Aprendizaje automatizado

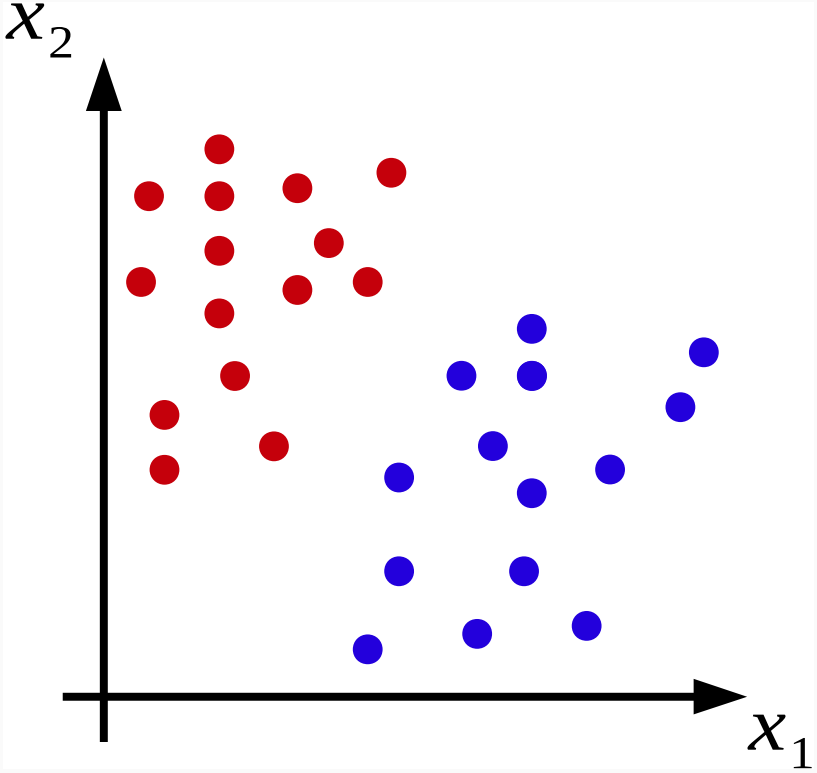
Máquinas de vectores de soporte y kernels

Gibran Fuentes-Pineda

Mayo 2020

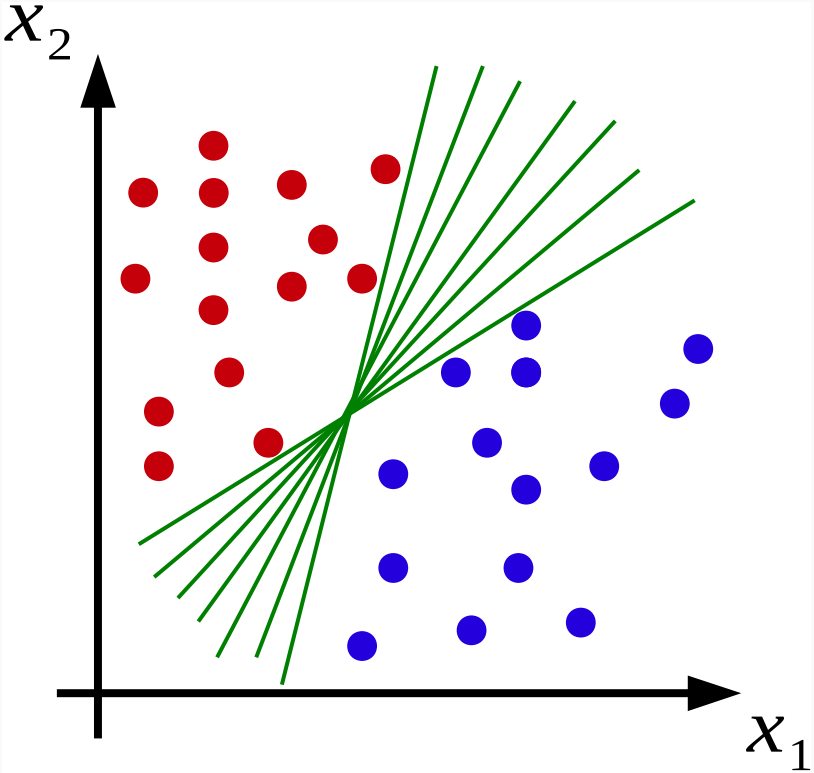
Caso 1: Clasificación binaria linealmente separable

- ¿Cómo separamos las clases?



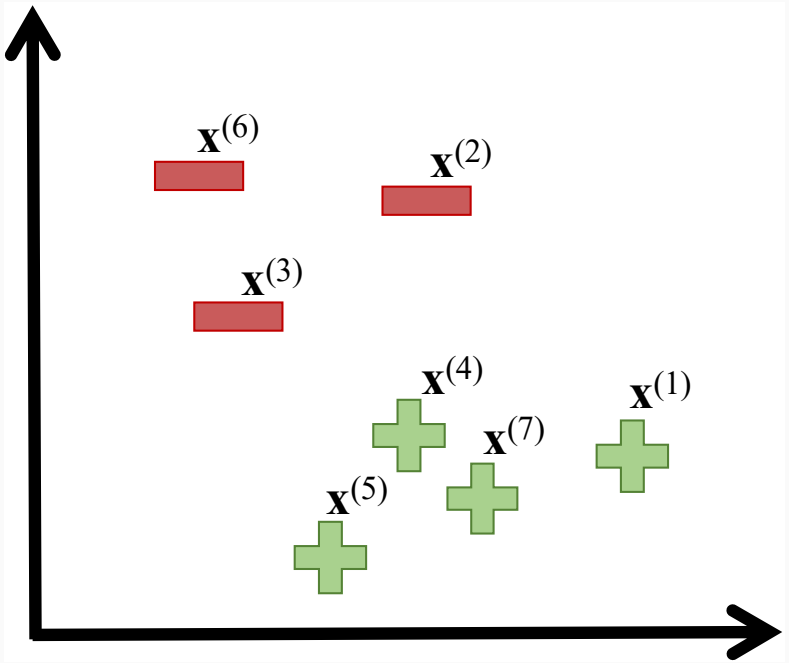
Caso 1: Clasificación binaria linealmente separable

- ¿Qué hiperplano elegimos?



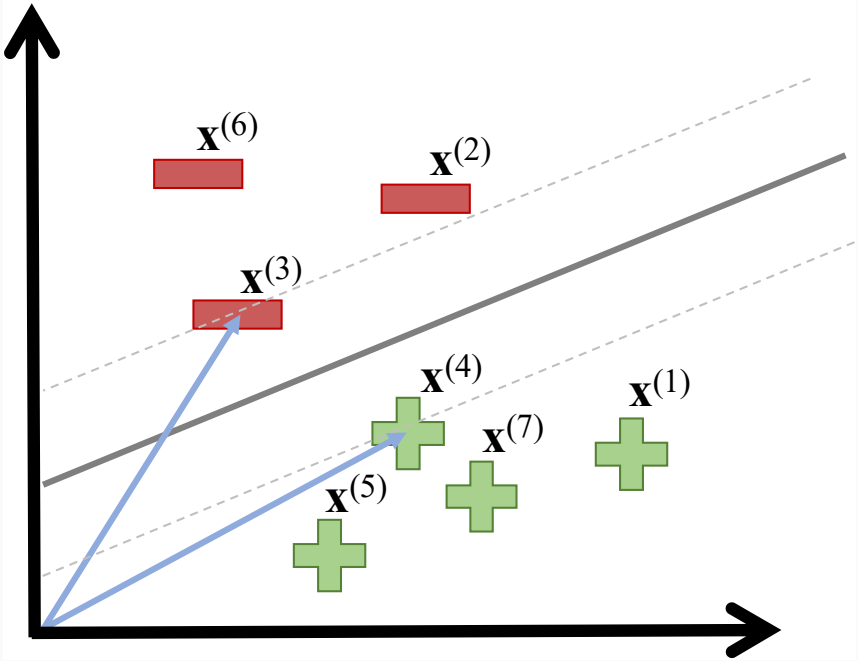
Clasificadores de margen máximo

- El del margen más grande: hiperplanos paralelos a región de decisión que pasan por datos se llaman *vectores de soporte*



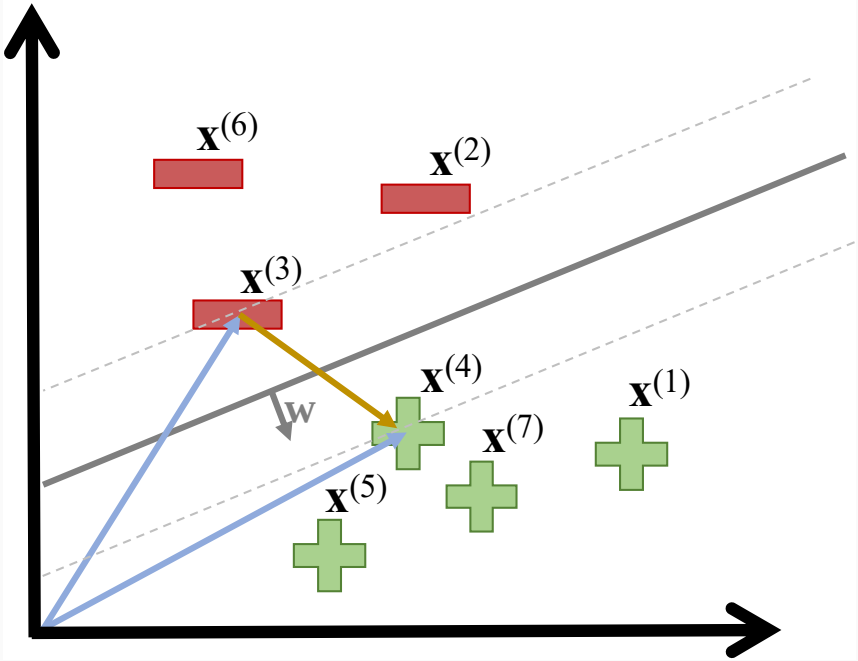
Clasificadores de margen máximo

- El del margen más grande: hiperplanos paralelos a región de decisión que pasan por datos se llaman *vectores de soporte*



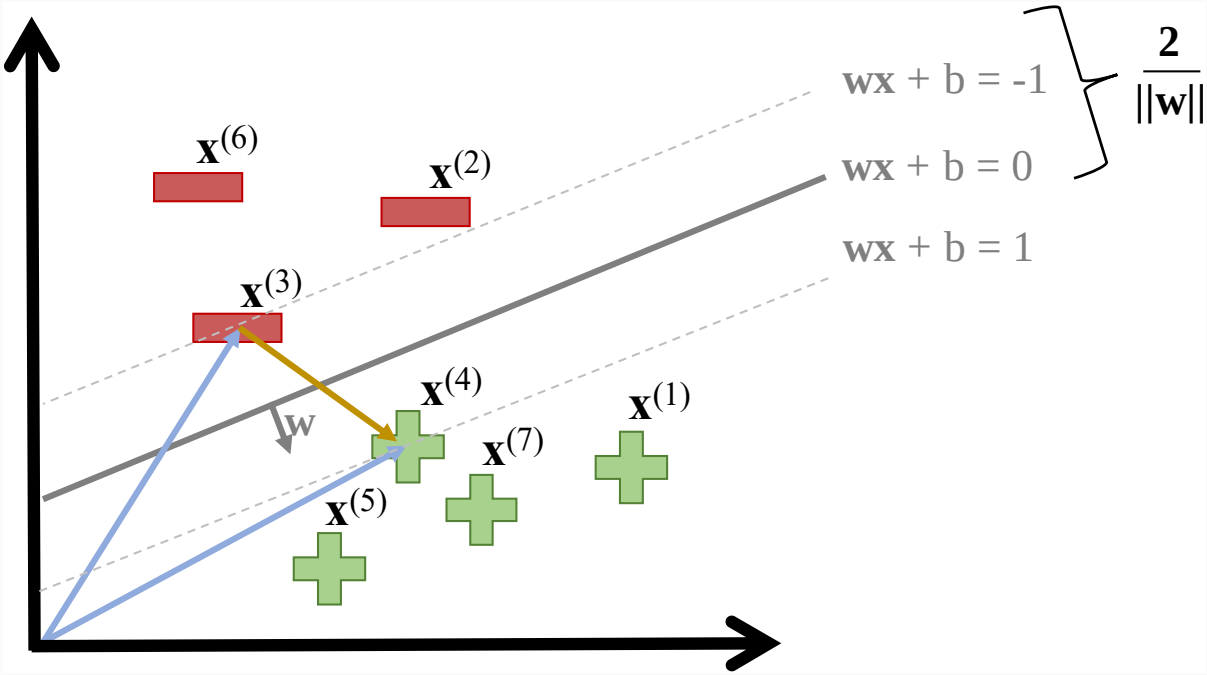
Clasificadores de margen máximo

- El del margen más grande: hiperplanos paralelos a región de decisión que pasan por datos se llaman *vectores de soporte*



Clasificadores de margen máximo

- El del margen más grande: hiperplanos paralelos a región de decisión que pasan por datos se llaman *vectores de soporte*



Optimización con restricciones

- Podemos convertir el problema a una optimización con restricciones

$$\begin{aligned} &\text{minimiza } \frac{1}{2}\|\mathbf{w}\|^2 \\ &\text{sujeto a } y^{(i)}(\mathbf{w}^\top \mathbf{x}^{(i)} + b) \geq 1 \end{aligned}$$

donde $y^{(i)} \in \{-1, +1\}$

Optimización con restricciones

- Podemos convertir el problema a una optimización con restricciones

$$\begin{aligned} &\text{minimiza } \frac{1}{2}\|\mathbf{w}\|^2 \\ &\text{sujeto a } y^{(i)}(\mathbf{w}^\top \mathbf{x}^{(i)} + b) \geq 1 \end{aligned}$$

  donde $y^{(i)} \in \{-1, +1\}$

- Optimización cuadrática con restricciones lineales y estrictamente convexa con solución única para problemas linealmente separables

Caso 2: No linealmente separables

- Penalizando suavemente clasificacionnes erróneas a través de *variables flojas*, $\xi_i \geq 0, i = 1, \ldots, N$

$$\text{minimiza } C \sum_{i=1}^{N} \xi_i + \frac{1}{2}\|\mathbf{w}\|^2$$

$$\text{sujeto a } y^{(i)}(\mathbf{w}^\top \mathbf{x}^{(i)} + b) \geq 1 - \xi_i, i = 1, \ldots, N$$

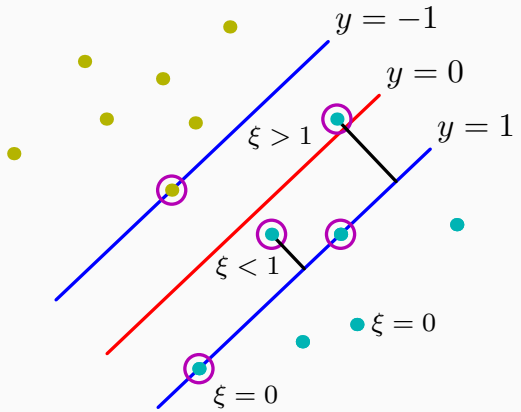


Imagen tomada de Bishop, PRML 2007

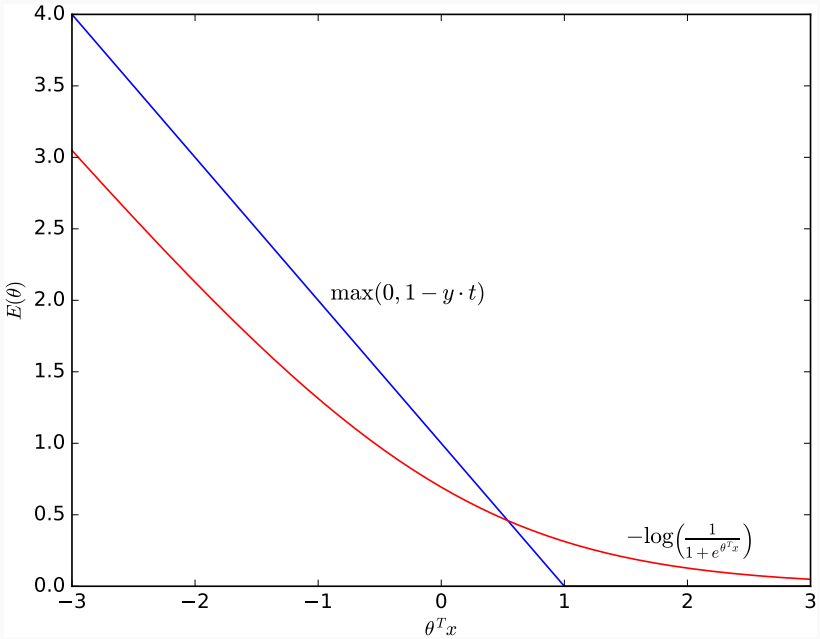
- $\xi^{(i)} = 0$, si están del lado correcto
- $\xi^{(i)} = |y^{(i)} - (\mathbf{w}^\top \mathbf{x}^{(i)} + b)|$ para otros puntos

Función de pérdida bisagra

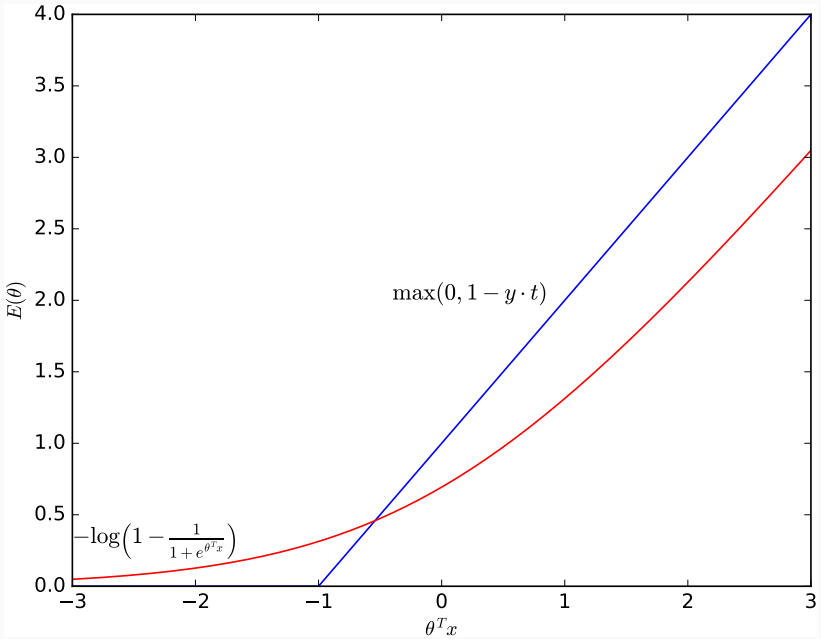
- Error respecto a parámetros está dado por función bisagra

$$B(\hat{y}, y) = \text{máx}(0, 1 - \hat{y} \cdot y)$$

$y = 1$



$y = -1$



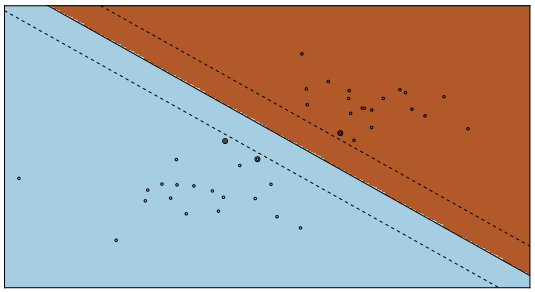
Encontrando el clasificador margen máximo

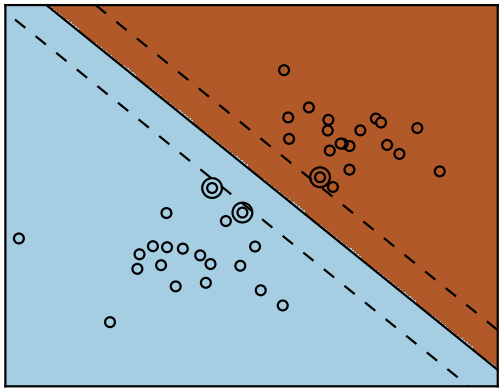
- El problema de optimización

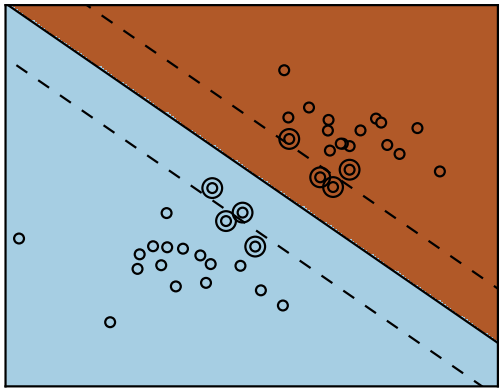
$$\min_{\mathbf{w},b} \left[C \cdot \sum_{i=1}^{N} B(\hat{y}_i, y^{(i)}) + \frac{1}{2}\|\mathbf{w}\|^2 \right]$$

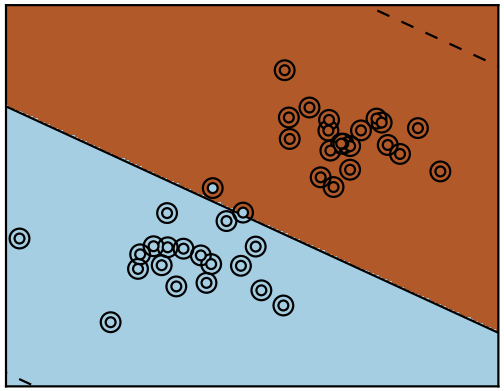
Caso 2: No linealmente separables

- Clasificación con diferentes valores de C









Representación dual

- Reformulación para tener espacio de entrada dado por producto punto de entrada

- Problema de optimización

$$\text{maximiza } \sum_{i=1}^{m} \alpha_i - \frac{1}{2} \sum_{i=1}^{m} \sum_{j=1}^{m} \alpha_i \alpha_j y^{(i)} y^{(j)} \mathbf{x}^{(i)\top} \mathbf{x}^{(j)}$$

$$\text{sujeto a } 0 \leq \alpha_i \leq C, \sum_{i=1}^{m} \alpha_i y^{(i)} = 0, \forall i$$

- Para predecir la clase de una nueva instancia $\tilde{\mathbf{x}}$

$$\tilde{y} = \left(\sum_{i=1}^{n} \alpha_i y^{(i)} k(\mathbf{x}^{(i)}, \tilde{\mathbf{x}}) + b \right)$$

¿Qué es una función de kernel?

- Función evaluada en los reales $k(\mathbf{x}, \mathbf{x}') \in \mathbb{R}$
  - Simétrica: $k(\mathbf{x}', \mathbf{x}) = k(\mathbf{x}, \mathbf{x}')$
  - No negativa: $k(\mathbf{x}, \mathbf{x}') \geq 0$

¿Qué es una función de kernel?

- Función evaluada en los reales $k(\mathbf{x}, \mathbf{x}') \in \mathbb{R}$
  - Simétrica: $k(\mathbf{x}', \mathbf{x}) = k(\mathbf{x}, \mathbf{x}')$
  - No negativa: $k(\mathbf{x}, \mathbf{x}') \geq 0$

- Puede ser vista como una medida de similitud (aunque no necesariamente debe ser una)

¿Qué es una función de kernel?

- Función evaluada en los reales $k(\mathbf{x}, \mathbf{x}') \in \mathbb{R}$
  - Simétrica: $k(\mathbf{x}', \mathbf{x}) = k(\mathbf{x}, \mathbf{x}')$
  - No negativa: $k(\mathbf{x}, \mathbf{x}') \geq 0$

- Puede ser vista como una medida de similitud (aunque no necesariamente debe ser una)

- Para mapeos no lineales $\phi(\mathbf{x})$, el kernel está dado por

$$k(\mathbf{x}, \mathbf{x}') = \phi(\mathbf{x})^\top \phi(\mathbf{x}')$$

Ejemplos de funciones de kernel

- Lineal

$$k(\mathbf{x}, \mathbf{x}') = \mathbf{x}^\top \mathbf{x}'$$

Ejemplos de funciones de kernel

- Lineal

$$k(\mathbf{x}, \mathbf{x}') = \mathbf{x}^\top \mathbf{x}'$$

- Gaussiana

$$k(\mathbf{x}, \mathbf{x}') = \exp\left(-\frac{1}{2}(\mathbf{x} - \mathbf{x}')^\top \Sigma^{-1}(\mathbf{x} - \mathbf{x}')\right)$$

Ejemplos de funciones de kernel

- Lineal

$$k(\mathbf{x}, \mathbf{x}') = \mathbf{x}^\top \mathbf{x}'$$

- Gaussiana

$$k(\mathbf{x}, \mathbf{x}') = \exp\left(-\frac{1}{2}(\mathbf{x} - \mathbf{x}')^\top \Sigma^{-1}(\mathbf{x} - \mathbf{x}')\right)$$

- Función de base radial (RBF)

$$k(\mathbf{x}, \mathbf{x}') = \exp\left(-\frac{\|\mathbf{x} - \mathbf{x}'\|_2^2}{2\sigma^2}\right)$$

Ejemplos de funciones de kernel

- Lineal

$$k(\mathbf{x}, \mathbf{x}') = \mathbf{x}^\top \mathbf{x}'$$

- Gaussiana

$$k(\mathbf{x}, \mathbf{x}') = \exp\left(-\frac{1}{2}(\mathbf{x} - \mathbf{x}')^\top \Sigma^{-1}(\mathbf{x} - \mathbf{x}')\right)$$

- Función de base radial (RBF)

$$k(\mathbf{x}, \mathbf{x}') = \exp\left(-\frac{\|\mathbf{x} - \mathbf{x}'\|_2^2}{2\sigma^2}\right)$$

- Similitud coseno

$$k(\mathbf{x}, \mathbf{x}') = \frac{\mathbf{x}^\top \mathbf{x}'}{\|\mathbf{x}\| \cdot \|\mathbf{x}'\|}$$

Kernels positivos definidos (Mercer)

- Kernel con matríz Gram positiva definida

$$\mathbf{K} = \begin{pmatrix} k(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_1) & \cdots & k(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_n) \\ & \vdots & \\ k(\mathbf{x}_n, \mathbf{x}_1) & \cdots & k(\mathbf{x}_n, \mathbf{x}_n) \end{pmatrix}$$

- La eigendescomposición de $\mathbf{K}$ está dada por

$$\mathbf{K} = \mathbf{U}^\top \Lambda \mathbf{U}$$

donde

$$k_{ij} = \left(\Lambda^{\frac{1}{2}} \mathbf{U}_{:,i}\right)^\top \left(\Lambda^{\frac{1}{2}} \mathbf{U}_{:,j}\right)$$

- Si un kernel es Mercer, existe un mapeo $\phi(\mathbf{x})$ tal que

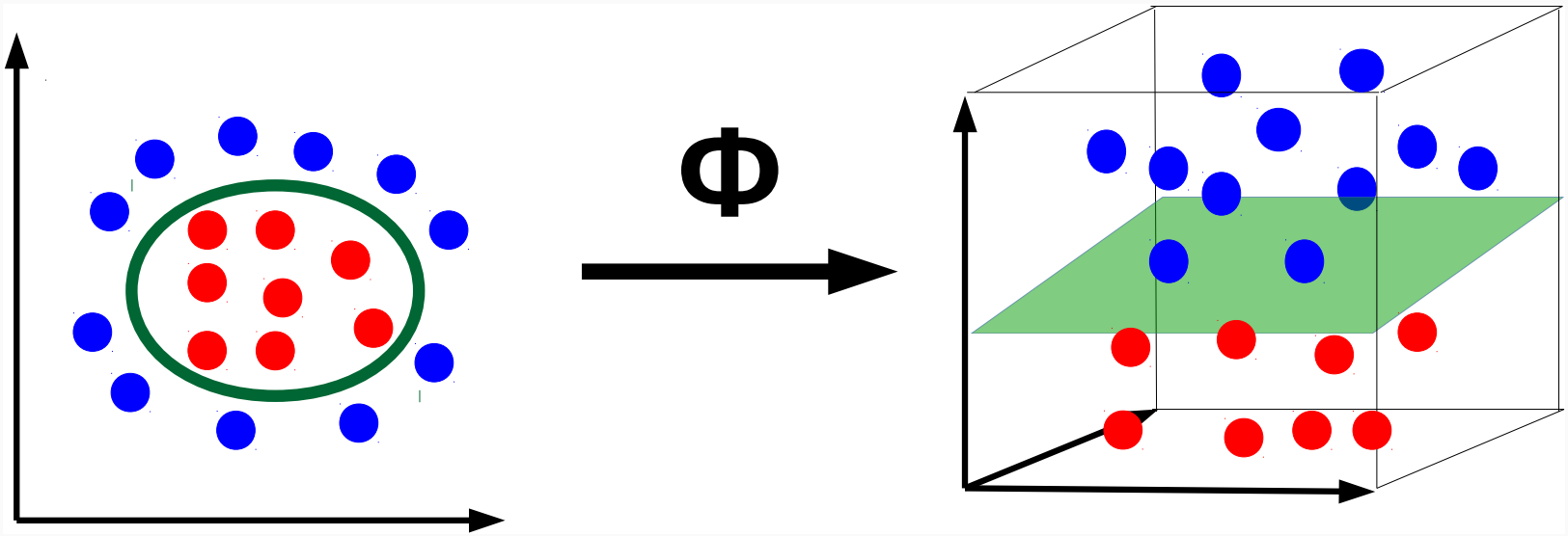
$$k(\mathbf{x}, \mathbf{x}') = \phi(\mathbf{x})^\top \phi(\mathbf{x}')$$

El truco del kernel

- Proyectamos el espacio de entrada a un espacio de más alta dimensionalidad en la que sea posible separar las clases linealmente

- Muchos algoritmos se pueden *kernelizar* usando la representación dual
    - Substituímos producto punto en representación dual por una llamada a un kernel

Intuición de clasificación con kernels



SVM con kernel lineal

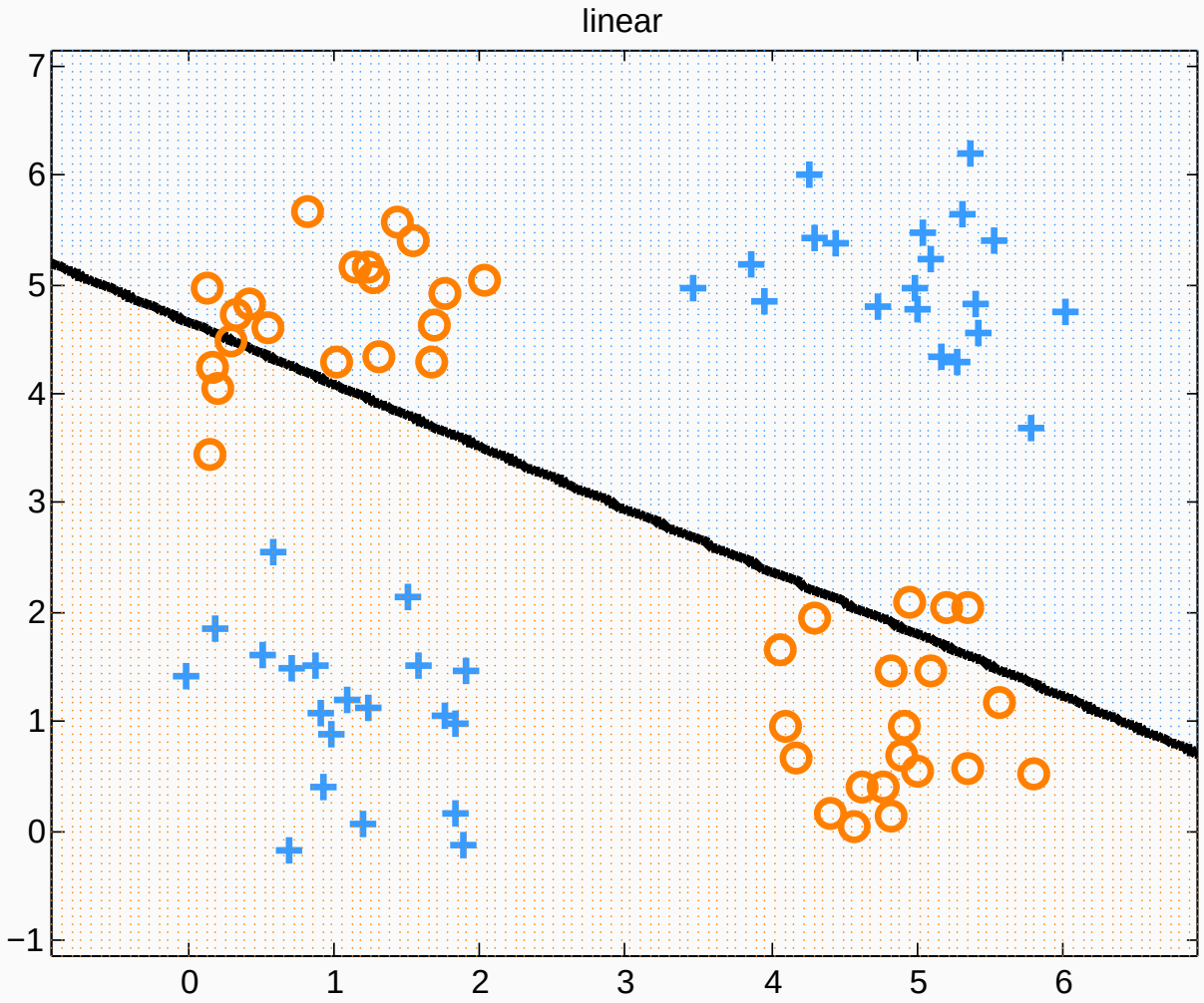


Imagen generada usando ejemplo de `https://github.com/probml/pmtk3`

SVM con función de base radial

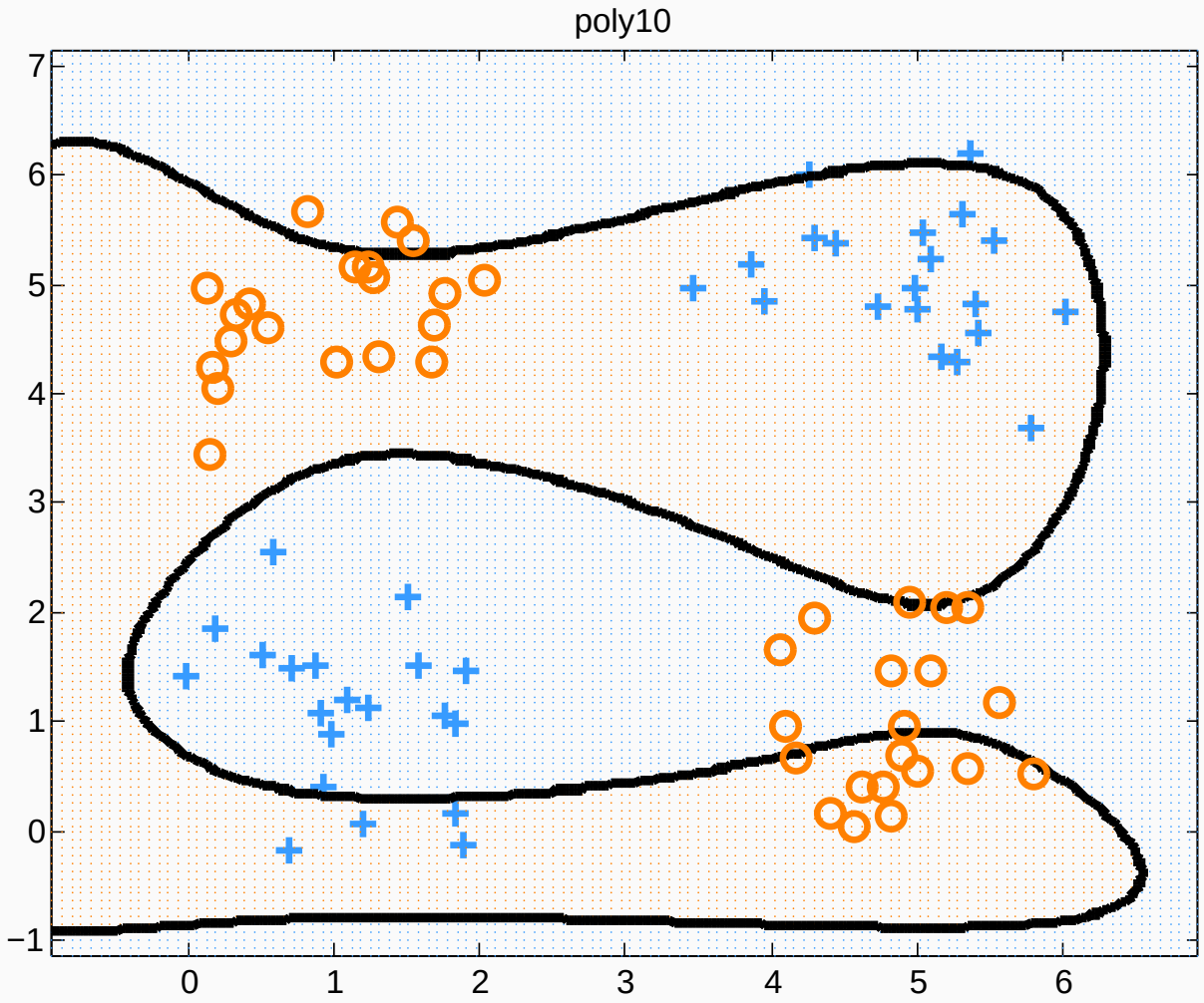


Imagen generada usando ejemplo de `https://github.com/probml/pmtk3`

SVM con kernel polinomial

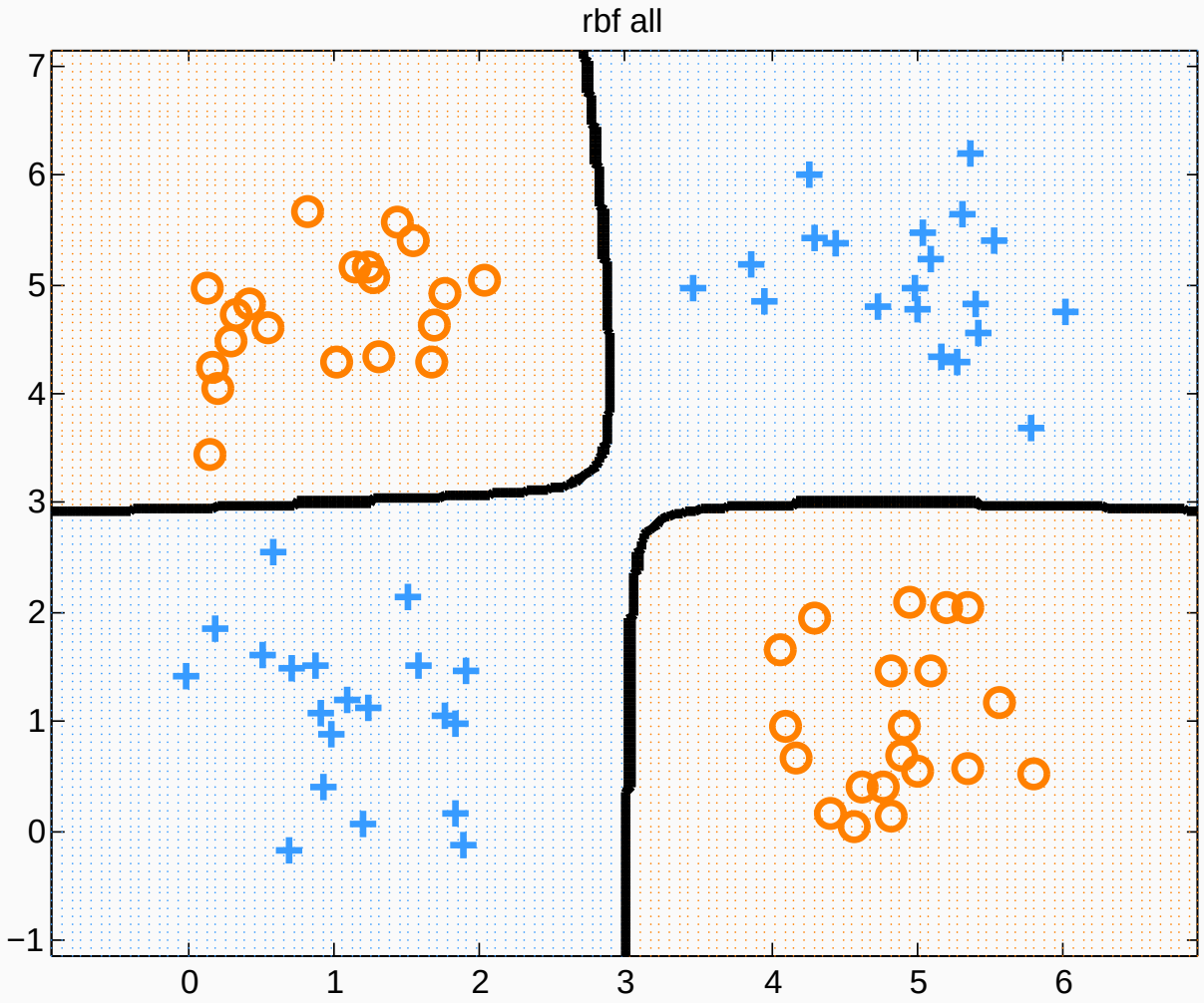


Imagen generada usando ejemplo de `https://github.com/probml/pmtk3`

Máquinas de vectores de soporte para regresión

- Extensión que preserva dispersidad en datos para regresión

Máquinas de vectores de soporte para regresión

- Extensión que preserva dispersidad en datos para regresión

- Usa función de pérdida ϵ-*sensible*

$$E(\hat{y}, y) = \begin{cases} 0 & \text{si } |\hat{y} - y| < \epsilon \\ |\hat{y} - y| - \epsilon & \text{en caso contrario} \end{cases}$$

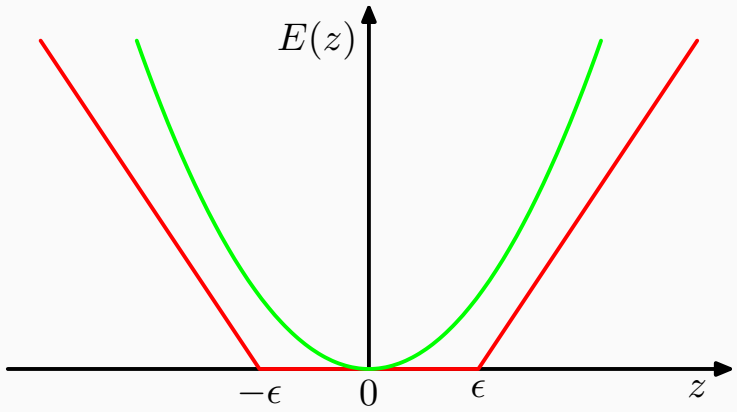


Imagen tomada de Bishop, PRML 2006

Problema de optimización para regresión

- Se busca resolver

$$\min_{\mathbf{w},b} \left[C \sum_{i=1}^{n} E(\hat{y}^{(i)}, y^{(i)}) + \frac{1}{2} \|\mathbf{w}\|^2 \right]$$

- Expresado con variables flojas ξ

$$\min_{\mathbf{w},b} \left[C \sum_{i=1}^{n} (\xi^{(i)} + \hat{\xi}^{(i)}) + \frac{1}{2} \|\mathbf{w}\|^2 \right]$$

$$\text{sujeto a } \hat{y}^{(i)} + \epsilon + \xi^{(i)} \geq y^{(i)}$$

$$\hat{y}^{(i)} - \epsilon - \xi^{(i)} \leq y^{(i)}$$

Tubo ϵ

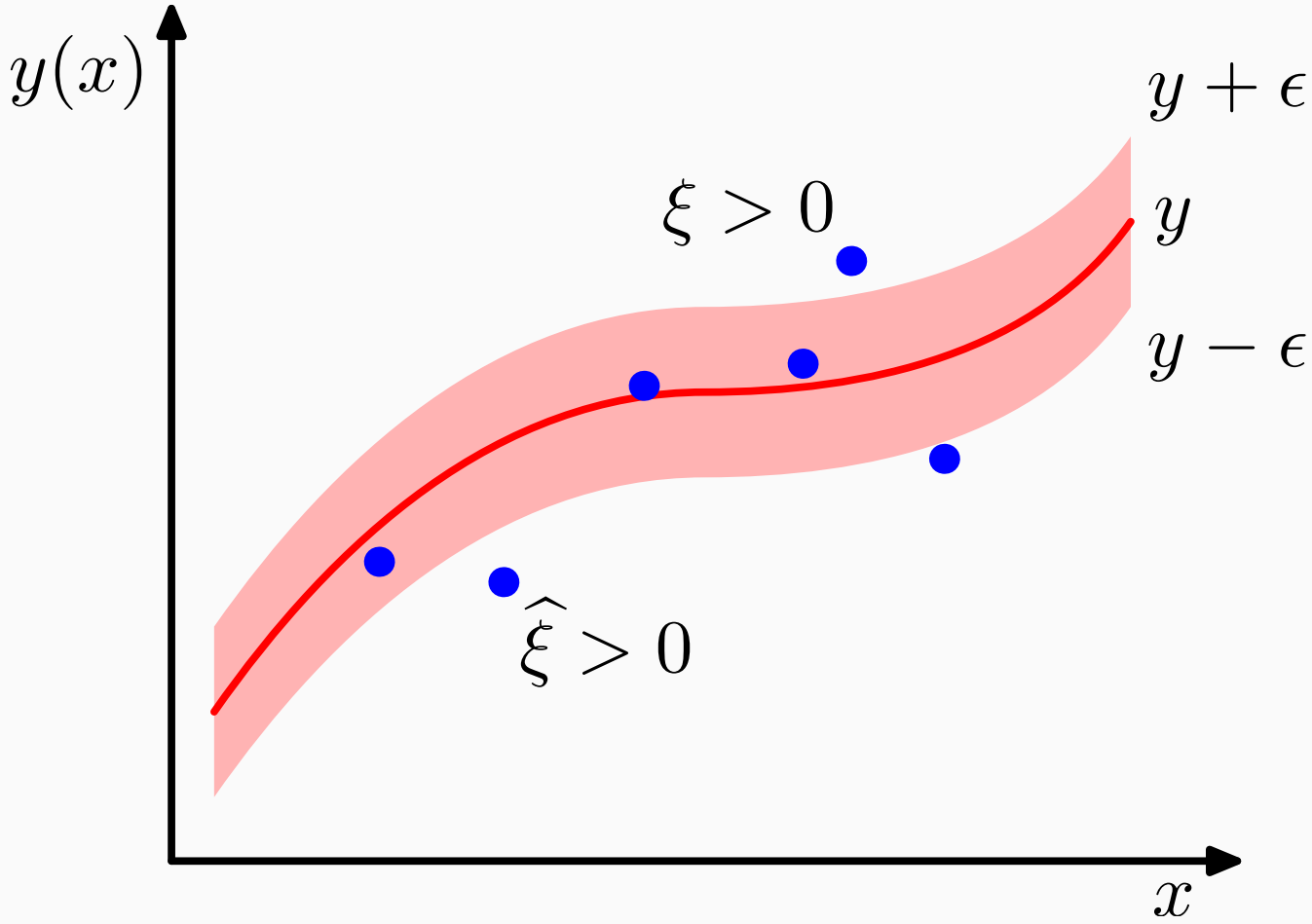


Imagen tomada de Bishop, PRML 2006

Algoritmo de optimización mínima secuencial (SMO)

- Divide el problema de optimización en una serie de subproblemas mínimos (con 2 multiplicadores de Lagrange debido a las restricciones)

- Es posible resolver cada subproblema de forma analítica

$$0 \leq \alpha_1, \alpha_2 \leq C$$
$$y^{(1)} \cdot \alpha_1 + y^{(2)} \cdot \alpha_2 = k$$

donde k es el negativo de la suma del resto de los términos de la restricción de igualdad

Algoritmo de descenso por subgradiente (PEGASOS)

- La función bisagra no es diferenciable
- Podemos usar el subgradiente

$$\tilde{\nabla} E(\mathbf{w}, b) = \begin{cases} 0, y^i \cdot (\mathbf{w}^\top \mathbf{x}^{(i)} + b) \geq 1 \\ y^i \cdot \mathbf{x}^{(i)}, y^i \cdot (\mathbf{w}^\top \mathbf{x}^{(i)} + b) < 1 \end{cases}$$