

Support Vector Machines ... in a Nutshell

Björn Schuller

Dr.-Ing. cand. habil.

 Lehrstuhl für Mensch-Maschine-Kommunikation
Technische Universität München

Freitag, 1. Juli 2011, 10:30 – 12:00

Promotionsprogramm "Empirische Sprachverarbeitung"

Institut für Phonetik und Sprachverarbeitung, Ludwig-Maximilians-Universität München

Outline

Einleitung

SVM & SVR

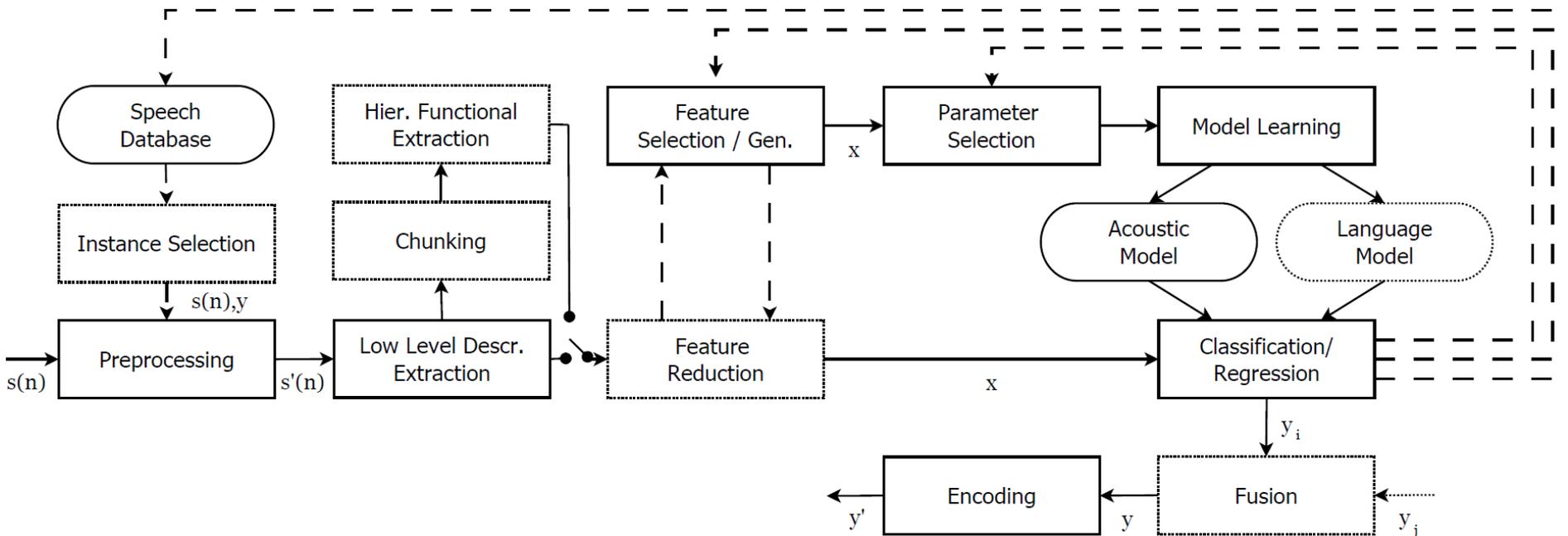
Praxis

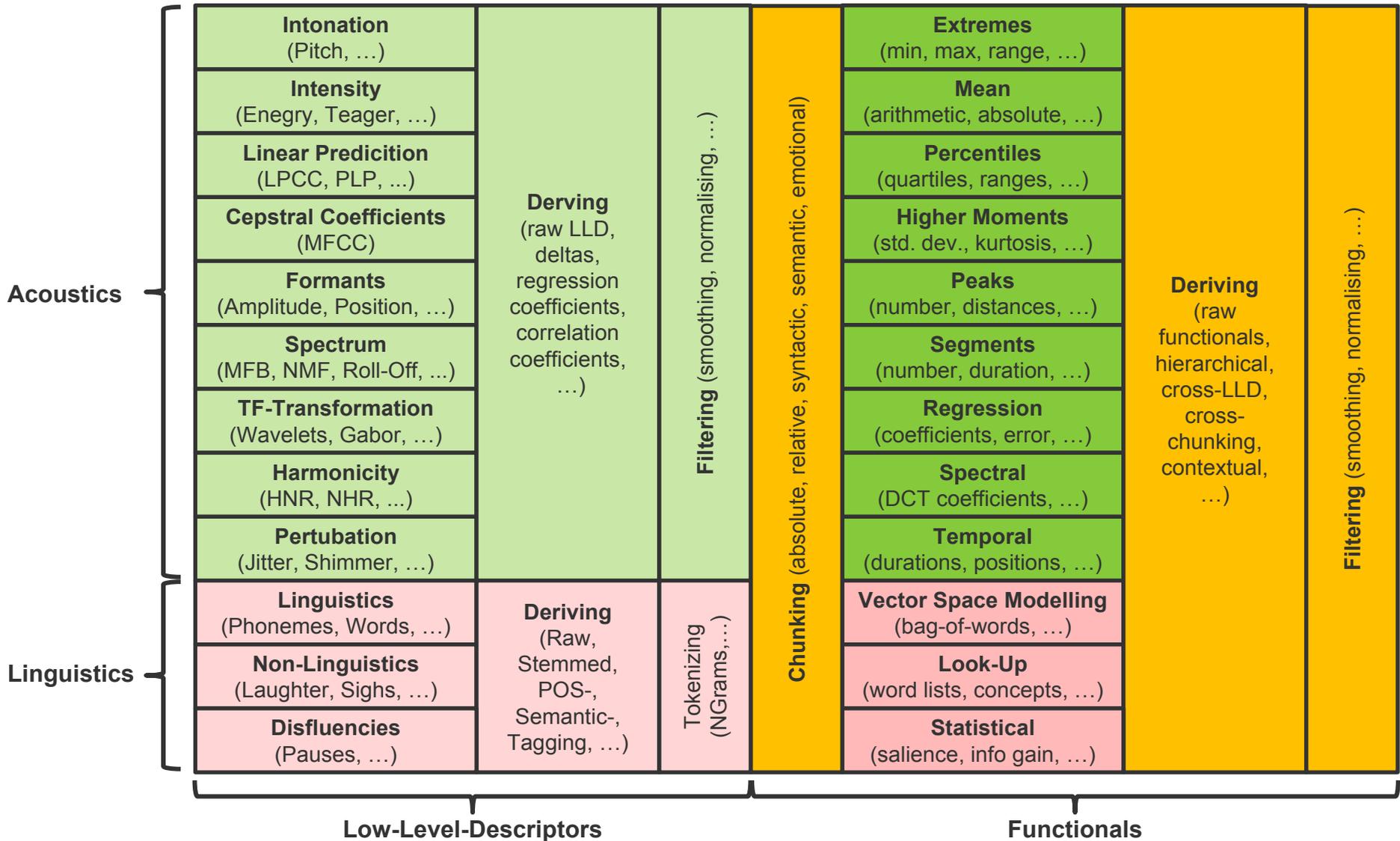
Diskussion

Einleitung

Einleitung

- **Audioklassifikation**
Überblick





Anforderungen Klassifikation

Adäquate Modellierung

Dynamische / statische Klassifikation

Daten- / wissensgetrieben

Umgang mit fehlenden Werten

Umgang mit Unsicherheiten

Trainingsstabilität

Modell- / instanzbasiert

Transparenz

Lösbarkeit nichtlinearer Probleme

Maximierte Diskriminativität der Klassen

Priorisierung von Merkmalen

Optimale Erkennungsleistung

Toleranz ggü. Dimensionserhöhung

Nachtrainierbarkeit

Hohe Verallgemeinerungsfähigkeit

Adaption an Komplexität

Einsetzbarkeit diverser Merkmalsets

Anforderungen Klassifikation

Effizienz

Echtzeitfähigkeit in der Erkennung

Kurze Trainingszeit

Geringer Bedarf an Lernbeispielen

Geringer Bedarf an Rechenleistung

Geringer Bedarf an Speicher

Ökonomische Faktoren

Günstige Umsetzbarkeit in Hardware

Merkmalsreduktion ohne Trainingsbedarf

Angabe über Sicherheit der Klassifikation

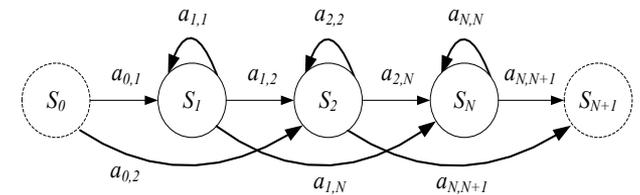
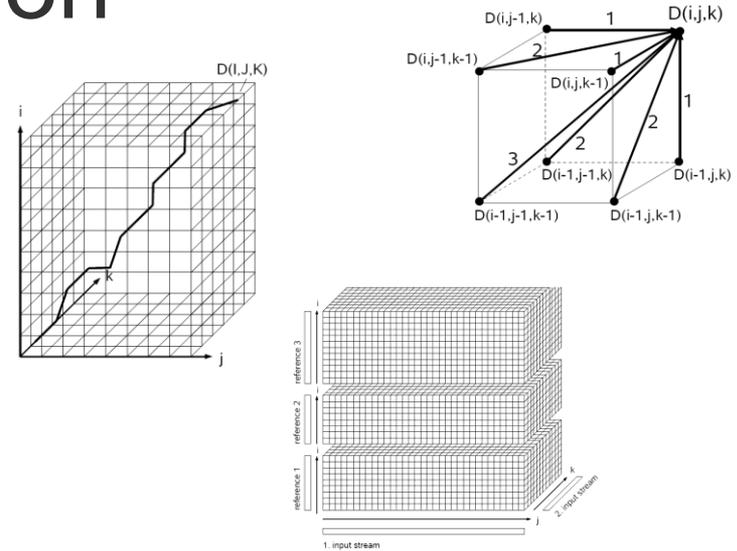
Optimale Integration

Klassenbezogene Sicherheit

Berücksichtigung von Eingangsunsicherheiten

Dynamische Klassifikation

- **Dynamische Programmierung**
Multidimensionaler-DTW
- **Dynamische Bayessche Netze**
Hidden Markov Modelle
- **Hidden Conditional Random Fields**



$$\lambda = (\underline{A}, b_1, \dots, b_N)$$

$$g(\underline{x}, \underline{m}_i, \underline{C}_i) = \frac{1}{\sqrt{(2\pi)^n \cdot |\underline{C}_i|^2}} \cdot e^{\left(-\frac{1}{2}(\underline{x}-\underline{m}_i)^T \cdot \underline{C}_i^{-1} \cdot (\underline{x}-\underline{m}_i)\right)}$$

Statische Klassifikation

$$d_r(\underline{x}, \underline{x}_l) = r \sqrt{\sum_{i=1}^N |x_i - x_{l,i}|^r} \quad \kappa_e = \underset{\kappa}{\operatorname{argmin}} d(\underline{x}, \underline{x}_{l,\kappa})$$

- **Lazy Learners**

Abstandsklassifikatoren

- **Stochastische Klassifikatoren**

Gaußsche Mixtur Modelle

(Diskriminative) Bayessche Netze

- **Funktionen**

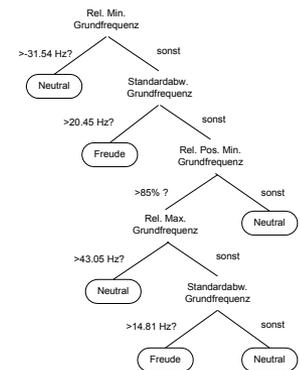
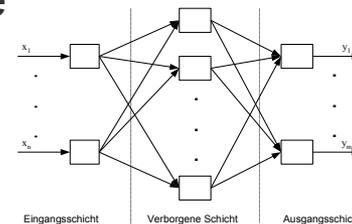
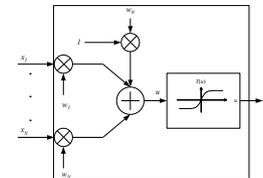
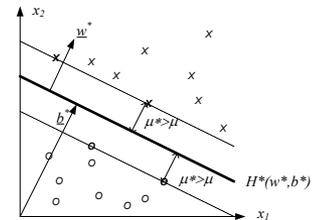
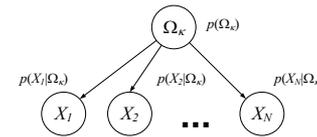
Support-Vektor-Maschinen/Regression

(Long-Short-Term-Memory) Rekurrente Netze

Conditional Random Fields

- **Bäume**

Random Forests



Metaklassifikation

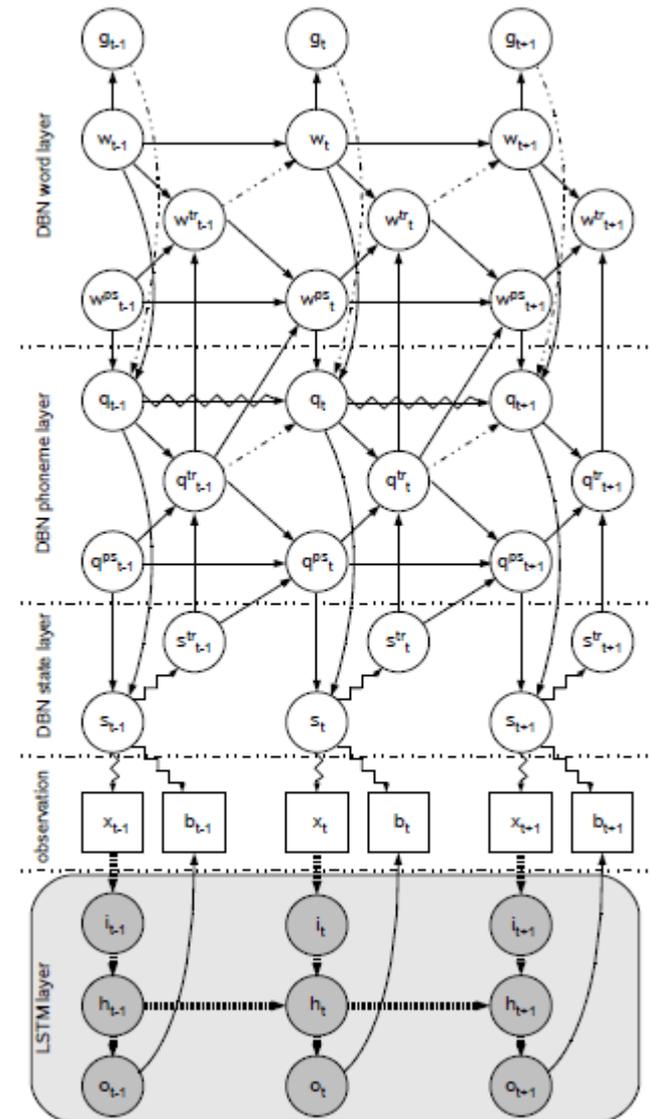
- **Dynamisch/Statisch**

Tandem
Hybrid

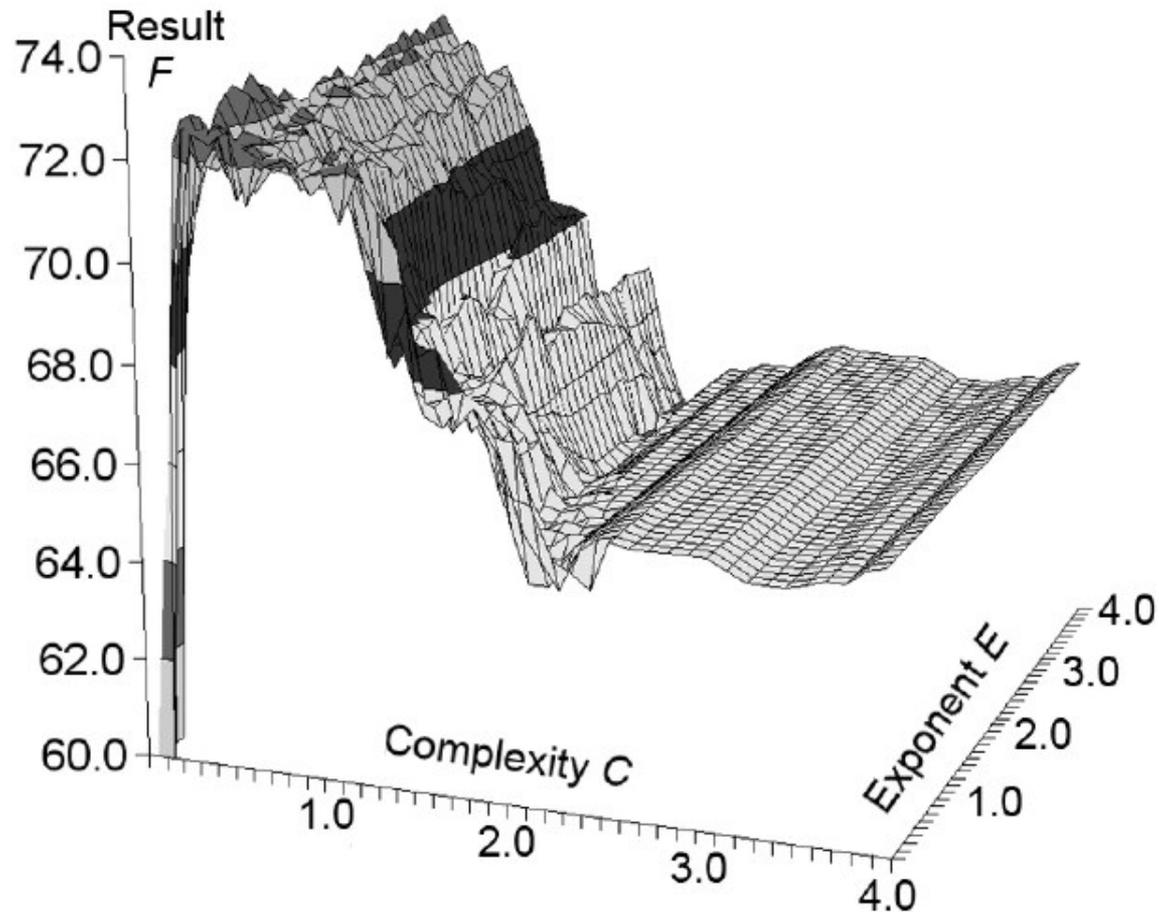
- **Metlernen**

Ensembles (Boosting, Bagging, ...)
Stacking
ROVER

$$\varepsilon = E \left\{ (\hat{\theta} - \theta)^2 \right\} = \left[E(\hat{\theta}) - \theta \right]^2 + E \left\{ \left[\hat{\theta} - E(\hat{\theta}) \right]^2 \right\}$$



Parametrierung



SVM & SVR

Support-Vektor-Maschinen

- **Hintergrund**

Vapnik 1995

Analogon zur Elektrostatik:

Trainingsbeispiel: Geladener Leiter an bestimmten Ort im Raum

Entscheidungsfkt.: Elektrostatische Potentialfunktion

Lernzielfunktion: Coulomb'sche Energie

Support-Vektor-Maschinen

- **Prinzip**

Linearer Klassifikator

(ähnlich Perzeptron mit linearer Aktivierungsfunktion)

Kombiniert mit nichtlinearer Abbildung in höherdim. Entscheidungsraum

Linearer Klassifikator dabei aus Untermenge der Lernbeispiele

Sogenannte *Stützvektoren*

Dadurch geringe Gefahr der Überadaption an die Lernmenge

Auswahl Stützvektoren durch klassisches quadr. Optimierungsverfahren

Support-Vektor-Maschinen

- **Prinzip**

Zunächst: Trennung von 2 Klassen

$$\mathcal{L} = \{(\mathbf{r}_l, y_l) \mid l = 1, \dots, L\} \text{ mit } y_l \in \{+1, -1\}$$

Hyperbene: Normalenvektor und Bias

$$H(\mathbf{w}, b) = \{\mathbf{r} \mid \mathbf{w}^T \mathbf{r} + b = 0\}$$

So dass:

$$y_l = +1 \Rightarrow \mathbf{w}^T \mathbf{r}_l + b \geq +1,$$

$$y_l = -1 \Rightarrow \mathbf{w}^T \mathbf{r}_l + b \leq -1$$

Support-Vektor-Maschinen

- **Prinzip**

Vorzeichenbehafteter Abstand zur Hyperebene:

$$D(\mathbf{r}) = \frac{\mathbf{w}^T \mathbf{r} + b}{\|\mathbf{w}\|}$$

Trennbreite (Margin of Separation):

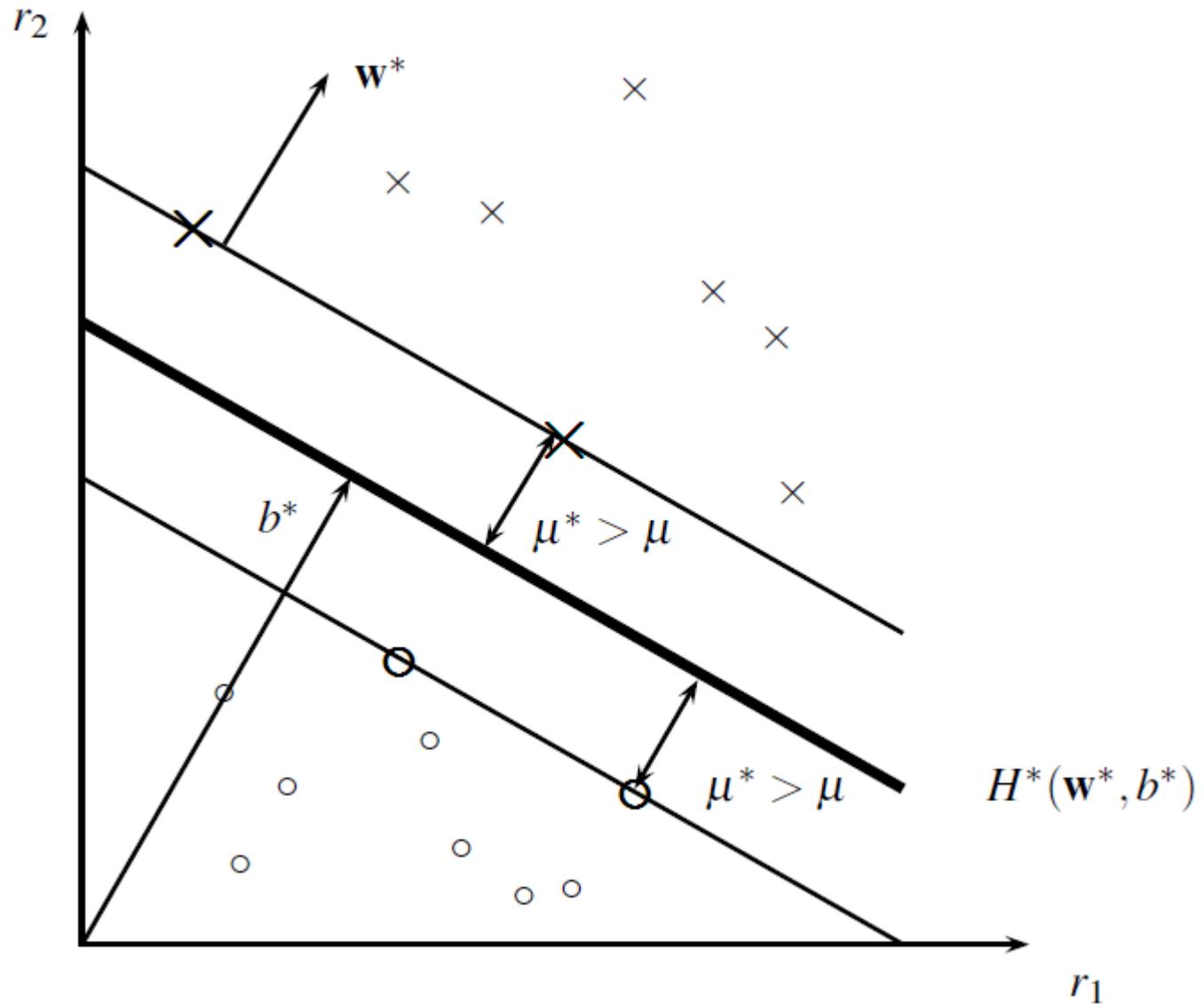
$$\mu_{\mathcal{L}}(\mathbf{w}, b) = \min_{l=1, \dots, L} |D(\mathbf{r}_l)|$$

Ziel: Maximale Diskriminativität, d.h., max. Trennbreite

Instanzen, die Hyperebene am nächsten sind, sind Stützvektoren

Abstand Stützvektoren: $D^*(\mathbf{r}_l^{sv}) = \frac{\pm 1}{\|\mathbf{w}\|}$ Korridorbreite: $2 \|\mathbf{w}\|^{-1}$

SVM



Support-Vektor-Maschinen

- **Prinzip**

Statt Maximierung der Korridorbreite $2 \|\mathbf{w}\|^{-1}$ Minimierung von $\frac{1}{2} \mathbf{w}^T \mathbf{w}$
(streng konvex, eindeutiges Minimum)

Daraus lineare Randbedingungen für Optimierung:

$$y_l (\mathbf{w}^T \mathbf{r}_l + b) - 1 \geq 0 \text{ mit } l = 1, \dots, L$$

Lösung des Randwertproblems u. A. mit Lagrange'schen Multiplikatoren

Im Allgemeinen keine Hyperbene zur fehlerfreien Trennung

Schlupfvariable:

$$\xi_l \geq 0, l = 1, \dots, L.$$

(Slack-Variable)

$$y_l = +1 \Rightarrow \mathbf{w}^T \mathbf{r}_l + b \geq +1 - \xi_l,$$

(Soft Margin)

$$y_l = -1 \Rightarrow \mathbf{w}^T \mathbf{r}_l + b \leq -1 + \xi_l$$

Support-Vektor-Maschinen

- **Prinzip**

Mit G als Fehlergewichtfaktor nun zu minimieren (primales Problem):

$$\frac{1}{2} \mathbf{w}^T \mathbf{w} + G \cdot \sum_{l=1}^L \xi_l$$

Äquivalent zu dualem Problem der Maximierung:

$$\sum_{l=1}^L a_l - \frac{1}{2} \sum_{k=1}^L \sum_{l=1}^L a_k a_l y_k y_l (\mathbf{r}_k^T \mathbf{r}_l)$$

Mit Nebenbedingungen: $0 \leq a_l \leq C, l = 1, \dots, L,$

$$\sum_{l=1}^L a_l y_l = 0$$

Support-Vektor-Maschinen

- **Prinzip**

Hyperebene nun definiert durch:

$$\mathbf{w} = \sum_{l=1}^L a_l y_l \mathbf{r}_l, \quad a_l \leq C, l = 1, \dots, L$$

$$b = y_{l^*} (1 - \xi_{l^*}) - \mathbf{r}_{l^*}^T \mathbf{w}_{l^*}$$

l^* : Index des Vektors \mathbf{r}_l mit größtem a_l

C: frei bestimmbar

Einführung der Gewichtskoeff.: Eliminierung der Schlupfvariablen

Normalenvektor ist gewichtete Summe der Trainingsbeispiele

Stützvektoren sind diejenigen Vektoren mit $a_l > 0$.

Praxis: Häufig *Sequentielle Minimale Optimierung* (SMO) zur Lösung

Support-Vektor-Maschinen

- **Prinzip**
Klassifikation

$$d_{\mathbf{w},b} : \mathbf{R} \rightarrow \{-1, +1\}$$

$$d_{\mathbf{w},b}(\mathbf{r}) = \text{sgn}(\mathbf{w}^T \mathbf{r} + b)$$

$$\text{sgn}(u) = \begin{cases} 1 & u \geq 0 \\ -1 & u < 0 \end{cases}$$

Bisher: nur linear trennbare Zweiklassenprobleme

Support-Vektor-Maschinen

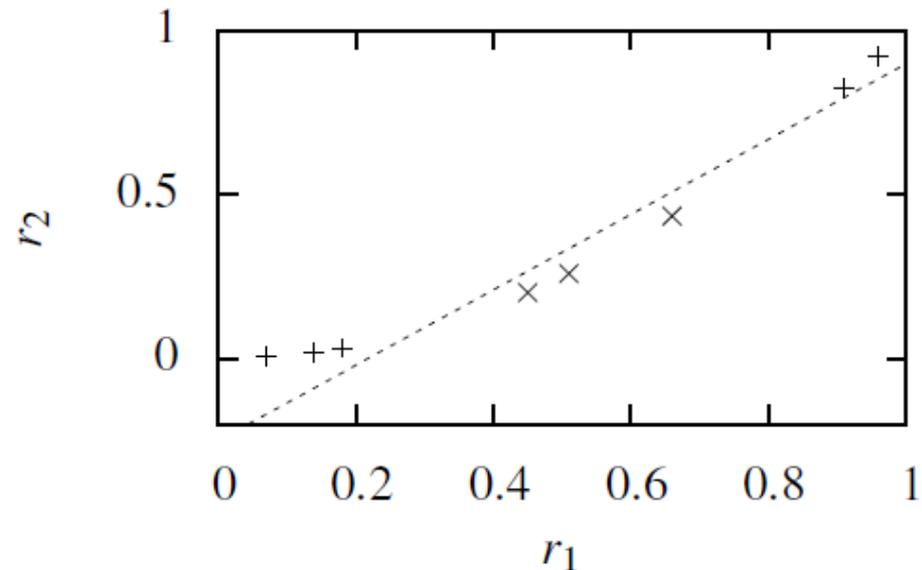
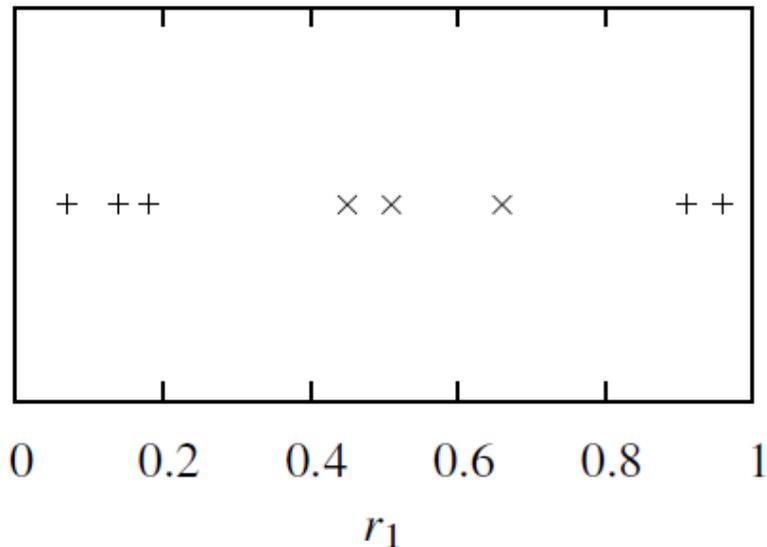
- **Kerneltrick**

Nichtlineare Transformation in höherdimensionalen Raum

$$\Phi : \mathbf{R} \rightarrow \mathbf{R}', \quad \dim(\mathbf{R}') > \dim(\mathbf{R})$$

Dort linear trennbar („hoffentlich“), Beispiel:

$$\Phi : r_1 \mapsto (r_1, r_1^2)$$



Support-Vektor-Maschinen

- **Kerneltrick**

Normalenvektor:
$$\mathbf{w} = \sum_{l:a_l>0} a_l y_l \boldsymbol{\Phi}(\mathbf{r}_l)$$

Entscheidungsfunktion:

$$d_{\mathbf{w},b}(\mathbf{r}) = \text{sgn}(\mathbf{w}^T \boldsymbol{\Phi}(\mathbf{r}) + b)$$

Da:
$$\mathbf{w}^T \boldsymbol{\Phi}(\mathbf{r}) = \sum_{l:a_l>0} a_l y_l \boldsymbol{\Phi}(\mathbf{r}_l)^T \boldsymbol{\Phi}(\mathbf{r})$$

Transformation nicht zur Parameterschätzung/Klassifikation expl. benötigt

Stattdessen *Kernelfunktion*

(pos. semidefinit, symmetrisch, Cauchy-Schwarz-Ungleichung erfüllen)

$$K^\Phi(\mathbf{r}, \mathbf{s}) = \boldsymbol{\Phi}(\mathbf{r})^T \boldsymbol{\Phi}(\mathbf{s})$$

Support-Vektor-Maschinen

- **Kerneltrick**

Beste Kernelfunktion nur empirisch

Polynom-Kernel (Polynomordnung):

$$K_p^\Phi(\mathbf{r}, \mathbf{s}) = (\mathbf{r}^T \mathbf{s} + 1)^p$$

Gauß-Kernel (Std.abw., radiale Basisfunktion):

$$K_\sigma^\Phi(\mathbf{r}, \mathbf{s}) = e^{-\frac{\|\mathbf{r}-\mathbf{s}\|^2}{2\sigma^2}}$$

Sigmoid-Kernel (Verstärkung, Offset):

$$K_{k,\Theta}^\Phi(\mathbf{r}, \mathbf{s}) = \tanh(k(\mathbf{r}^T \mathbf{s}) + \Theta)$$

String-Kernel, etc.

Support-Vektor-Maschinen

- **Kerneltrick**

Kernelfunktion statt Transformation erniedrigt Rechenaufwand erheblich
Für hochdim. Probleme nutzbar

Beispiel: Polynom Grad p
Zahl zu berechnender Terme

$$\binom{\dim(\mathbf{R}) + p}{p} \approx \frac{\dim(\mathbf{R})^p}{p!}$$

Polynom-Kernel unabh. von p
Zahl zu berechnender Terme ca.

$$\dim(\mathbf{R})$$

Support-Vektor-Maschinen

- **Mehrklassenklassifikation**

L: # Entscheidungen, M: # Klassen

Entscheidungsregeln:

1-vs-alle:

$$L = M$$

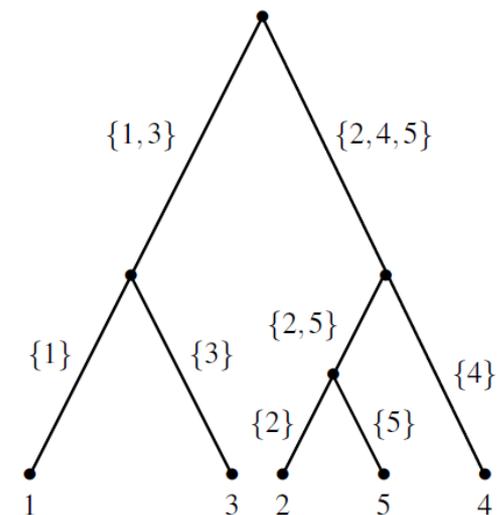
1-vs-1:

$$L = M(M - 1)/2$$

Vergleich mit jeder anderen Klasse positiv oder Mehrheitsentscheid

1/2-vs-1/2 (Bäume) im Mittel: $L = \log_2(M)$

„Echte“ Mehrklassen-SVM...



Support-Vektor-Regression

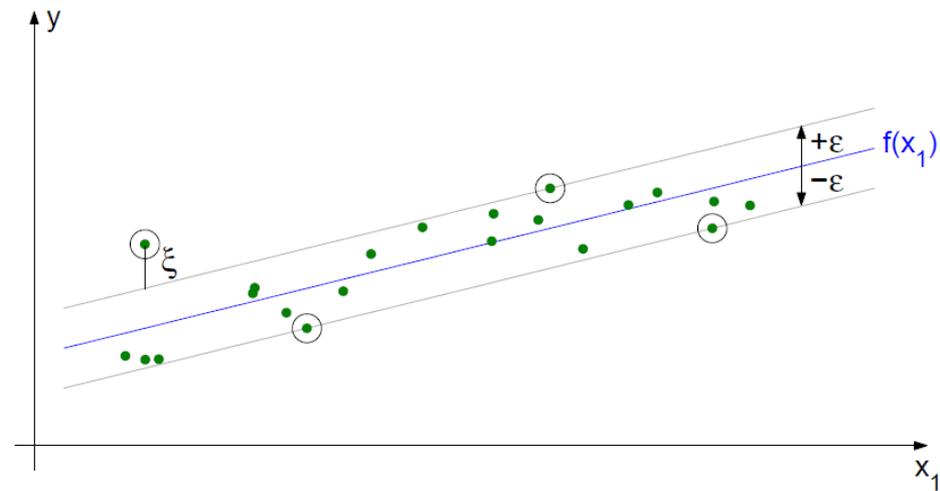
- **Prinzip**

Grundsätzlich jeder Klassifikator in Regressor wandelbar:
Regression durch Diskretisierung

SVR:

$$f(\underline{x}) = \underline{w}^T \underline{x} + b$$

Ausgang lineare Regression
Möglichst flache Abweichung
Schlupfvariablen
Langrange'sche Multiplikatoren
Stützvektoren
Kerneltrick



Support-Vektor-Varianten

- **Relevance-Vektor-Maschinen (RVM)**

- Probabilistische Klassifikation

- Äquivalent zu Gauß'schem Prozess mit Kovarianz

- Meist Gauß'scher Kernel

- Bayes'sche Formulierung vermeidet Parametersuche

- EM-ähnlicher Lernalgorithmus

- Anders als mit SMO keine Gewährleistung globalen Optimums

- **Hybride Ansätze**

- z.B. SVM-HMM, SVM-DBN, SVM-GM (Tandem, Hybrid)

- Hybride Ensembles: Stacking, StackingC, Voting, etc.

Support-Vektor-Varianten

- **GMM Supervektoren**

Stacking der Mittelwerte der Gauß'schen-Mixtur-Modelle als Merkmale

GMM Universelles-Background-Modell (UBM), z.B. mit EM

MAP anwendbar

$$g(\mathbf{x}) = \sum_{i=1}^N \lambda_i \mathcal{N}(\mathbf{x}; \mathbf{m}_i, \Sigma_i)$$

Praxis

SVM Software

- **SVMlight**

<http://svmlight.joachims.org/>

Fast optimization algorithm, works on very large datasets, efficient leave-one-out cross-validation.

Source: C++, binaries: Linux, Windows, Cygwin, Solaris

Kernels: polynomial, radial basis function, and neural (tanh)

- **SVMstruct**

http://svmlight.joachims.org/svm_struct.html

model complex (multivariate) output data y , such as trees, sequences, or sets. Can be applied to natural language parsing, and Markov models for part-of-speech tagging, multi-class classification

SVM Software

- **mySVM**

<http://www-ai.cs.uni-dortmund.de/SOFTWARE/MYSVM/index.html>

Source: C++, binaries: Windows

Kernels: linear, polynomial, radial basis function, neural (tanh), anova

- **JmySVM**

<http://www-ai.cs.uni-dortmund.de/SOFTWARE/YALE/index.html>

part of YaLE (Yet Another Learning Environment)/Rapid Miner

Source: Java

- **Weka**

<http://www.cs.waikato.ac.nz/ml/weka/>

Collection of machine learning algorithms for data mining tasks

Source: Java

SVM Software

- **LIBSVM**

<http://www.csie.ntu.edu.tw/~cjlin/libsvm/>

Multi-class classification, weighted SVM for unbalanced data, cross-validation and automatic model selection

Source: C++, Java

Interfaces for Python, R, Splus, MATLAB, Perl, Ruby, and LabVIEW.

Kernels: linear, polynomial, radial basis function, and neural (tanh)

- **SVM Torch**

<http://www.idiap.ch/learning/SVMTorch.html>

Part of the Torch machine learning library

Source: C++, Binaries: Linux, Solaris

SVM Software

- **SVM in R**

<http://cran.r-project.org/src/contrib/Descriptions/e1071.html>

C-classification, n-classification, e-regression, and n-regression

Kernels: linear, polynomial, radial basis, neural (tanh)

- **BSVM**

<http://www.csie.ntu.edu.tw/~cjlin/bsvm/>

Two implementations of multi-class classification

Source: UNIX/Linux, binaries: Windows

- **M-SVM**

<http://www.loria.fr/~guermeur/>

Multi-class SVM implementation

Source: C

SVM Software

- **MATLAB SVM Toolbox**

<http://www.isis.ecs.soton.ac.uk/resources/svminfo/>

Kernels: linear, polynomial, Gaussian radial basis function, exponential radial basis function, neural (tanh), Fourier series, spline, B spline

- **TinySVM**

<http://chasen.org/~taku/software/TinySVM/>

sparse vector representation, handles several ten-thousands of training examples, hundred-thousands of feature dimensions

Source: C++ Linux, binary: Windows

- **SvmFu**

<http://five-percent-nation.mit.edu/SvmFu/>

Source: C++

Kernels: linear, polynomial, Gaussian radial basis function

SVM Software

- **Gini-SVM**
- **Gist**
- **GPDT**
- **HeroSvm**
- **LearnSC**
- **MATLAB SVM Toolbox**
- **OSU SVM Classifier Matlab Toolbox**
- **SimpleSVM Toolbox (Matlab)**
- **SmartLab, Spider (Matlab)**
- **SVMsequel**
- **SVM Toolbox (Matlab)**
- **Tree Kernels**
- **Und viele mehr...**

Evaluierung

- **Partitionierung**

Ausbalancierung (z.B. Hochsampling, SMOTE)

J-fache Kreuzvalidierung (stratifizieren)

Partition #			
1	2	3	
TE	tr	tr	Durchgang 1
tr	TE	tr	Durchgang 2
tr	tr	TE	Durchgang 3

Evaluierung

- **Partitionierung**

tr: Training (z.B. 40%)

VA: Validierung (z.B. 30%)

TE: Test (z.B. 10-30%)

			Partition #
1	2	3	
TE	VA	tr	Durchgang 1
tr	TE	VA	Durchgang 2
VA	tr	TE	Durchgang 3

Evaluierung

- **Partitionierung**

Zusätzliche Unabhängigkeit: Leave-One-Speaker/Speaker Group-Out

Reproduzierbarkeit wahren

Transparenz wahren

Keine Vorselektion

Cross-Corpus

Evaluierung

- Maße

Accuracy / Recall:
$$\text{RE} = \frac{\text{Anzahl richtig erkannter Muster}}{\text{Umfang der Teststichprobe}}$$

$$\text{RE}_i = \frac{|\{\mathbf{r} \in \mathcal{T}_i \mid d(\mathbf{r}) = i\}|}{T_i}$$

Unweighted Average Recall:
$$\text{UAR} = \frac{\sum_{i=1}^M \text{RE}_i}{M}$$

True / False Positives:
$$\text{FP}_i = |\{\mathbf{r} \in \mathcal{T} - \mathcal{T}_i \mid d(\mathbf{r}) = i\}|$$

Precision:
$$\text{PR}_i = \frac{\text{TP}_i}{\text{TP}_i + \text{FP}_i}$$

Evaluierung

- **Maße**

F-Measure:

$$F_i = 2 \frac{RE_i PR_i}{RE_i + PR_i}$$

True / False Negatives:

$$TN_i = |\{\mathbf{r} \in \mathcal{T} - \mathcal{T}_i \mid d(\mathbf{r}) \neq i\}|,$$

$$FN_i = |\{\mathbf{r} \in \mathcal{T}_i \mid d(\mathbf{r}) \neq i\}|$$

Konfusionen:

$$k_{i,j} = |\{\mathbf{r} \in \mathcal{T}_i \mid d(\mathbf{r}) = j\}|$$

Evaluierung

- Maße

Aus Konfusionen:

$$TP_i = k_{i,i},$$

$$FP_i = \sum_{i \neq j} k_{j,i},$$

$$RE_i = k_{i,i}/T_i = k_{i,i} / \sum_{j=1}^M k_{i,j},$$

$$RE = \text{spur}\{\mathbf{K}\} / |\mathcal{T}|,$$

$$PR_i = k_{i,i} / \sum_{j=1}^M k_{j,i}$$

Evaluierung

- **Maße für binäre Entscheidungen**

Receiver-Operating-Curve (ROC)

Equal-Error-Rate (EER)

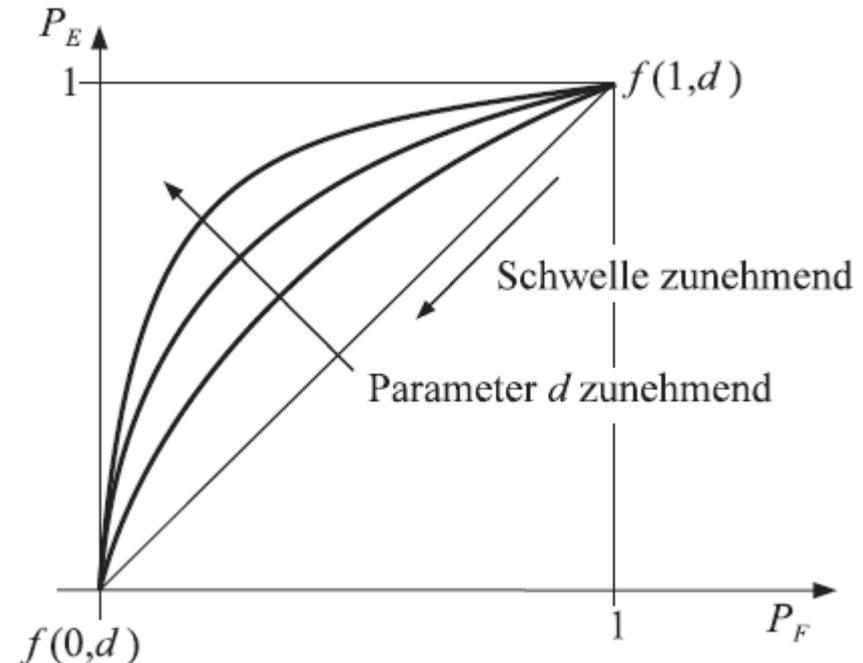
Area-Under-Curve (AUC)

- **Maße für kont. Entscheidungen**

Cross-Correlation (CC)

Mean-Linear-Error (MLE) /
Mean-Absolute-Error (MAE)

Mean-Square-Error (MSE)



Probleme

- **Wahl Kernel und Parameter-Optimierung**
Multiple-Kernel-Learning (MKL): Lernen des optimalen Kernels
Gewichtete Summierung der Kernel äquiv. Merkmalsraumkonkatinierung
Grid-Search, etc.
- **Große Datenmenge**
Sukzessives Einlesen und Trainieren
- **Hohe Dimensionalität**
Merkmalsauswahl
PCA / LDA, etc.
- **(Geringe) Trainingsinstabilität**
Bagging, Boosting, etc.

Diskussion

Support-Vektor-Maschinen

- **Konklusion**

Generalisierte lineare Klassifikatoren

Erweiterung des Perzeptrons

Diskriminativität: Maximum-Margin-Klassifikator

Support-Vektor-Maschinen

- **Vorteile**

- Hohe Dimensionen behandelbar
- Gute Generalisierung
- Diskriminativer Ansatz
- Inhärente Instanzselektion

- **Nachteile**

- Abhängig von Parameterwahl: Kernel, Kernelparam., Soft-Margin-Param.
- Unkalibrierte Klassenzugehörigkeitswahrscheinlichkeiten
- Kein Speicher (wie etwa RNN oder (B)LSTM, etc.)
- Keine dynamische Klassifikation
(wie HMM oder DBN, nur Multi-Instanz-Lernen)
- Keine Merkmalsselektion (SVM-SFFS, etc.)

Support-Vektor-Maschinen

- **Ausblick**

Transduktive SVM: Erlauben semi-überwachtes Lernen

Strukturierte SVM: Multi-label und strukturierte Label (Bäume)

Least-Square SVM: Lösen Satzes linearer Gleichungen anstelle konvexer quadr. Programmierung

Multiple-Instanzen-SVM: „Bag-Of-Frames“:

Bag „-“ wenn alle Frames „-“

Bag „+“ falls ≥ 1 Frame „+“

Literatur

- **Vapnik et al.**

Vapnik, V.; Cortes, C.: Support vector networks, Machine Learning 20 (1995), S. 273-297.

- **Schölkopf et al.**

Schölkopf, B.; Smola, A.: Learning with Kernels: Support Vector Machines, Regularization, Optimization, and Beyond (Adaptive Computation and Machine Learning), 2002, Cambridge, MA: MIT Press, ISBN 0-262-19475-9.

Danke.



<http://www.openaudio.eu>