SVM learning

WM&R a.a. 2013/14

R. Basili (A. Moschitti)

Dipartimento di Ingegneria dell'Impresa
Università di Roma "Tor Vergata"
Email: basili@info.uniroma2.it

Sommario

- Perceptron Learning
- Limiti dei classificatori lineari
- Support Vector Machines
  - Maximal margin classification
  - Ottimizzazione con margine *hard*
  - Ottimizzazione con margine *soft*
- Il ruolo dei kernel

Classificatori lineari (1)

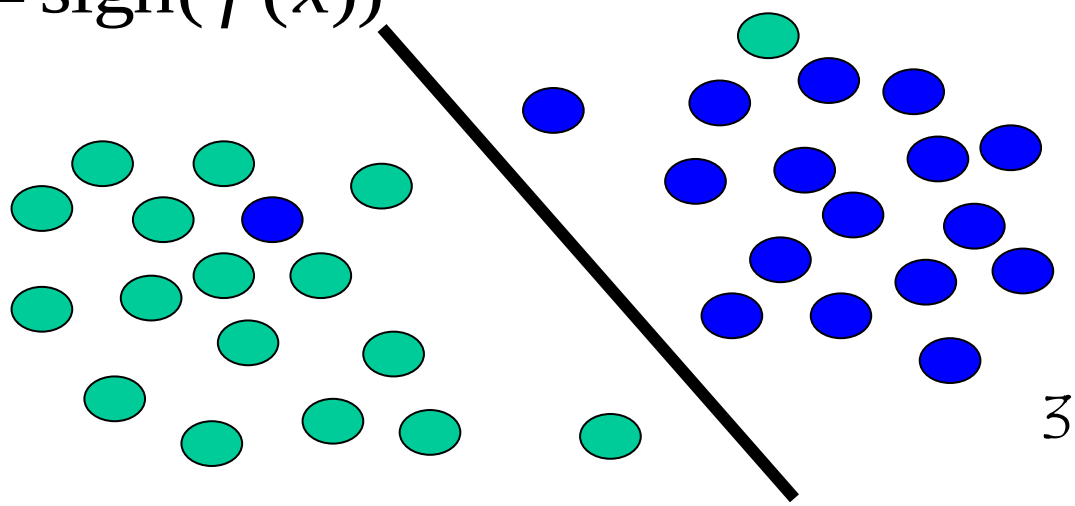
L'equazione di un iperpiano:

$$f(\vec{x}) = \vec{x} \cdot \vec{w} + b, \quad \vec{x}, \vec{w} \in \Re^n, b \in \Re$$

$\vec{x}$ è il vettore che rappresenta l'esempio da classificare

$\vec{w}$ è il gradiente all'iperpiano

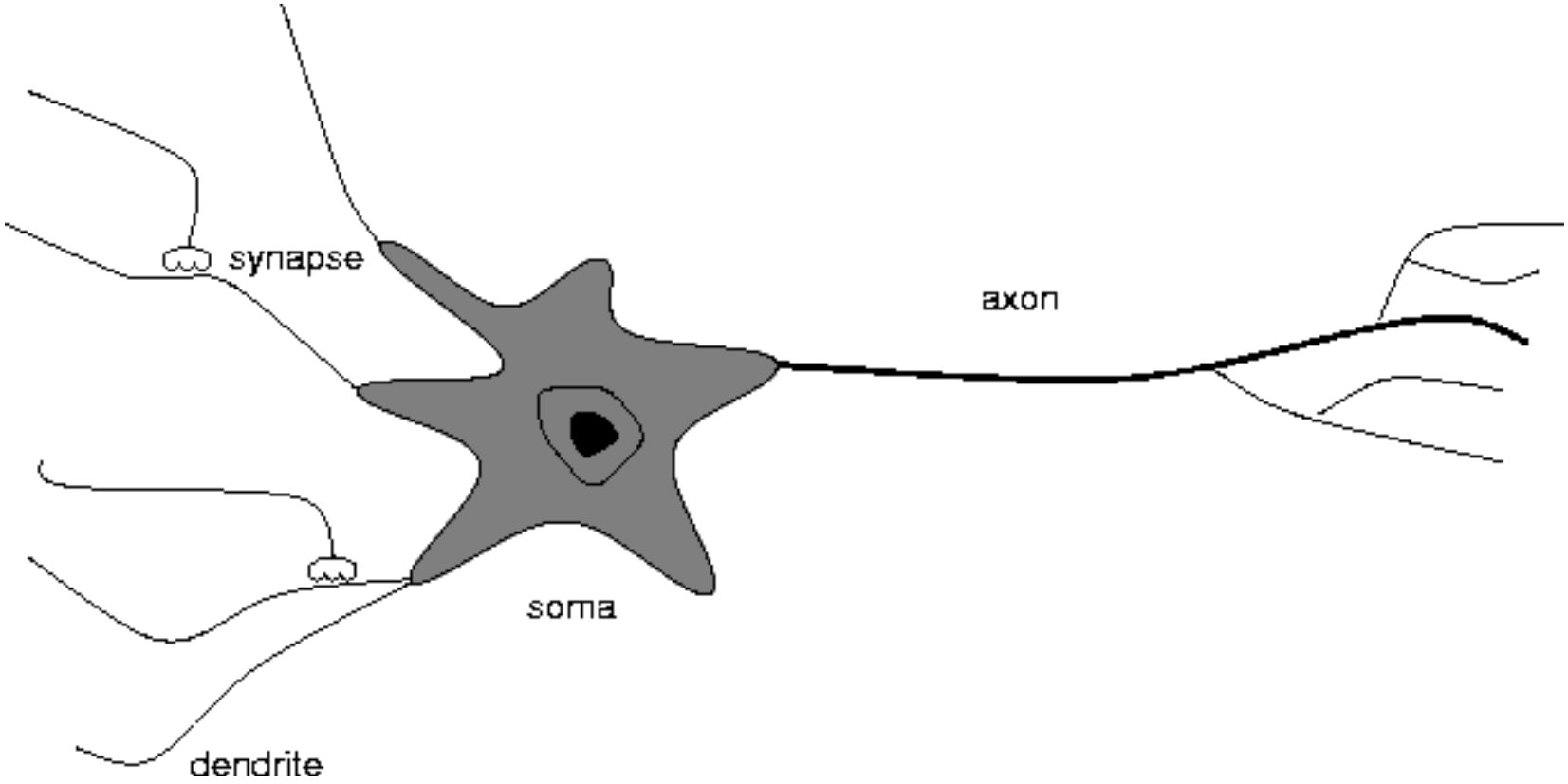
Per classificare: $h(x) = \text{sign}(f(x))$



Classificatori Lineari (2)

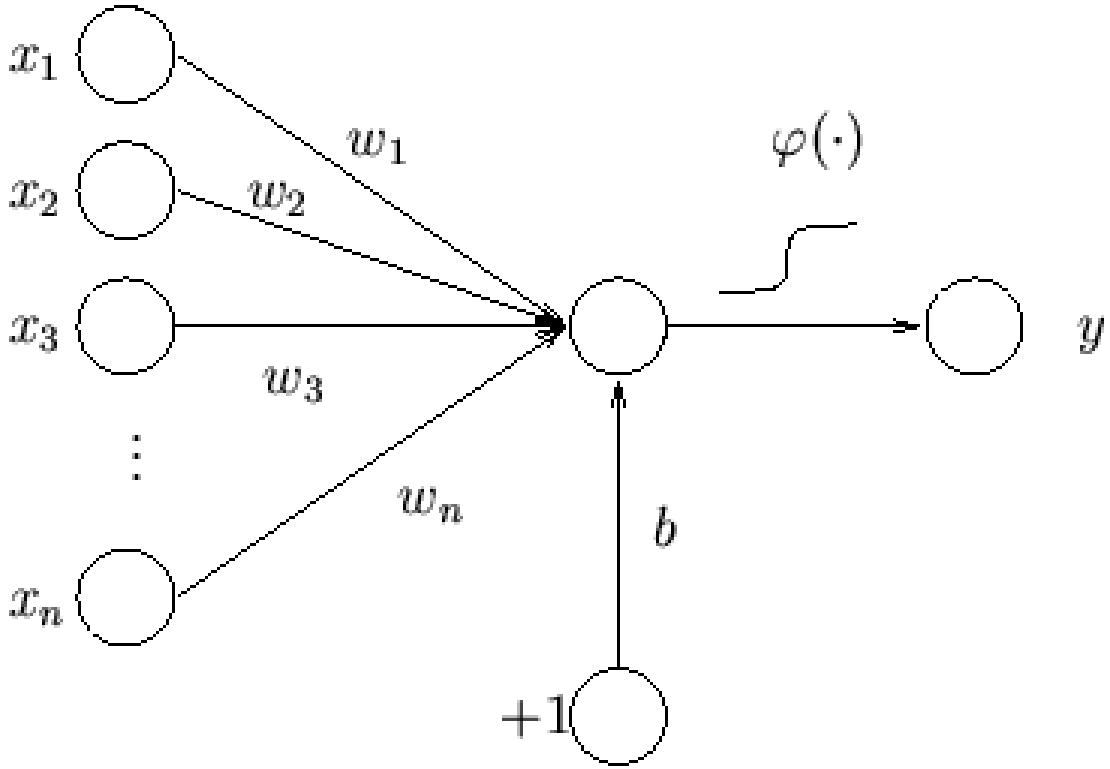
- Le funzioni lineari sono le più semplici da trattare analiticamente.
- L'idea base è quella di selezionare un'ipotesi consistente con il training-set (errore empirico nullo).
- Per apprendere la funzione di separazione lineare è sufficiente una rete neurale ad un solo neurone (percettrone)

Un Neurone



Il percettrone

$$\varphi(\vec{x}) = \mathrm{sgn}\left(\sum_{i=1..n} w_i \times x_i + b \right)$$



Notazioni

- ***Il margine funzionale*** di un esempio $(\vec{x}_i, y_i)$ rispetto ad un iperpiano è: $\gamma_i = y_i(\vec{w} \cdot \vec{x}_i + b)$
- ***La distribuzione dei margini funzionali*** di un iperpiano $(\vec{w}, b)$ rispetto ad un training set S è la distribuzione dei margini degli esempi di S.
- ***Il margine funzionale di un iperpiano*** è il minimo margine della distribuzione

Notazioni 2

- Se normalizziamo l'equazione dell'iperpiano, i.e.

$$\left(\frac{\vec{w}}{\| \vec{w} \|}, \frac{b}{\| \vec{w} \|} \right)$$

  otteniamo ***il margine geometrico***

- Tale margine misura la distanza euclidea dei punti dall'iperpiano
  - Per esempio, nel piano

$$d(P, r) = \frac{|ax_0 + by_0 + c|}{\sqrt{a^2 + b^2}}$$

Notazioni 3

- ***Il margine del training*** set S è il massimo margine geometrico tra tutti gli iperpiani.
- L'iperpiano che realizza tale margine è chiamato il ***maximal margin hyperplane***

Prodotto Interno e coseno

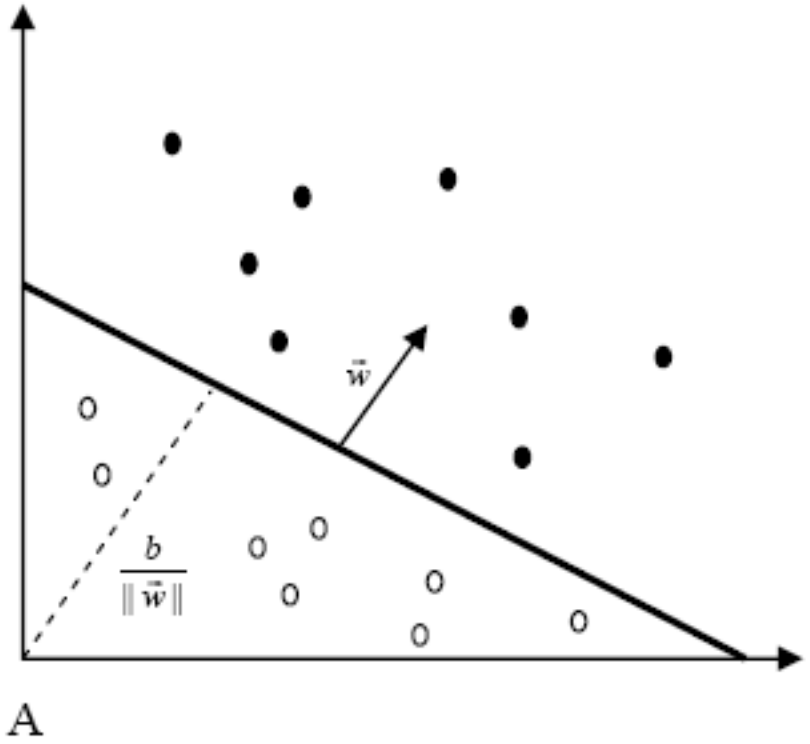
- Da $$\cos(\vec{x},\vec{w}) = \frac{\vec{x}\cdot\vec{w}}{\|\vec{x}\|\cdot\|\vec{w}\|}$$

- segue che:

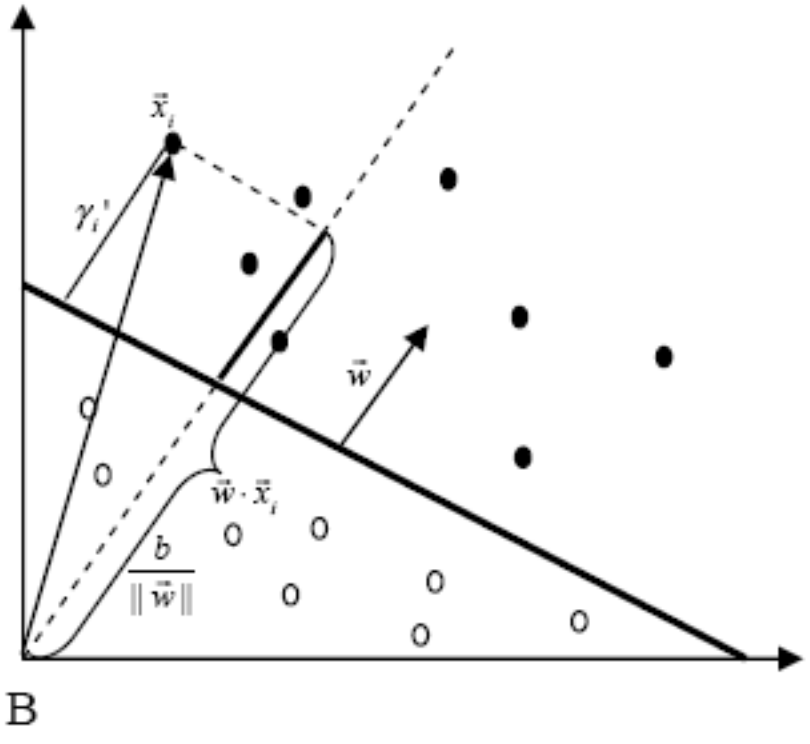
$$\|\vec{x}\|\cos(\vec{x},\vec{w}) = \frac{\vec{x}\cdot\vec{w}}{\|\vec{w}\|} = \vec{x}\cdot\frac{\vec{w}}{\|\vec{w}\|}$$

modulo di $\vec{x}$ per il coseno tra $\vec{x}$ e $\vec{w}$, cioè la proiezione di $\vec{x}$ su $\vec{w}$

Margine Geometrico

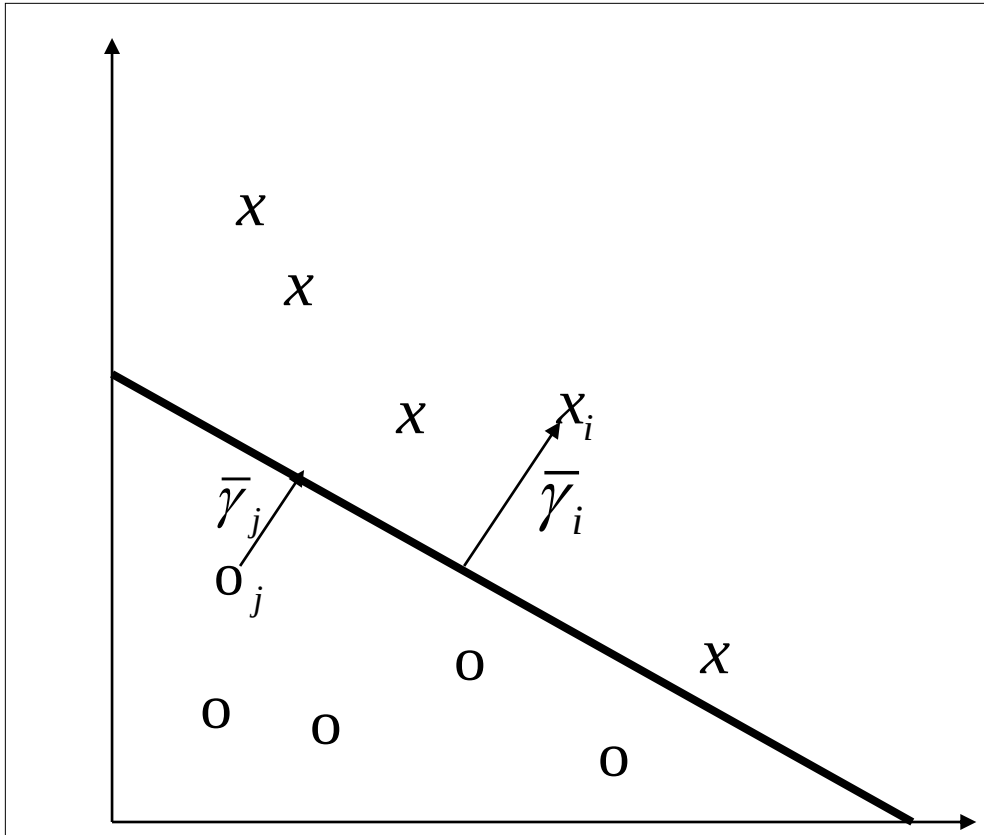


A

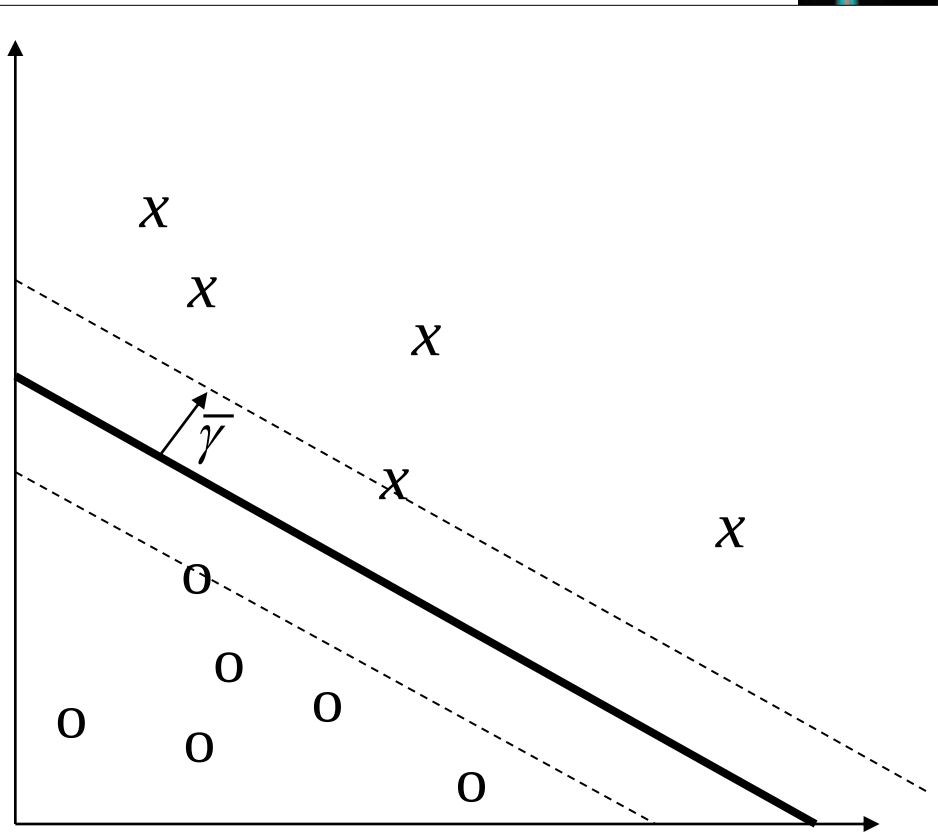


B

Margine geometrico:
per 2 punti e sul training set

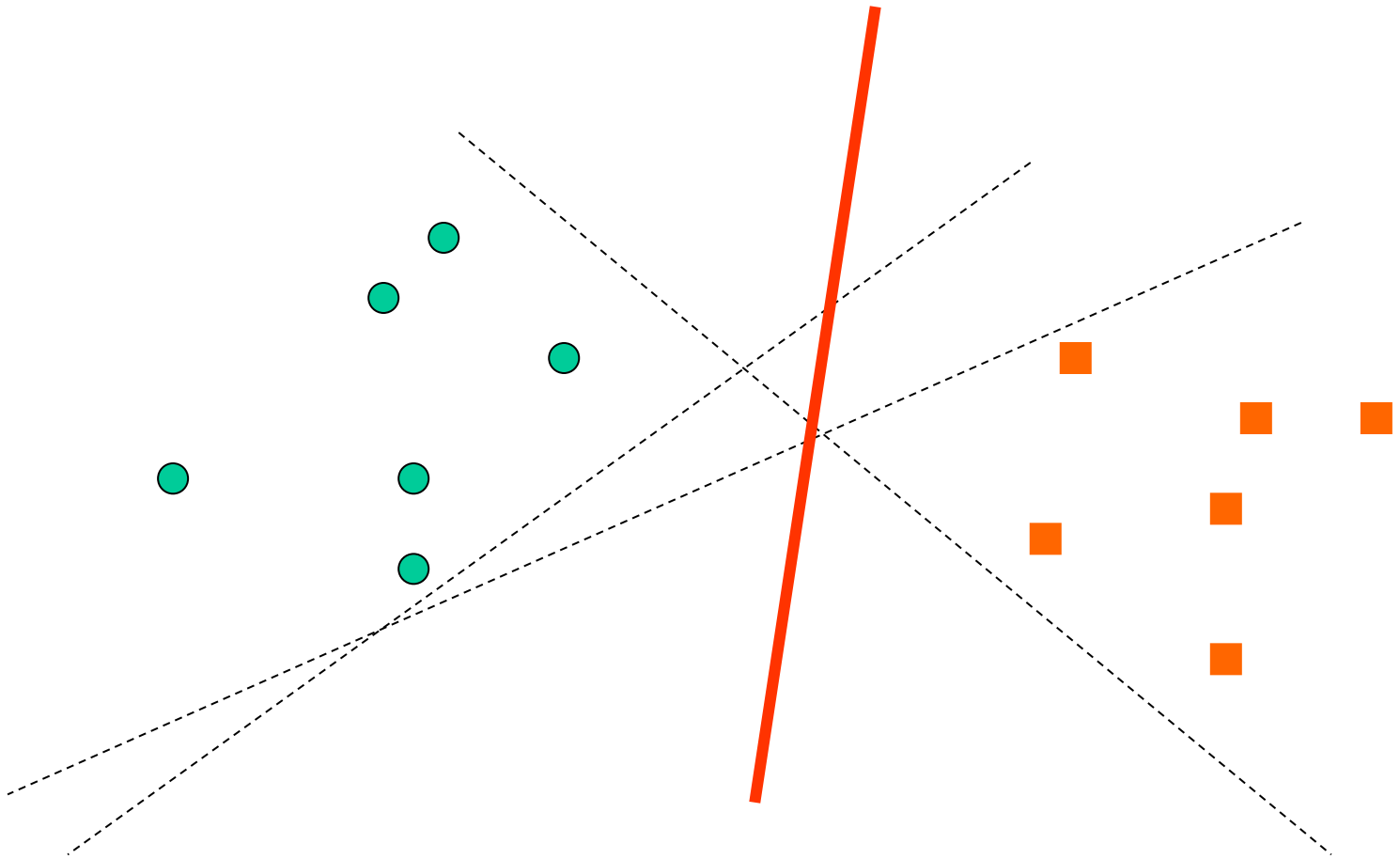


Margine geometrico



Margine del training set

Maximal margin vs altri Margini



Addestramento di un percettrone sul training-set (algoritmo *on-line*)

$\vec{w}_0 \leftarrow \vec{0}; b_0 \leftarrow 0; k \leftarrow 0; R \leftarrow \max_{1 \le i \le l} \| \vec{x}_i \|$

Repeat

  for i = 1 to ℓ

    if $y_i(\vec{w}_k \cdot \vec{x}_i + b_k) \le 0$ then

      $\vec{w}_{k+1} = \vec{w}_k + \eta y_i \vec{x}_i$

      $b_{k+1} = b_k + \eta y_i R^2$

      k = k + 1

    endif

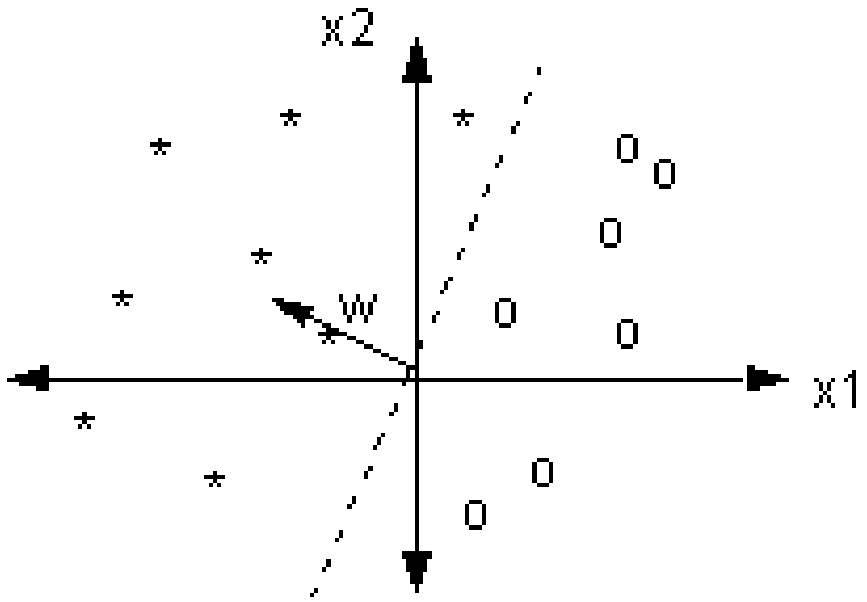
  endfor

until ci sono degli errori

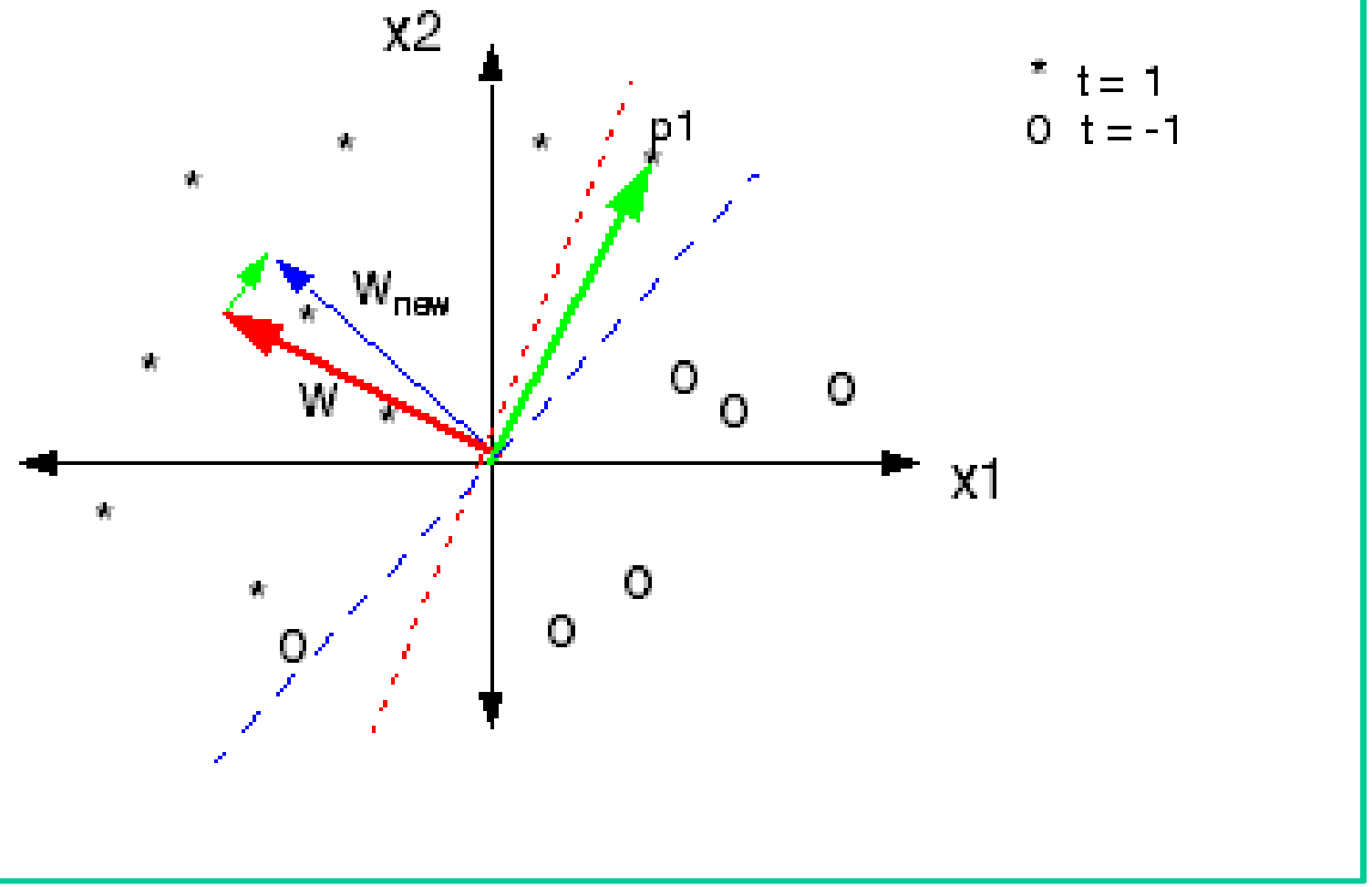
return k, $(\vec{w}_k, b_k)$

Errore di classificazione

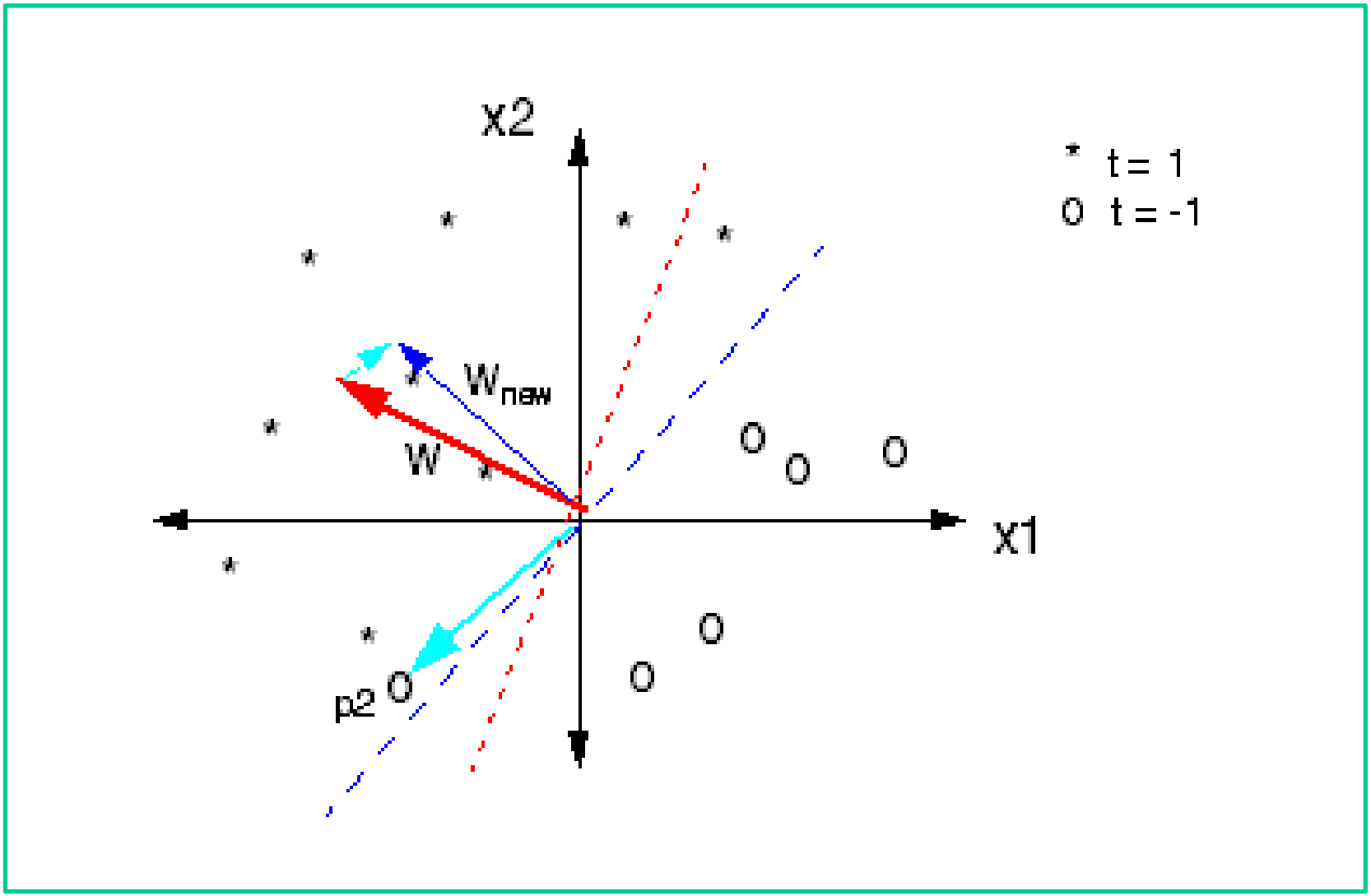
aggiustamenti

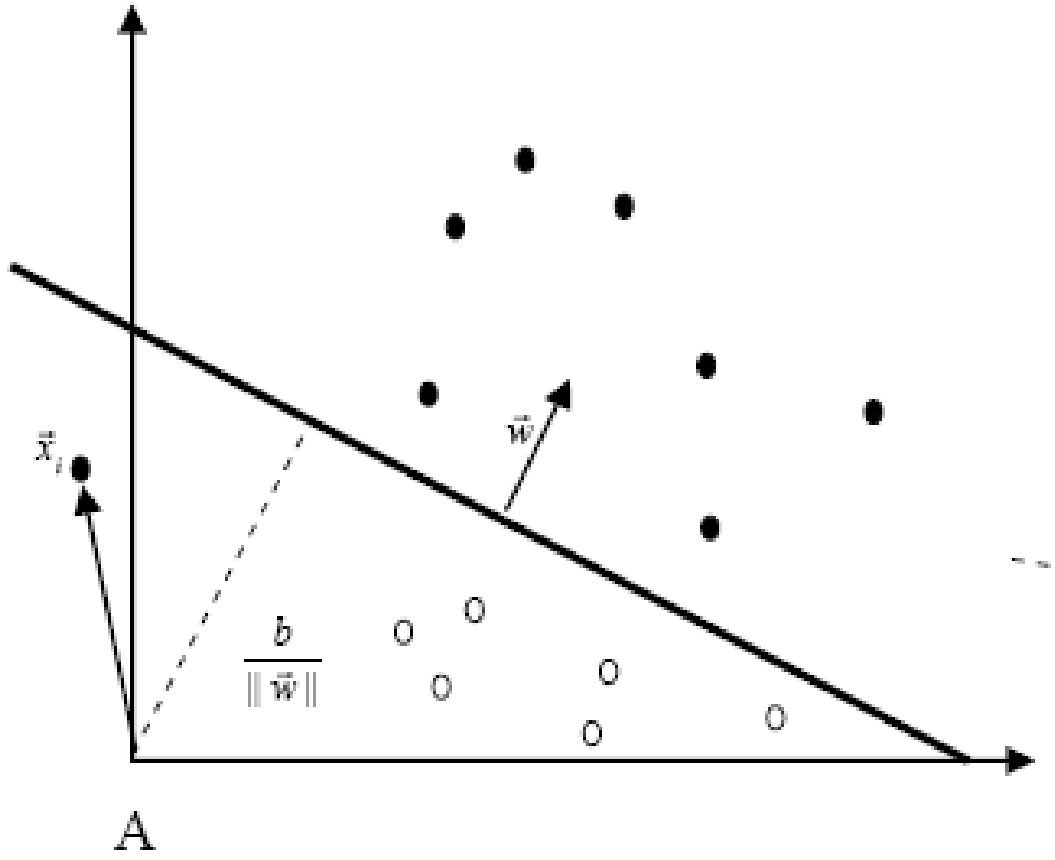

x2
x1
w

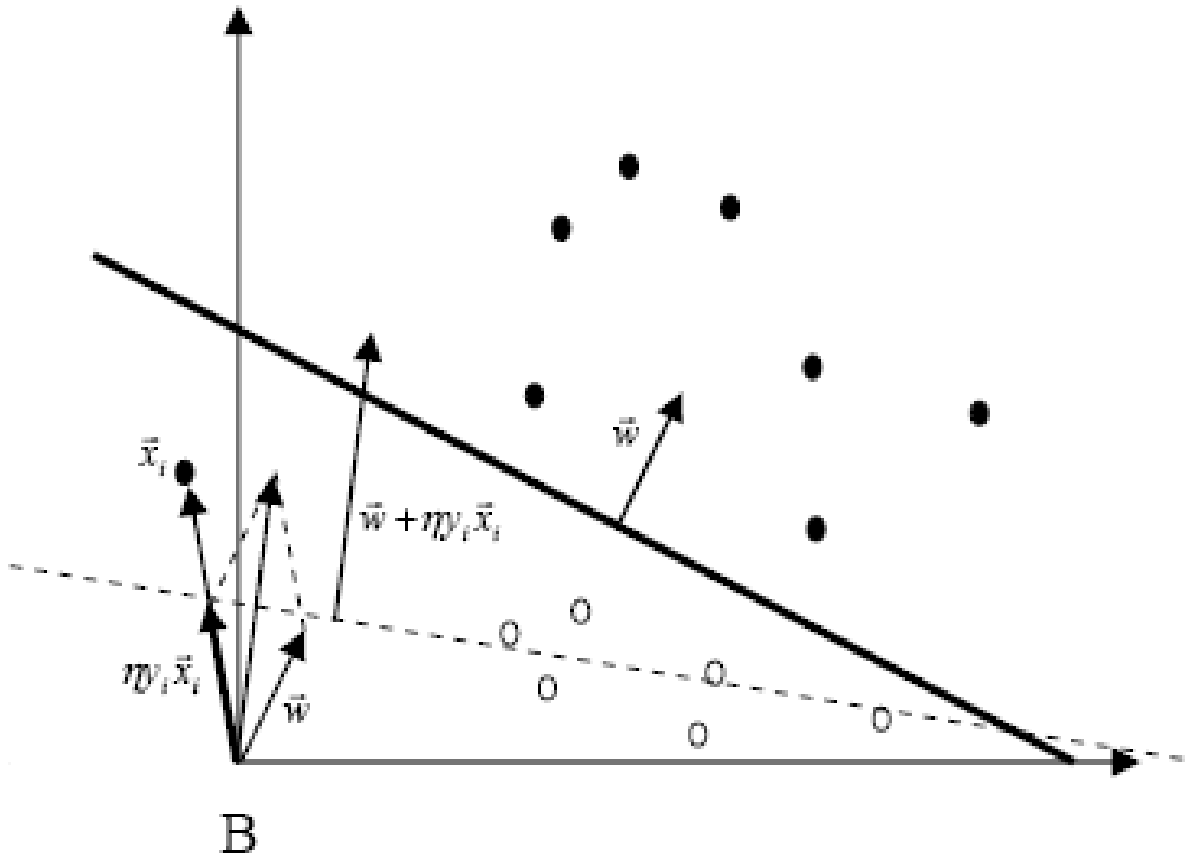
On-line Learning: es. positivi

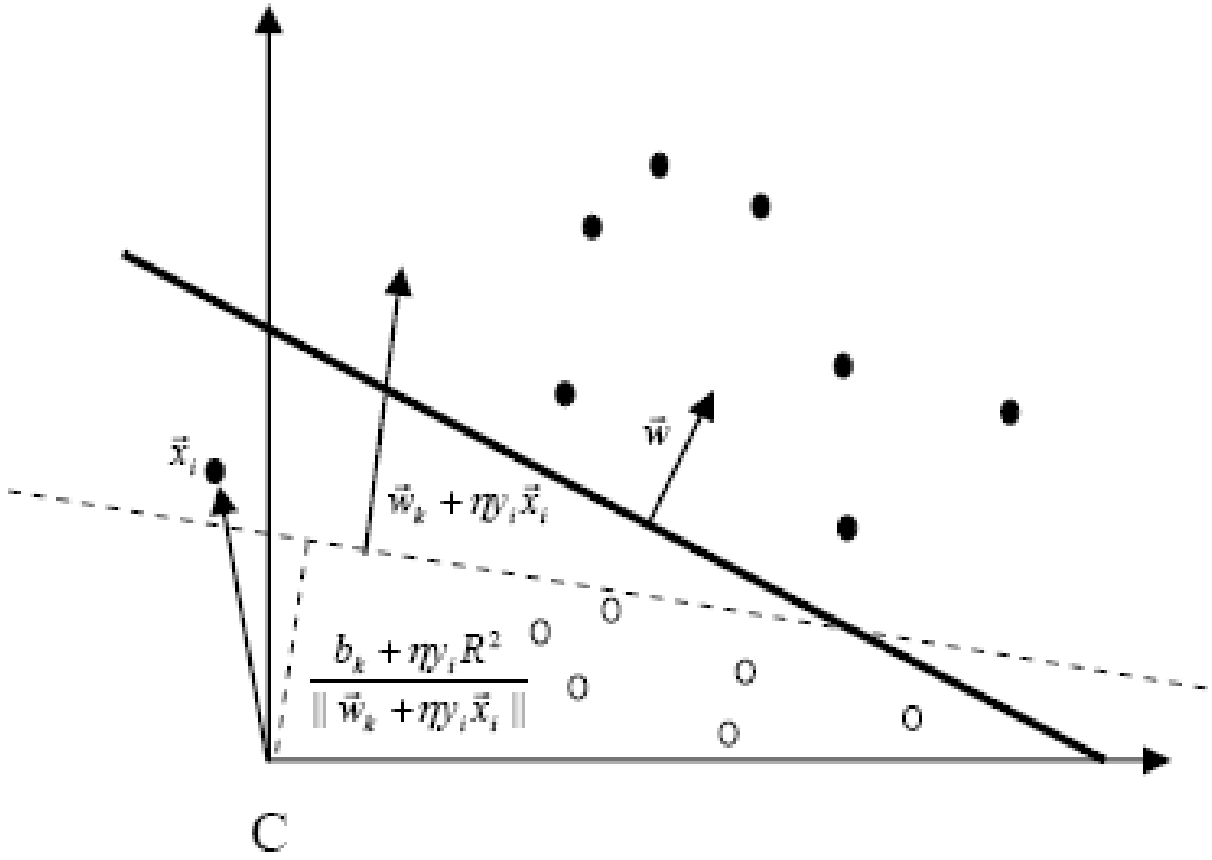


On-line Learning: es. negativi




$\vec{x}_i$
$\vec{w}$
$\frac{b}{\|\vec{w}\|}$
A


$\vec{x}_i$
$\vec{w}$
$\vec{w} + \eta y_i \vec{x}_i$
$\eta y_i \vec{x}_i$
$\vec{w}$
B


$\vec{x}_i$
$\vec{w}_k + \eta y_i \vec{x}_i$
$\vec{w}$
$\frac{b_k + \eta y_i R^2}{\| \vec{w}_k + \eta y_i \vec{x}_i \|}$
C

Teorema di Novikoff

Sia *S* un training-set non banale e sia

$$R = \max_{1 \le i \le l} \| x_i \| .$$

Supponiamo che esista un vettore $\mathbf{w}^*, \| \mathbf{w}^* \| = 1$ e che

$$y_i (\langle \mathbf{w}^*, \mathbf{x}_i \rangle + b^*) \ge \gamma, \quad i = 1, ..., l,$$

con $\gamma > 0$. Allora il massimo numero di errori commessi dal percettrone è:

$$t^* = \left(\frac{2R}{\gamma} \right)^2 ,$$

Osservazioni

- Il teorema afferma che non ha importanza la grandezza del margine se i dati sono linearmente separabili il percettrone trova la soluzione in un numero finito di passi
- Tale numero è inversamente proporzionale al quadrato del margine.
- Il bound è invariante alla scala dei *pattern*.
- Il learning rate non è importante.

Rappresentazione duale

- Possiamo riscrivere la funzione di decisione:

$$h(x) = \text{sgn}(\vec{w} \cdot \vec{x} + b) = \text{sgn}((\sum_{j=1..\ell} \alpha_j y_j \vec{x}_j) \cdot \vec{x} + b) =$$

$$\text{sgn}(\sum_{i=1..\ell} \alpha_j y_j \vec{x}_j \cdot \vec{x} + b)$$

- Così come la funzione di aggiornamento

$$\text{if } y_i(\sum_{j=1..\ell} \alpha_j y_j \vec{x}_j \cdot \vec{x}_i + b) \leq 0 \text{ allora } \alpha_i = \alpha_i + \eta$$

- Il learning rate η influenza solo il re-scaling degli iperpiani, e non influenza l'algoritmo quindi fissiamo $\eta = 1$.

La prima proprietà delle SVMs

- La DUALITA è la prima caratteristica delle Support Vector Machines
- SVMs sono learning machines del tipo:

$$f(x) = \text{sgn}(\vec{w} \cdot \vec{x} + b) = \text{sgn}(\sum_{j=1..\ell} \alpha_j y_j \vec{x}_j \cdot \vec{x} + b)$$

- Notare che i dati appaiono solo nel prodotto scalare (sia per il testing che per il training)
- La matrice $G = \left(\left\langle \mathbf{x}_i \cdot \mathbf{x}_j \right\rangle \right)_{i,j=1}^{l}$ è chiamata Gram matrix

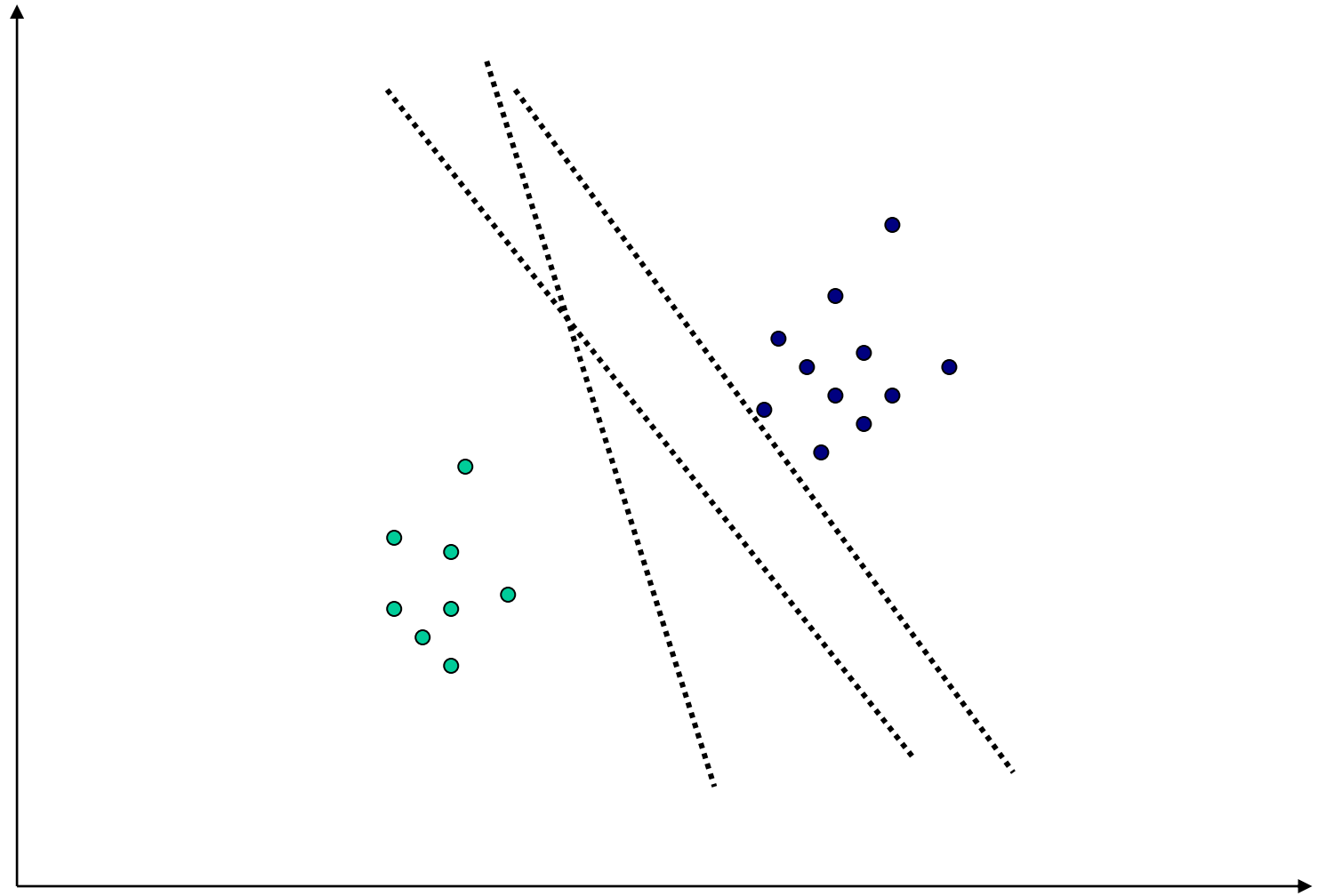
Limiti dei classificatori lineari

- Dati non separabili linearmente
- Dati rumorosi
- I dati devono essere in forma vettoriale

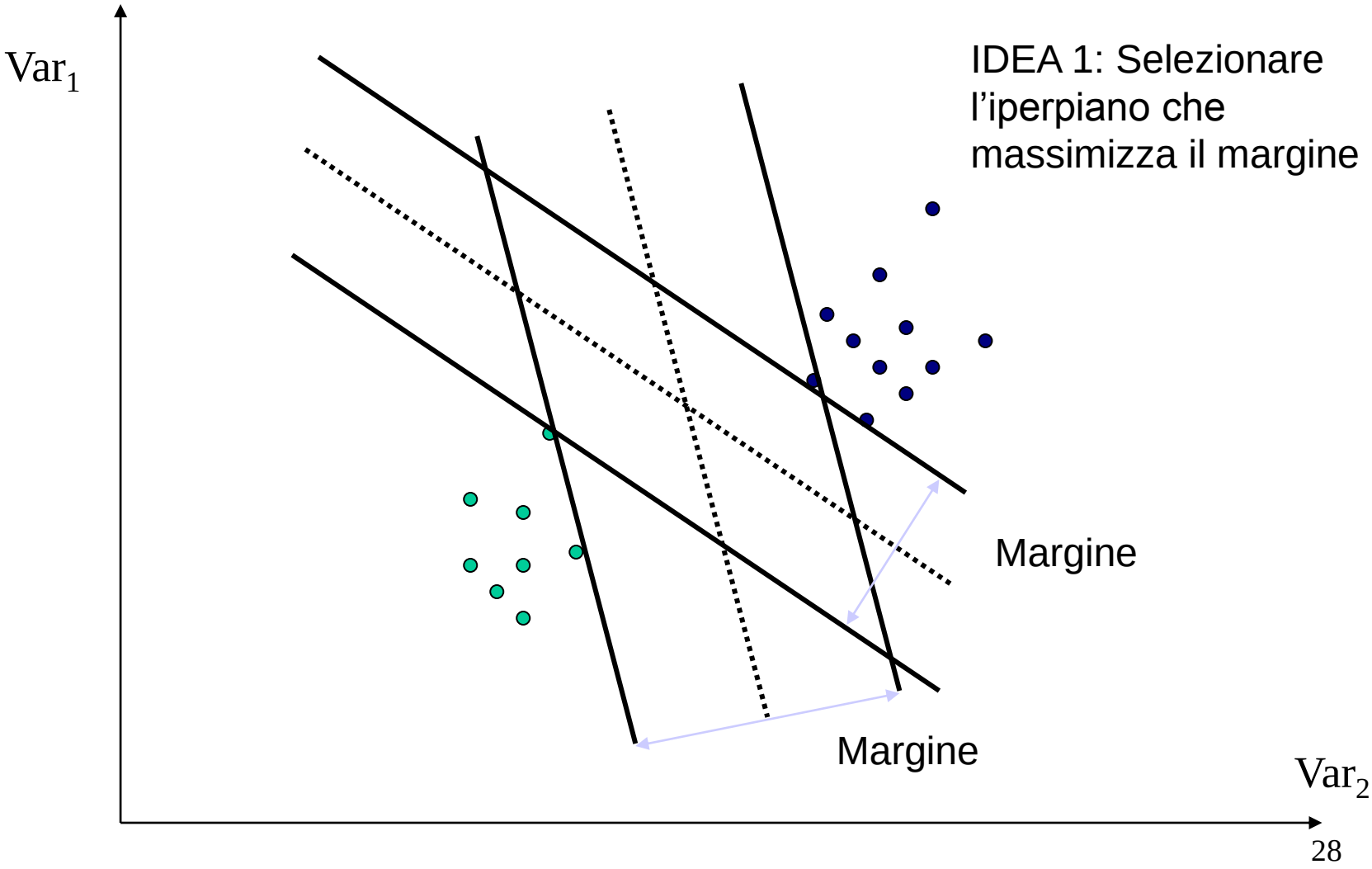
Soluzioni

- **Approccio delle reti neurali:** funzioni lineari a più strati ⇒ reti neurali multistrato ⇒ algoritmo di Learning– back-propagation.
- **Approccio SVMs :** rappresentazioni basate su kernel (cioè la funzione che è descritta dalla Gram matrix).
  - Gli algoritmi di learning sono così disaccoppiati dal dominio di applicazione, il quale è codificato esclusivamente nella progettazione della funzione kernel.
    - Il modello del problema può non essere necessariamente vettoriale ma derivare dalle proprietà intrinseche degli oggetti di training
    - Sottostringhe, alberi, grafi o componenti principali (LSA)

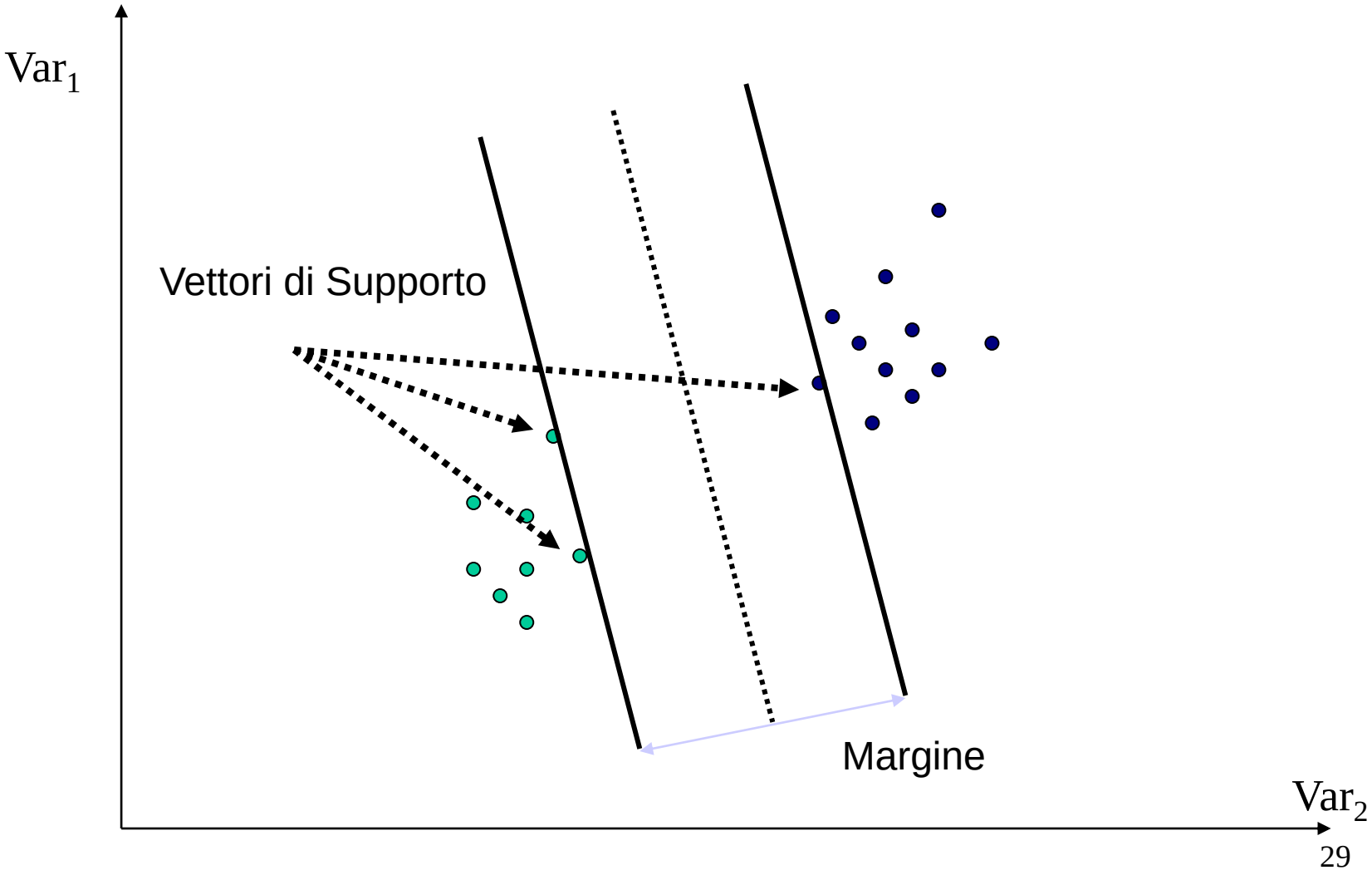
Quale iperpiano scegliere



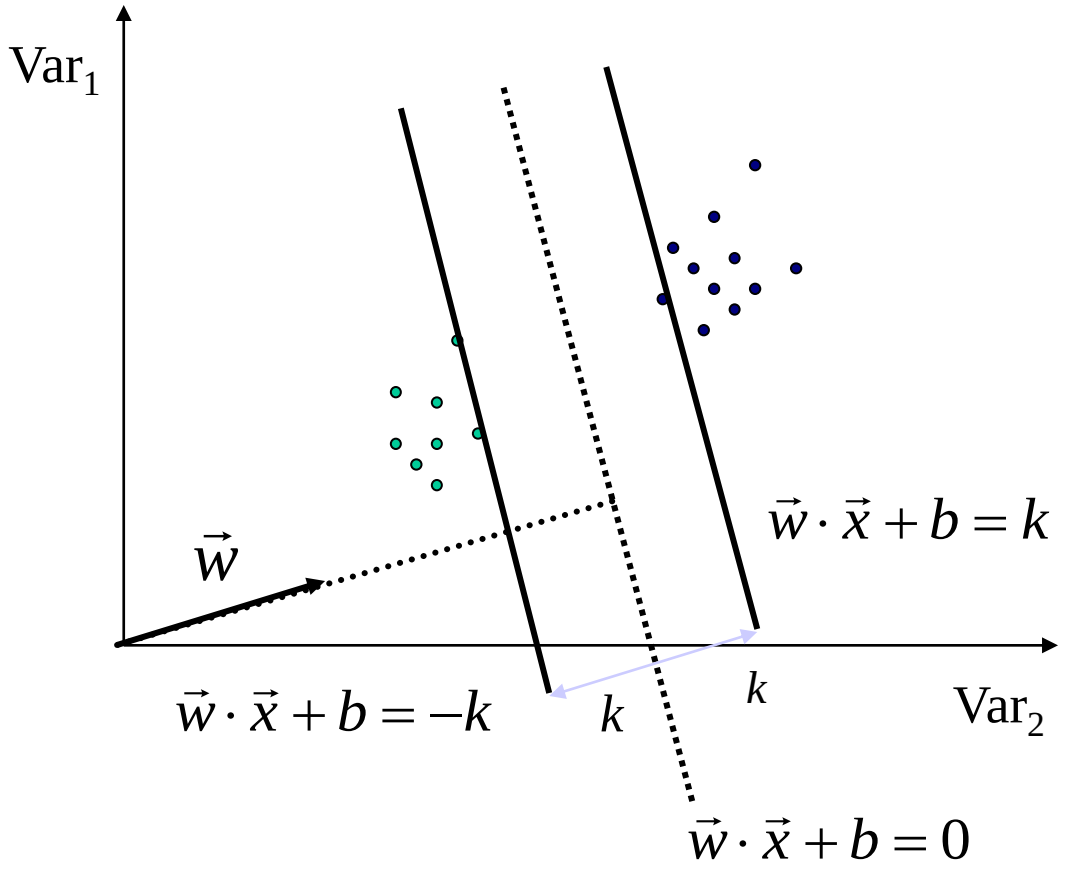
Classificatore con Massimo Margine



Vettori di supporto



Come trovare il margine massimo?



La misura del margine è:

$$\frac{2|k|}{\|w\|}$$

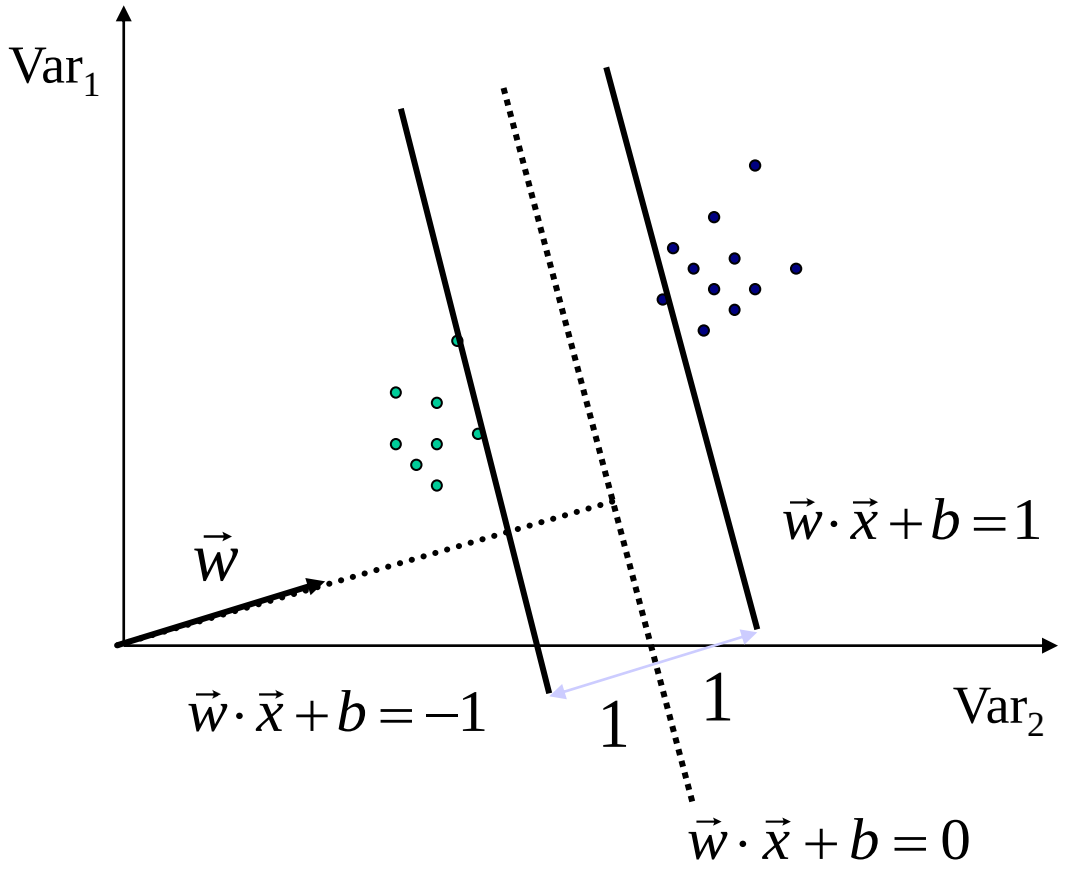
Il problema da risolvere è

$$MAX\ \frac{2|k|}{\|\vec{w}\|}$$

$\vec{w}\cdot\vec{x}+b\geq+k,$ se $\vec{x}$ è positivo

$\vec{w}\cdot\vec{x}+b\leq-k,$ se $\vec{x}$ è negativo

Scalando l'iperpiano...



Ci sarà una scala tale che *k=1*.

Il problema diventa:

$$\max \frac{2}{\| \vec{w} \|}$$

$\vec{w}\cdot\vec{x}+b \geq +1$, se $\vec{x}$ è positivo

$\vec{w}\cdot\vec{x}+b \leq -1$, se $\vec{x}$ è negativo

Problema nella forma finale

$$\max \frac{2}{\| \vec{w} \|}$$
$$\vec{w} \cdot \vec{x}_i + b \geq +1, \;\; y_i = 1$$
$$\vec{w} \cdot \vec{x}_i + b \leq -1, \;\; y_i = \text{-}1$$

$$\Rightarrow \quad \max \frac{2}{\| \vec{w} \|} \quad \Rightarrow$$
$$y_i (\vec{w} \cdot \vec{x}_i + b) \geq 1$$

$$\min \frac{\| \vec{w} \|}{2} \quad \Rightarrow \quad \min \frac{\| \vec{w} \|^2}{2}$$
$$y_i (\vec{w} \cdot \vec{x}_i + b) \geq 1 \qquad y_i (\vec{w} \cdot \vec{x}_i + b) \geq 1$$

Definizione di errore sul training

Dati di Training

$$f : R^N \to \{\pm 1\} \qquad (\vec{x}_1, y_1), \ldots, (\vec{x}_l, y_l) \in R^N \times \{\pm 1\}$$

Rischio (errore) empirico $$R_{emp}[f] = \frac{1}{l} \sum_{i=1}^{l} \frac{1}{2} \left| f(\vec{x}_i) - y_i \right|$$

Rischio (errore) $$R[f] = \int \frac{1}{2} \left| f(\vec{x}) - y \right| dP(\vec{x}, y)$$

Problema da ottimizzare

- L'iperpiano ottimo:
  - Minimizzare $\tau(\vec{w}) = \frac{1}{2}\|\vec{w}\|^2$
  - Soggetto a $y_i((\vec{w}\cdot\vec{x}_i)+b) \geq 1 \qquad i = 1,\ldots,l$
- Il duale è più semplice da trattare

Definizione del Lagrangiano

Def. 2.24 *Let $f(\vec{w})$, $h_i(\vec{w})$ and $g_i(\vec{w})$ be the objective function, the equality constraints and the inequality constraints (i.e. $\geq$) of an optimization problem, and let $L(\vec{w}, \vec{\alpha}, \vec{\beta})$ be its Lagrangian, defined as follows:*

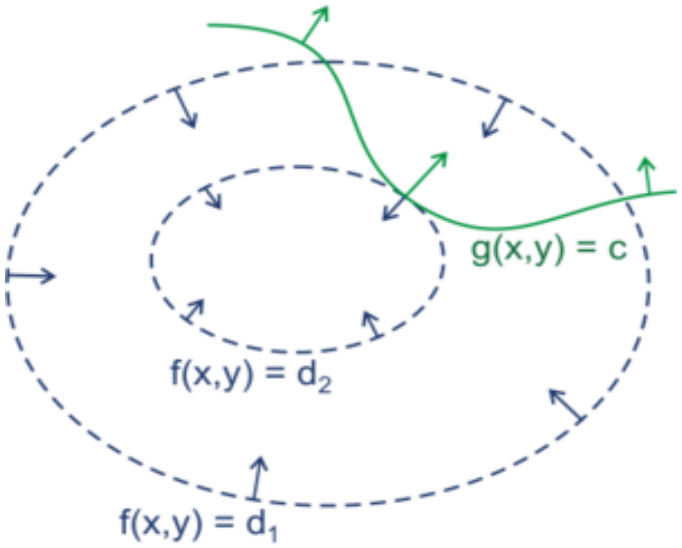
$$L(\vec{w}, \vec{\alpha}, \vec{\beta}) = f(\vec{w}) - \sum_{i=1}^{m} \alpha_i g_i(\vec{w}) - \sum_{i=1}^{l} \beta_i h_i(\vec{w})$$

$$f(\vec{w}) = \tau(\vec{w}) = \frac{1}{2}\|\vec{w}\|^2$$

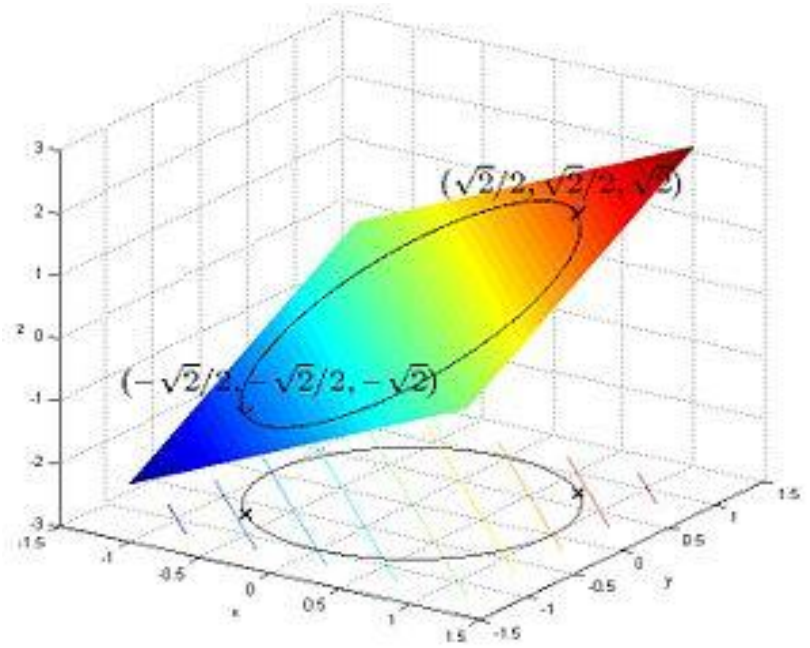
$$y_i((\vec{w} \cdot \vec{x}_i) + b) \geq 1, \quad i = 1, \ldots, l$$

Graficamente:

- Due esempi:



$$f(x,y) = x^2 + y^2$$
$$g(x,y) = c$$



$$f(x,y) = x + y$$
$$g(x,y) = x^2 + y^2 - 1$$

Problema di ottimizzazione Duale

*The **Lagrangian dual problem** of the above primal problem is*

$$maximize \quad \theta(\vec{\alpha}, \vec{\beta})$$

$$subject \ \ to \quad \vec{\alpha} \geq \vec{0}$$

where $\theta(\vec{\alpha}, \vec{\beta}) = inf_{w \in W} \ \ L(\vec{w}, \vec{\alpha}, \vec{\beta})$

Trasformazione nel duale

Il Lagrangiano del nostro problema diventa:

$$L(\vec{w}, b, \vec{\alpha}) = \frac{1}{2}\vec{w} \cdot \vec{w} - \sum_{i=1}^{m} \alpha_i [y_i(\vec{w} \cdot \vec{x_i} + b) - 1]$$

- Per risolvere il duale dobbiamo calcolare

$$\theta(\vec{\alpha}, \vec{\beta}) = inf_{w \in W} \; L(\vec{w}, \vec{\alpha}, \vec{\beta})$$

quindi imporre le derivate = 0, rispetto a $\vec{w}$

Trasformazione nel problema duale (cont.)

$$L(\vec{w}, b, \vec{\alpha}) = \frac{1}{2}\vec{w} \cdot \vec{w} - \sum_{i=1}^{m} \alpha_i [y_i(\vec{w} \cdot \vec{x_i} + b) - 1]$$

Imponendo le derivate = 0, rispetto a $\vec{w}$

$$\frac{\partial L(\vec{w}, b, \vec{\alpha})}{\partial \vec{w}} = \vec{w} - \sum_{i=1}^{m} y_i \alpha_i \vec{x}_i = \vec{0} \quad \Rightarrow \quad \vec{w} = \sum_{i=1}^{m} y_i \alpha_i \vec{x}_i$$

- e rispetto a *b*

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

Trasformazione duale (cont.)

$$\vec{w} = \sum_{i=1}^{m} y_i \alpha_i \vec{x}_i \qquad \frac{\partial L(\vec{w}, b, \vec{\alpha})}{\partial b} = \sum_{i=1}^{m} y_i \alpha_i = 0$$

... sostituendo nella funzione obiettivo

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

Problema (duale) finale

$$maximize \quad \sum_{i=1}^{m} \alpha_i - \frac{1}{2} \sum_{i,j=1}^{m} y_i y_j \alpha_i \alpha_j \vec{x_i} \cdot \vec{x_j}$$

$$subject\ to \quad \alpha_i \geq 0, \quad i = 1, .., m$$

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

- Dipende dal set di variabili $\underline{\alpha}$ e non piu' da $\underline{w}$ e b
- Ha una forma più semplice
- Esplicita il problema come ricerca del contributo individuale (α_l) degli esempi (x_l)

Teorema di Khun-Tucker

- Condizioni necessarie e sufficienti per avere un soluzione ottima

$$\frac{\partial L(\vec{w}^*, \vec{\alpha}^*, \vec{\beta}^*)}{\partial \vec{w}} = \vec{0}$$

$$\frac{\partial L(\vec{w}^*, \vec{\alpha}^*, \vec{\beta}^*)}{\partial \vec{\beta}} = \vec{0}$$

$$\alpha_i^* g_i(\vec{w}^*) = 0, \quad i = 1, .., m$$

$$g_i(\vec{w}^*) \leq 0, \quad i = 1, .., m$$

$$\alpha_i^* \geq 0, \quad i = 1, .., m$$

Vincolo di Karush-Kuhn-Tucker

Conseguenze dei vincoli

- Vincoli di Lagrange: $\sum_{i=1}^{l} a_i y_i = 0 \qquad \vec{w} = \sum_{i=1}^{l} \alpha_i y_i \vec{x}_i$
- Vincolo di Karush-Kuhn-Tucker

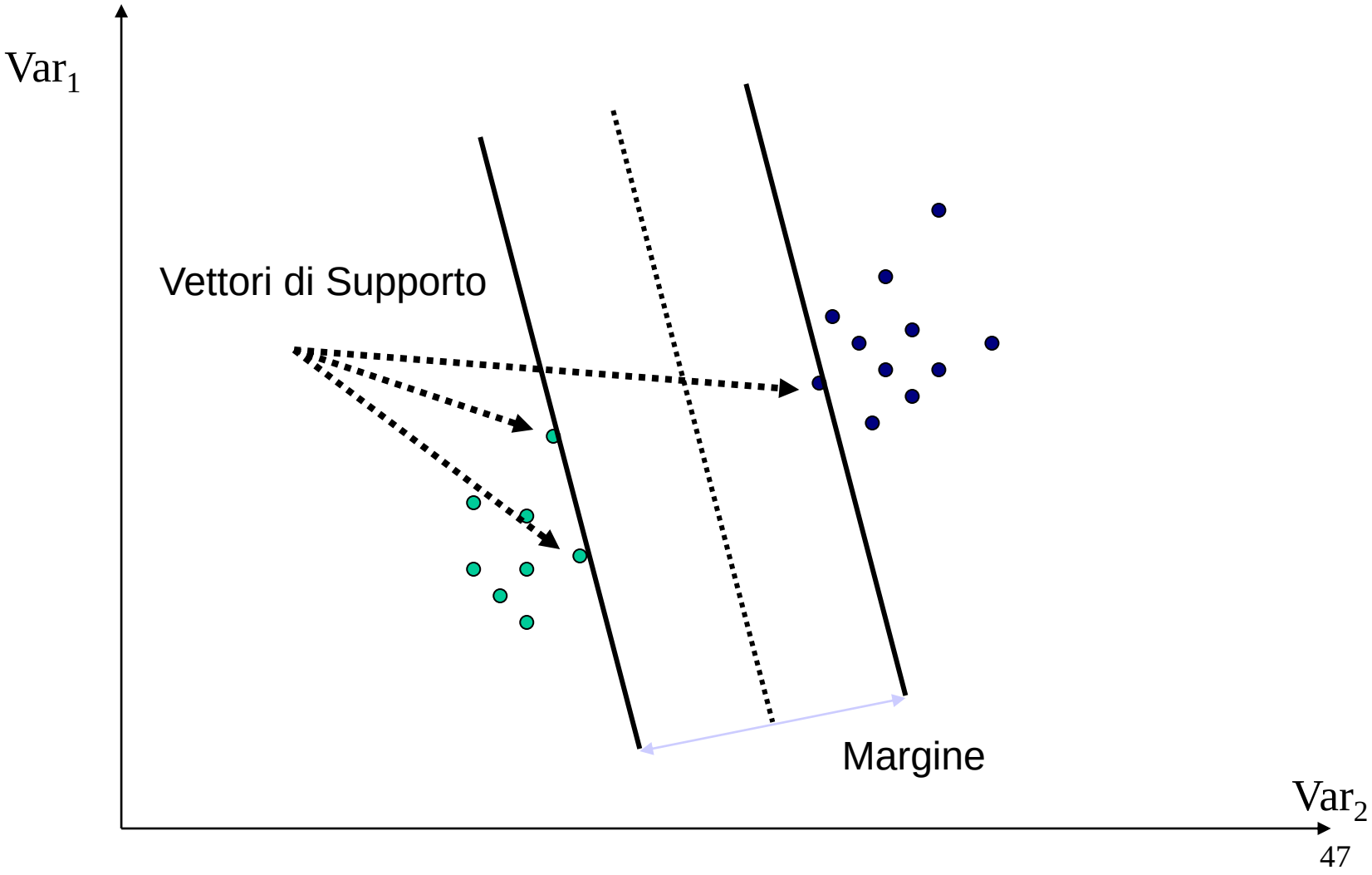
$$\alpha_i \cdot [y_i(\vec{x}_i \cdot \vec{w} + b) - 1] = 0, \quad i = 1, \ldots, l$$

- I **vettori di supporto** sono quegli $\vec{x}_i$ che hanno α_i non nullo, cioè tali che $y_i(\vec{x}_i \cdot \vec{w} + b) = -1$

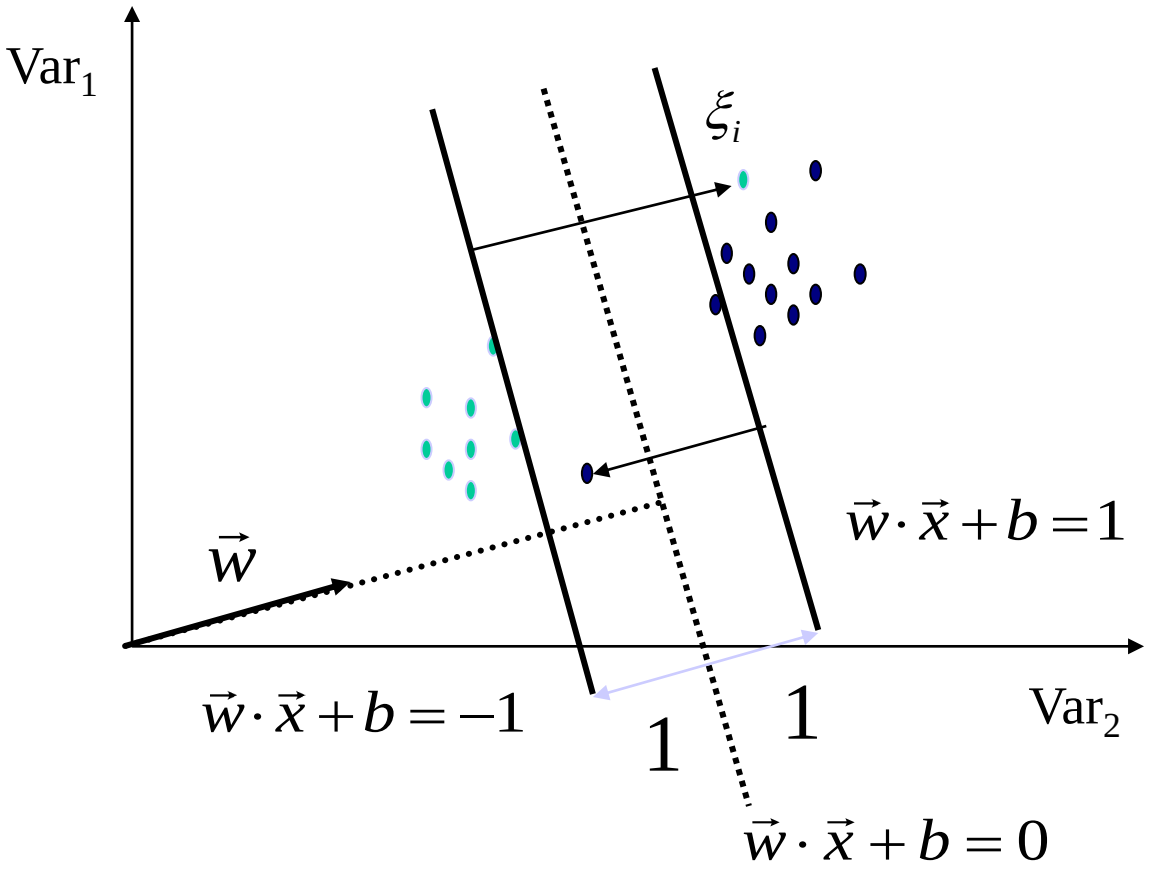
  cioè giacciono sulla frontiera
- Per ricavare *b* applichiamo la seguente formula

$$b^* = -\frac{\vec{w}^* \cdot \vec{x}^+ + \vec{w}^* \cdot \vec{x}^-}{2}$$

Vettori di supporto



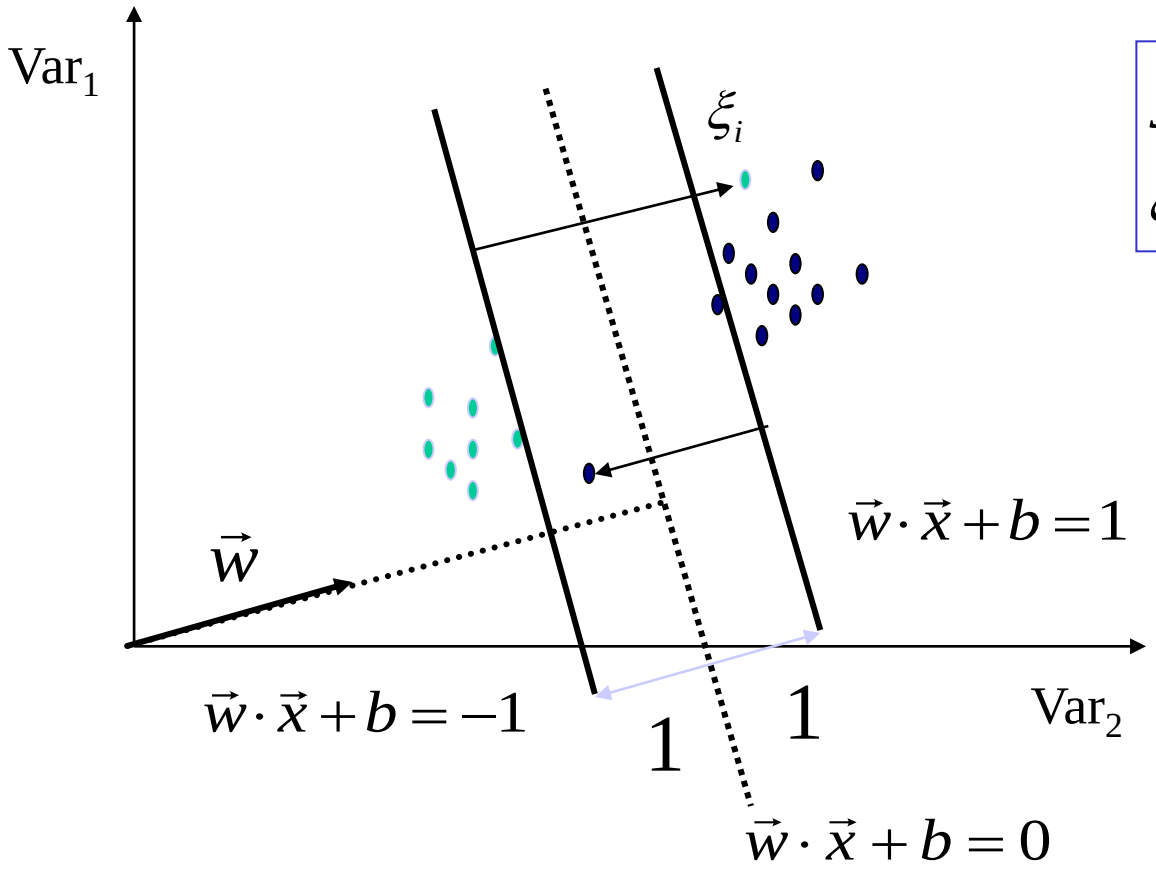
Dati di training non separabili linearmente



Si introducono le variabili di slack ξ_i

Si permettono degli errori penalizzando la funzione di ottimizzazione

Soft Margin SVMs



I nuovi vincoli sono :

$$y_i(\vec{w}\cdot\vec{x}_i+b)\geq 1-\xi_i \quad \forall\vec{x}_i$$
$$\xi_i \geq 0$$

La funzione obiettivo penalizza gli esempi incorrettamente classificati

$$\min \frac{1}{2}\|\vec{w}\|^2 + C\sum_i \xi_i$$

C è il *trade-off* tra margine ed errore

Conversione nel duale

$$\begin{cases} min \quad ||\vec{w}|| + C\sum_{i=1}^{m}\xi_i^2 \\ y_i(\vec{w}\cdot\vec{x_i}+b) \geq 1-\xi_i, \quad \forall i = 1,..,m \\ \xi_i \geq 0, \quad i = 1,..,m \end{cases}$$

$$L(\vec{w},b,\vec{\xi},\vec{\alpha}) = \frac{1}{2}\vec{w}\cdot\vec{w} + \frac{C}{2}\sum_{i=1}^{m}\xi_i^2 - \sum_{i=1}^{m}\alpha_i[y_i(\vec{w}\cdot\vec{x_i}+b)-1]$$

- Deriviamo rispetto a $\vec{w},\vec{\xi}$ e b

Derivate parziali

$$\frac{\partial L(\vec{w}, b, \vec{\xi}, \vec{\alpha})}{\partial \vec{w}} = \vec{w} - \sum_{i=1}^{m} y_i \alpha_i \vec{x}_i = \vec{0} \quad \Rightarrow \quad \vec{w} = \sum_{i=1}^{m} y_i \alpha_i \vec{x}_i$$

$$\frac{\partial L(\vec{w}, b, \vec{\xi}, \vec{\alpha})}{\partial \vec{\xi}} = C\vec{\xi} - \vec{\alpha} = \vec{0}$$

$$\frac{\partial L(\vec{w}, b, \vec{\xi}, \vec{\alpha})}{\partial b} = \sum_{i=1}^{m} y_i \alpha_i = 0$$

Sostituzione nella funzione obiettivo

$$= \sum_{i=1}^{m} \alpha_i - \frac{1}{2} \sum_{i,j=1}^{m} y_i y_j \alpha_i \alpha_j \vec{x_i} \cdot \vec{x_j} + \frac{1}{2C} \vec{\alpha} \cdot \vec{\alpha} - \frac{1}{C} \vec{\alpha} \cdot \vec{\alpha} =$$

$$= \sum_{i=1}^{m} \alpha_i - \frac{1}{2} \sum_{i,j=1}^{m} y_i y_j \alpha_i \alpha_j \vec{x_i} \cdot \vec{x_j} - \frac{1}{2C} \vec{\alpha} \cdot \vec{\alpha} =$$

$$= \sum_{i=1}^{m} \alpha_i - \frac{1}{2} \sum_{i,j=1}^{m} y_i y_j \alpha_i \alpha_j \left(\vec{x_i} \cdot \vec{x_j} + \frac{1}{C} \delta_{ij} \right),$$

- δ_{ij} di Kronecker

Problema duale di ottimizzazione finale

$$\sum_{i=1}^{m} \alpha_i - \frac{1}{2} \sum_{i,j=1}^{m} y_i y_j \alpha_i \alpha_j \left(\vec{x_i} \cdot \vec{x_j} + \frac{1}{C} \delta_{ij} \right)$$

$$\alpha_i \geq 0, \quad \forall i = 1, .., m$$

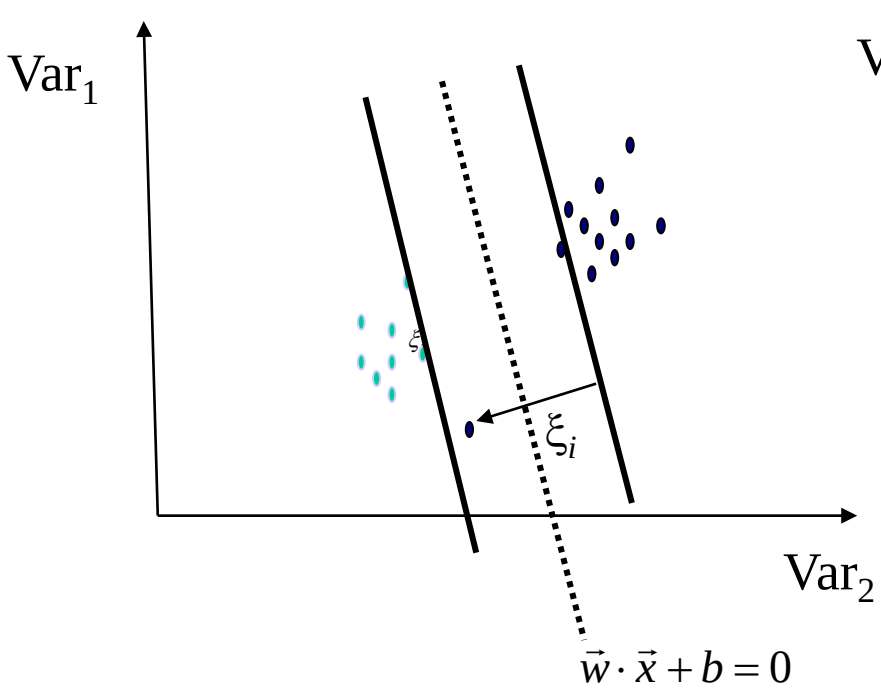
$$\sum_{i=1}^{m} y_i \alpha_i = 0$$

Soft Margin Support Vector Machines

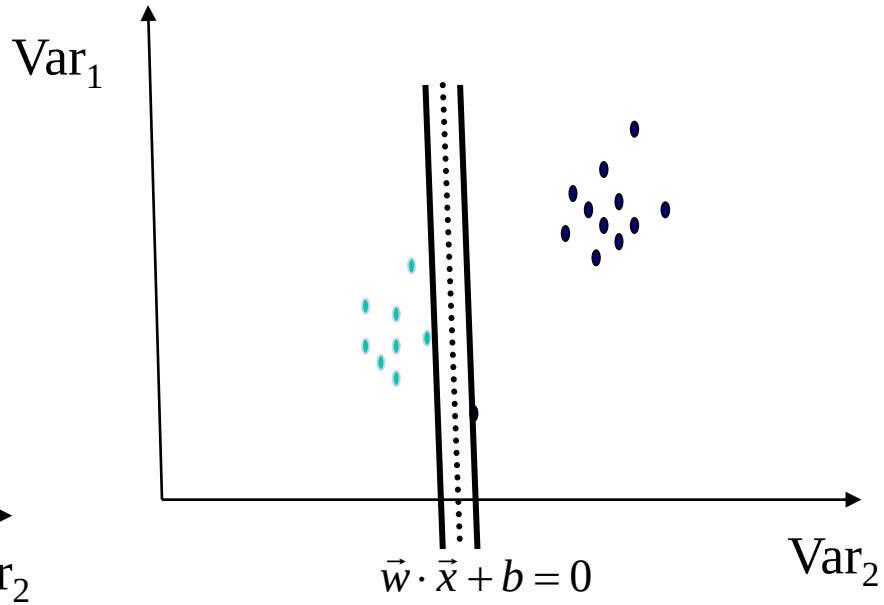
$$\min \frac{1}{2} \| \vec{w} \|^2 + C \sum_i \xi_i \qquad y_i (\vec{w} \cdot \vec{x}_i + b) \geq 1 - \xi_i \quad \forall \vec{x}_i$$
$$\xi_i \geq 0$$

- L'algoritmo prova a mantenere a zero ξ_i e massimizzare il margine
- NB: L'algoritmo non minimizza il numero di errori (problema NP-completo); minimizza la somma delle distanze dall'iperpiano
- Se $C \to \infty$, la soluzione tende a quella del *hard-margin*
- *Attenzione !!!*: se $C = 0$ si ottiene $\| \vec{w} \| = 0$. Infatti posso sempre trovare $y_i b \geq 1 - \xi_i \quad \forall \vec{x}_i$
- Se aumento C tendo a diminuire il numero di errori. All'infinito il numero errori deve essere pari a o. Questa è esattamente la formulazione *hard-margin*.

Robustezza dei *Soft* vs *Hard Margin* SVMs



Soft Margin SVM



Hard Margin SVM

Soft vs Hard Margin SVMs

- *Il Soft-Margin* ha sempre una soluzione
- Il *Soft-Margin* è più robusto rispetto agli esempi *strani*
  - *Vocabolario insufficiente*
  - *Ambiguità molto alta dei termini*
- *L' Hard-Margin* non richiede parametri

La prima proprietà delle SVMs

- La DUALITA è la prima caratteristica delle Support Vector Machines
- SVMs sono learning machines del tipo:

$$f(x) = \text{sgn}(\vec{w} \cdot \vec{x} + b) = \text{sgn}(\sum_{j=1..\ell} \alpha_j y_j \vec{x}_j \cdot \vec{x} + b)$$

- Notare che i dati appaiono solo nel prodotto scalare (sia per il testing che per il training)
- La matrice $G = \left(\left\langle \mathbf{x}_i \cdot \mathbf{x}_j \right\rangle \right)_{i,j=1}^{l}$ è chiamata Gram matrix

SVM-light: un implementazione delle SVMs

- Implementa il *soft margin approach*
- Contiene le procedure per la soluzione dei problemi di ottimizzazione
- Classificatore binario
- Esempi e descrizioni al sito:

  http://www.joachims.org/

  (http://svmlight.joachims.org/)

Riferimenti

- *A tutorial on Support Vector Machines for Pattern Recognition (C.J.Burges)*
  - **URL:** http://www.umiacs.umd.edu/~joseph/support-vector-machines4.pdf
- *The Vapnik-Chervonenkis Dimension and the Learning Capability of Neural Nets (E.D: Sontag)*
  - **URL:** http://www.math.rutgers.edu/~sontag/FTP_DIR/vc-expo.pdf
- Computational Learning Theory
  (Sally A Goldman Washington University St. Louis Missouri)
  - http://www.learningtheory.org/articles/COLTSurveyArticle.ps
- *AN INTRODUCTION TO SUPPORT VECTOR MACHINES (and other kernel-based learning methods)*, N. Cristianini and J. Shawe-Taylor Cambridge University Press
- *The Nature of Statistical Learning Theory*, V. N. Vapnik - Springer Verlag (December, 1999)