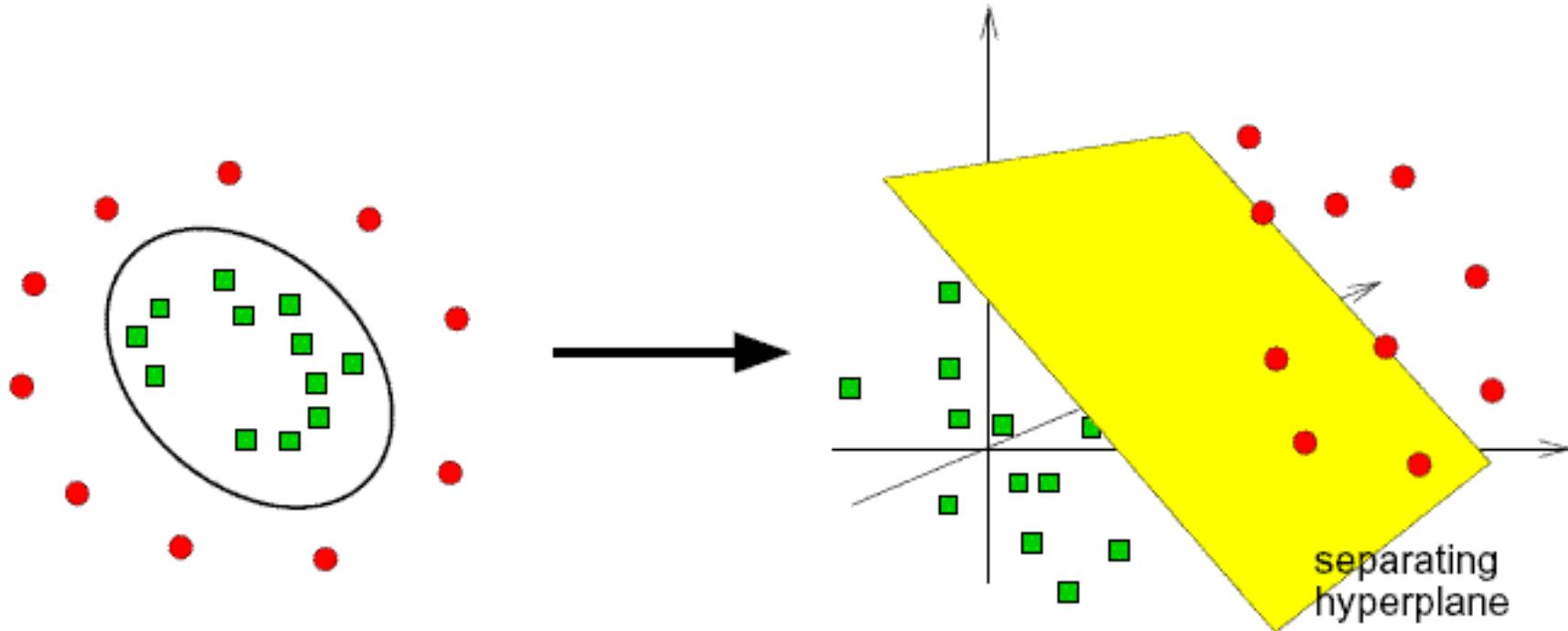
$$\begin{aligned} K(x_i, x_j) &= (x_i x_j + 1)^2 \\ &= ((y_{i1}, y_{i2}) \cdot (y_{j1}, y_{j2}) + 1)^2 \\ &= (y_{i1}y_{j1} + y_{i2}y_{j2} + 1)^2 \\ &= (y_{i1}^2, y_{i2}^2, \sqrt{2}y_{i1}, \sqrt{2}y_{i2}, \sqrt{2}y_{i1}y_{i2}, 1) \\ &\quad \cdot (y_{j1}^2, y_{j2}^2, \sqrt{2}y_{j1}, \sqrt{2}y_{j2}, \sqrt{2}y_{j1}y_{j2}, 1) \\ &= \Psi(x_i)\Psi(x_j) \end{aligned}$$

das Skalarprodukt im neuen Merkmalsraum  $\mathbb{R}^6$

# Nichtlineare SVM

Beispiel:  $\Psi : \mathbb{R}^2 \rightarrow \mathbb{R}^3$

$$\Psi((y_1, y_2)) = (y_1^2, \sqrt{2}y_1y_2, y_2^2)$$



Die Kernelfunktion

$$K(x_i, x_j) = (x_i x_j)^2 = \Psi(x_i) \Psi(x_j)$$

berechnet das Skalarprodukt im neuen Merkmalsraum  $\mathbb{R}^3$ . Wir können also das Skalarprodukt zwischen  $\Psi(x_i)$  und  $\Psi(x_j)$  ausrechnen, ohne die Funktion  $\Psi$  anzuwenden.

Häufig verwendete Kernfunktionen:

$$\text{Polynom-Kernel: } K(x_i, x_j) = (x_i x_j)^d$$

$$\text{Gauss-Kernel: } K(x_i, x_j) = e^{-\frac{\|x_i - x_j\|^2}{c}}$$

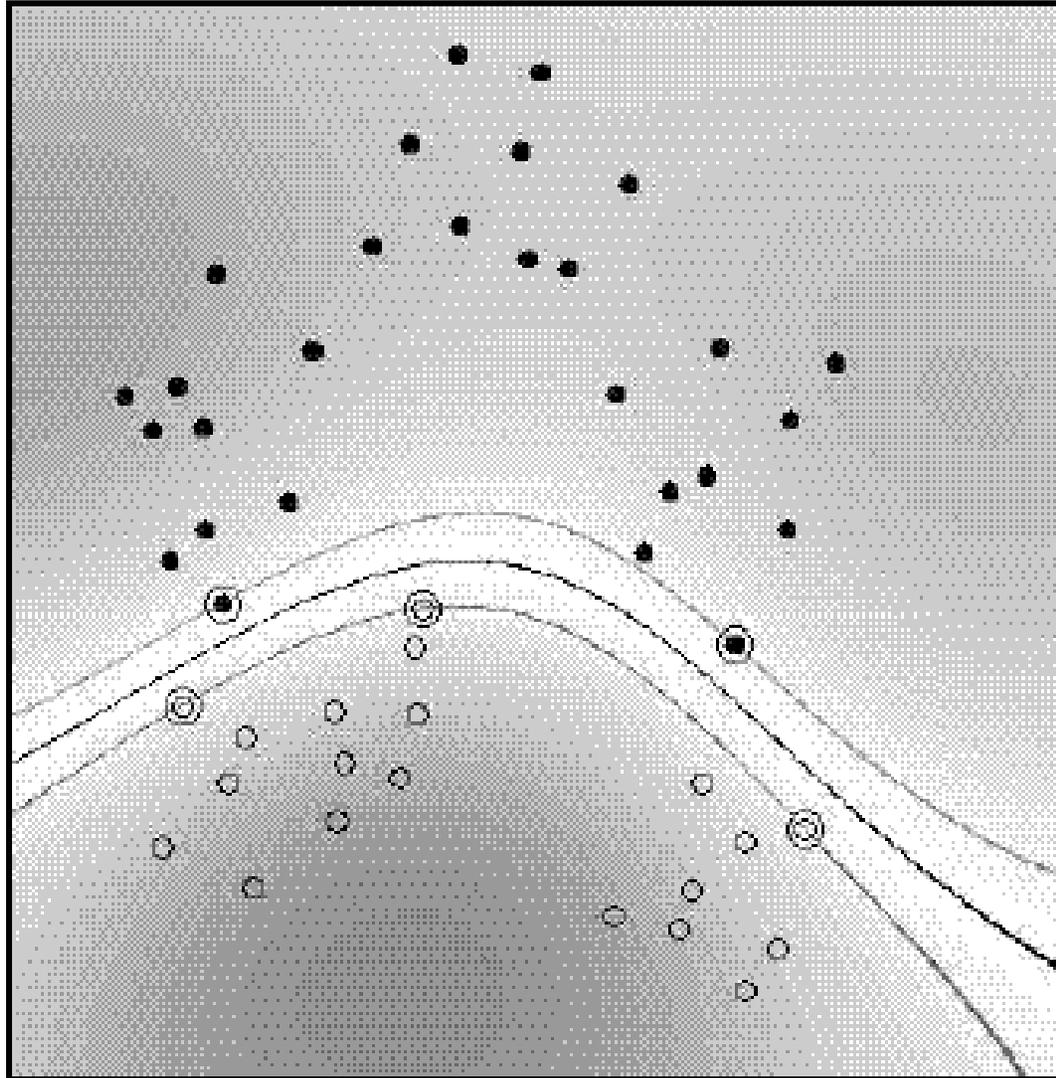
$$\text{Sigmoid-Kernel: } K(x_i, x_j) = \tanh(\beta_1 x_i x_j + \beta_2)$$

Lineare Kombinationen von gültigen Kernels  $\rightarrow$  neue Kernelfunktionen

Wir müssen nicht wissen, wie der neue Merkmalsraum  $\mathfrak{R}^m$  aussieht. Wir brauchen nur die Kernel-Funktion als ein Maß der Ähnlichkeit.

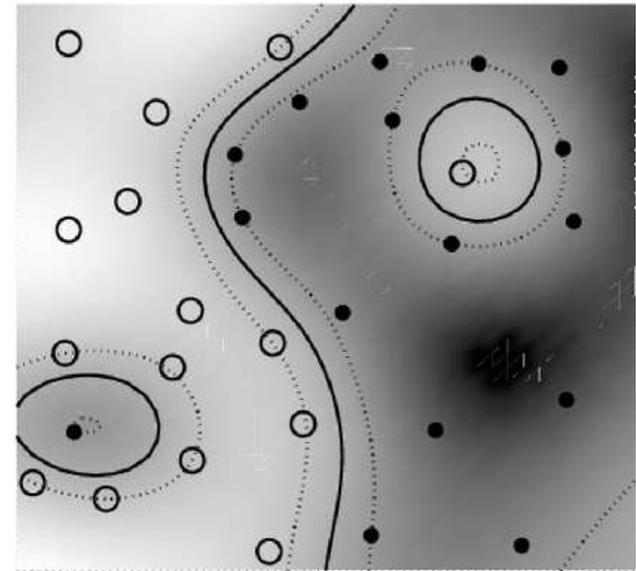
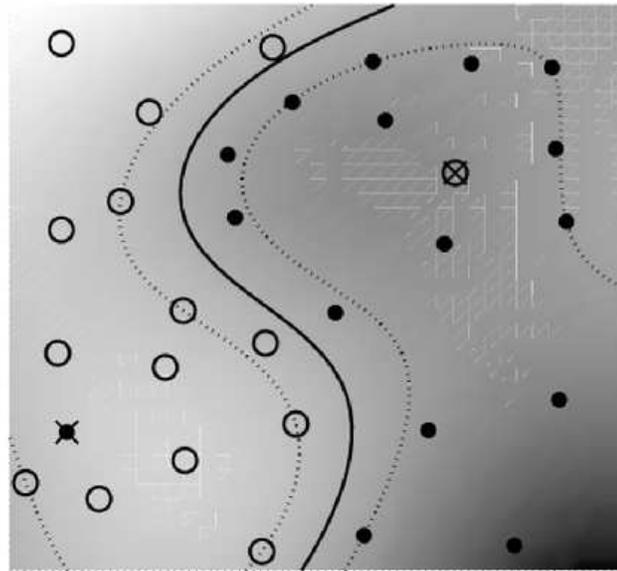
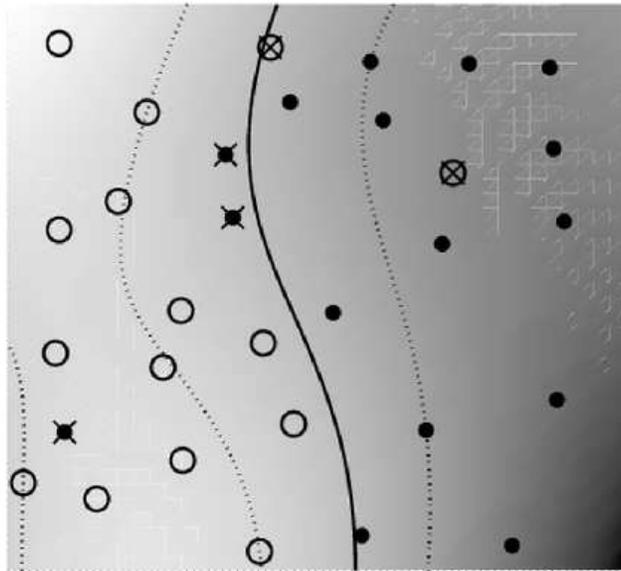
# Nichtlineare SVM

Beispiel: Gauss-Kernel ( $c = 1$ ). Die Support-Vektoren sind durch einen extra Kreis gekennzeichnet.



# Nichtlineare SVM

Beispiel: Gauss-Kernel ( $c = 1$ ) für Soft-Margin SVM.



# Schlußbemerkungen

## Stärken von SVM:

SVM liefert nach derzeitigen Erkenntnissen sehr gute Klassifikationsergebnisse; bei einer Reihe von Aufgaben gilt sie als der Top-Performer

Sparse-Darstellung der Lösung über Support-Vektoren

Leicht anwendbar: wenig Parameter, kein a-priori-Wissen erforderlich

Geometrisch anschauliche Funktionsweise

Theoretische Aussagen über Ergebnisse: globales Optimum, Generalisierungsfähigkeit

## Schwächen von SVM:

Langsames speicherintensives Lernen

“Tuning SVMs remains a black art: selecting a specific kernel and parameters is usually done in a try-and-see manner”

# Schlußbemerkungen

Liste von SVM-Implementierungen unter

<http://www.kernel-machines.org/software>

LIBSVM ist die gängigste: <http://www.csie.ntu.edu.tw/~cjlin/libsvm/>