Data Science 1

Vorlesung 8 - Klassifikation

Prof. Dr. Christian Bockermann

Hochschule Bochum

Wintersemester 2023/2024

Inhalt

Lineare Klassifikation

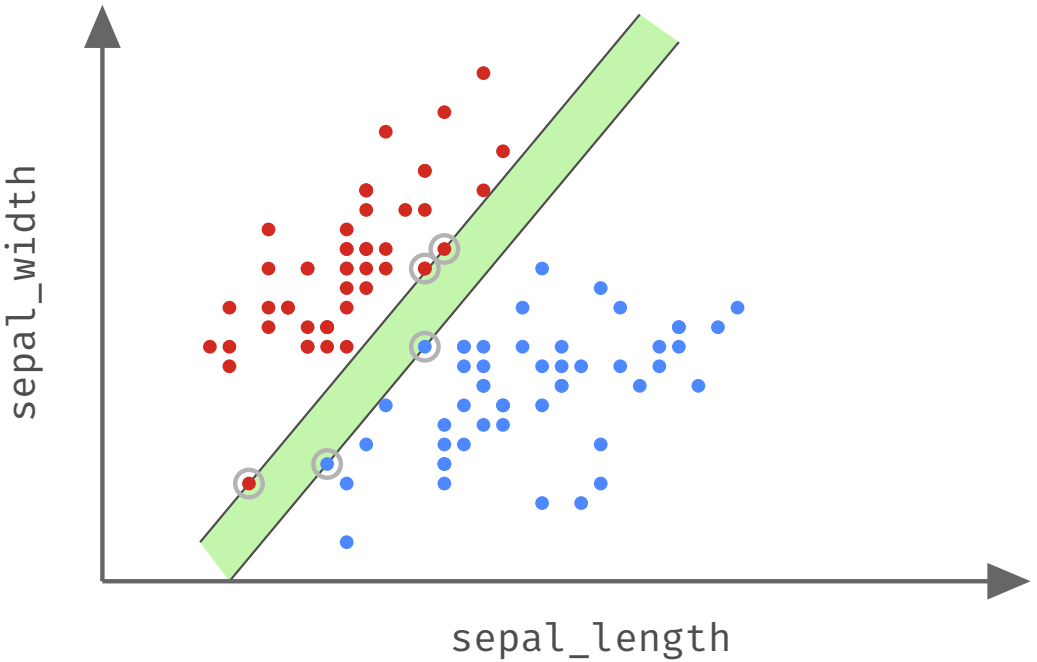
Lineare Modelle zur Klassifikation

- Beschreibung von trennenden Hyperebenen durch lineare Funktionen
- Suche nach bester Ebene/Funktion durch Optimierung
- Optimierung zielt auf Minimierung des Trainingsfehlers ab

Beispiel: Stützvektor-Methode für Klassifikation

- Such Parameter $\mathbf{w}$, b für Ebene
- Optimierung: Maximierung des Abstandes zu beiden Klassen
- Funktioniert gut in hochdimensionalen Räumen

Lineare SVM geht von linearer Separierbarkeit aus



Beste Ebene durch Lösung eines Optimierungsproblems

Das SVM Optimierungsproblem

- SVM nutzt Optimierungsproblem um beste Ebene zu finden
- Vorgehen geht von linearer Separierbarkeit aus
- Lösung = Ebene mit maximalem Abstand

Optimierungsproblem mit Nebenbedingungen

$$\arg\min_{\mathbf{w},b} \frac{1}{2}||\mathbf{w}||^2 \quad \text{mit} \quad (\mathbf{w}^T\mathbf{x}_i + b)y_i \geq 1$$

Das SVM Optimierungsproblem

- SVM nutzt Optimierungsproblem um beste Ebene zu finden
- Vorgehen geht von linearer Separierbarkeit aus
- Lösung = Ebene mit maximalem Abstand

Optimierungsproblem mit Nebenbedingungen

$$\arg\min_{\mathbf{w},b} \frac{1}{2}||\mathbf{w}||^2 \quad \text{mit} \quad \boxed{(\mathbf{w}^T\mathbf{x}_i + b)y_i \geq 1}$$

Finde $\mathbf{w}, b$ mit maximalem Abstand

Bedingungen, dass alle Punkte auf der richtigen Seite liegen

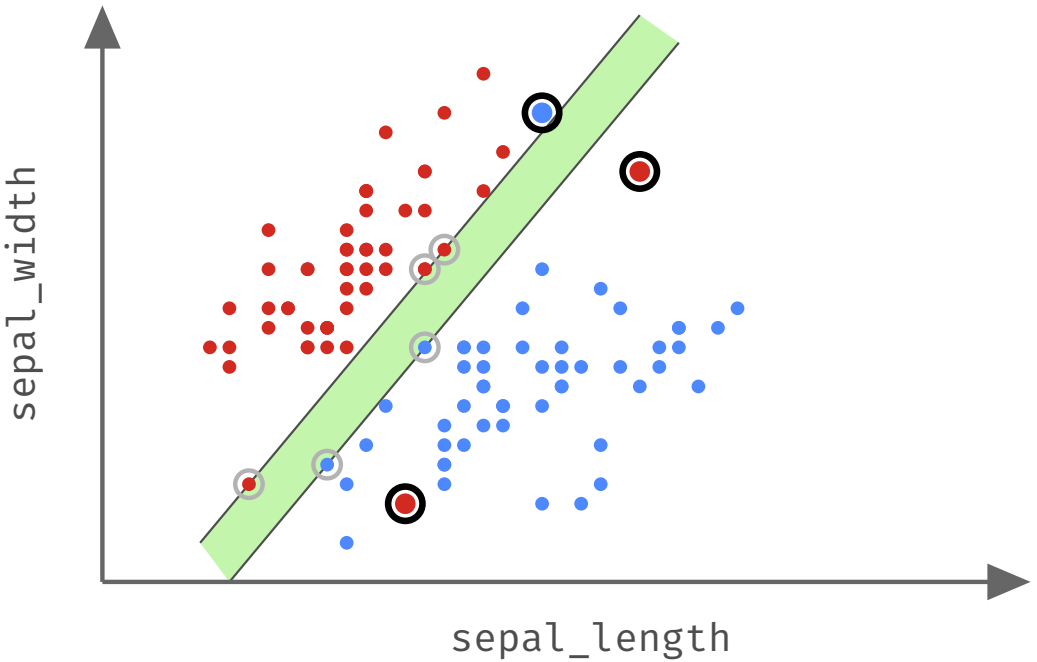
Optimierung mit Nebenbedingungen

$$\arg\min_{\mathbf{w},b} \frac{1}{2}||\mathbf{w}||^2 \quad \text{mit} \quad (\mathbf{w}^T\mathbf{x}_i + b)y_i \geq 1$$

lässt sich mit Lagrange-Optimierung formulieren als

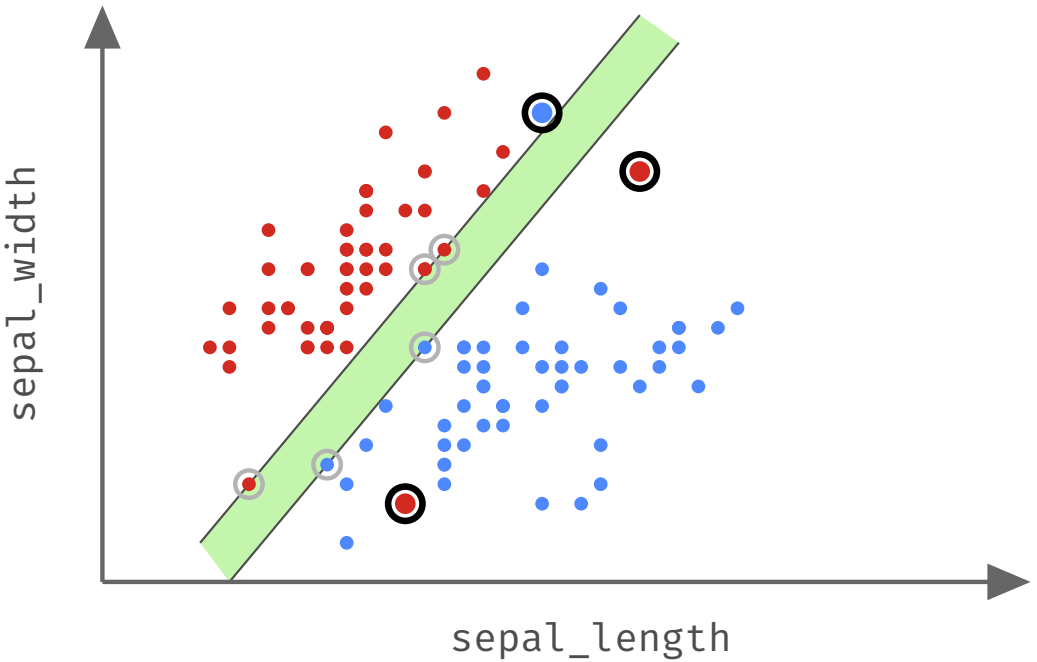
$$L(\mathbf{a}, \mathbf{w}, b) = \frac{1}{2}||\mathbf{w}||^2 + \sum_{i=1}^{n} a_i \left[y_i(\mathbf{w}^T\mathbf{x}_i + b) - 1 \right]$$

Lineare SVM geht von linearer Separierbarkeit aus



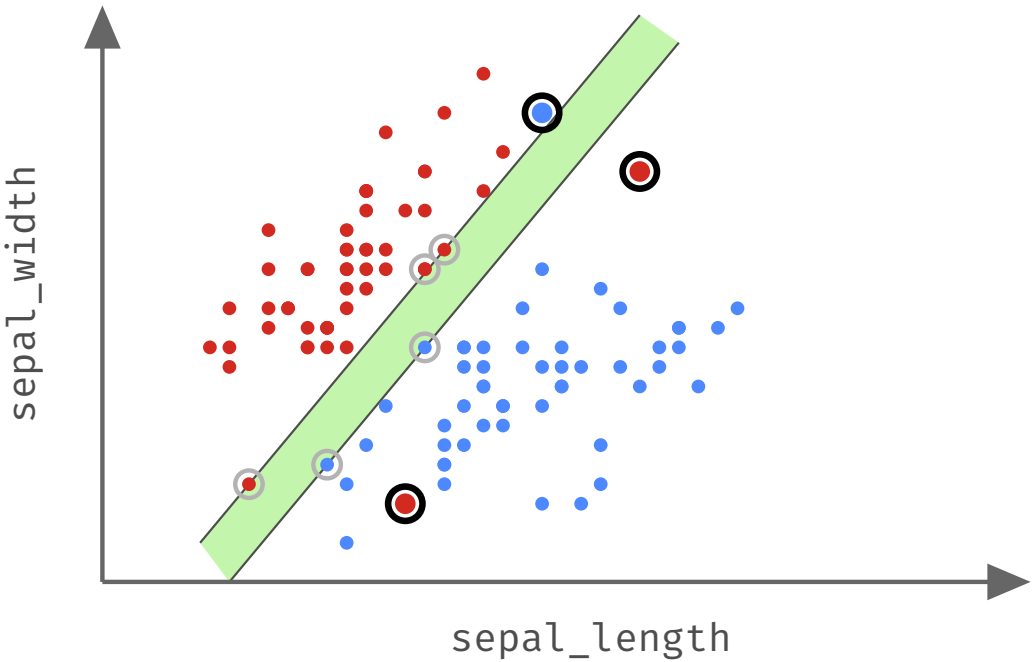
- Was ist, wenn es Ausnahmen in den Daten gibt?

Lineare SVM geht von linearer Separierbarkeit aus



- Was ist, wenn es Ausnahmen in den Daten gibt?
- Dann sind einige Bedingungen verletzt $\Rightarrow$ keine Lösung

Lineare SVM geht von linearer Separierbarkeit aus

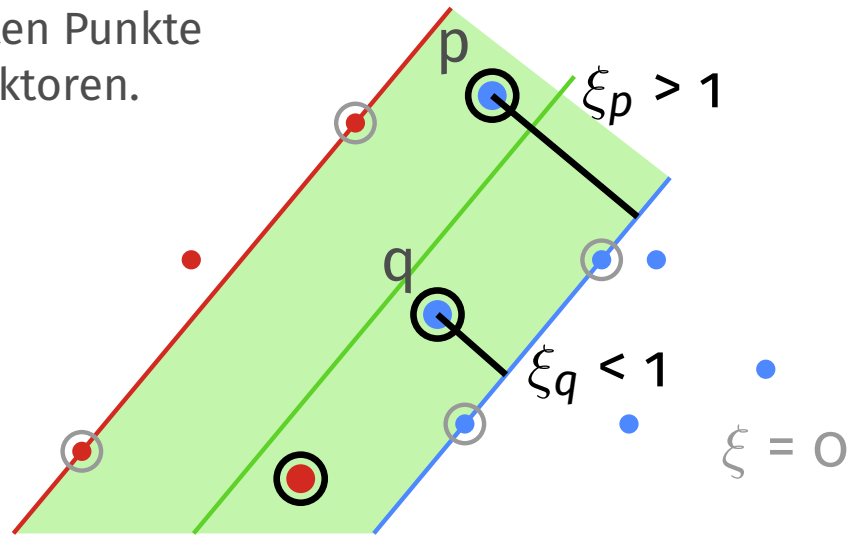


- Was ist, wenn es Ausnahmen in den Daten gibt?
- Dann sind einige Bedingungen verletzt $\Rightarrow$ keine Lösung

Wie kommen wir trotzdem zu einer Lösung?

Idee: Strafpunkte für Ausnahmen im Trainingsdatensatz

Alle eingekreisten Punkte sind Stützvektoren.



- Punkte im richtigen Bereich bekommen ein $\xi = 0$ (keine Strafe)
- Punkte auf richtiger Seite im Margin bekommen ein $\xi < 1$ (leichte Strafe)
- Punkte auf falscher Seite bekommen ein $\xi > 1$ (große Strafe)

Idee: Strafpunkte für Ausnahmen im Trainingsdatensatz

- Erlaubt kleine Fehler im Training
- Lösung = Ebene mit minimalen Strafpunkten

Optimierungsproblem mit Strafpunkten:

$$\arg\min_{\mathbf{w},b} \frac{1}{2}||\mathbf{w}||^2 + C\sum_{i=1}^{n} \xi_i$$

- Parameter C gibt an, wie stark die Fehler gewertet werden

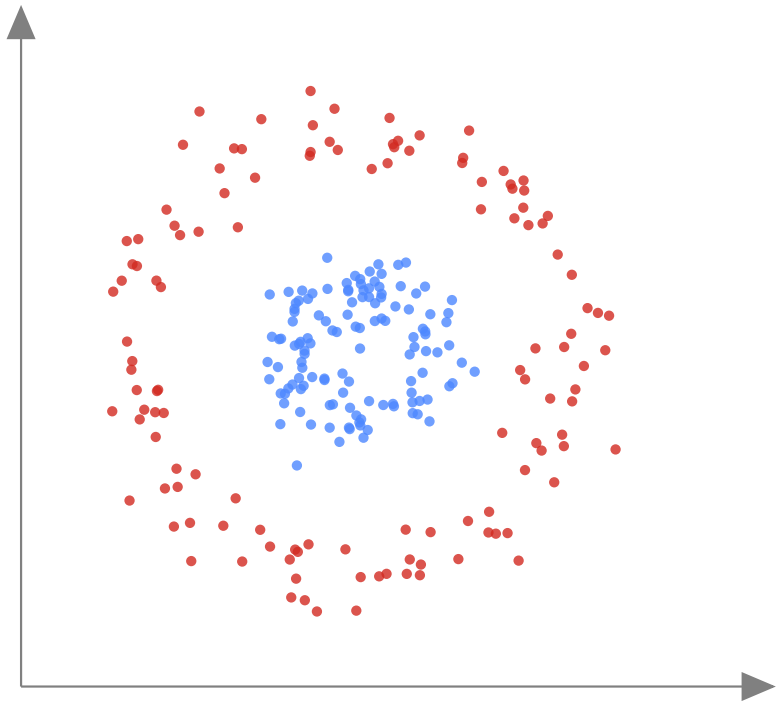
SVM Modell mit Parameter C in SciKit Learn

```
# SVC = SupportVectorClassifier
from sklearn.svm import SVC

# Lineare SVM mit C=100
m = SVC(kernel="linear", C=100).
```

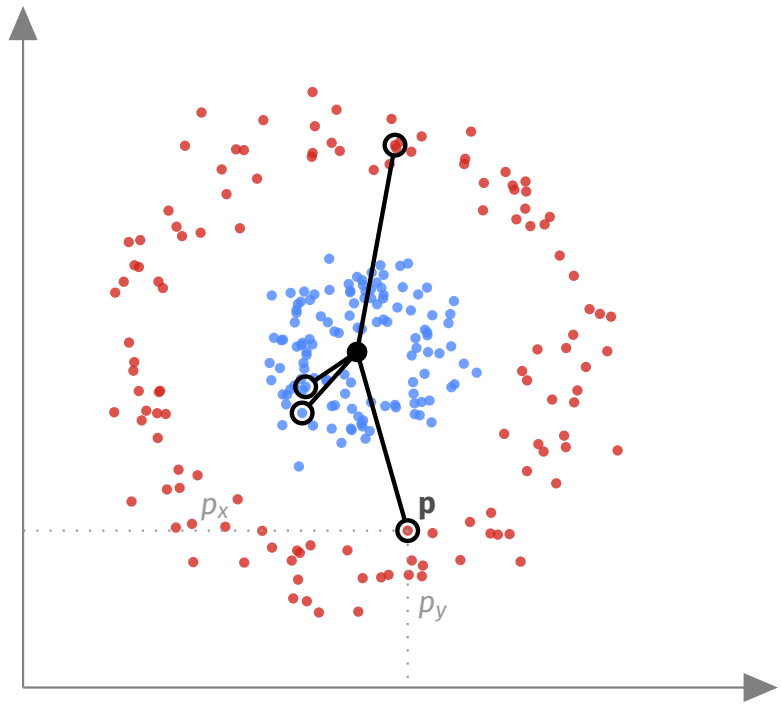
- Parameter *C* ist wichtigster *Einstellknopf* für SVMs
- Jede SVM Implementierung enthält Parameter *C*

Nicht-lineare Separierbarkeit

Problem: Was ist, wenn Strafpunkte nicht ausreichen?



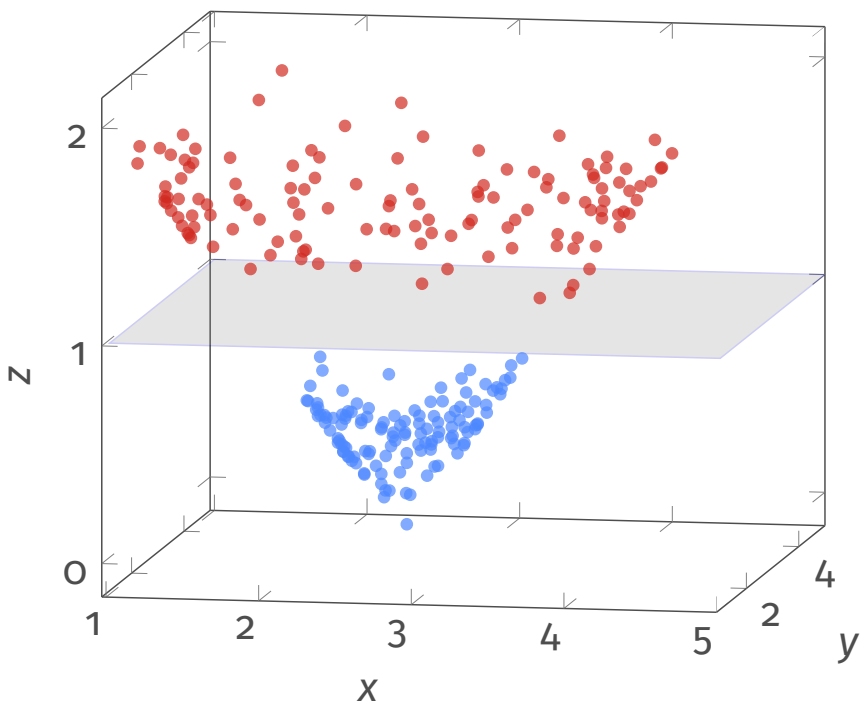
Problem: Was ist, wenn Strafpunkte nicht ausreichen?



Mögliche Idee:
Betrachte die Abstände zum Mittelpunkt $\mathbf{c} = (c_x, c_y)$

$$d(\mathbf{c}, \mathbf{p}) = \sqrt{(c_x - p_x)^2 + (c_y - p_y)^2}$$

Problem: Was ist, wenn Strafpunkte nicht ausreichen?



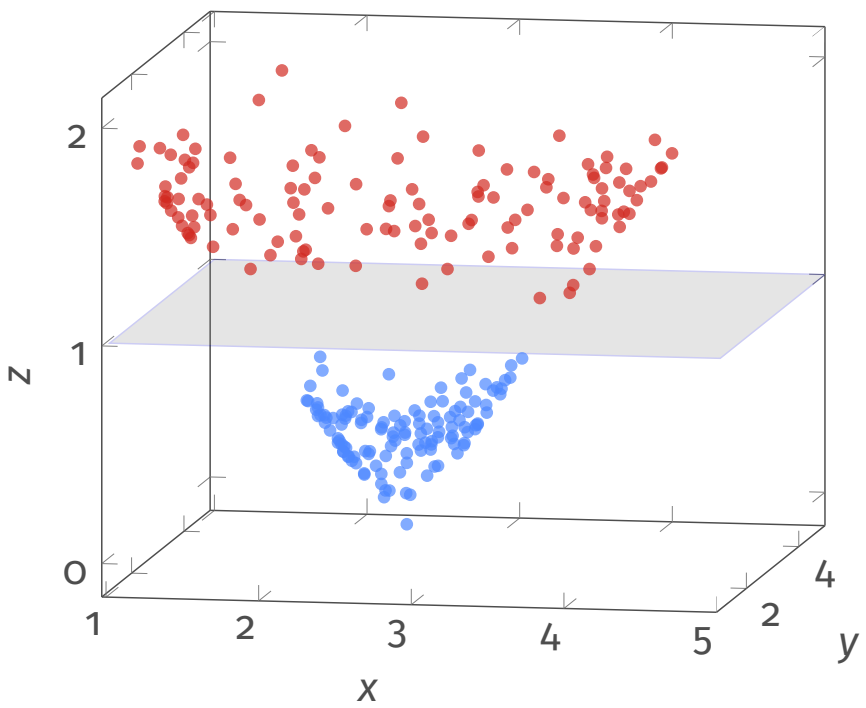
Mögliche Idee:
Betrachte die Abstände zum Mittelpunkt $\mathbf{c} = (c_x, c_y)$

$$d(\mathbf{c}, \mathbf{p}) = \sqrt{(c_x - p_x)^2 + (c_y - p_y)^2}$$

Und transformiere die Daten in einen höherdimensionalen Raum mit neuer Dimension z:

$$\mathbf{p} = \underbrace{(p_x, p_y)}_{\in \mathbb{R}^2} \mapsto \underbrace{(p_x, p_y, d(\mathbf{c}, \mathbf{p}))}_{\in \mathbb{R}^3}$$

Problem: Was ist, wenn Strafpunkte nicht ausreichen?



Mögliche Idee:
Betrachte die Abstände zum Mittelpunkt $\mathbf{c} = (c_x, c_y)$

$$d(\mathbf{c}, \mathbf{p}) = \sqrt{(c_x - p_x)^2 + (c_y - p_y)^2}$$

Und transformiere die Daten in einen höherdimensionalen Raum mit neuer Dimension z:

$$\mathbf{p} = \underbrace{(p_x, p_y)}_{\in \mathbb{R}^2} \mapsto \underbrace{(p_x, p_y, d(\mathbf{c}, \mathbf{p}))}_{\in \mathbb{R}^3}$$

- Lineare Separierbarkeit in höherdimensionalem Raum
- Transformation in der Theorie meist mit Φ bezeichnet

Problem: Transformation von Daten ist aufwendig!

Idee: SVM braucht höhere Dimension nur im Skalarprodukt!

$$L(\mathbf{a}, \mathbf{w}, b) = \frac{1}{2}||\mathbf{w}||^2 + \sum_{i=1}^{n} a_i \left[y_i(\underbrace{\langle \mathbf{w}, \mathbf{x}_i \rangle}_{=:k(\mathbf{w},\mathbf{x}_i)} + b) - 1 \right]$$

Statt $\langle \mathbf{w}, \mathbf{x}_i \rangle$ nehmen wir nun $\langle \Phi(\mathbf{w}), \Phi(\mathbf{x}_i) \rangle$, d.h. wir berechnen das Skalarprodukt von $\mathbf{w}$ und $\mathbf{x}_i$ im höherdimensionalen Raum.

$k(\mathbf{w}, \mathbf{x}_i) = \langle \Phi(\mathbf{w}), \Phi(\mathbf{x}_i) \rangle$ wird als Kern-Funktion (*kernel*) bezeichnet.

Idee: Kern-Funktionen ersparen die Transformation

- Transformation lässt sich in Kern-Funktion integrieren
- Kern-Funktion k berechnet Skalarprodukt in höher-dimensionalen Räumen
- Mit $k(\mathbf{v}, \mathbf{w}) = \langle \mathbf{v}, \mathbf{w} \rangle$ ergibt sich die lineare SVM

Weitere bekannte Kern-Funktionen

- RBF Kern (Radial Basis Functions):

$$k(\mathbf{v}, \mathbf{w}) = \exp\left(-\gamma(||v - w||^2)\right) \text{ , mit freiem Parameter } \gamma$$

- Polynomielle Kern-Funktion

$$k(\mathbf{v}, \mathbf{w}) = (\langle \mathbf{v}, \mathbf{w} \rangle + r)^p \text{ , für } r \geq 0, p \geq 1$$

Kern-Funktionen natürlich auch in SciKit-Learn

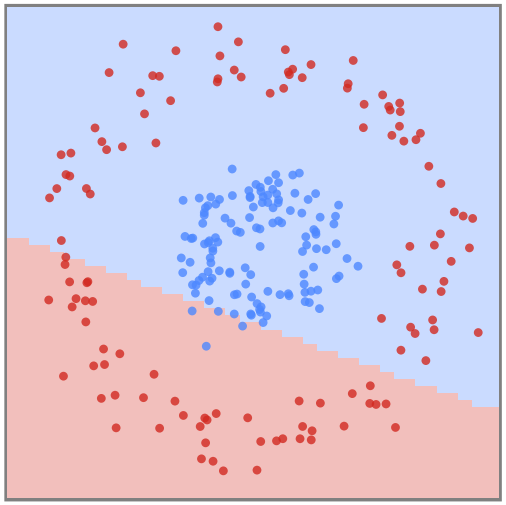
```
from sklearn.svm import SVC

rbf1 = SVC(gamma=2)   # default: RBF Kern

rbf2 = SVC(kernel="rbf", gamma=2)

# polynomieller kern mit Parametern r und p:
poly = SVC(kernel="polynomial", degree=p, coef0=r)

# lineare SVM
lin = SVC(kernel="linear")
```

Kern-Funktionen natürlich auch in SciKit-Learn

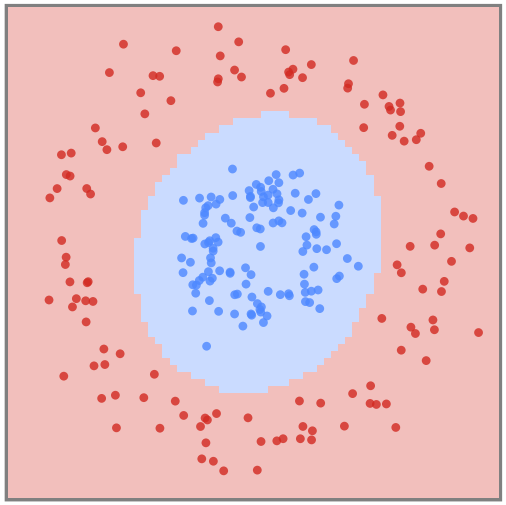
```
from sklearn.svm import SVC

rbf1 = SVC(gamma=2)   # default: RBF Kern

rbf2 = SVC(kernel="rbf", gamma=2)

# polynomieller kern mit Parametern r und p:
poly = SVC(kernel="polynomial", degree=p, coef0=r)

# lineare SVM
lin = SVC(kernel="linear")
```

Dazu kommt noch Parameter C für die Straf-Kosten!

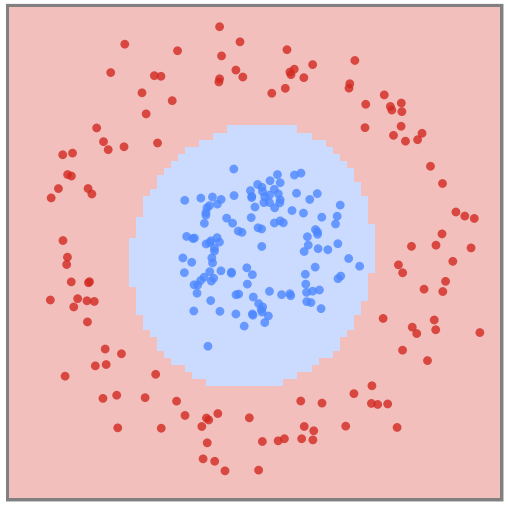
Beispiele: SVM Model mit verschiedenen Parametern



Linearer Kern, C=100



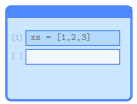
Polynomieller Kern, degree=3, coef0=2, C=100



RBF Kern, gamma=0.1, C=100

Beispiele: SVM Model mit verschiedenen Parametern

- Die vorherigen Plots wurden auf synthetischen Daten erstellt
- Hilfreich, um selbst zu experimentieren
- Versuchen Sie die Beispiele im Notebook nachzuvollziehen!



Probieren Sie es im Notebook aus!

Notebook: Vorlesung/V8-Klassifikation-SVM-ZweiKreise