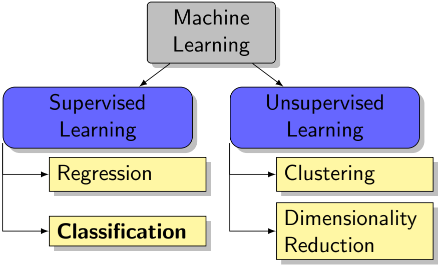
Support Vector Machine

SVM

Dr. Mauricio Toledo-Acosta
mauricio.toledo@unison.mx

Diplomado Ciencia de Datos con Python

Table of Contents


Machine Learning
Supervised Learning
Unsupervised Learning
Regression
Classification
Clustering
Dimensionality Reduction

La tarea de clasificación

¿Qué tienen en común las siguientes tareas?

La tarea de clasificación

¿Qué tienen en común las siguientes tareas?

Hello Friends! We hope you had a pleasant week. Last weeks trivia questions was: What do these 3 films have in common: One Crazy Summer, Whispers in the Dark, Moby Dick? Answer: Nantucket Island	No Spam
IMPORTANT INFORMATION: The new domain names are finally available to the general public at discount prices. Now you can register one of the exciting new .BIZ or .INFO domain names, as well as the original .COM and .NET names for just $14.95. These brand new domain extensions were recently approved by ICANN and have the same rights as the original .COM and .NET domain names. The biggest benefit is of-course that the .BIZ and .INFO domain names are currently more available. i.e. it will be much easier to register an attractive and easy-to-remember domain name for the same price. Visit: http://www.affordable-domains.com today for more info.	Spam
If you have an internal zip drive (not sure about external) and you bios supports using a zip as floppy drive, you could use a bootable zip disk with all the relevant dos utils.	No Spam

La tarea de clasificación

Clasificación

Problema supervisado en el cual el objetivo es asignar una etiqueta o categoría a cada ejemplo de un conjunto de datos.

La tarea de clasificación consiste en entrenar un modelo para predecir a qué clase pertenece una nueva observación. Esto lo hacemos basándonos en un conjunto de datos etiquetados donde las categorías son conocidas.

- Clasificación Binaria: Dos etiquetas, mutuamente exclusivas.

La tarea de clasificación

Clasificación

Problema supervisado en el cual el objetivo es asignar una etiqueta o categoría a cada ejemplo de un conjunto de datos.

La tarea de clasificación consiste en entrenar un modelo para predecir a qué clase pertenece una nueva observación. Esto lo hacemos basándonos en un conjunto de datos etiquetados donde las categorías son conocidas.

- Clasificación Binaria: Dos etiquetas, mutuamente exclusivas.
- Clasificación Multi-clase: Varias etiquetas mutuamente excluyentes.

La tarea de clasificación

Clasificación

Problema supervisado en el cual el objetivo es asignar una etiqueta o categoría a cada ejemplo de un conjunto de datos.

La tarea de clasificación consiste en entrenar un modelo para predecir a qué clase pertenece una nueva observación. Esto lo hacemos basándonos en un conjunto de datos etiquetados donde las categorías son conocidas.

- Clasificación Binaria: Dos etiquetas, mutuamente exclusivas.
- Clasificación Multi-clase: Varias etiquetas mutuamente excluyentes.
- Clasificación Multi-etiqueta: Cada instancia tiene varias etiquetas.

Clasificación Binaria

Hello Friends! We hope you had a pleasant week. Last weeks trivia questions was: What do these 3 films have in common: One Crazy Summer, Whispers in the Dark, Moby Dick? Answer: Nantucket Island	No Spam
IMPORTANT INFORMATION: The new domain names are finally available to the general public at discount prices. Now you can register one of the exciting new .BIZ or .INFO domain names, as well as the original .COM and .NET names for just $14.95. These brand new domain extensions were recently approved by ICANN and have the same rights as the original .COM and .NET domain names. The biggest benefit is of-course that the .BIZ and .INFO domain names are currently more available. i.e. it will be much easier to register an attractive and easy-to-remember domain name for the same price. Visit: http://www.affordable-domains.com today for more info.	Spam
If you have an internal zip drive (not sure about external) and you bios supports using a zip as floppy drive, you could use a bootable zip disk with all the relevant dos utils.	No Spam

Clasificación Binaria

Texto	ℓ
Hello Friends! We hope you had a pleasant week. Last weeks trivia questions was ...	0
IMPORTANT INFORMATION: The new domain names are finally available to the general...	1
...	...

Clasificación Binaria

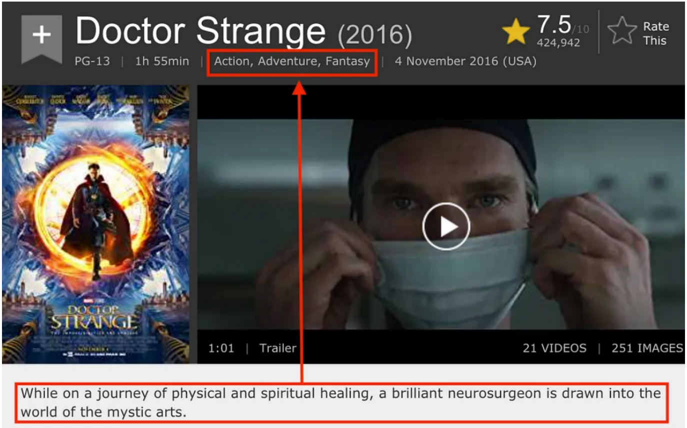
w_1	...	w_M	ℓ
2	...	0	1
...	...	...	...

Clasificación Multi-clase

Clasificación Multi-clase

p_1	...	p_{784}	ℓ
0	...	57	0
...	...	...	...

Clasificación Multi-etiqueta



Un ejemplo trabajado con código

Clasificación Multi-etiqueta

Texto	Action	Adventure	Fantasy	Romance
While on a journey of physicial and spiritual healing, a brilliant...	1	1	1	0
...	...	...	...	...

Un ejemplo trabajado con código

Más ejemplos de clasificación

- Clasificación de imágenes (identificar objetos en fotos).
- Diagnóstico médico (clasificar si un tumor es benigno o maligno). Esto puede ser por medio de imágenes, mediciones, etc.
- Reconocimiento de voz (identificar palabras habladas).
- Detección de fraude (identificar transacciones fraudulentas).
- Detección de tópicos (Identificar el tópico de un documento escrito).
- Análisis de sentimientos (Identificar el sentimiento detrás de un texto).

La tarea de clasificación: Planteamiento matemático

Datos de entrada en la clasificación binaria:

$$X = \underbrace{\{x_1, ..., x_n\}}_{\text{Datos de entrada}} \subset \mathbb{R}^D, \quad Y = \underbrace{\{y_1, ..., y_n\}}_{\text{Etiqueta de cada dato}}$$

donde $y_j \in \{0, 1\}$.

La tarea de clasificación: Planteamiento matemático

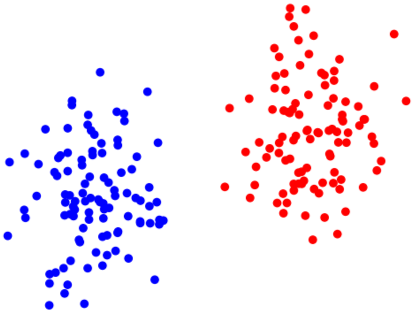
Datos de entrada en la clasificación binaria:

$$X = \underbrace{\{x_1, ..., x_n\}}_{\text{Datos de entrada}} \subset \mathbb{R}^D, \quad Y = \underbrace{\{y_1, ..., y_n\}}_{\text{Etiqueta de cada dato}}$$

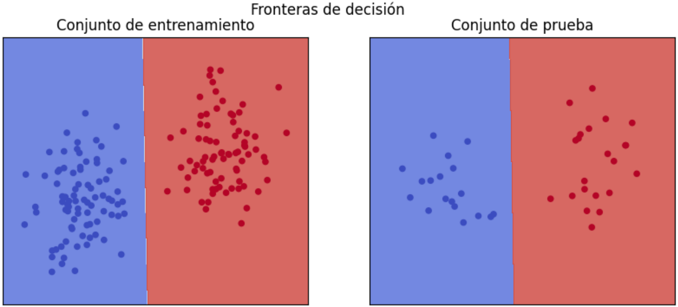
donde $y_j \in \{0, 1\}$.

- **Enforque ML:** Un clasificador asigna etiquetas a cada dato de entrada.
- **Enfoque geométrico:** Es decir, separa los datos de entrada X en regiones de decisión cuyos límites se llaman fronteras de decisión.

La geometría



La geometría



El algoritmo buscará encontrar la frontera de decisión de acuerdo a diferentes criterios.

Algoritmos

Hay varios métodos:

- SVM (Support Vector Machine)
- Regresión Logística
- Árboles de decisión y árboles aleatorios.
- Naive-Bayes
- K-nearest neighbors.
- Perceptron (Módulo siguiente)
- Redes Neuronales (Módulo siguiente)

¿Cómo lidiar con la clasificación multiclase?

Algunos algoritmos no soportan la clasificación multiclase, sólo la binaria. En estos casos hay dos estrategias para convertir una clasificación multiclase (con k clases diferentes) en varios problemas de clasificaciones binarias:

- **One vs all** (OVA) o **one vs rest** (OVR). Se divide una clasificación multiclase en un problema de clasificación binaria por cada clase. En cada clasificación binaria se analiza si la entidad pertenece a la clase j-sima o no.

¿Cómo lidiar con la clasificación multiclase?

Algunos algoritmos no soportan la clasificación multiclase, sólo la binaria. En estos casos hay dos estrategias para convertir una clasificación multiclase (con k clases diferentes) en varios problemas de clasificaciones binarias:

- **One vs all** (OVA) o **one vs rest** (OVR). Se divide una clasificación multiclase en un problema de clasificación binaria por cada clase. En cada clasificación binaria se analiza si la entidad pertenece a la clase j-sima o no.
- **One vs one** (OVO). Se divide una clasificación multiclase en un problema de clasificación binaria por cada par de clases. En cada clasificación binaria se analiza si la entidad pertenece a la clase i-sima o a la clase j-sima.

¿Cómo lidiar con la clasificación multiclase?

Supongamos que tenemos un conjunto de datos en el que cada instancia puede ser de clase `rojo`, `verde` o `azul`.

- **One vs rest** (OVR).
  - Clasificación binaria 1: Rojo, (azul, verde).
  - Clasificación binaria 2: Azul, (rojo, verde).
  - Clasificación binaria 3: Verde, (azul, rojo).

objeto	color
objeto 1	`rojo`
objeto 2	`verde`

¿Cómo lidiar con la clasificación multiclase?

Supongamos que tenemos un conjunto de datos en el que cada instancia puede ser de clase `rojo`, `verde` o `azul`.

- **One vs rest** (OVR).
  - Clasificación binaria 1: Rojo, (azul, verde).
  - Clasificación binaria 2: Azul, (rojo, verde).
  - Clasificación binaria 3: Verde, (azul, rojo).

objeto	rojo	verde	azul
objeto 1	1	0	0
objeto 2	0	1	0

¿Cómo lidiar con la clasificación multiclase?

Supongamos que tenemos un conjunto de datos en el que cada instancia puede ser de clase `rojo`, `verde` o `azul`.

- **One vs one** (OVO).
  - Clasificación binaria 1: Rojo, azul.
  - Clasificación binaria 2: Rojo, verde.
  - Clasificación binaria 3: Azul, verde.

objeto	color
objeto 1	`rojo`
objeto 2	`verde`

Un ejemplo ilustrativo...

¿Cómo lidiar con la clasificación multiclase?

Supongamos que tenemos un conjunto de datos en el que cada instancia puede ser de clase `rojo`, `verde` o `azul`.

- **One vs one** (OVO).
  - Clasificación binaria 1: Rojo, azul.
  - Clasificación binaria 2: Rojo, verde.
  - Clasificación binaria 3: Azul, verde.

objeto	rojo/azul	rojo/verde	azul/verde
objeto 1	1	1	-
objeto 2	-	0	0

Un ejemplo ilustrativo...

Table of Contents

Matriz de Confusión Binaria

		Predicted condition	
	Total population = P + N	Positive (PP)	Negative (PN)
Actual condition	Positive (P)	True positive (TP)	False negative (FN)
	Negative (N)	False positive (FP)	True negative (TN)

Métricas de desempeño

- **Accuracy**: De todos la población, ¿cuántos predije correctamente?

$$A = \frac{TP + TN}{\text{Total}}.$$

- **Recall**: De todos la población positiva, ¿cuántos predije correctamente como positivos?

$$R = \frac{TP}{TP + FN}.$$

- **Precision**: De todos los que predije como positivos, ¿cuántos son realmente positivos?

$$P = \frac{TP}{TP + FP}.$$

- **F1 score**: Media armónica de la precisión y el recall:

$$2\frac{P \cdot R}{P + R}$$

Ejemplo

Tenemos la siguiente población $\{++----\}$:

- Si nuestro clasificador predice todo como $-$:

real	$+$	$+$	-	-	-	-
predicho	-	-	-	-	-	-

  Accuracy: 0.66, Recall: 0, Precision: 0.

- Si nuestro clasificador predice todo como $+$:

real	$+$	$+$	-	-	-	-
predicho	$+$	$+$	$+$	$+$	$+$	$+$

  Accuracy: 0.33, Recall: 1, Precision: 0.33.

Una métrica alta no pinta el panorama completo.

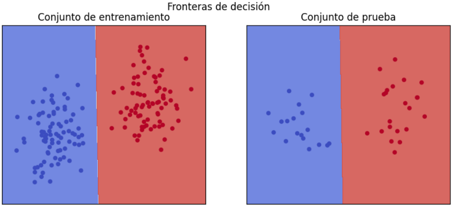
Table of Contents

Introducción

Support Vector Machine

Modelo supervisado de clasificación binaria que busca encontrar una frontera de decisión óptima que separe las clases de puntos.

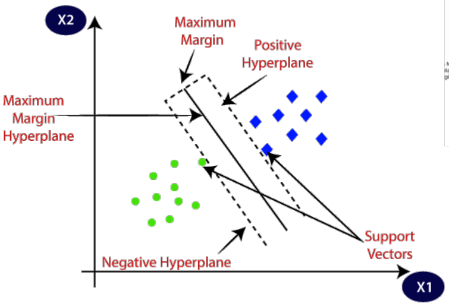
Su principal objetivo es encontrar el hiperplano que mejor separa las clases en un espacio de características.



Introducción

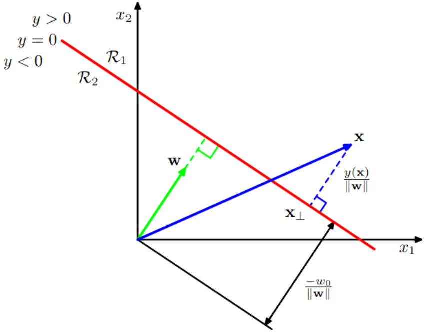
El algoritmo SVM busca los elementos de cada clase que son más similares a los de la otra clase. Estos son los *vectores de soporte*, sobre estos vectores el algoritmo busca encontrar el mejor hiperplano que los separa.

La distancia de los vectores de soporte a la frontera de decisión es el *margen*.



El modelo lineal de clasificación

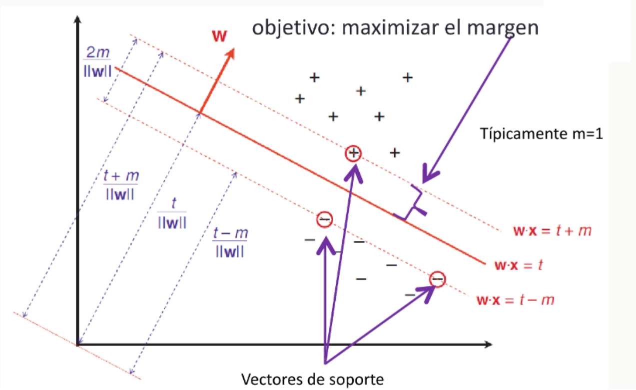
Los puntos x que satisfacen $y(x) = w^T \cdot x + w_0 = 0$ forman la frontera de decisión (FD), la cual divide al espacio de datos en dos regiones.



Buscamos determinar la FD usando la forma normal de la recta (vector normal y distancia al origen).

SVM de margen duro

Analicemos el caso con datos linealmente separables. La FD está definida por $g(x) = w^T \cdot x - t = 0$. Queremos encontrar una FD que maximice el margen $\dfrac{2}{\|w\|}$. Es decir, queremos minimizar $\|w\|$.



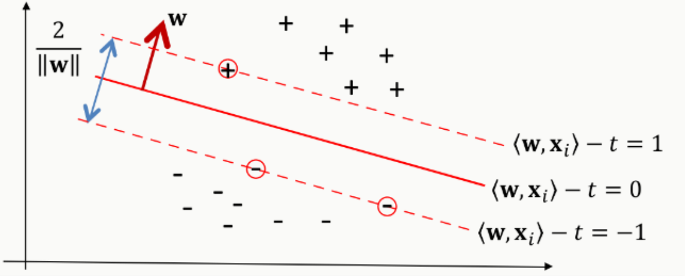
Planteamiento del problema

- Nuestro objetivo es:

$$\mathbf{w}^*, t^* \;=\; \underset{\mathbf{w},t}{\operatorname{argmin}} \frac{1}{2} \|\boldsymbol{w}\|^2$$

- Sujeto a las siguientes N restricciones:

$$y_i(\langle \mathbf{w}, \mathbf{x}_i \rangle - t\,) \geq 1, \qquad 1 \leq i \leq N$$



Planteamiento del problema

Por lo anterior, usaremos el método de los multiplicadores de Lagrange.

Minimizar **Maximizar**

- Definimos el lagrangiano

$$\mathcal{L}_P(\mathbf{w}, t, \alpha_1, \cdots, \alpha_N) = \frac{1}{2}\|\boldsymbol{w}\|^2 - \sum_{i=1}^{N} \alpha_i (yi\,(\langle \mathbf{w}, \mathbf{x}_i\rangle - t\,) - 1)$$

$$= \frac{1}{2}\|\boldsymbol{w}\|^2 - \sum_{i=1}^{N} \alpha_i y_i \langle \mathbf{w}, \mathbf{x}_i\rangle + \sum_{i=1}^{N} \alpha_i y_i t + \sum_{i=1}^{N} \alpha_i$$

$$= \frac{1}{2}\langle \mathbf{w}, \mathbf{w}\rangle - \left\langle \mathbf{w}, \sum_{i=1}^{N} \alpha_i y_i \mathbf{x}_i \right\rangle + t\left(\sum_{i=1}^{N} \alpha_i y_i\right) + \sum_{i=1}^{N} \alpha_i$$

- Para un t óptimo $\partial_t \mathcal{L}_P = 0 \Longrightarrow \sum_{i=1}^{N} \alpha_i y_i = 0$
- Para pesos óptimos $\partial_{\mathbf{w}} \mathcal{L}_P = 0 \Longrightarrow \mathbf{w} = \sum_{i=1}^{N} \alpha_i y_i \mathbf{x}_i$

Planteamiento del problema

- *Reinsertando estas expresiones en $\mathcal{L}_P$ obtenemos $\mathcal{L}_D$ el lagrangiano del problema dual:*

$$\mathcal{L}_D(\alpha_1, \cdots, \alpha_N) = -\frac{1}{2}\left\langle \sum_{i=1}^{N} \alpha_i y_i \mathbf{x}_i , \sum_{i=1}^{N} \alpha_i y_i \mathbf{x}_i \right\rangle + \sum_{i=1}^{N} \alpha_i$$

$$= -\frac{1}{2}\sum_{i=1}^{N}\sum_{j=1}^{N} \alpha_i \, \alpha_j y_i y_j \left\langle \mathbf{x}_i, \mathbf{x}_j \right\rangle + \sum_{i=1}^{N} \alpha_i$$

Planteamiento del problema

- *El problema de optimización dual es el siguiente:*

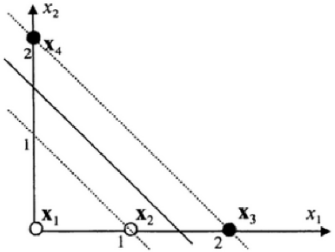
$$\alpha_1^*, \cdots, \alpha_N^* = \underset{\alpha_1,\cdots,\alpha_N}{\operatorname{argmax}} -\frac{1}{2}\sum_{i=1}^{N}\sum_{j=1}^{N} \alpha_i\, \alpha_j y_i y_j \left\langle \mathbf{x}_i, \mathbf{x}_j \right\rangle + \sum_{i=1}^{N} \alpha_i$$

- *Sujeto a las restricciones:*

$$\alpha_i > 0 \;,\; 1 \leq i \leq N \qquad y \qquad \textstyle\sum_{i=1}^{N} \alpha_i y_i = 0$$

Ejemplo

- Encuentra W óptimo para este problema: X1=[0,0] X2=[1,0] para la clase (+1) y X3=[2,0] y X4=[0,2] para la clase (-1)



Ejemplo

$$\mathcal{L}_D(\alpha_1, \cdots, \alpha_N) = \sum_{i=1}^{N} \alpha_i - \frac{1}{2}\sum_{i=1}^{N}\sum_{j=1}^{N} \alpha_i \alpha_j y_i y_j \langle \mathbf{x}_i, \mathbf{x}_j \rangle$$

$$\mathcal{L}_D = (\alpha_1 + \alpha_2 + \alpha_3 + \alpha_4) - \frac{1}{2}\left(\alpha_2{}^2 - 4\alpha_2\alpha_3 + 4\alpha_3{}^2 + 4\alpha_4{}^2\right)$$

Diferenciando con respecto a los α's y utilizando la restricción $\sum_{i=1}^{N} \alpha_i y_i = 0$ obtenemos:

$$\begin{cases} \alpha_1 + \alpha_2 - \alpha_3 - \alpha_4 = 0 \\ \alpha_2 - 2\alpha_3 = 1 \\ -2\alpha_2 + 4\alpha_3 = 1 \\ 4\alpha_4 = 1 \end{cases}$$

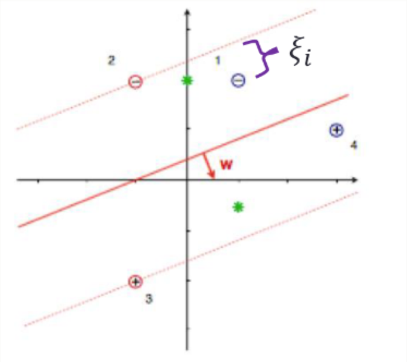
de donde: $\alpha_1 = 0,\ \alpha_2 = 1,\ \alpha_3 = \frac{3}{4},\ \alpha_4 = 1/4$

Aplicando: $\mathbf{w} = \sum_{i=1}^{N} \alpha_i y_i \mathbf{x}_i$, finalmente obtenemos

$\mathbf{w} = \begin{bmatrix} -1/2 \\ -1/2 \end{bmatrix}$, $w_0 = 3/4$ y $d(x) = 3 - 2x_1 - 2x_2 = 0$

SVM de margen suave

- La SVM anterior no funciona con datos no-separables
- Introducimos variables de holgura ξ_i para cada dato de entrada, lo que les permite a algunos de ellos estar dentro del margen, o incluso del lado equivocado de la frontera de decision.



SVM de margen suave

$$\mathbf{w}^*, t^*, \xi_i^* = \underset{\mathbf{w}, t, \xi_i}{\operatorname{argmin}} \frac{1}{2} \|\boldsymbol{w}\|^2 + C \sum_{i=1}^{N} \xi_i$$

$$\text{sujeto a } y_i(\langle \mathbf{w}, \mathbf{x}_i \rangle - t) \geq 1 - \xi_i \text{ y } \xi_i \geq 0, 1 \leq i \leq N$$

- C es un parámetro definido por el usuario que balancea la maximización del margen contra la minimización de las variables de holgura:
  - *un valor alto de C significa que los errores de margen son altamente costosos,*
  - *un valor pequeño de C permite más errores de margen con tal de hacer mas grande el margen.*
- Si permitimos más errores de margen necesitamos menos vectores de soporte, por lo tanto C controla la 'complejidad' de la SVM y por ello se le denomina el *parámetro de complejidad*.

SVM de margen suave

- Buscamos soluciones mediante el nuevo Lagrangiano:

$$\mathcal{L}(\mathbf{w}, t, \xi_i, \alpha_i, \beta_i) = \frac{1}{2}\|\boldsymbol{w}\|^2 + C\sum_{i=1}^{N}\xi_i - \sum_{i=1}^{N}\alpha_i\big(yi\left(\langle \mathbf{w}, \mathbf{x}_i\rangle - t\right) - (1 - \xi_i)\big) - \sum_{i=1}^{N}\beta_i\xi_i$$

$$= \mathcal{L}(\mathbf{w}, t, \alpha_i) + \sum_{i=1}^{N}(C - \alpha_i - \beta_i)\xi_i$$

- La solución óptima es tal que $\partial_{\xi_i}\mathcal{L} = 0 \Longrightarrow$ el término añadido desaparece en el problema dual.
- Además, puesto que α_i y β_i son positivos, α_i no puede ser mayor a C:

$$\alpha_1^*, \cdots, \alpha_N^* = \underset{\alpha_1, \cdots, \alpha_N}{\operatorname{argmax}} -\frac{1}{2}\sum_{i=1}^{N}\sum_{j=1}^{N}\alpha_i\,\alpha_j y_i y_j \langle \mathbf{x}_i, \mathbf{x}_j\rangle + \sum_{i=1}^{N}\alpha_i$$

Sujeto a las restricciones: $0 \leq \alpha_i \leq C$, $1 \leq i \leq N$ y $\sum_{i=1}^{N}\alpha_i y_i = 0$

El hiperparámetro C

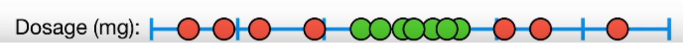
El valor C depende del problema y es necesario experimentar con varios valores.

- **Valor alto de** C: El modelo se enfoca en clasificar correctamente todos los ejemplos del conjunto de entrenamiento, incluso si eso significa tener un margen más pequeño. El modelo penaliza más fuertemente los errores de clasificación, lo que puede llevar a un margen más estrecho entre las clases. Esto puede resultar en un modelo que se ajuste demasiado a los datos de entrenamiento (overfitting).
- **Valor bajo de** C: El modelo permite más errores de clasificación en el conjunto de entrenamiento para lograr un margen de separación más amplio. Esto implica una regularización más fuerte, lo que puede resultar en un modelo más generalizado y menos propenso a overfitting.

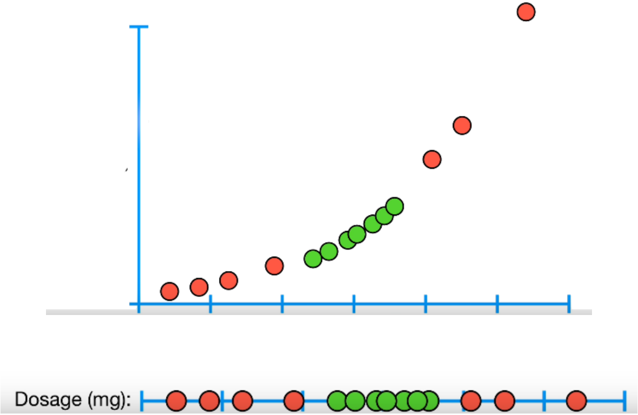
Table of Contents

El truco del Kernel

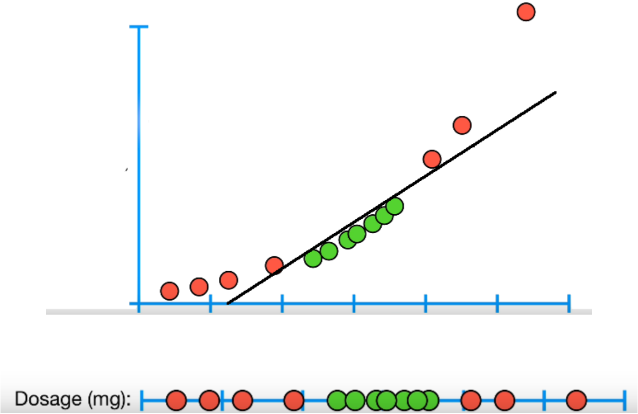
Supongamos que queremos determinar qué dosis de un medicamento es la adecuada para tratar alguna condición. Coloreamos en verde las dosis que lograron una mejoría y en rojo las que no. ¿Cómo logramos una separación lineal de los datos?



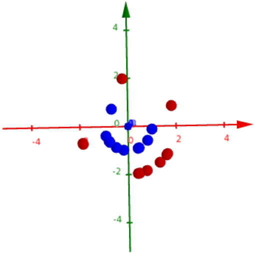
El truco del Kernel



El truco del Kernel



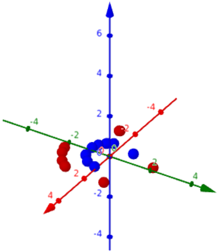
Un ejemplo con “kernel polinomial”



Queremos separar con *linealmente* estos datos.

https://www.geogebra.org/m/xawkavxe

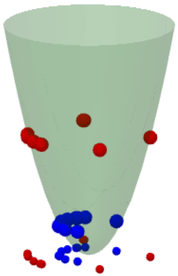
Un ejemplo con “kernel polinomial”



Consideramos los datos en un espacio de dimensión superior.

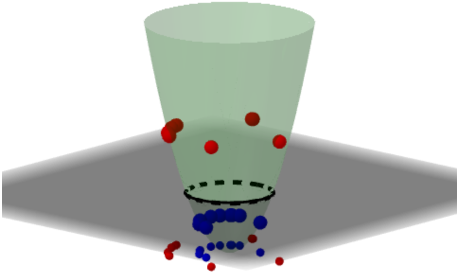
`https://www.geogebra.org/m/xawkavxe`

Un ejemplo con “kernel polinomial”



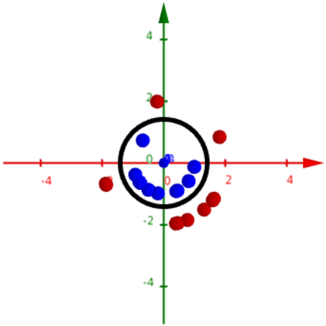
https://www.geogebra.org/m/xawkavxe

Un ejemplo con "kernel polinomial"



https://www.geogebra.org/m/xawkavxe

Un ejemplo con “kernel polinomial”



https://www.geogebra.org/m/xawkavxe

El ejemplo más sencillo: kernel polinomial de grado 2

Para puntos en $\mathbb{R}^2$, reemplazamos las 2 features originales por 4 features nuevas por medio de la función $\phi : \mathbb{R}^2 \to \mathbb{R}^4$ dada por

$$\phi(x_1, x_2) = (x_1^2, x_1 x_2, x_1 x_2, x_2^2)$$

El ejemplo más sencillo: kernel polinomial de grado 2

Para puntos en $\mathbb{R}^2$, reemplazamos las 2 features originales por 4 features nuevas por medio de la función $\phi : \mathbb{R}^2 \to \mathbb{R}^4$ dada por

$$\phi(x_1, x_2) = (x_1^2, x_1x_2, x_1x_2, x_2^2)$$

El producto interior en estas 4 features es

$$\begin{aligned}
\langle \phi(\mathbf{x}), \phi(\mathbf{y}) \rangle &= \langle (x_1^2, x_1x_2, x_1x_2, x_2^2), (y_1^2, y_1y_2, y_1y_2, y_2^2) \rangle \\
&= x_1^2y_1^2 + x_1x_2y_1y_2 + x_1x_2y_1y_2 + x_2^2y_2^2 \\
&= x_1y_1x_1y_1 + x_1y_1x_2y_2 + x_1y_1x_2y_2 + x_2y_2x_2y_2 \\
&= (x_1y_1 + x_2y_2)^2 = \langle (x_1, x_2), (y_1y_2) \rangle^2 = \langle \mathbf{x}, \mathbf{y} \rangle^2
\end{aligned}$$

El ejemplo más sencillo: kernel polinomial de grado 2

Para puntos en $\mathbb{R}^2$, reemplazamos las 2 features originales por 4 features nuevas por medio de la función $\phi : \mathbb{R}^2 \to \mathbb{R}^4$ dada por

$$\phi(x_1, x_2) = (x_1^2, x_1x_2, x_1x_2, x_2^2)$$

El producto interior en estas 4 features es

$$\begin{aligned}
\langle \phi(\mathbf{x}), \phi(\mathbf{y}) \rangle &= \langle (x_1^2, x_1x_2, x_1x_2, x_2^2), (y_1^2, y_1y_2, y_1y_2, y_2^2) \rangle \\
&= x_1^2y_1^2 + x_1x_2y_1y_2 + x_1x_2y_1y_2 + x_2^2y_2^2 \\
&= x_1y_1x_1y_1 + x_1y_1x_2y_2 + x_1y_1x_2y_2 + x_2y_2x_2y_2 \\
&= (x_1y_1 + x_2y_2)^2 = \langle (x_1, x_2), (y_1y_2) \rangle^2 = \langle \mathbf{x}, \mathbf{y} \rangle^2
\end{aligned}$$

Nos podemos ahorrar la definición de la función ϕ si definimos el kernel

$$\kappa(\mathbf{x}, \mathbf{y}) = \langle \mathbf{x}, \mathbf{y} \rangle^2$$

El siguiente ejemplo más sencillo

Para puntos en $\mathbb{R}^2$, reemplazamos las 2 features originales por 7 features nuevas por medio de la función $\phi : \mathbb{R}^2 \to \mathbb{R}^7$ dada por

$$\phi(x_1, x_2) = (x_1^2, x_1 x_2, x_1 x_2, x_2^2, \sqrt{2r} x_1, \sqrt{2r} x_2, r)$$

El siguiente ejemplo más sencillo

Para puntos en $\mathbb{R}^2$, reemplazamos las 2 features originales por 7 features nuevas por medio de la función $\phi : \mathbb{R}^2 \to \mathbb{R}^7$ dada por

$$\phi(x_1, x_2) = (x_1^2, x_1x_2, x_1x_2, x_2^2, \sqrt{2r}x_1, \sqrt{2r}x_2, r)$$

El producto interior en estas 7 features es

$$\begin{aligned}\langle \phi(\mathbf{x}), \phi(\mathbf{y}) \rangle &= \ldots \\ &= (x_1y_1 + x_2y_2 + r)^2 \\ &= (\langle (x_1, x_2), (y_1y_2) \rangle + r)^2 = (\langle \mathbf{x}, \mathbf{y} \rangle + r)^2\end{aligned}$$

El siguiente ejemplo más sencillo

Para puntos en $\mathbb{R}^2$, reemplazamos las 2 features originales por 7 features nuevas por medio de la función $\phi : \mathbb{R}^2 \to \mathbb{R}^7$ dada por

$$\phi(x_1, x_2) = (x_1^2, x_1x_2, x_1x_2, x_2^2, \sqrt{2r}x_1, \sqrt{2r}x_2, r)$$

El producto interior en estas 7 features es

$$\begin{aligned} \langle \phi(\mathbf{x}), \phi(\mathbf{y}) \rangle &= \ldots \\ &= (x_1y_1 + x_2y_2 + r)^2 \\ &= (\langle (x_1, x_2), (y_1y_2) \rangle + r)^2 = (\langle \mathbf{x}, \mathbf{y} \rangle + r)^2 \end{aligned}$$

Nos podemos ahorrar la definición de la función ϕ si definimos el kernel

$$\kappa(\mathbf{x}, \mathbf{y}) = (\langle \mathbf{x}, \mathbf{y} \rangle + r)^2$$

Tipos de Kernel

Los cuatro principales kernels son:

Lineal	$\kappa(\mathbf{x},\mathbf{y}) = \langle \mathbf{x},\mathbf{y}\rangle$
Polinomial	$\kappa(\mathbf{x},\mathbf{y}) = (\langle \mathbf{x},\mathbf{y}\rangle + r)^p,\ r \geq 0$
Gaussiano (Radial Basis Function)	$\kappa(\mathbf{x},\mathbf{y}) = e^{-\gamma\|\mathbf{x}-\mathbf{y}\|^2}$
Sigmoide	$\kappa(\mathbf{x},\mathbf{y}) = \tanh\left(\langle \mathbf{x},\mathbf{y}\rangle + r\right)$

Algunos criterios para escoger el kernel

- Primero veamos si los datos son linealmente separables.
- El kernel lineal suele ser bueno cuando hay muchas features. Además, es el más rápido.
- El kernel polinomial es una generalización del kernel lineal.
- El kernel RBF es un buen kernel por defecto. Suele usarse cuando no hay información adicional sobre los datos.
- El kernel sigmoide equivale a usar una red neuronal de tipo *perceptron de dos capas*.
- Se pueden probar los demás kernels usando *grid seach* y *validación cruzada*.

Algunos criterios para escoger el kernel

- Primero veamos si los datos son linealmente separables.
- El kernel lineal suele ser bueno cuando hay muchas features. Además, es el más rápido.
- El kernel polinomial es una generalización del kernel lineal.
- El kernel RBF es un buen kernel por defecto. Suele usarse cuando no hay información adicional sobre los datos.
- El kernel sigmoide equivale a usar una red neuronal de tipo *perceptron de dos capas*.
- Se pueden probar los demás kernels usando *grid seach* y *validación cruzada*.

Cawley, G. C., & Talbot, N. L. (2010). On over-fitting in model selection and subsequent selection bias in performance evaluation. The Journal of Machine Learning Research, 11, 2079-2107.