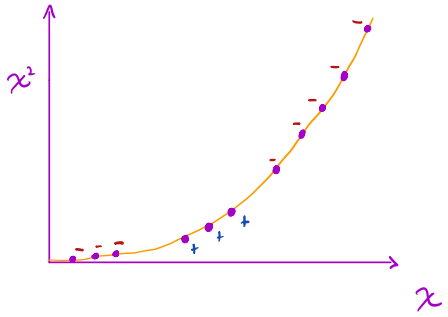
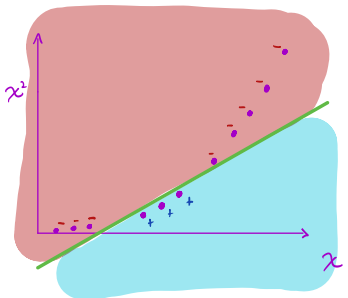
Kernels y SVM

Recordemos el ejemplo del siguiente data set uni-dimensional:

Una forma de resolver este problema es llevar este data set a una dimensión más alta usando una función ϕ que lleva el punto de coordenada x al punto en el plano (x, x^2).



Aqui si podemos encontrar una forma de resolver nuestro problema:



¿Qué hace a esta técnica particularmente útil junto a los SVM?

Lo que la hace útil es que no tenemos que transformar nuestras instancias gracias al "kernel trick".

Transformación y Kernel

La transformación ϕ del punto anterior puede ser descrita como $(x, x^2, \frac{1}{2})$ en tres dimensiones (como el eje z está fijo no es relevante).
Si tomamos dos puntos a y b en una dimensión, el producto punto $\phi(a) \cdot \phi(b)$ es:

$$\begin{pmatrix} a \\ a^2 \\ \frac{1}{2} \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} b \\ b^2 \\ \frac{1}{2} \end{pmatrix} = ab + a^2b^2 + \frac{1}{4} = \left(ab + \frac{1}{2}\right)^2$$

Entonces, al resolver el problema de optimización dual:

$$\min \quad \frac{1}{2} \sum_i \sum_i \alpha_i \alpha_j y_i y_j x_i^T x_j - \sum \alpha_i \quad \text{con } \alpha_i \geq 0$$

Debemos reemplazar el producto punto:

$x_i \cdot x_j = x_i^T x_j$ por $\phi(a) \cdot \phi(b) = (ab + \frac{1}{2})^2$

Lo que es bueno porque no tenemos que transformar los datos a la hora de entrenar nuestro modelo, solo tenemos que calcular el producto punto con $(ab + \frac{1}{2})^2$.

Este tipo de funciones que calculan el producto punto sin hacer transformaciones es lo que llamaremos Kernel. Esta técnica hace el proces mucho más eficiente.

Formalmente, un Kernel es una función K capaz de computar el producto punto

$$\phi(\vec{a})^T \phi(\vec{b})$$

Basado sdamente en los valores originales de $\vec{a}$ y $\vec{b}$. En el ejemplo, $\vec{a}$ y $\vec{b}$ eran unidimensionales, pero en general trabajaremos con vectores.

Ojo, nunca vamos a tener que computar ϕ, de hecho hay veces que no la conoceremos.

Algunos Kernel:

- Lineal: $K(\vec{a}, \vec{b}) = \vec{a}^T \vec{b}$
- Polinomial: $K(\vec{a}, \vec{b}) = (\gamma \vec{a}^T \vec{b} + r)^d$
  - ↳ En el ejemplo usamos este con $\gamma = 1$, $r = \frac{1}{2}$ y $d = 2$
- Gaussian RBF: $K(\vec{a}, \vec{b}) = e^{(-\gamma \|\vec{a} - \vec{b}\|^2)}$
- Sigmoid: $K(\vec{a}, \vec{b}) = \tanh(\gamma \vec{a}^T \vec{b} + r)$

Teorema de Mercer

El teorema de Mercer nos dice que si una función $K(\vec{a}, \vec{b})$ respeta ciertas condiciones (llamadas "Mercer's Condition"), entonces existe una función ϕ tal que mapea $\vec{a}$ y $\vec{b}$ a un espacio (de posiblemente muchas dimensiones) donde:

$$K(\vec{a}, \vec{b}) = \phi(\vec{a})^T \phi(\vec{b})$$

Probablemente, nunca conozcamos ϕ. Por ejemplo con el Kernel Gaussian RBF podemos mostrar que ϕ mapea cada instancia a un espacio

de dimensiones infinitas.

Ahora para predecir, uno en vez de calcular $\vec{w}$ y $\vec{b}$, uno puede expresar la función de decisión en terminos del Kernel (i.e. productos punto).