UVG UNIVERSIDAD DEL VALLE DE GUATEMALA

Máquinas de Vectores de Soporte (SVM)

Alan Reyes-Figueroa

Aprendizaje Estadístico (Aula 24) 08.mayo.2024

Modelo Perceptrón

Introducido por F. Rosenblatt (1958), en *Psychological Review* Vol. **65**(6).

$(\mathbb{X}, \mathbf{y})$ conjunto de datos $\mathbb{X} \in \mathbb{R}^{n \times d}$. Codificamos las categorías $y_i \in \{-1, 1\}$.

Buscamos clasificadores lineales de la forma

$$\widehat{y}(\mathbf{x}) = \text{sign}\left(g(\mathbf{x})\right) = \text{sign}(w_0 + \mathbf{w}^T\mathbf{x}),$$

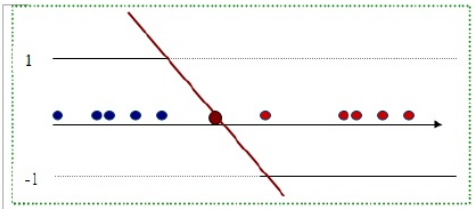
con $w_0 \in \mathbb{R}$, $\mathbf{w} \in \mathbb{R}^d$.

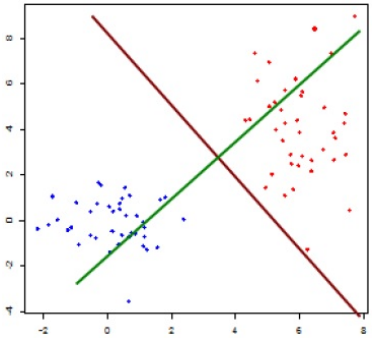
Obs:

- La frontera de decisión es una curva de nivel de $g(\mathbf{x})$.
- $\mathbf{w}$ indica la dirección (es el vector normal al hiperplano separante).
- w_0 indica la curva de nivel a elegir.

Modelo Perceptrón

Ejemplo: En $\mathbb{R}^2$, $\mathbf{w} \in \mathbb{R}^2$ marca la linea verde (dirección normal al plano). La línea roja marca la frontera. Las curvas de nivel de $G(\mathbf{x})$ son paralelas a la línea roja.





Modelo Perceptrón

¿Cómo hallar w_0 y $\mathbf{w}$ óptimos?
Vamos a definir una función de costo $C(w_0, \mathbf{w})$ (medida del desempeño), y vamos al minimizar dicha función.

Supongamos por ahora que los datos son linealmente separables.

- Primer intento: tomar el error empírico

$$C(w_0, \mathbf{w}) = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^{n} \mathbf{1}\big[\operatorname{sign}(g(\mathbf{x}_i)) \neq y_i\big].$$

  Problema: C no es siempre derivable en $w_0, \mathbf{w}$; y el gradiente muchas veces no es informativo.

¿Cómo construir funciones de costo más informativas?

Modelo Perceptrón

Tomemos ℓ el hiperplano de decisión, nos gustaría incluir en la función de costo un término que mida la distancia $d(\mathbf{x}, \ell)$ entre cada punto $\mathbf{x}$ (mal clasificado) y ℓ.

Sea $\mathbf{x}_\ell$ la proyección ortogonal de $\mathbf{x}$ a ℓ. Entonces

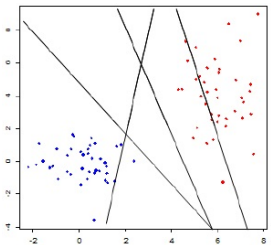
$$\mathbf{x} = \mathbf{x}_\ell + d\frac{\mathbf{w}}{||\mathbf{w}||}, \quad \text{con } d = d(\mathbf{x}, \ell) = |\mathbf{w}^T(\mathbf{x} - \mathbf{x}_\ell)|.$$

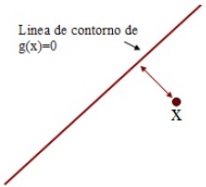
Multiplicando ambos lados por $\mathbf{w}^T$, y sumando w_o, resulta

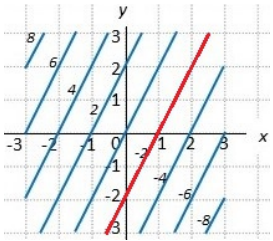
$$g(\mathbf{x}) = w_o + \mathbf{w}^T\mathbf{x} = w_o + \mathbf{w}^T\mathbf{x}_\ell + d\frac{\mathbf{w}^T\mathbf{w}}{||\mathbf{w}||} = g(\mathbf{x}_\ell) + d||\mathbf{w}|| = d||\mathbf{w}||.$$

De ahí que $d = \dfrac{g(\mathbf{x})}{||\mathbf{w}||}$ y $d(\mathbf{x}, \ell) = \dfrac{|g(\mathbf{x})|}{||\mathbf{w}||}$.

Modelo Perceptrón







- Segundo intento: Por construcción, observe que $\mathbf{x}_i$ está mal clasificado si $g(\mathbf{x}_i)\, y_i < 0$. Con base en esto, proponemos

$$C(w_0, \mathbf{w}) = \sum_{i:g(\mathbf{x}_i)\, y_i<0} \frac{|g(\mathbf{x}_i)|}{||\mathbf{w}||} = -\sum_{i:g(\mathbf{x}_i)\, y_i<0} \frac{g(\mathbf{x}_i)\, y_i}{||\mathbf{w}||}.$$

Modelo Perceptrón

Ahora, $C(w_0, \mathbf{w}) = -\sum_{i:g(\mathbf{x}_i)\,y_i<0} \frac{g(\mathbf{x}_i)\,y_i}{||\mathbf{w}||}$ y $||\mathbf{w}||C(w_0, \mathbf{w}) = -\sum_{i:g(\mathbf{x}_i)\,y_i<0} g(\mathbf{x}_i)\,y_i$ tienen el mismo mínimo. Preferimos trabajar con

$$C_n(w_0, \mathbf{w}) = -\sum_{i:g(\mathbf{x}_i)\,y_i<0} g(\mathbf{x}_i)\,y_i.$$

Haciendo el mapeo de $\mathbb{R}^d$ a $\mathbb{R}^{d+1}$, dado por $\mathbf{x} \to (1, \mathbf{x})$, y escribiendo $\mathbf{w} = (w_0, \ldots, w_d) \in \mathbb{R}^{d+1}$, tenemos

$$C_n(\mathbf{w}) = -\sum_{i:g(\mathbf{x}_i)\,y_i<0} (\mathbf{x}_i^T\mathbf{w})\,y_i, \quad \nabla_{\mathbf{w}} C_n(\mathbf{w}) = -\sum_{i:g(\mathbf{x}_i)\,y_i<0} y_i\,\mathbf{x}_i.$$

Modelo Perceptrón

Tenemos el siguiente
Algoritmo: (Perceptrón, gradiente *online*)

1.) Inicio: Elegir $\alpha > 0$, $\mathbf{w}^{(0)} \in \mathbb{R}^{d+1}$ arbitrario.

2.) Repetir para $k = 0, 1, 2, \ldots$ (hasta cierto criterio de paro):

- Para cada dato mal clasificado $\mathbf{x}_i$ hacer

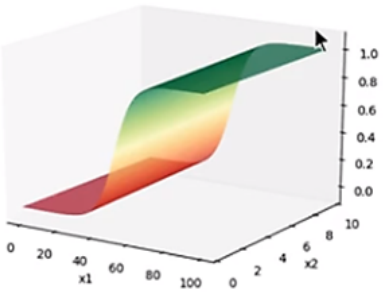
$$\mathbf{w}^{(k+1)} = \mathbf{w}^{(k)} - \alpha \nabla_{\mathbf{w}} C_n(\mathbf{x}_i) = \mathbf{w}^{(k)} + \alpha y_i \mathbf{x}_i.$$

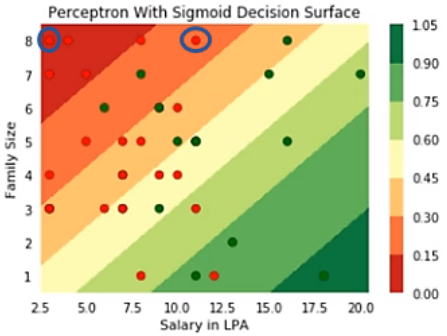
Obs!

- Si los datos son linealmente separables, habrá convergencia en tiempo finito.
- Cuidado con los mínimos locales de $C_n(\mathbf{w})$!
- `https://lecture-demo.ira.uka.de/neural-network-demo/?preset=Rosenblatt%20Perceptron`

Modelo Perceptrón

El modelo perceptrón y el modelo de clasificación logística son similares: ambos usan un gradiente en la dirección de **w**, sin embargo la regresión logística pondera el gradiente mediante la función sigmoide σ.





Otros clasificadores lineales

Algunos modelos lineales resuelven el problema de clasificación como si fuera regresión:

- regresión logística.

- Se puede demostrar que LDA (análisis discriminante lineal) resuelve un problema de regresión (y también un *optimal scoring problem*) como:

$$\text{argmin}_{\mathbf{w}} \sum_i \left(\vartheta(y_i) - \mathbf{w}^T \mathbf{x}_i\right)^2,$$

donde

$$\vartheta(y) = \begin{cases} -\frac{n}{n_-}, & \text{si } y = -1; \\ \frac{n}{n_+}, & \text{si } y = +1. \end{cases}$$

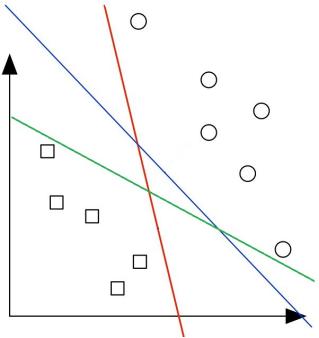
n_- y n_+ el número de observaciones negativas y positivas, resp.

Máquinas de Vectores de Soporte

Consideremos la siguiente situación: Aplicamos nuestro clasificador lineal

$$\widehat{y}(\mathbf{x}) = \text{sign}(w_0 + \mathbf{w}^T\mathbf{x})$$

a un conjunto linealmente separable. Obtenemos varias soluciones (azul, rojo, verde).



Máquinas de Vectores de Soporte

Tenemos $C(rojo) = 0$, $C(azul) = 0$, $C(verde) = 0$.
Hemos evaluado igual cada una de las soluciones. ¿Cuál es mejor?

Máquinas de vectores de soporte:
Support vector machines (SVM). Introducidas por Vladimir Vapnik, 1970s (Papers en 1992, 1995a, 1995b).

Definición

*El **margen** de un clasificador lineal es la menor distancia entre una observación $\mathbf{x}_i$ y la frontera de decisión ℓ.*

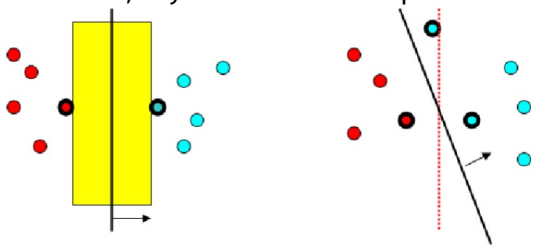
Idea: buscar clasificador lineal con margen máximo

$$\text{argmax}_{\mathbf{w}}\, C(\mathbf{w}), \quad \text{sujeto a } \frac{g(\mathbf{x}_i)\, y_i}{||\mathbf{w}||} \geq C, \ \forall i.$$

Definición

*Los **vectores de soporte** son las observaciones $\mathbf{x}_i$ que están a una distancia mínima (igual al margen) de la frontera de decisión.*

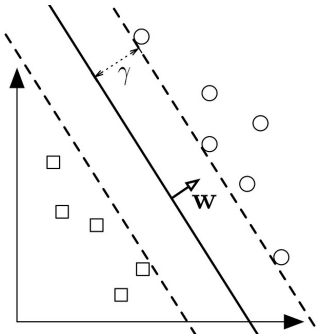
En 2D si los datos son continuos, hay dos situaciones típicas:



(a) 2 vectores de soporte, el margen es $\frac{1}{2}$(distancia entre ellos); (b) 3 vectores de soporte. En $\mathbb{R}^2$, si hay 4 vectores de soportes o más habrá colinealidad.

Máquinas de Vectores de Soporte

Si cambiamos $g(\cdot)$ por $cg(\cdot)$; $c > 0$, el clasificador $\widehat{y}(\mathbf{x})$ no cambia.
Podemos suponer que g en los puntos más cercanos a la frontera de decisión toma valor 1 ó -1. En ese caso, el margen es $\gamma = C = \frac{1}{||\mathbf{w}||}$, $\mathbf{w} \in \mathbb{R}^d$.



Máquinas de Vectores de Soporte

Entonces, el problema de optimización a resolver

$$\text{argmax}_{w_o,\mathbf{w}}\, C, \quad \text{sujeto a } \frac{g(\mathbf{x}_i)\, y_i}{||\mathbf{w}||} \geq C, \forall i.$$

se convierte en

$$\text{argmax}_{w_o,\mathbf{w}}\, \frac{1}{||\mathbf{w}||}, \quad \text{sujeto a } g(\mathbf{x}_i)\, y_i \geq 1, \forall i,$$

o equivalentemente

$$\text{argmin}_{w_o,\mathbf{w}}\, ||\mathbf{w}||^2, \quad \text{sujeto a } g(\mathbf{x}_i)\, y_i \geq 1, \forall i,$$

Máquinas de Vectores de Soporte

Así, la formulación *primal* de las SVMs es

$$\text{argmax}_{w_0,\mathbf{w}} \tfrac{1}{2}\mathbf{w}^T\mathbf{w}, \quad \text{sujeto a } y_i(w_0 + \mathbf{w}^T\mathbf{x}_i) \geq 1, \ \forall i. \tag{1}$$

Observe que este es un problema de programación cuadrática (problema de optimización con función objetivo cuadrática y restricciones lineales).

En la práctica, en lugar de resolver el problema primal, se resuelve el *problema dual* (ver Bishop, o Hastie, Tibshirani, Friedmann):

$$\text{argmin}_{\alpha} \tfrac{1}{2}\alpha^T Q\alpha - \mathbf{1}^T\alpha, \quad \text{sujeto a } \mathbf{y}^T\alpha \geq 0, \ \mathbf{y} \geq 0, \tag{2}$$

donde $Q = (Q_{ij})$, $q_{ij} = y_i\mathbf{x}_i^T\mathbf{x}_j y_j$.

Máquinas de Vectores de Soporte

Supongamos ahora que los datos no son linealmente separables.

Antes se exigía $\frac{g(\mathbf{x}_i)\, y_i}{||\mathbf{w}||} \geq C$, $\forall i$. En lugar de eso, se introducen ahora variables $\varepsilon_i \geq 0$, y se cambia lo anterior por

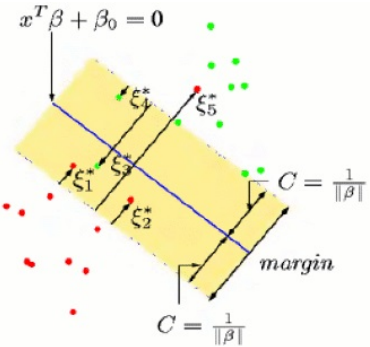
$$\frac{g(\mathbf{x}_i)\, y_i}{||\mathbf{w}||} \geq C(1 - \varepsilon_i), \quad \forall i.$$

Al mismo tiempo se castigan cada $\varepsilon_i \neq 0$, incluyéndolos en la función de costo, con un factor de penalización $\gamma > 0$. El problema a resolver resulta

$$\text{argmax}_{w_0, \mathbf{w}} \, \tfrac{1}{2}\mathbf{w}^T\mathbf{w} + \gamma \sum_i \varepsilon_i, \quad \text{sujeto a } y_i(w_0 + \mathbf{w}^T\mathbf{x}_i) \geq 1 - \varepsilon_i, \ \forall i. \tag{3}$$

Máquinas de Vectores de Soporte

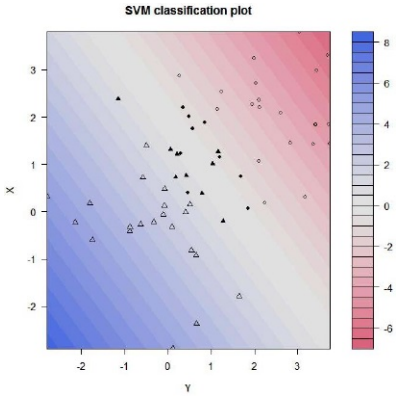
Interpretación de (3)



- ε_i es la distancia mínima que hay que trasladar $\mathbf{x}_i$ para que esté al lado correcto de la frontera de decisión, y al menos a una distancia de $\frac{1}{\|\mathbf{w}\|}$.
- Si $g(\mathbf{x}_i)\, y_i < 0$ ó $0 < g(\mathbf{x}_i)\, y_i < 1$, tomamos ε_i tal que $g(\mathbf{x}_i)\, y_i = 1 - \varepsilon_i$.
- Si $g(\mathbf{x}_i)\, y_i \geq 1$, tomamos $\varepsilon_i = 0$.

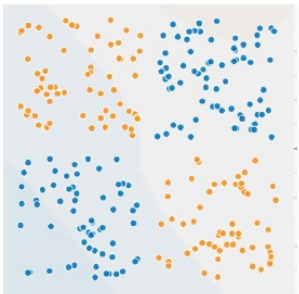
Máquinas de Vectores de Soporte

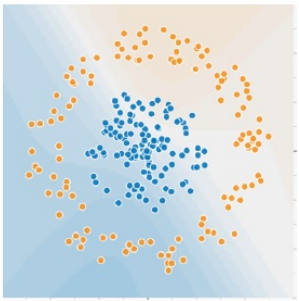
Se puede mostrar que la solución es de la forma $g(\mathbf{x}) = \sum_i \alpha_i \langle \mathbf{x}, \mathbf{x}_i \rangle + w_0$,
donde sólo algunas α_i son diferentes de 0: aquellas que corresponden a observaciones con $\varepsilon_i \neq 0$ (los llamados vectores de soporte).



Caso general

Hasta ahora trabajamos con un clasificador lineal $\widehat{y}(\mathbf{x}) = \text{sign}(w_0 + \mathbf{w}^T\mathbf{x})$.
¿Qué hacer si tenemos siguientes datos?





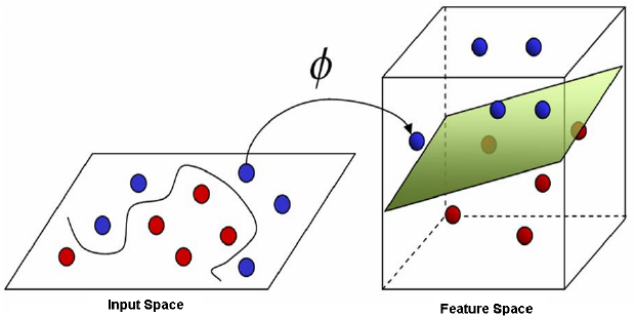
Ejemplos de datos no linealmente separables.

`http://playground.tensorflow.org/`

Caso general

Recordemos el **truco del kernel** (*kernel trick*): mapeamos los datos a un espacio de mayor dimension, donde esperamos que sean linealmente separables.

Idea: transformar (implícitamente) los datos: $\mathbf{x} \rightarrow \Phi(\mathbf{x})$.



Caso general

Antes: $g(\mathbf{x}) = \sum_i \alpha_i \langle \mathbf{x}, \mathbf{x}_i \rangle + w_0$ Ahora: $g(\mathbf{x}) = \sum_i \alpha_i \langle \Phi(\mathbf{x}), \Phi(\mathbf{x}_i) \rangle + w_0$.

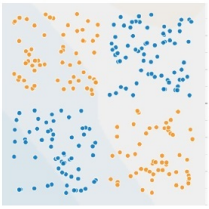
Si definimos un kernel $K_\Phi(\mathbf{u}, \mathbf{v}) := \langle \Phi(\mathbf{u}), \Phi(\mathbf{v}) \rangle$, entonces

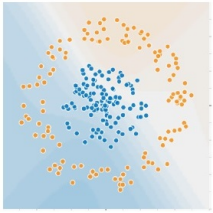
$$g(\mathbf{x}) = \sum_i \alpha_i K(\mathbf{x}, \mathbf{x}_i) + w_0.$$

Ejemplos:

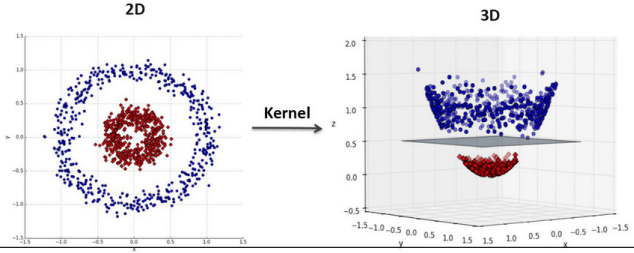
- kernel polinomial $K_\Phi(\mathbf{x}, \mathbf{y}) = (1 + \langle \mathbf{x}, \mathbf{y} \rangle)^p$.
- kernel base radial gaussiano $K_\Phi(\mathbf{x}, \mathbf{y}) = e^{-||\mathbf{x}-\mathbf{y}||^2/\sigma^2}$.
- Otros: lineal, sigmoide, otras RBFs, ...

Caso general

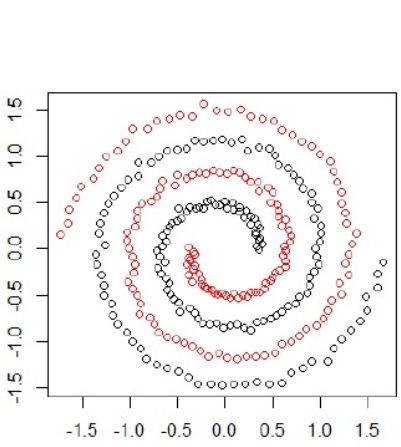


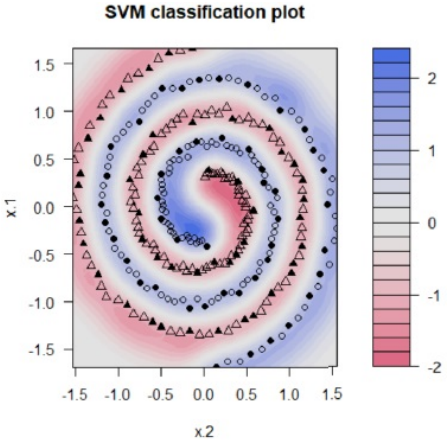


Un kernel polinomial de grado 2 puede separar los datos.



Caso general





Un kernel RBF puede separar los datos en espiral.