2021-2022

Aprendizaje Automático

4. Máquinas de vectores soporte

etsinf
Escola Tècnica Superior d'Enginyeria Informàtica

Francisco Casacuberta Nolla
(fcn@dsic.upv.es)

Enrique Vidal Ruiz
(evidal@dsic.upv.es)

Departament de Sistemas Informàtics i Computació (DSIC)

Universitat Politècnica de València (UPV)

Septiembre, 2021

Index

Index

Clasificación en dos clases con funciones discriminantes lineales

FUNCIÓN DISCRIMINANTE LINEAL (FDL)

$$\phi : \mathbb{R}^d \to \mathbb{R} : \quad \phi(\boldsymbol{x}; \boldsymbol{\Theta}) \;=\; \boldsymbol{\theta}^t \boldsymbol{x} + \theta_0 \;=\; \sum_{i=1}^{d} \theta_i \, x_i + \theta_0$$

$\boldsymbol{\Theta} = (\boldsymbol{\theta}, \theta_0)$: $\boldsymbol{\theta} \in \mathbb{R}^d$ es un *vector de pesos* y $\theta_0 \in \mathbb{R}$ se denomina *umbral*.

El número de parámetros de $\boldsymbol{\Theta}$ es pues $D = d + 1$.

REGLA DE CLASIFICACIÓN (2 CLASES)

Asumiendo que las etiquetas de clase, c, son $+1$ y -1:

$$f(\boldsymbol{x}) \;=\; \begin{cases} +1 & \text{si } \phi(\boldsymbol{x}; \boldsymbol{\Theta}) \geq 0 \\ -1 & \text{si } \phi(\boldsymbol{x}; \boldsymbol{\Theta}) < 0 \end{cases}$$

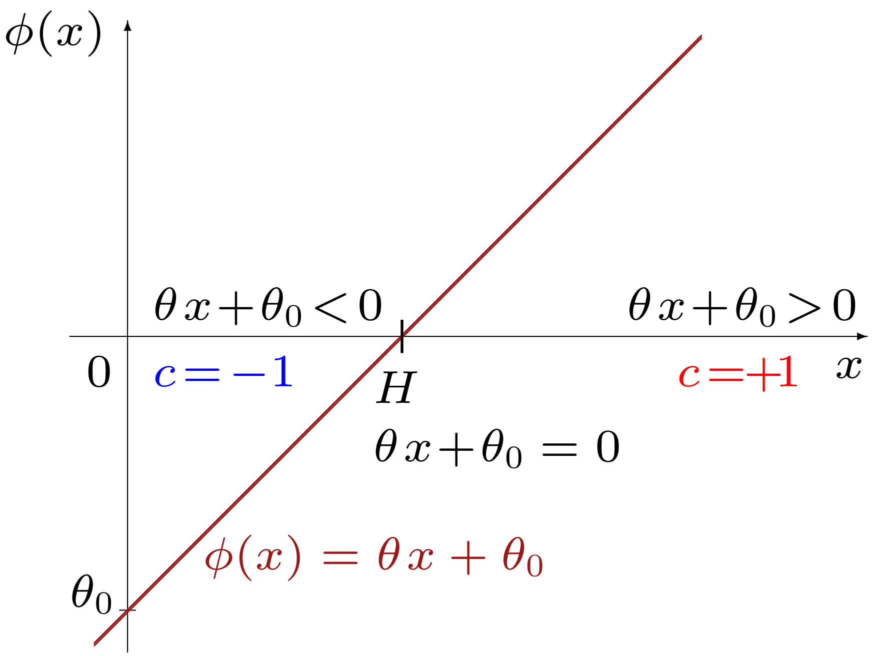
Propiedades de las funciones discriminantes lineales

1. Una FDL ϕ define el hiperplano de decisión $H = \{\boldsymbol{x} \mid \phi(\boldsymbol{x}; \boldsymbol{\Theta}) = 0\}$.
2. H divide a $\mathbb{R}^d$ en dos semiespacios: $\phi(\boldsymbol{x}; \boldsymbol{\Theta}) \geq 0,\ c = +1$ y $\phi(\boldsymbol{x}; \boldsymbol{\Theta}) < 0,\ c = -1$.
3. Si $\gamma \in \mathbb{R}^+$, entonces $\gamma\, \phi(\boldsymbol{x}; \boldsymbol{\Theta})$ y $\phi(\boldsymbol{x}; \boldsymbol{\Theta})$ representan al mismo H.

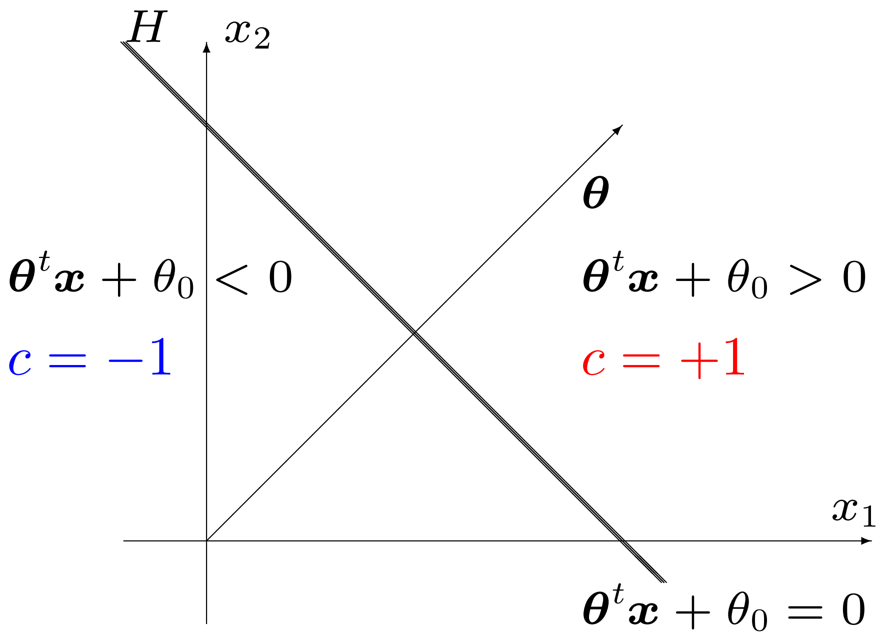
Propiedades de las funciones discriminantes lineales

1. Una FDL ϕ define el hiperplano de decisión $H = \{\boldsymbol{x} \mid \phi(\boldsymbol{x}; \boldsymbol{\Theta}) = 0\}$.
2. H divide a $\mathbb{R}^d$ en dos semiespacios: $\phi(\boldsymbol{x}; \boldsymbol{\Theta}) \geq 0,\ c = +1$ y $\phi(\boldsymbol{x}; \boldsymbol{\Theta}) < 0,\ c = -1$.
3. Si $\gamma \in \mathbb{R}^+$, entonces $\gamma\, \phi(\boldsymbol{x}; \boldsymbol{\Theta})$ y $\phi(\boldsymbol{x}; \boldsymbol{\Theta})$ representan al mismo H.

Ejemplo con $d = 1$



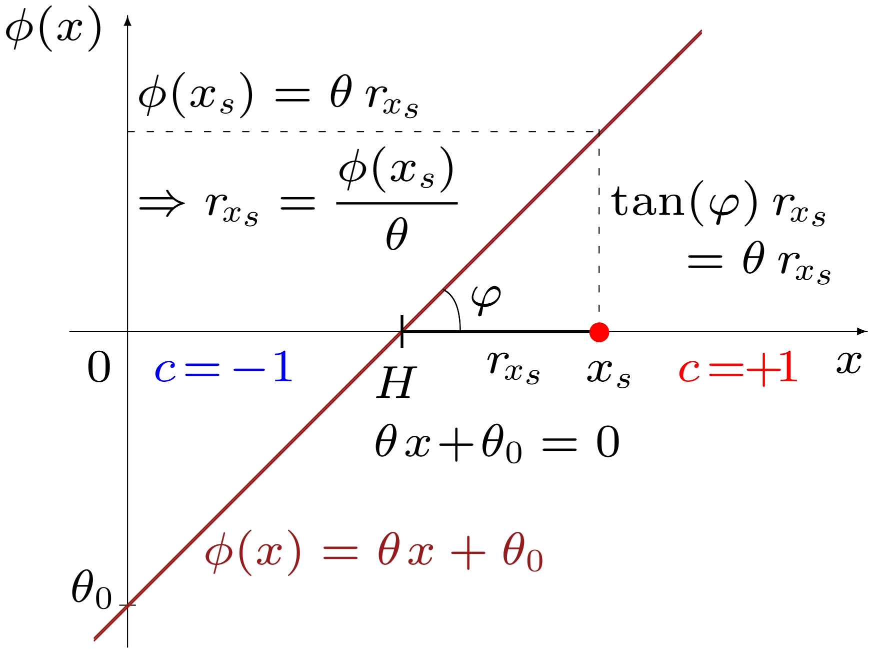
Ejemplo con $d = 2$



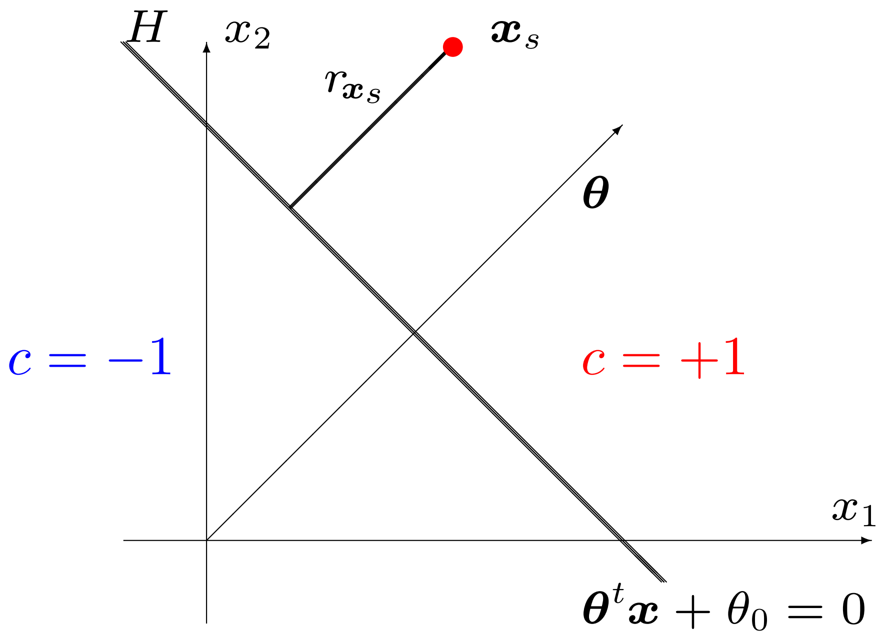
Propiedades de las funciones discriminantes lineales

1. Una FDL ϕ define el hiperplano de decisión $H = \{\boldsymbol{x} \mid \phi(\boldsymbol{x};\boldsymbol{\Theta}) = 0\}$.
2. H divide a $\mathbb{R}^d$ en dos semiespacios: $\phi(\boldsymbol{x};\boldsymbol{\Theta}) \geq 0,\ c = +1$ y $\phi(\boldsymbol{x};\boldsymbol{\Theta}) < 0,\ c = -1$.
3. Si $\gamma \in \mathbb{R}^+$, entonces $\gamma\ \phi(\boldsymbol{x};\boldsymbol{\Theta})$ y $\phi(\boldsymbol{x};\boldsymbol{\Theta})$ representan al mismo H.
4. La distancia de cualquier punto $\boldsymbol{x}_s$ a H es: $r_{\boldsymbol{x}_s} = \dfrac{|\phi(\boldsymbol{x}_s;\boldsymbol{\Theta})|}{||\boldsymbol{\theta}||} = \dfrac{|\boldsymbol{\theta}^t\boldsymbol{x}_s + \theta_0|}{||\boldsymbol{\theta}||}$

Ejemplo con $d = 1$



Ejemplo con $d = 2$



Aprendizaje de funciones discriminantes lineales

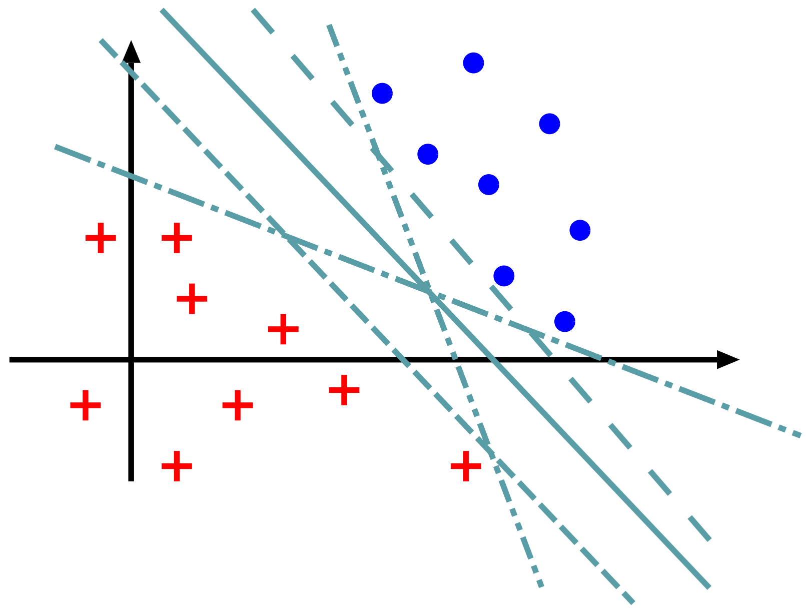
$$S = \{(\boldsymbol{x}_1, c_1), \ldots, (\boldsymbol{x}_N, c_N)\}, \quad \boldsymbol{x}_n \in \mathbb{R}^d, c_n \in \{+1, -1\}, \; 1 \leq n \leq N.$$

S es *linealmente separable* si $\exists\, \boldsymbol{\theta} \in \mathbb{R}^d, \; \theta_0 \in \mathbb{R},$ tales que:

$$c_n \left(\boldsymbol{\theta}^t \boldsymbol{x}_n + \theta_0\right) \; > \; 0 \,, \quad 1 \leq n \leq N$$

Aprendizaje: Dada una muestra linealmente separable S, encontrar $\boldsymbol{\Theta} = (\boldsymbol{\theta}, \theta_0)$ que la separe.

Aproximación usual: Minimizar alguna función objetivo $q_S(\boldsymbol{\theta}, \theta_0)$ utilizando descenso por gradiente. Por ejemplo: el algoritmo Perceptrón, o el algoritmo Adaline.



Problema: probablemente hayan muchas soluciones.

Soluciones con *margen* $b \in \mathbb{R}^{\geq 0}$: $\quad c_n \left(\boldsymbol{\theta}^t \boldsymbol{x}_n + \theta_0\right) \geq \; b$

Ejercicio: Escribir el algoritmo Perceptrón con margen

Forma canónica respecto a un conjunto de puntos

Para un hiperplano separador H dado, hay múltiples posibilidades de definirlo mediante diferentes FDLs $\phi(\boldsymbol{x};\boldsymbol{\Theta})$.

La *FDL canónica* de un H dado con respecto a un conjunto S de N puntos se define por $\check{\boldsymbol{\Theta}} \equiv (\check{\boldsymbol{\theta}}, \check{\theta}_0)$, tal que:

$$\min_{1 \leq n \leq N} \mid \phi(\boldsymbol{x}_n; \check{\boldsymbol{\Theta}}) \mid \;=\; \min_{1 \leq n \leq N} \mid \check{\boldsymbol{\theta}}^t \boldsymbol{x}_n + \check{\theta}_0 \mid \;=\; 1$$

Por tanto, la distancia $\check{r}$ del vector $\check{\boldsymbol{x}} \in S$ más próximo al hiperplano separador H es:

$$\check{r} \;=\; \frac{\mid \check{\boldsymbol{\theta}}^t \check{\boldsymbol{x}} + \check{\theta}_0 \mid}{\|\check{\boldsymbol{\theta}}\|} \;=\; \frac{1}{\|\check{\boldsymbol{\theta}}\|}$$

Index

Forma canónica y margen de un clasificador respecto a un conjunto de puntos

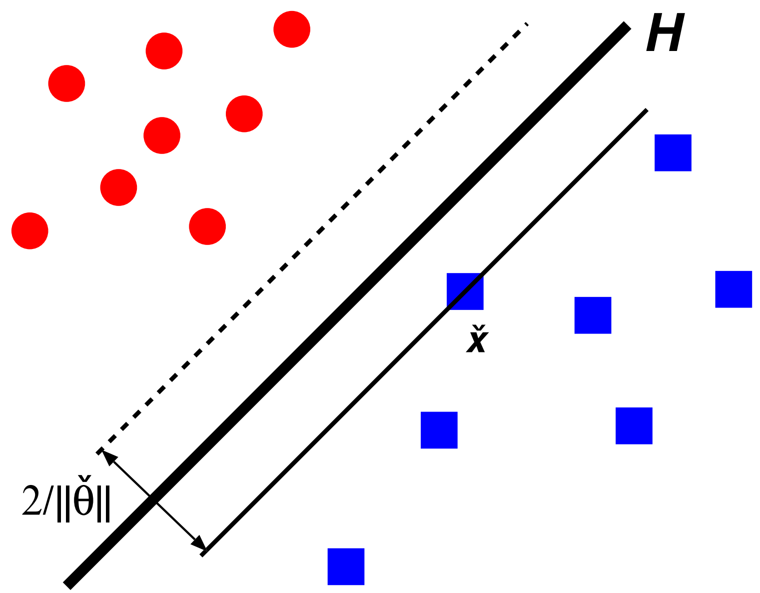
Dado un hiperplano separador H y su *FDL canónica* con respecto a un conjunto S de N puntos $\check{\mathbf{\Theta}} \equiv (\check{\boldsymbol{\theta}}, \check{\theta}_0)$.

Hemos visto que la distancia $\check{r}$ del vector $\check{\boldsymbol{x}} \in S$ más próximo al hiperplano separador H es:

$$\check{r} = \frac{1}{||\check{\boldsymbol{\theta}}||}$$

Y el margen de H con respecto a S se define como:

$$2\check{r} = \frac{2}{||\check{\boldsymbol{\theta}}||}$$



En adelante se asume que $\mathbf{\Theta}$ es siempre canónico respecto a S; es decir $\check{\mathbf{\Theta}} \to \mathbf{\Theta}$

Clasificadores de margen máximo

- *Aprendizaje*: dada una muestra linealmente separable S, encontrar $\boldsymbol{\theta} \in \mathbb{R}^d$ y $\theta_0 \in \mathbb{R}$ que:
  - *maximicen:* $\dfrac{2}{\|\boldsymbol{\theta}\|}$
  - *sujetas a:* $c_n\,(\boldsymbol{\theta}^t \boldsymbol{x}_n + \theta_0) \;\geq\; 1, \quad 1 \leq n \leq N$
- Equivalentemente, *buscar* $\boldsymbol{\theta} \in \mathbb{R}^d$ *y* $\theta_0 \in \mathbb{R}$ *que:*
  - *minimicen:* $\dfrac{1}{2}\,\boldsymbol{\theta}^t \boldsymbol{\theta}$
  - *sujetas a:* $c_n\,(\boldsymbol{\theta}^t \boldsymbol{x}_n + \theta_0) \;\geq\; 1, \quad 1 \leq n \leq N$

Aplicación de la técnica de los multiplicadores de Lagrange

- Función de Lagrange:

$$\Lambda(\boldsymbol{\theta}, \theta_0, \boldsymbol{\alpha}) \ = \ \frac{1}{2}\boldsymbol{\theta}^t\boldsymbol{\theta} \ - \sum_{n=1}^{N} \alpha_n \left(c_n \left(\boldsymbol{\theta}^t \boldsymbol{x}_n + \theta_0 \right) - 1 \right)$$

  donde $\alpha_n \geq 0, \ 1 \leq n \leq N$ son los *multiplicadores de Lagrange*.

- Resolver $\ \boldsymbol{\nabla}_{\boldsymbol{\theta},\theta_0} \Lambda(\boldsymbol{\theta}, \theta_0, \boldsymbol{\alpha}) \ = \ \mathbf{0}$

$$\boldsymbol{\nabla}_{\boldsymbol{\theta}} \Lambda = \mathbf{0} \ \Rightarrow \ \boldsymbol{\theta}^{\star} = \sum_{n=1}^{N} c_n \, \alpha_n \, \boldsymbol{x}_n \, ; \qquad \frac{\partial \Lambda}{\partial \theta_0} = 0 \ \Rightarrow \ \sum_{n=1}^{N} \alpha_n \, c_n \ = \ 0$$

- Lagrangiana dual (sustituyendo las anteriores expresiones en $\Lambda(\boldsymbol{\theta}, \theta_0, \boldsymbol{\alpha})$):

$$\Lambda_D(\boldsymbol{\alpha}) \ = \ \sum_{n=1}^{N} \alpha_n - \frac{1}{2} \sum_{n=1}^{N} \sum_{m=1}^{N} c_n \, c_m \, \alpha_n \, \alpha_m \, \boldsymbol{x}_n^t \boldsymbol{x}_m$$

- Maximizar $\ \Lambda_D(\boldsymbol{\alpha})\ $ sujeto a: $\displaystyle\sum_{n=1}^{N} \alpha_n \, c_n = 0; \quad \alpha_n \geq 0, \ 1 \leq n \leq N \quad \longrightarrow \quad \boldsymbol{\alpha}^{\star}$

Ejercicio: Desarrollar completamente los pasos anteriores hasta obtener $\Lambda_D(\boldsymbol{\alpha})$.

Maximización del margen: problemas equivalentes

- *Original:* minimizar $\frac{1}{2}\boldsymbol{\theta}^t\boldsymbol{\theta}$, sujeto a: $c_n(\boldsymbol{\theta}^t\boldsymbol{x}_n + \theta_0) \geq 1, \; 1 \leq n \leq N$

- *Primal:* minimizar $\Lambda(\boldsymbol{\theta}, \theta_0, \boldsymbol{\alpha}) \; = \; \frac{1}{2}\boldsymbol{\theta}^t\boldsymbol{\theta} - \sum_{n=1}^{N} \alpha_n \left(c_n \left(\boldsymbol{\theta}^t\boldsymbol{x}_n + \theta_0\right) - 1\right)$

  sujeto a $\alpha_n \geq 0, \; 1 \leq n \leq N \qquad \longrightarrow \quad \boldsymbol{\theta}^\star(\boldsymbol{\alpha})$

  Dual: maximizar $\Lambda_D(\boldsymbol{\alpha}) \; = \; \sum_{n=1}^{N} \alpha_n - \frac{1}{2} \sum_{n=1}^{N} \sum_{m=1}^{N} c_n \, c_m \, \alpha_n \, \alpha_m \, \boldsymbol{x}_n^t \boldsymbol{x}_m$

  sujeto a: $\sum_{n=1}^{N} \alpha_n \, c_n = 0; \quad \alpha_n \geq 0, \; 1 \leq n \leq N \qquad \longrightarrow \quad \boldsymbol{\alpha}^\star$

Los dos son problemas de *optimización cuadrática*, para los que existen técnicas de optimización más o menos costosas; típicamente en $\mathcal{O}(N^3)$.

Ventajas de la formulación *dual*: Permite soluciones computacionales más eficientes.

Resumen de propiedades de los clasificadores de máximo margen

Las soluciones $\boldsymbol{\theta}^\star, \theta_0^\star, \boldsymbol{\alpha}^\star$ verifican:

1. $\boldsymbol{\theta}^\star = \sum_{n=1}^{N} c_n \, \alpha_n^\star \, \boldsymbol{x}_n$

2. $\sum_{n=1}^{N} \alpha_n^\star \, c_n = 0$

3. $\alpha_n^\star \geq 0, \quad 1 \leq n \leq N$

4. Condición complementaria de Karush-Kuhn-Tucker (KKT):

   $$\alpha_n^\star \left(c_n \, (\boldsymbol{\theta}^{\star t} \boldsymbol{x}_n + \theta_0^\star) - 1 \right) = 0, \quad 1 \leq n \leq N$$

   Esto implica que hay dos posibilidades para cada n:

   $\alpha_n^\star = 0$, o bien $\alpha_n^\star \neq 0, \;\; c_n \, (\boldsymbol{\theta}^{\star t} \boldsymbol{x}_n + \theta_0^\star) = 1$

Vectores soporte

- *Vectores soporte:* muestras de entrenamiento $\boldsymbol{x}_n$ para las que $\alpha_n^\star \neq 0$

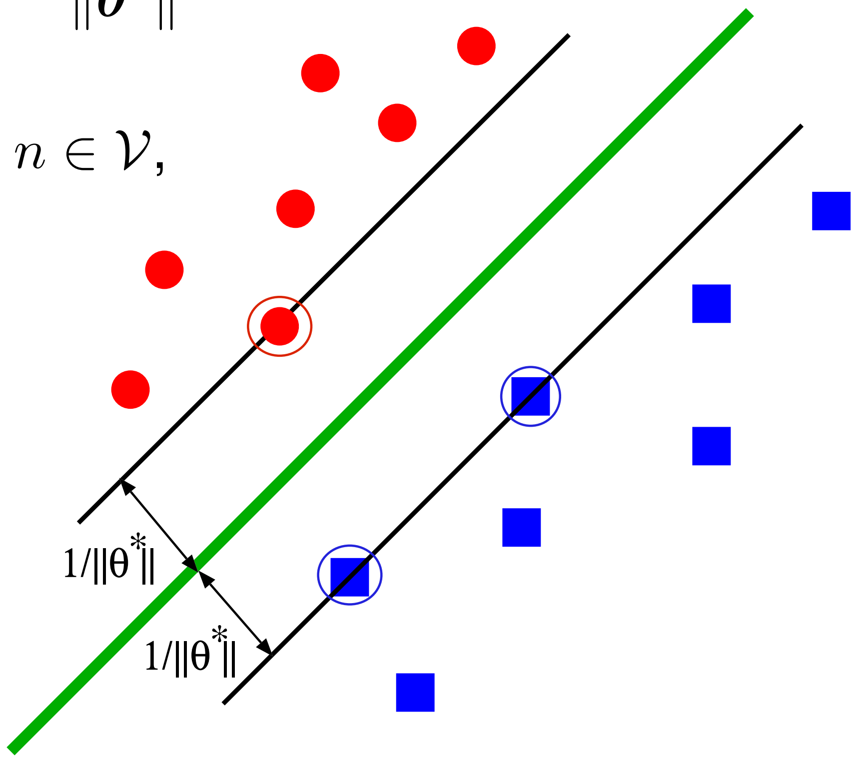
$$\mathcal{V} = \left\{ n \in \mathbb{N},\ 1 \leq n \leq N \mid (\boldsymbol{x}_n, c_n) \in S,\ c_n({\boldsymbol{\theta}^\star}^t \boldsymbol{x}_n + \theta_0^\star) = 1 \right\}$$

- Todos los vectores soporte equidistan del hiperplano separador:

$$\forall n \in \mathcal{V}, \quad r_{\boldsymbol{x}_n} = \frac{|\,{\boldsymbol{\theta}^\star}^t \boldsymbol{x}_n + \theta_0^\star\,|}{\|\boldsymbol{\theta}^\star\|} = \frac{|\,c_n\,|}{\|\boldsymbol{\theta}^\star\|} = \frac{1}{\|\boldsymbol{\theta}^\star\|}$$

- Las propiedades: $\sum_{n=1}^{N} \alpha_n^\star c_n = 0$ y $\alpha_n^\star > 0,\ n \in \mathcal{V}$, implican que hay al menos un vector soporte de cada clase; es decir, $\exists n, n' \in \mathcal{V}$ tales que

$$c_n = +1,\ c_{n'} = -1$$
$$\alpha_n^\star, \alpha_{n'}^\star > 0,$$
$$n \neq n'$$



Máquinas de vectores soporte

Un clasificador de máximo margen queda definido por la función discriminante lineal $\phi(\boldsymbol{x};\boldsymbol{\Theta}) \stackrel{\text{def}}{=} \boldsymbol{\theta}^{\star t}\boldsymbol{x} + \theta_0^\star$, donde $\boldsymbol{\theta}^\star, \theta_0^\star$ son parámetros óptimos del problema *original* (maximizar el margen), o de los correspondientes problemas *primal–dual*.

$\boldsymbol{\theta}^\star$ se obtiene mediante combinación lineal de vectores soporte, por lo que estos clasificadores también se denominan *máquinas de vectores soporte*.

- Por la primera propiedad: $\boldsymbol{\theta}^\star = \sum_{n=1}^{N} c_n\, \alpha_n^\star\, \boldsymbol{x}_n = \sum_{n\in\mathcal{V}} c_n\, \alpha_n^\star\, \boldsymbol{x}_n$
- Por KKT, para cualquier $m \in \mathcal{V}$: $\theta_0^\star = c_m - \boldsymbol{\theta}^{\star t}\boldsymbol{x}_m = c_m - \sum_{n\in\mathcal{V}} c_n\, \alpha_n^\star\, \boldsymbol{x}_n^t \boldsymbol{x}_m$

Función discriminante lineal que maximiza el margen:

$$\boxed{\phi_{\text{svm}}(\boldsymbol{x};\boldsymbol{\Theta}) = \sum_{n\in\mathcal{V}} \alpha_n^\star\, c_n\, \boldsymbol{x}_n^t \boldsymbol{x} + \theta_0^\star}$$

DEMO

Ejercicios

1. Sea $S = \{((1,1)^t, +1), ((2,2)^t, -1)\}$ una muestra de entrenamiento. Mediante el método de los multiplicadores de Lagrange, obtener (analíticamente) $\boldsymbol{\theta}^\star$ y $\theta_0^\star$ que clasifiquen S con el máximo margen.

2. Sea S una muestra linealmente separable. Demostrar que el margen óptimo es:

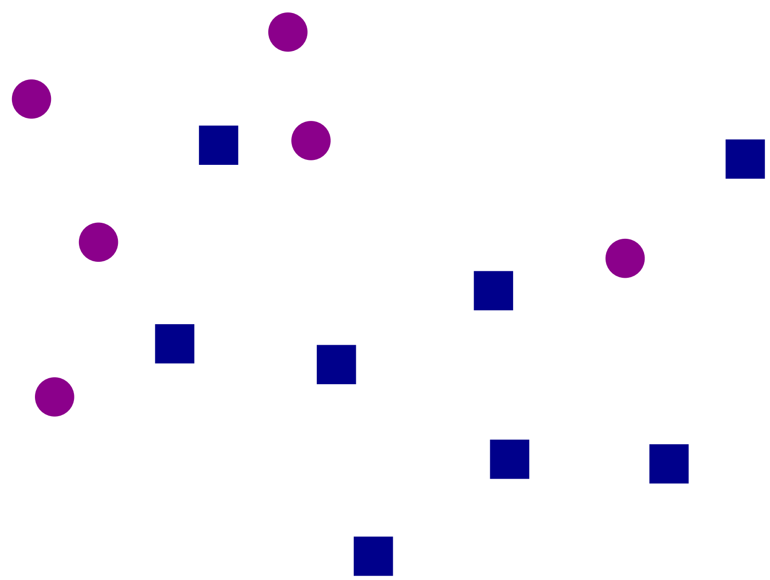
$$2\left(\sum_{n\in\mathcal{V}} \alpha_n^\star\right)^{-1/2}$$

Caso de no separabilidad lineal: “márgenes blandos”

A la función a minimizar, $\frac{1}{2}\|\boldsymbol{\theta}\|^2$, se le añade un término que pondera cómo de mal clasificado (o fuera del margen) se tolera que esté cada vector $\boldsymbol{x}_n$ de S.

Dado $S = \{(\boldsymbol{x}_1, c_1), \ldots, (\boldsymbol{x}_N, c_N)\}$ y una constante $\mathcal{C} > 0$, obtener $\boldsymbol{\theta} \in \mathbb{R}^d$, $\theta_0 \in \mathbb{R}$ y $\boldsymbol{\zeta} \in \mathbb{R}^N$ tales que:

- $\frac{1}{2}\boldsymbol{\theta}^t\boldsymbol{\theta} + \mathcal{C}\sum_{n=1}^{N}\zeta_n$ sea mínimo
- sujeto a:
  - $c_n\,(\boldsymbol{\theta}^t\boldsymbol{x}_n + \theta_0) \geq 1 - \zeta_n\,, \quad 1 \leq n \leq N$
  - $\zeta_n \geq 0\,, \; 1 \leq n \leq N$

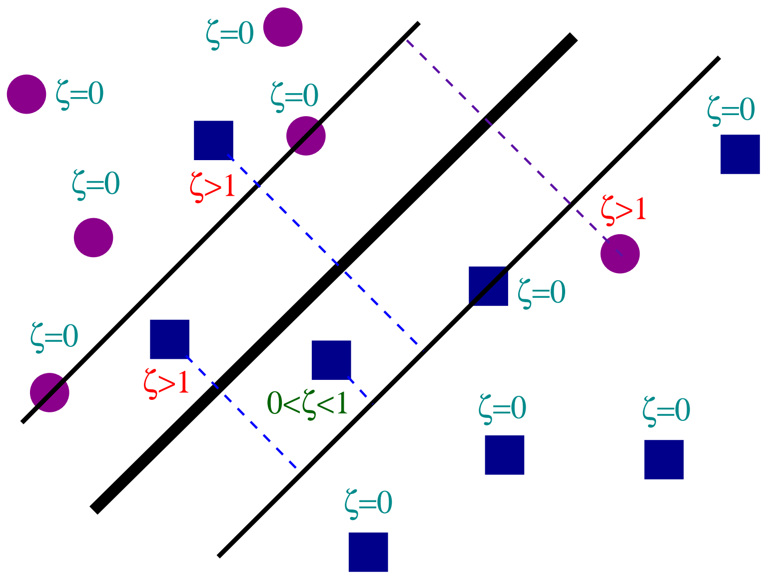


Caso de no separabilidad lineal: “márgenes blandos”

A la función a minimizar, $\frac{1}{2}\|\boldsymbol{\theta}\|^2$, se le añade un término que pondera cómo de mal clasificado (o fuera del margen) se tolera que esté cada vector $\boldsymbol{x}_n$ de S.

Dado $S = \{(\boldsymbol{x}_1, c_1), \ldots, (\boldsymbol{x}_N, c_N)\}$ y una constante $\mathcal{C} > 0$, obtener $\boldsymbol{\theta} \in \mathbb{R}^d$, $\theta_0 \in \mathbb{R}$ y $\boldsymbol{\zeta} \in \mathbb{R}^N$ tales que:

- $\displaystyle \frac{1}{2}\boldsymbol{\theta}^t\boldsymbol{\theta} \; + \; \mathcal{C}\sum_{n=1}^{N}\zeta_n$ sea mínimo
- sujeto a:
  - $c_n\,(\boldsymbol{\theta}^t\boldsymbol{x}_n + \theta_0) \;\geq\; 1 - \zeta_n\,, \;\; 1 \leq n \leq N$
  - $\zeta_n \;\geq\; 0\,, \; 1 \leq n \leq N$



SVM en el caso de no separabilidad lineal

- *Lagrangiana primal*:

Minimizar $\Lambda(\boldsymbol{\theta}, \theta_0, \boldsymbol{\zeta}, \boldsymbol{\alpha}, \boldsymbol{\beta}) =$

$$\frac{1}{2}\boldsymbol{\theta}^t\boldsymbol{\theta} + \mathcal{C}\sum_{n=1}^{N}\zeta_n - \sum_{n=1}^{N}\alpha_n\left(c_n\left(\boldsymbol{\theta}^t\boldsymbol{x}_n + \theta_0\right) + \zeta_n - 1\right) - \sum_{n=1}^{N}\beta_n\zeta_n$$

sujeto a $\alpha_n \geq 0,\ \beta_n \geq 0$ y $\zeta_n \geq 0$ para $1 \leq n \leq N$

- *Lagrangiana dual*:

Maximizar $\Lambda_D(\boldsymbol{\alpha}, \boldsymbol{\beta}) = \Lambda_D(\boldsymbol{\alpha}) = \displaystyle\sum_{n=1}^{N}\alpha_n - \frac{1}{2}\sum_{n=1}^{N}\sum_{m=1}^{N} c_n\, c_m\, \alpha_n\, \alpha_m\, \boldsymbol{x}_n^t\, \boldsymbol{x}_m$

sujeto a $\alpha_n \geq 0, \alpha_n + \beta_n = C$ para $1 \leq n \leq N$ y a $\displaystyle\sum_{n=1}^{N}\alpha_n\, c_n = 0$

Desarrollo similar al caso separable (*ejercicio*)

SVM en el caso de no separabilidad lineal

- *Lagrangiana dual*:

$$\Lambda_D(\boldsymbol{\alpha}) \;=\; \sum_{n=1}^{N} \alpha_n - \frac{1}{2} \sum_{n=1}^{N} \sum_{m=1}^{N} c_n \, c_m \, \alpha_n \, \alpha_m \, \boldsymbol{x}_n^t \, \boldsymbol{x}_m$$

- Las soluciones $\boldsymbol{\theta}^\star$, $\theta_0^\star$, $\zeta^\star$, $\boldsymbol{\alpha}^\star$, $\boldsymbol{\beta}^\star$ verifican:

1. $\boldsymbol{\theta}^\star = \sum_{n=1}^{N} c_n \, \alpha_n^\star \, \boldsymbol{x}_n$
2. $\sum_{n=1}^{N} \alpha_n^\star \, c_n = 0$
3. $0 \leq \alpha_n^\star \leq \mathcal{C} \quad 1 \leq n \leq N$
4. $\beta_n^\star = \mathcal{C} - \alpha_n^\star \quad 1 \leq n \leq N$
5. Condición complementaria de Karush-Kuhn-Tucker

$$\left.\begin{array}{rcl} \alpha_n^\star \left(c_n \, (\boldsymbol{\theta}^{\star t} \boldsymbol{x}_n + \theta_0^\star) - 1 + \zeta_n^\star \right) & = & 0 \\ \beta_n^\star \zeta_n^\star & = & 0 \end{array}\right\} \; 1 \leq n \leq N$$

Vectores soporte "erróneos"

$$1 \le n \le N \quad \left\{ \begin{array}{rcll} \alpha_n^\star \left(c_n(\boldsymbol{\theta}^{\star t} \boldsymbol{x}_n + \theta_0^\star) - 1 + \zeta_n^\star \right) & = & 0 & \quad (1) \\ \beta_n^\star \, \zeta_n^\star \; = \; (\mathcal{C} - \alpha_n^\star)\, \zeta_n^\star & = & 0 & \quad (2) \end{array} \right.$$

- (1) $\rightarrow$ muestras $\boldsymbol{x}_n$ tales que $\alpha_n^\star \neq 0$ son vectores soporte.
  En este caso, $c_n(\boldsymbol{\theta}^{\star t} \boldsymbol{x}_n + \theta_0^\star) = 1 - \zeta_n^\star$

- (2) $\rightarrow$ $(\mathcal{C} - \alpha_n^\star)\, \zeta_n^\star = 0$
  - $\mathcal{C} - \alpha_n^\star > 0 \;\Rightarrow\; \zeta_n^\star = 0 \;\Rightarrow\; c_n\,(\boldsymbol{\theta}^{\star t} \boldsymbol{x}_n + \theta_0^\star) = 1 \;\Rightarrow$ sin error de margen
  - $\zeta_n^\star > 0 \;\Rightarrow\; \mathcal{C} = \alpha_n^\star \;\Rightarrow$ error de margen $\left\{ \begin{array}{lll} \zeta_n^\star > 1 & \text{error de clasificación} \\ \zeta_n^\star \le 1 & \text{dentro del margen} \end{array} \right.$

- $\mathcal{C}$ se determina mediante validación cruzada y controla el compromiso entre el margen y los errores de margen

- Ejercicio: ¿Qué ocurre con el resto de muestras ($\alpha_n^\star = 0$) ?

$\mathcal{C}-$SVM

- Calcular $\alpha_n^\star$, $1 \leq n \leq N$, que maximicen $\Lambda_D(\boldsymbol{\alpha})$, sujeto a las restricciones: $\sum_{n=1}^{N} \alpha_n \, c_n = 0$ y $0 \leq \alpha_n \leq \mathcal{C}, \; 1 \leq n \leq N$
- *Vectores soporte:* $\boldsymbol{x}_n \in S, \; n \in \mathcal{V}$, $\mathcal{V} = \{n \in \mathbb{N}, \; 1 \leq n \leq N \mid \alpha_n^\star \neq 0\}$
- Coeficientes de la FDL:
  - $\boldsymbol{\theta}^\star = \sum_{n \in \mathcal{V}} c_n \, \alpha_n^\star \, \boldsymbol{x}_n$
  - $\theta_0^\star = c_n - \boldsymbol{\theta}^{\star t} \boldsymbol{x}_n$ para algún $n \in \mathcal{V}$ tal que $\alpha_n^* < \mathcal{C}$

Función discriminante lineal de margen máximo:

$$\boxed{\phi_{\mathrm{svm}}(\boldsymbol{x}; \boldsymbol{\Theta}) = \sum_{n \in \mathcal{V}} \alpha_n^\star \, c_n \, \boldsymbol{x}_n^t \boldsymbol{x} + \theta_0^\star}$$

Métodos de optimización para SVM

Problema: *maximizar la Lagrangiana dual:*

$$\underset{\substack{\boldsymbol{\alpha} \\ \sum_{n=1}^{N} c_n \alpha_n = 0 \\ 0 \leq \alpha_n \leq C,\ 1 \leq n \leq N}}{\arg\max} \quad \Lambda_D(\boldsymbol{\alpha})$$

- Solución analítica, si $N \lll$ (generalmente $N \leq 3$)
- Ascenso por gradiente, en general
- Algoritmos de descomposición, si $N \lesssim 5000$
- Optimización minimal sequencial, $N \gg 5000$
  (“Sequential minimal optimization algorithm”, SMO)

Index

Funciones discriminantes lineales generalizadas (FDLG)

- FDLG para un problema de clasificación en dos clases:

$$\phi(\boldsymbol{x};\boldsymbol{\Theta}) \;=\; \sum_{i=1}^{d'} \theta_i\, \psi_i(\boldsymbol{x}) + \theta_0 \;=\; \boldsymbol{\theta}^t \boldsymbol{\psi}(\boldsymbol{x}) + \theta_0$$

donde: – $\boldsymbol{x} \in \mathbb{R}^d$, $\boldsymbol{\theta} \in \mathbb{R}^{d'}$ (típicamente $d' \gg d$),
– $\boldsymbol{\psi}$ es una función no lineal: $\boldsymbol{\psi} : \mathbb{R}^d \to \mathbb{R}^{d'}$

- Ejemplo: Linealización de funciones cuadráticas:

$$\phi(\boldsymbol{x};\boldsymbol{\Theta}) \;=\; \sum_{i=1}^{d}\sum_{j=1}^{d} a_{ij}x_i x_j + \sum_{j=1}^{d} b_j x_j + c$$

$\phi(\boldsymbol{x};\boldsymbol{\Theta}) \;=\; \boldsymbol{\theta}^t \boldsymbol{\psi}(\boldsymbol{x}) + \theta_0$ con $\boldsymbol{\psi} : \mathbb{R}^d \to \mathbb{R}^{d'},\; d' = \frac{1}{2}d(d+3)$:

$$\boldsymbol{\psi}(x_1,\dots,x_d) \;=\; (x_1x_1, x_1x_2,\dots,x_2x_1,x_2x_2,\dots,x_dx_d,\; x_1,\dots,x_d)^t$$

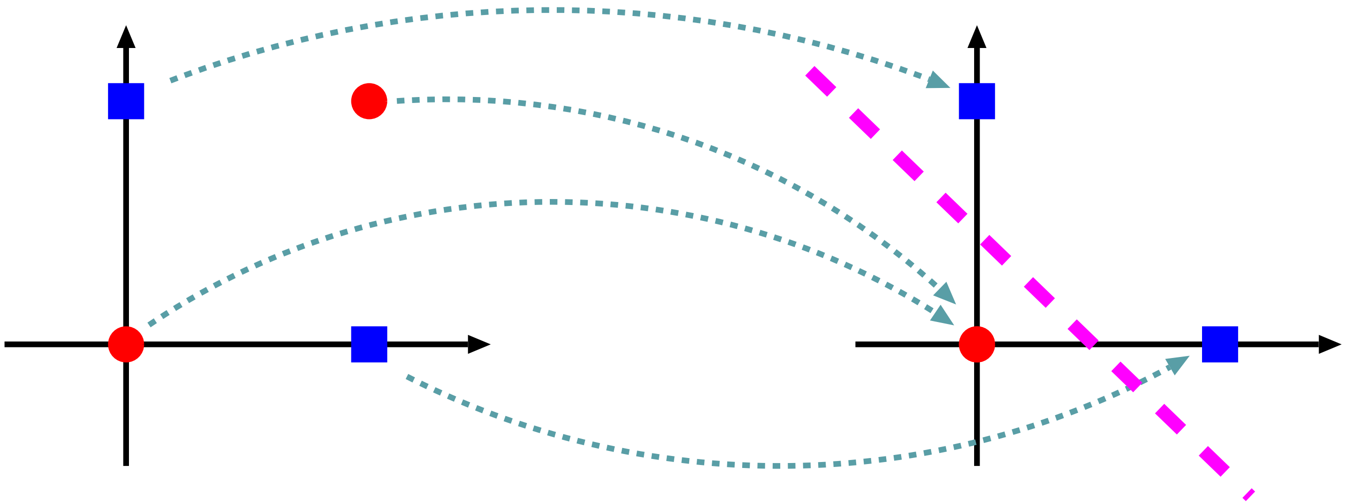
$$\boldsymbol{\theta} \;=\; (a_{11},a_{12},\dots,a_{21},a_{22},\dots,a_{dd},\; b_1,\dots,b_d)^t, \qquad \theta_0 = c$$

Ejemplo: Problema de la 'O' exclusiva (XOR)

Mediante la función escalón $E : \mathbb{R} \to \{0, 1\}$ definida como $E(x) = \begin{cases} 1 & \text{si} \;\; x \geq 0 \\ 0 & \text{si} \;\; x < 0 \end{cases}$

el cambio de espacio de representación:

$$\psi_1(x_1, x_2) = E(x_1 - x_2 - 0.5) \;\; \text{y} \;\; \psi_2(x_1, x_2) = E(-x_1 + x_2 - 0.5)$$



permite definir una FDLG que linealiza el problema XOR:

$$\begin{aligned} \phi(x_1, x_2; \theta_0, \theta_1, \theta_2) &= \sum_{k=1}^{2} \theta_k \psi_k(x_1, x_2) + \theta_0 \\ //\theta_1 = \theta_2 = 1, \;\; \theta_0 = -0.5// &= E(x_1 - x_2 - 0.5) + E(-x_1 + x_2 - 0.5) - 0.5 \end{aligned}$$

Generalización de SVM [1]: Núcleos

Se aprovecha la propiedad de que una SVM se puede expresar en base a productos escalares entre muestras de entrenamiento:

$$\phi(\boldsymbol{x}) = \sum_{n=1}^{N} \alpha_n \, c_n \, {\boldsymbol{x}_n}^t \boldsymbol{x} \, + \, \theta_0$$

$$\Downarrow$$

$$\phi_\psi(\boldsymbol{x}) \; = \; \sum_{n=1}^{N} \alpha_n \, c_n \, \boldsymbol{\psi}(\boldsymbol{x}_n)^t \boldsymbol{\psi}(\boldsymbol{x}) \; + \; \theta_0$$

$$\Downarrow$$

$$\phi_{\mathcal{K}}(\boldsymbol{x}) \; = \; \sum_{n=1}^{N} \alpha_n \, c_n \, \mathcal{K}(\boldsymbol{x}_n, \boldsymbol{x}) \; + \; \theta_0$$

donde $\mathcal{K} : \mathbb{R}^d \times \mathbb{R}^d \to \mathbb{R}$ es una función que se denomina núcleo si $\exists \boldsymbol{\psi} : \mathbb{R}^d \to \mathbb{R}^{d'}$ tal que $\mathcal{K}(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{x}') = \boldsymbol{\psi}(\boldsymbol{x})^t \boldsymbol{\psi}(\boldsymbol{x}'), \;\; \forall \boldsymbol{x}, \boldsymbol{x}' \in \mathbb{R}^d$.
A $\mathbb{R}^{d'}$ se le suele llamar espacio de características

[1] Una generalización similar puede hacerse también para el perceptrón (*Kernel perceptron*)

Núcleos: ejemplo

Sean $\boldsymbol{x} = (x_1, x_2, x_3)^t$, $\boldsymbol{y} = (y_1, y_2, y_3)^t$ y $\mathcal{K}\colon \mathbb{R}^3 \times \mathbb{R}^3 \to \mathbb{R}$ definida como:

$$\mathcal{K}(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{y}) = (x_1\, y_1 + x_2\, y_2 + x_3\, y_3)^2$$

¿Es $\mathcal{K}(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{y})$ un núcleo?

Núcleos: ejemplo

Sean $\boldsymbol{x} = (x_1, x_2, x_3)^t$, $\boldsymbol{y} = (y_1, y_2, y_3)^t$ y $\mathcal{K}\colon \mathbb{R}^3 \times \mathbb{R}^3 \to \mathbb{R}$ definida como:

$$\mathcal{K}(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{y}) = (x_1\, y_1 + x_2\, y_2 + x_3\, y_3)^2$$

¿Es $\mathcal{K}(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{y})$ un núcleo? ... *Sí*, ya que:

$$\begin{aligned}\mathcal{K}(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{y}) &= (x_1\, y_1 + x_2\, y_2 + x_3\, y_3)^2 \\ &= x_1^2\, y_1^2 + x_2^2\, y_2^2 + x_3^2\, y_3^2 + 2\, x_1\, y_1\, x_2\, y_2 + 2\, x_1\, y_1\, x_3\, y_3 + 2\, x_2\, y_2\, x_3\, y_3\end{aligned}$$

$\mathcal{K}(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{y}) = \boldsymbol{\psi}(\boldsymbol{x})^t \boldsymbol{\psi}(\boldsymbol{y})$ si $\boldsymbol{\psi} : \mathbb{R}^3 \to \mathbb{R}^6$ se define como:

$$\begin{aligned}\boldsymbol{\psi}(\boldsymbol{x}) &= (x_1^2,\ x_2^2,\ x_3^2,\ \sqrt{2}\, x_1\, x_2,\ \sqrt{2}\, x_1\, x_3,\ \sqrt{2}\, x_2\, x_3)^t \\ \boldsymbol{\psi}(\boldsymbol{y}) &= (y_1^2,\ y_2^2,\ y_3^2,\ \sqrt{2}\, y_1\, y_2,\ \sqrt{2}\, y_1\, y_3,\ \sqrt{2}\, y_2\, y_3)^t\end{aligned}$$

Alternativas para calcular $\mathcal{K}(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{y})$:

- *Directamente* en $\mathbb{R}^3$, mediante $\mathcal{K}(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{y})$: $3 + 2 + 1 = 6$ productos + sumas
- Obtener primero $\boldsymbol{\psi}(\boldsymbol{x})$, $\boldsymbol{\psi}(\boldsymbol{y})$ en $\mathbb{R}^6$ y calcular $\boldsymbol{\psi}(\boldsymbol{x})^t \boldsymbol{\psi}(\boldsymbol{y})$:
  $2 \cdot 6 + 6 + 5 = 23$ productos + sumas

Construcción de núcleos

- Elegir $\boldsymbol{\psi} : \mathbb{R}^d \to \mathbb{R}^{d'}$ y el núcleo es $\mathcal{K}(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{x}') = \boldsymbol{\psi}(\boldsymbol{x})^t \boldsymbol{\psi}(\boldsymbol{x}')$
  Es necesario trabajar en $\mathbb{R}^{d'}$, $d' \gg d$: ¡amenaza de la dimensionalidad!

- Elegir $\mathcal{K} : \mathbb{R}^d \times \mathbb{R}^d \to \mathbb{R}$ y:
  - Demostrar que $\exists \boldsymbol{\psi} : \mathbb{R}^d \to \mathbb{R}^{d'}$: $\mathcal{K}(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{x}') = \boldsymbol{\psi}(\boldsymbol{x})^t \boldsymbol{\psi}(\boldsymbol{x}'), \ \forall \boldsymbol{x}, \boldsymbol{x}' \in \mathbb{R}^d$
  - *Condición de Mercer*: $\mathcal{K}$ es un núcleo *si* y *solo si*, para cualquier conjunto de vectores $\{\boldsymbol{x}_1, \dots, \boldsymbol{x}_N\}$, la matriz $[\mathcal{K}(\boldsymbol{x}_n, \boldsymbol{x}_m)]_{1 \le n,m \le N}$ (llamada matriz de Gramm) es semidefinida positiva
  - Mediante *"álgebra de núcleos"*: construir $\mathcal{K}$ a partir de núcleos simples. Si $\mathcal{K}_1$ y $\mathcal{K}_2$ son núcleos, entonces también son núcleos:
    * La suma, el producto o cualquier polinomio con coeficientes no negativos de $\mathcal{K}_1$ y $\mathcal{K}_2$
    * $\exp(\mathcal{K}_1(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{x}'))$
  - *Núcleos de base radial* (RBK): $\mathcal{K}(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{x}') \stackrel{\text{def}}{=} f(r), \ r = \| \boldsymbol{x} - \boldsymbol{x}' \|$
    Ejemplo: núcleos gaussianos: $\mathcal{K}(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{x}') = \exp\left(-c \| \boldsymbol{x} - \boldsymbol{x}' \|^2\right)$
    ver: http://en.wikipedia.org/wiki/Radial_basis_function
  - $\cdots$ Etc.

Máquinas de vectores soporte y núcleos

- *Problema*: Dado un muestra de entrenamiento $S = \{(\boldsymbol{x}_1, c_1), \ldots, (\boldsymbol{x}_N, c_N)\}$, una constante $\mathcal{C} \geq 0$ y un núcleo $\mathcal{K}(\boldsymbol{x}_n, \boldsymbol{x}_m) = \boldsymbol{\psi}(\boldsymbol{x}_n)^t \boldsymbol{\psi}(\boldsymbol{x}_m)$, obtener $\boldsymbol{\theta} \in \mathbb{R}^{d'}$ y $\theta_0 \in \mathbb{R}$ tales que:
  - $\frac{1}{2}\boldsymbol{\theta}^t\boldsymbol{\theta} + \mathcal{C}\sum_{n=1}^{N} \zeta_n$ sea mínimo
  - sujeto a $c_n(\boldsymbol{\theta}^t\boldsymbol{\psi}(\boldsymbol{x}_n) + \theta_0) \geq 1 - \zeta_n$ y $\zeta_n \geq 0,\ 1 \leq n \leq N$
- *Solución:* Lagrangiana dual: $\Lambda_D(\boldsymbol{\alpha}) = \sum_{n=1}^{N} \alpha_n - \frac{1}{2}\sum_{n,m=1}^{N} c_n\, c_m\, \alpha_n\, \alpha_m\, \mathcal{K}(\boldsymbol{x}_n, \boldsymbol{x}_m)$
  - Calcular $\boldsymbol{\alpha}^\star$ que maximice $\Lambda_D(\boldsymbol{\alpha})$
    sujeto a $\sum_{n=1}^{N} \alpha_n c_n = 0$, $0 \leq \alpha_n \leq \mathcal{C},\ 1 \leq n \leq N$
  - *Vectores soporte:* $\boldsymbol{x}_n \in S : n \in \mathcal{V},\ \ \mathcal{V} = \{n \in \mathbb{N}, 1 \leq n \leq N \mid \alpha_n^\star \neq 0\}$
  - *FDLG*: $\phi_{\mathcal{K}}(\boldsymbol{x}) = \sum_{n \in \mathcal{V}} c_n\, \alpha_n^\star\, \mathcal{K}(\boldsymbol{x}_n, \boldsymbol{x}) + \theta_0^\star$

    con $\theta_0^\star = c_n - \sum_{m \in \mathcal{V}} c_m\, \alpha_m^\star\, \mathcal{K}(\boldsymbol{x}_m, \boldsymbol{x}_n)$ para algún $n \in \mathcal{V} : \alpha_n^\star < \mathcal{C}$

Cuestión: ¿Dónde están ψ y $\boldsymbol{\theta}^*$?

Index

Clasificación en C clases con funciones discriminantes lineales

FUNCIONES DISCRIMINANTES LINEALES GENERALIZADAS

$$\phi_c(\boldsymbol{x};\boldsymbol{\Theta}) \;=\; \boldsymbol{\theta}_c{}^t\boldsymbol{\psi}(\boldsymbol{x}) + \theta_{c0} \;=\; \sum_{i=1}^{d'} \theta_{ci}\,\psi_i(\boldsymbol{x}) + \theta_{c0}\,, \quad 1 \leq c \leq C$$

donde:

- $\boldsymbol{\psi} : \mathbb{R}^d \rightarrow \mathbb{R}^{d'}$ es una *función de cambio de espacio*
- $\boldsymbol{\theta}_c \in \mathbb{R}^{d'}$ es el vector de pesos de la clase c
- $\theta_{c0} \in \mathbb{R}$ es el umbral de la clase c

REGLA DE CLASIFICACIÓN

$$f(\boldsymbol{x}) \stackrel{\text{def}}{=} \hat{c} \;=\; \arg\max_{1\leq c\leq C} \phi_c(\boldsymbol{x};\boldsymbol{\Theta}) \;\Longleftrightarrow\; \phi_{\hat{c}}(\boldsymbol{x};\boldsymbol{\Theta}) > \phi_c(\boldsymbol{x};\boldsymbol{\Theta}) \;\forall c \neq \hat{c}$$

El problema de C clases: uno-contra-uno

$$S = \{(\boldsymbol{x}_1, c_1), ..., (\boldsymbol{x}_N, c_N)\}, \text{ con } \boldsymbol{x}_n \in \mathbb{R}^d, c_n \in \{1, \dots, C\}$$

Un núcleo $\mathcal{K} : \mathbb{R}^d \times \mathbb{R}^d \to \mathbb{R}$

- $C\ (C-1)/2$ clasificadores uno-contra-uno
  - *Aprendizaje:* Para $1 \leq c < c' \leq C$,

    $S_{cc'} : (\boldsymbol{x}_n, c_{ncc'}) \in S_{cc'}$ si $(\boldsymbol{x}_n, c_n) \in S$ con $c_n = c$ o $c_n = c'$ y $c_{ncc'} = \begin{cases} +1 & c_n = c \\ -1 & c_n = c' \end{cases}$

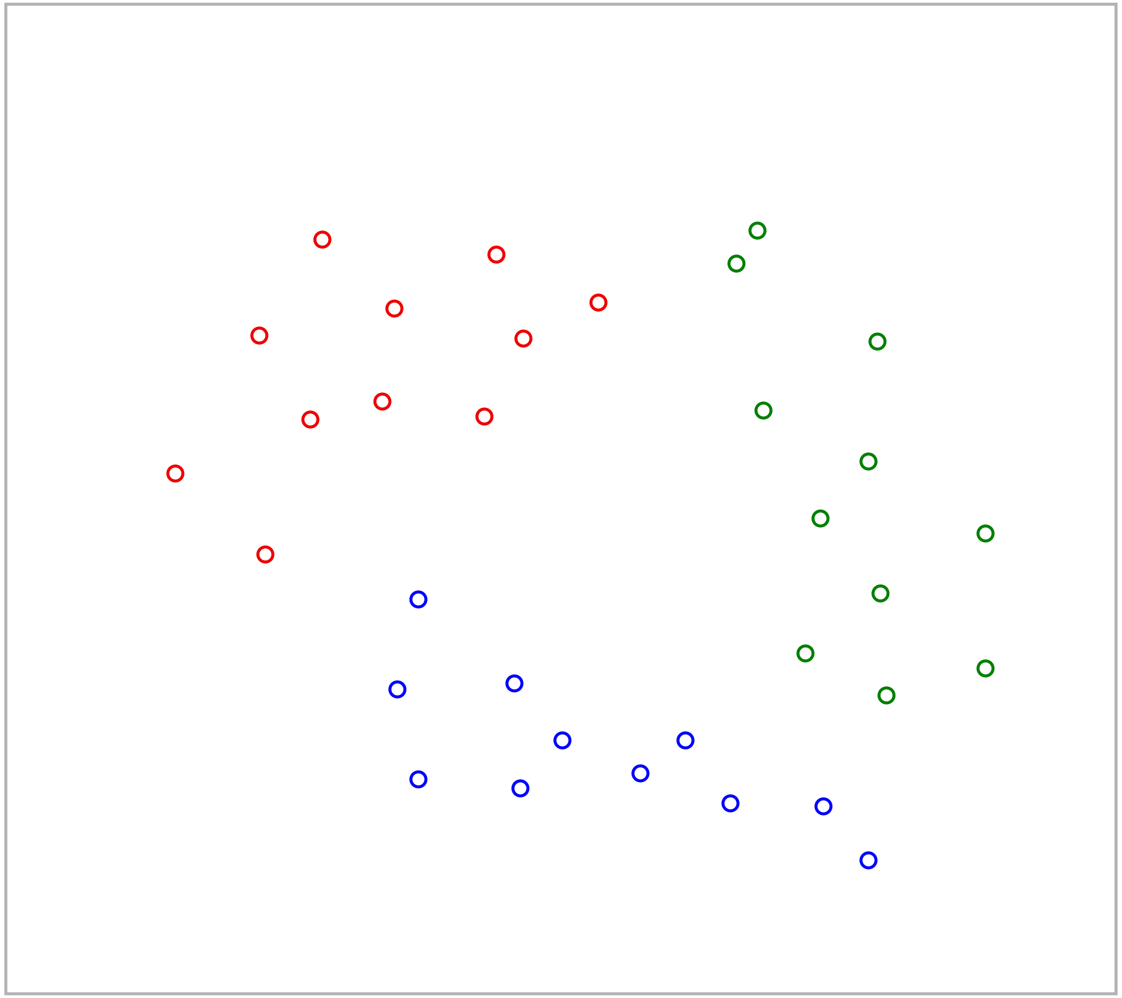
$$\phi_{cc'}(\boldsymbol{x}) = \sum_{\boldsymbol{x}_n \in \mathcal{SV}_{cc'}} \alpha^\star_{ncc'}\, c_{ncc'}\, \mathcal{K}(\boldsymbol{x}_n, \boldsymbol{x}) + \theta^\star_{cc'0}$$

$$f_{cc'}(\boldsymbol{x}) = \begin{cases} +1 & \text{si } \phi_{cc'}(\boldsymbol{x}) \geq 0 \\ -1 & \text{si } \phi_{cc'}(\boldsymbol{x}) < 0 \end{cases}$$

  - *Clasificación por votación*: $O(C^2)$ (or $O(M^2 \cdot |\overline{\mathcal{V}}|)$ cálculos de kernels)
  - *Clasificación utilizando DAGs (directed acyclic graphs)*: $O(C)$

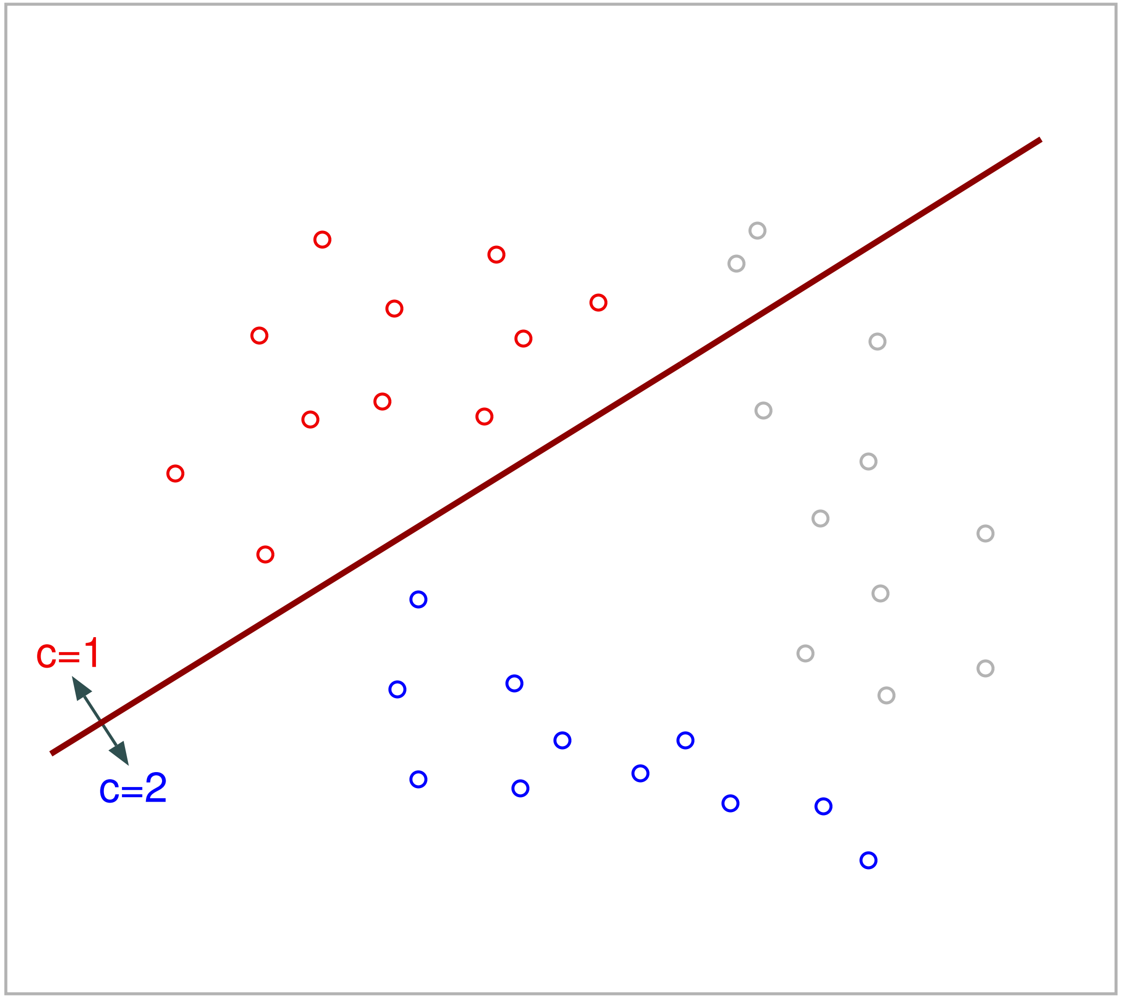
Clasificación multi-clase mediante clasificadores binarios: ejemplo

Uno-contra-uno por votación



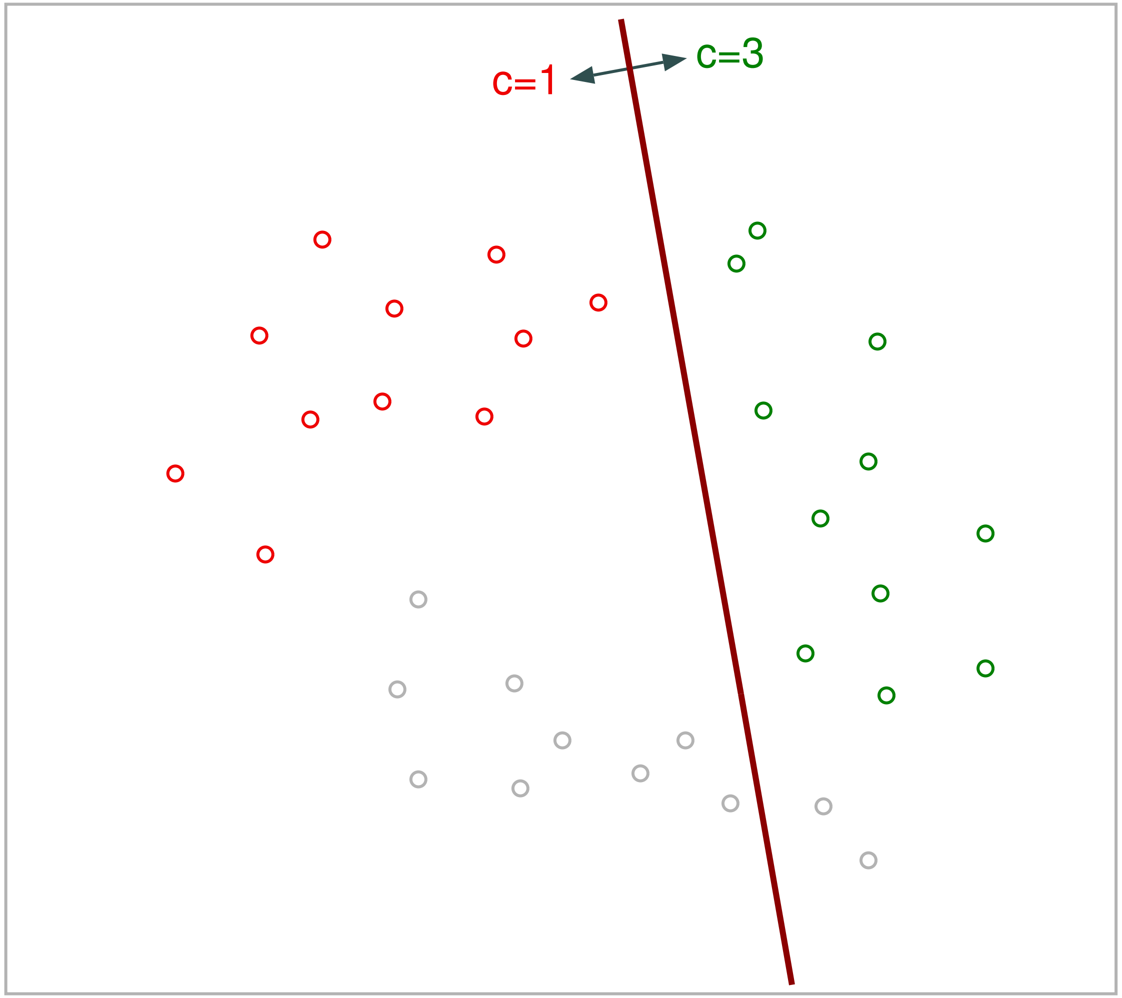
Clasificación multi-clase mediante clasificadores binarios: ejemplo

Uno-contra-uno por votación



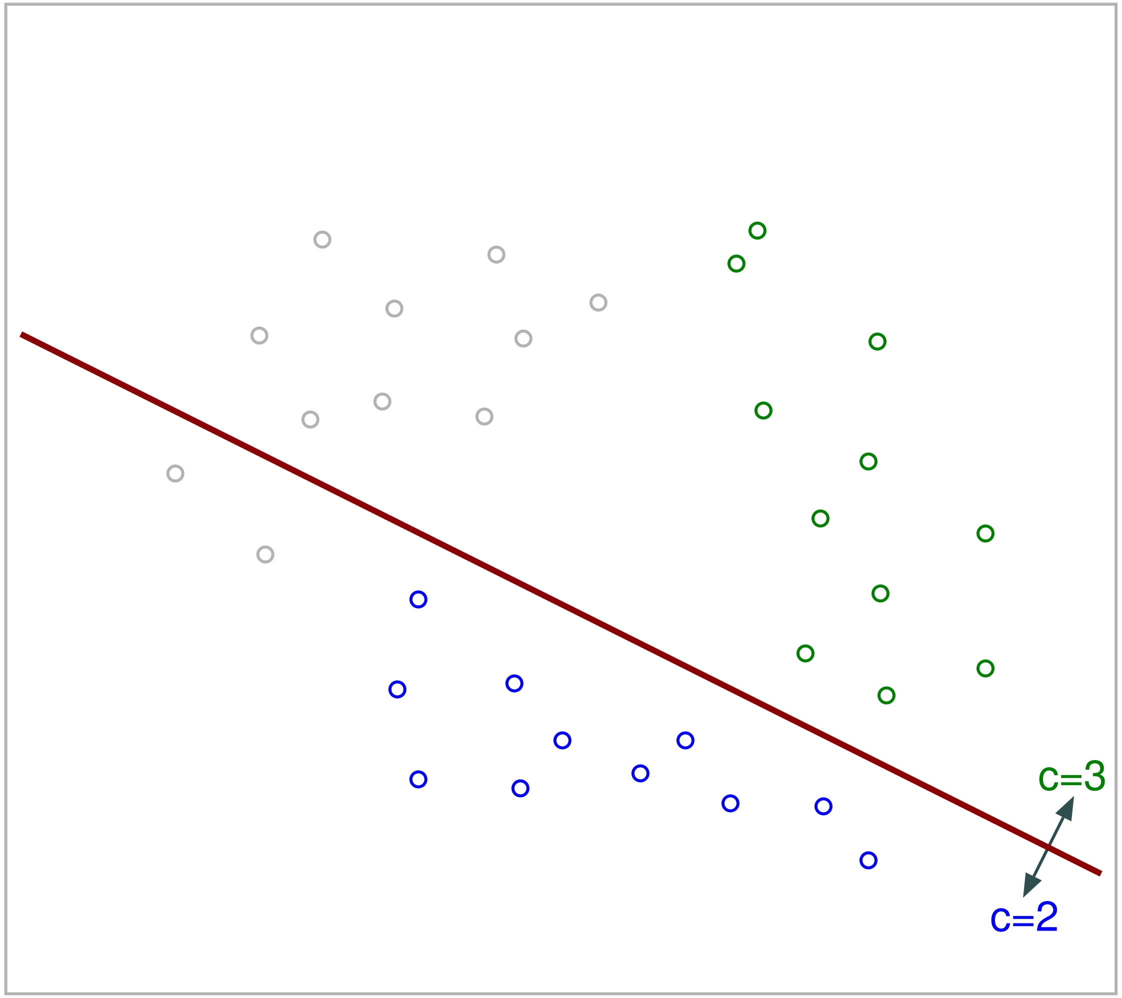
Clasificación multi-clase mediante clasificadores binarios: ejemplo

Uno-contra-uno por votación



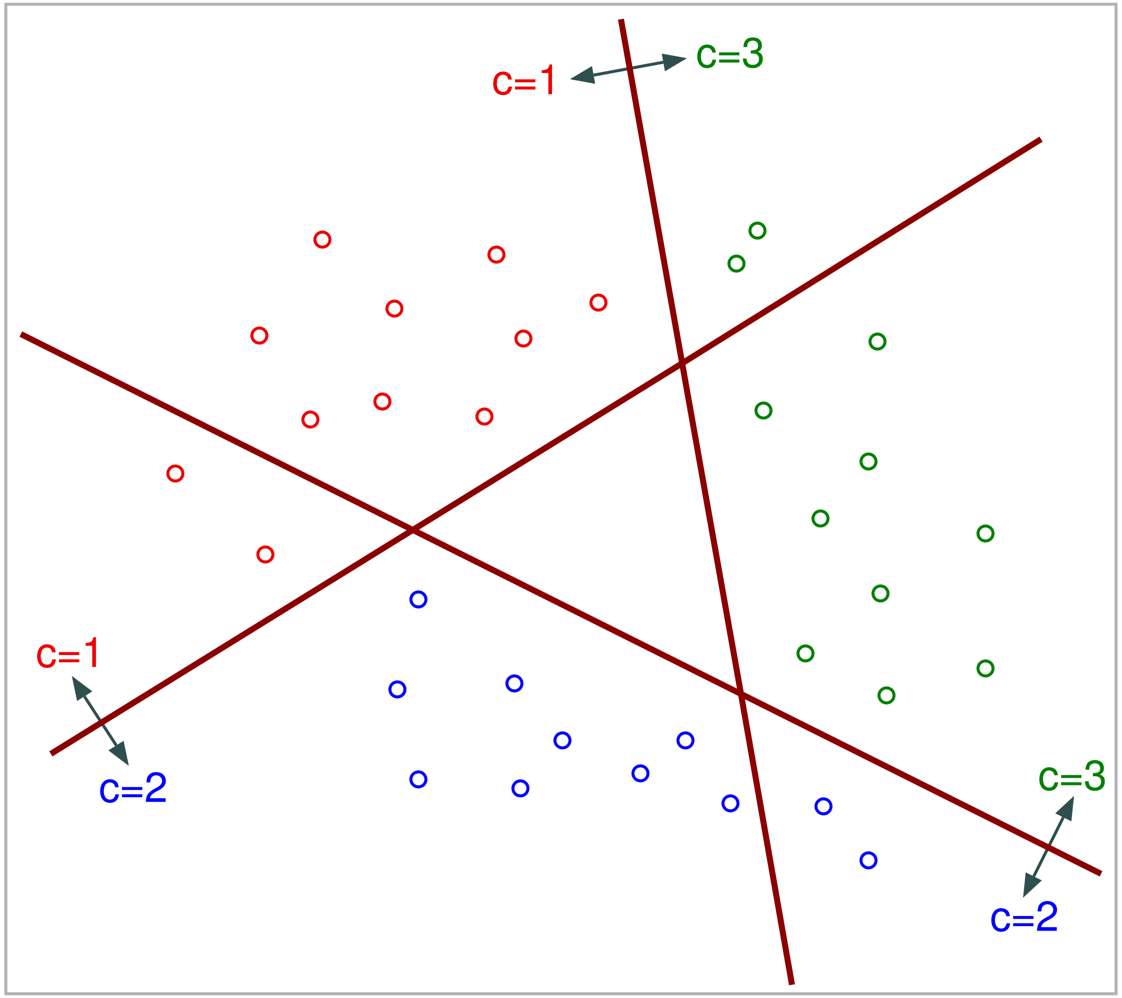
Clasificación multi-clase mediante clasificadores binarios: ejemplo

Uno-contra-uno por votación



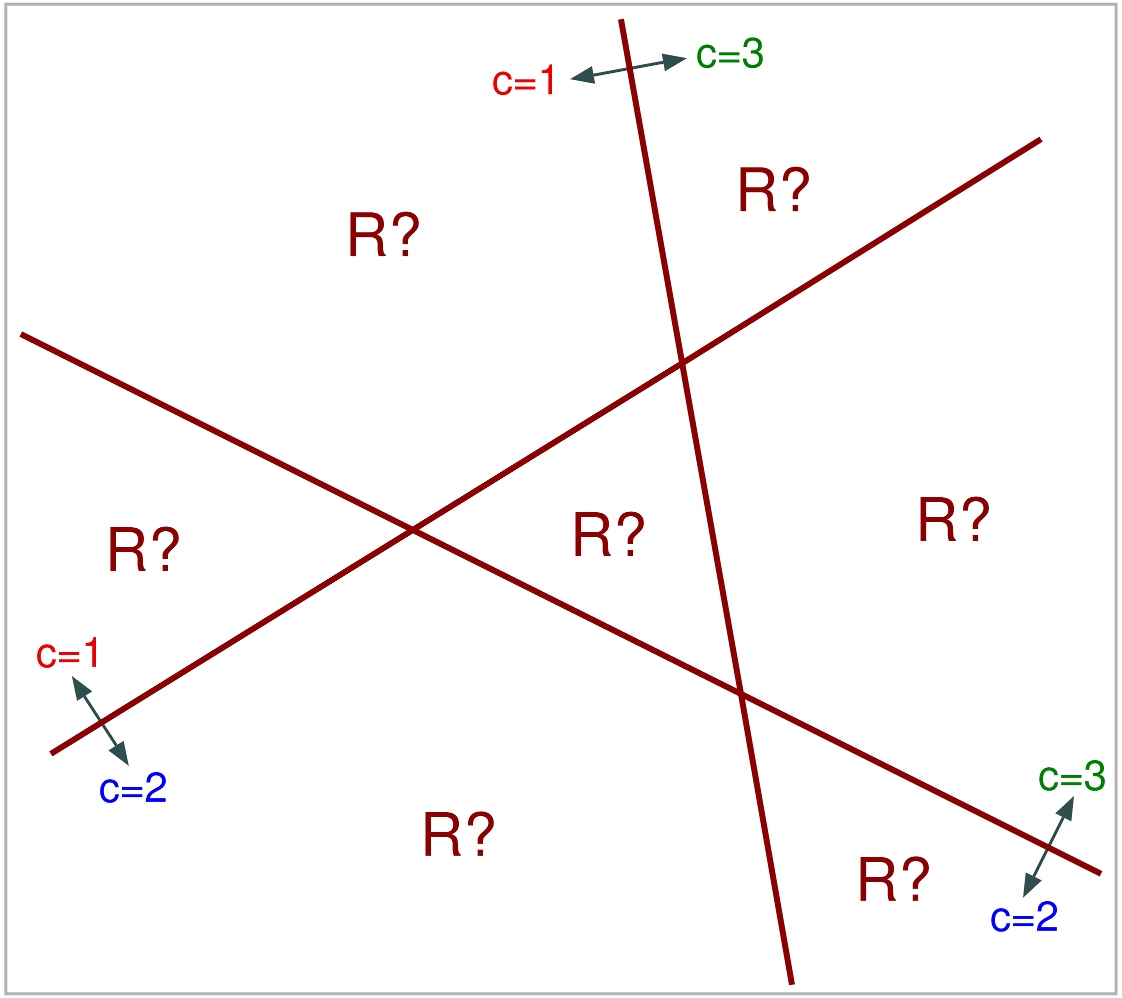
Clasificación multi-clase mediante clasificadores binarios: ejemplo

Uno-contra-uno por votación



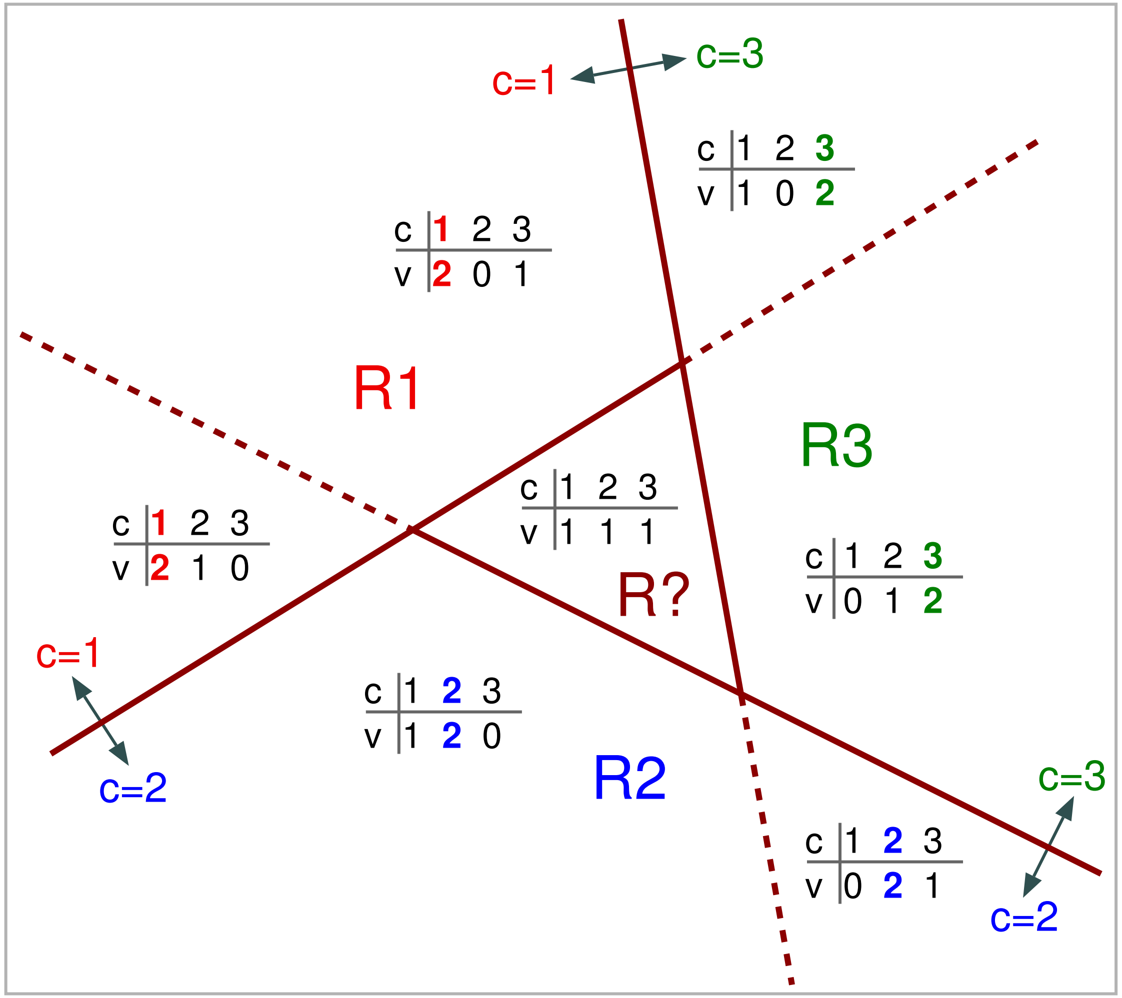
Clasificación multi-clase mediante clasificadores binarios: ejemplo

Uno-contra-uno por votación



Clasificación multi-clase mediante clasificadores binarios: ejemplo

Uno-contra-uno por votación

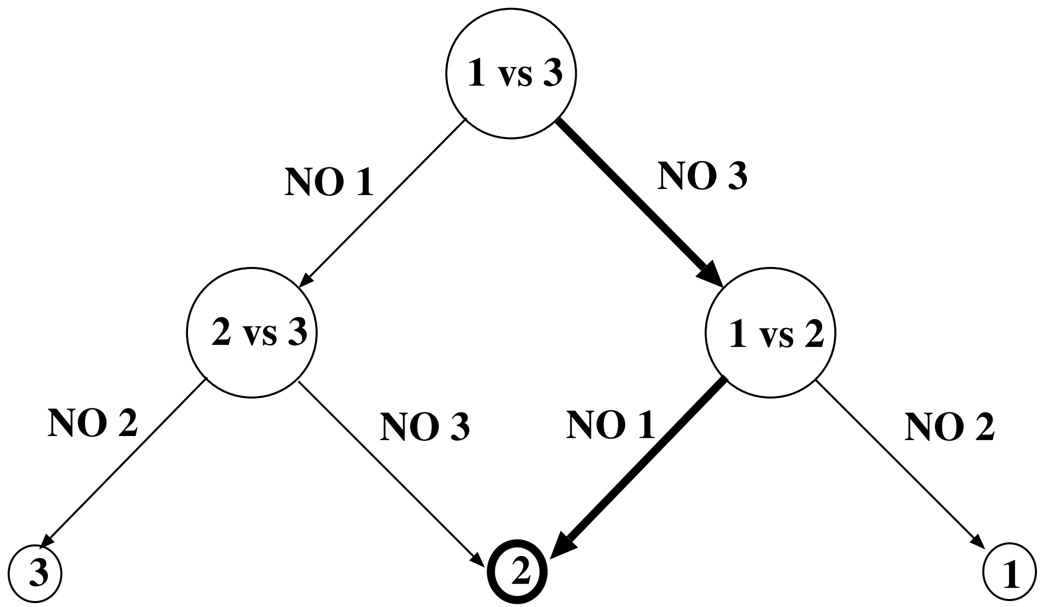


El problema de 3 clases: uno-contra-uno y DAGs

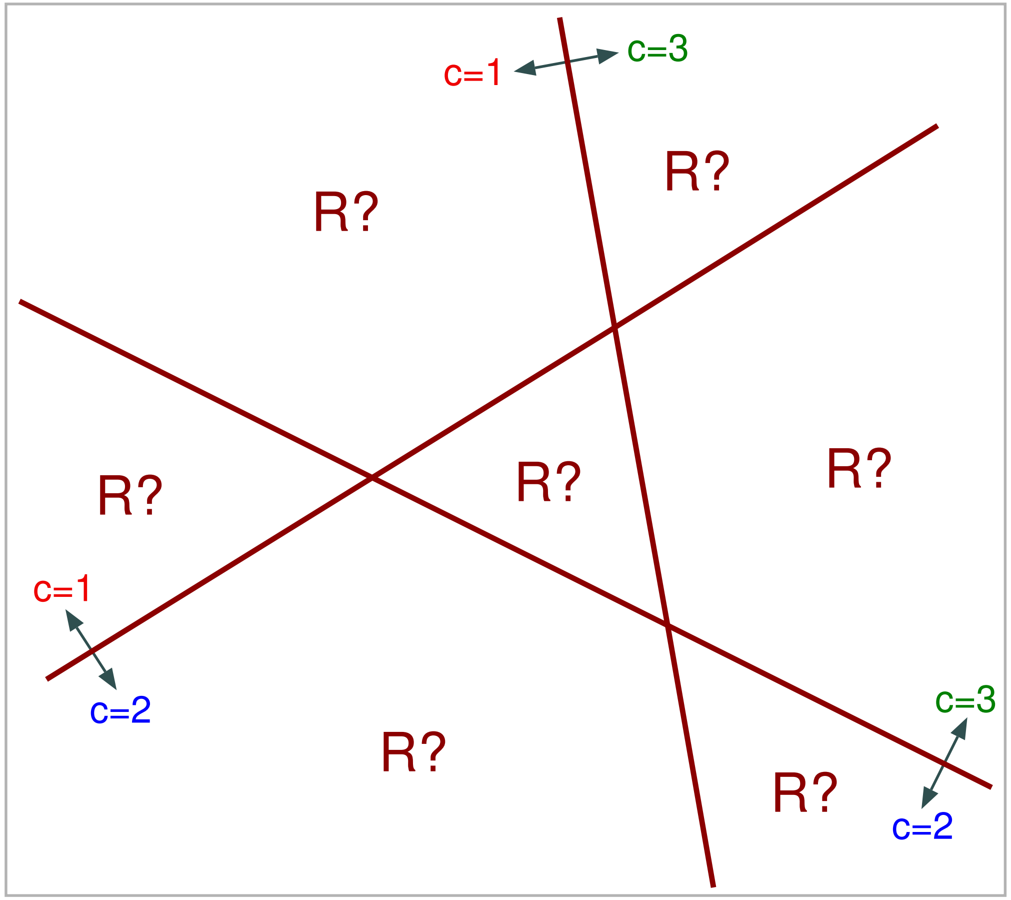
- Formulación equivalente a la clasificación por votación: A partir de los clasificadores binarios $f_{cc'}$ para $1 \leq c, c' \leq C$: La decisión multi-clase se define:

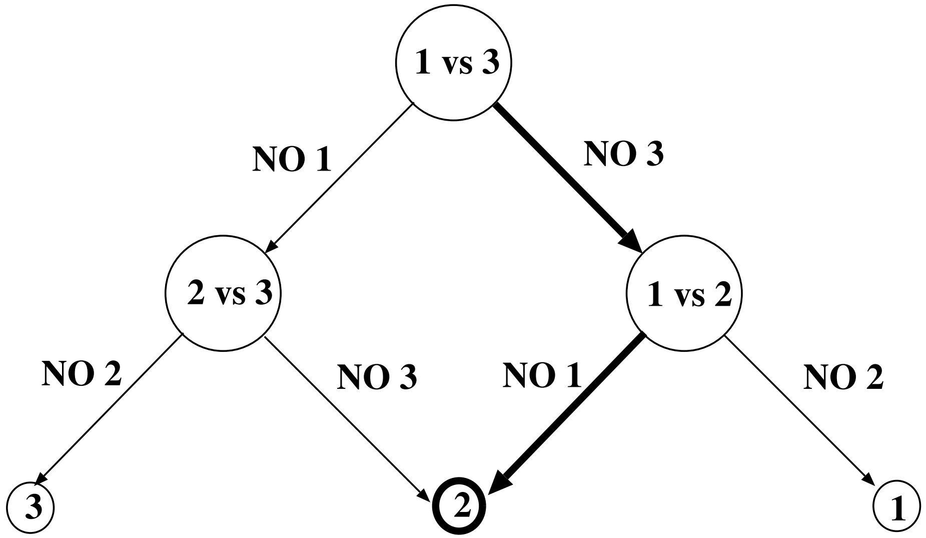
$$f(\boldsymbol{x}) = \operatorname*{arg\,max}_{1 \leq c \leq C} \sum_{c' \neq c} f_{cc'}(\boldsymbol{x})$$

- *Clasificación utilizando grafos dirigidos y acíclicos* (DAGs): Para $C = 3$,



Clasificación multi-clase mediante clasificadores binarios: ejemplo anterior mediante DAGs





Otras técnicas de clasificación multi-clase para SVM

- *Uno-contra-el-resto:* Se entrenan C FDLs binarias, $\phi_c, 1 \leq c \leq C$, usando como muestras positivas *solo* los vectores de la clase c y como negativas el resto.

- *SVM*$^{\mathrm{multiC}}$*:* Optimización directa de márgenes en C clases [Cramer & Singer, 01]

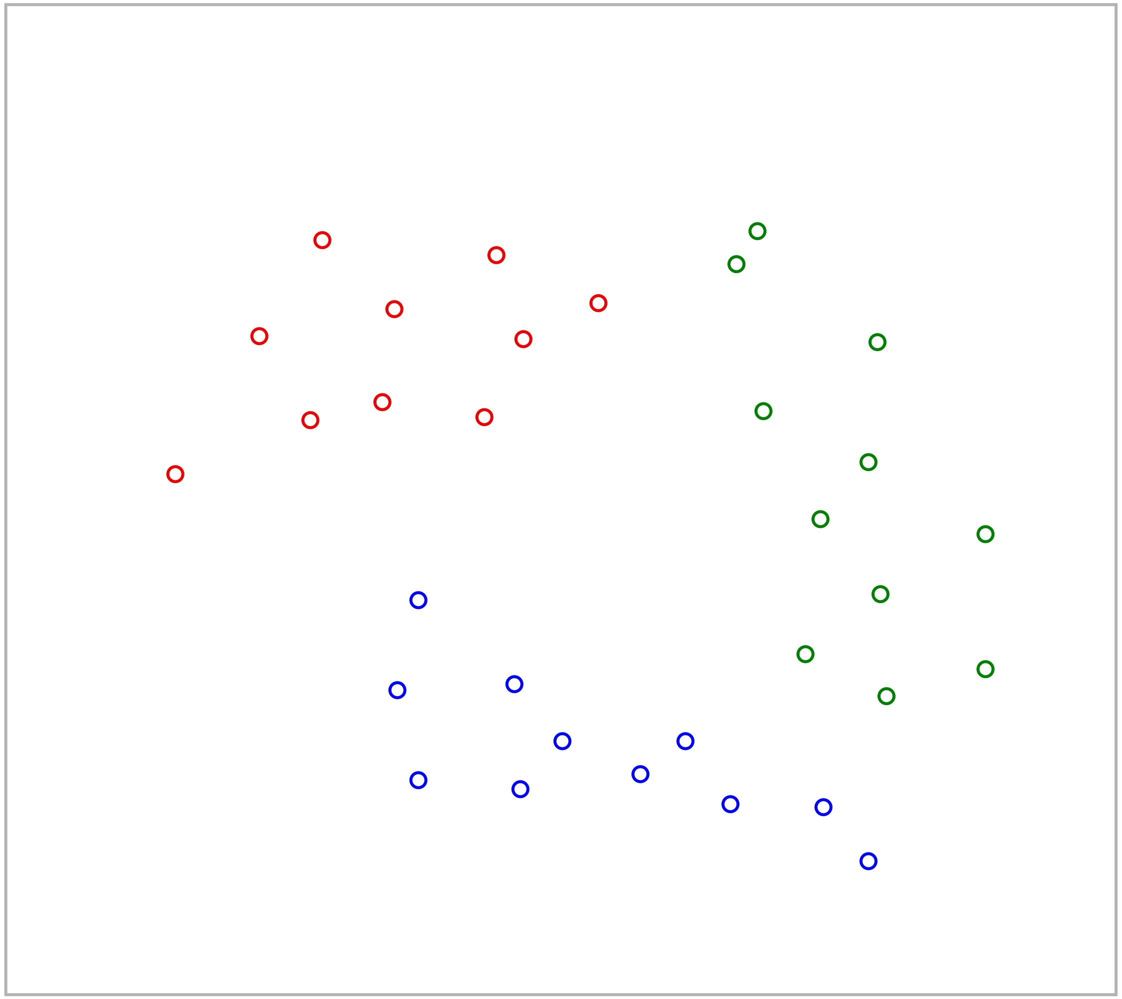
- *Construcción de Kesler:* Transformación de un problema de C clases on otro de 2 clases (aumentando la dimensionalidad). [Duda & Hart, 73], [Franc & Hlaváč, 02]

- *En la práctica:* Las técnicas que parecen más adecuadas son *uno-contra-uno* con *DAG*. [Hsu & Lin, 03]

- *Demo:* `http://www.csie.ntu.edu.tw/~cjlin/libsvm`

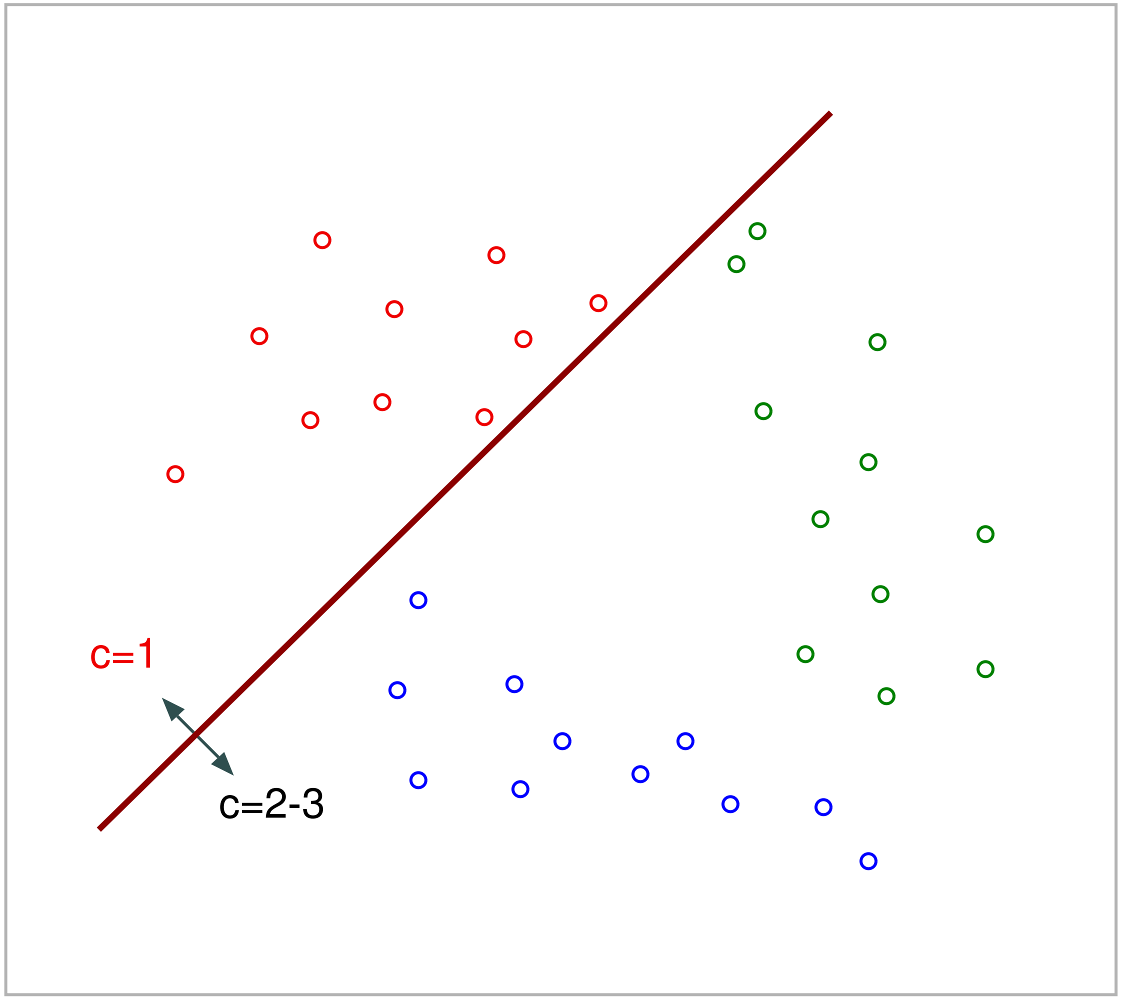
Clasificación multi-clase mediante clasificadores binarios: ejemplo

Uno-contra-resto



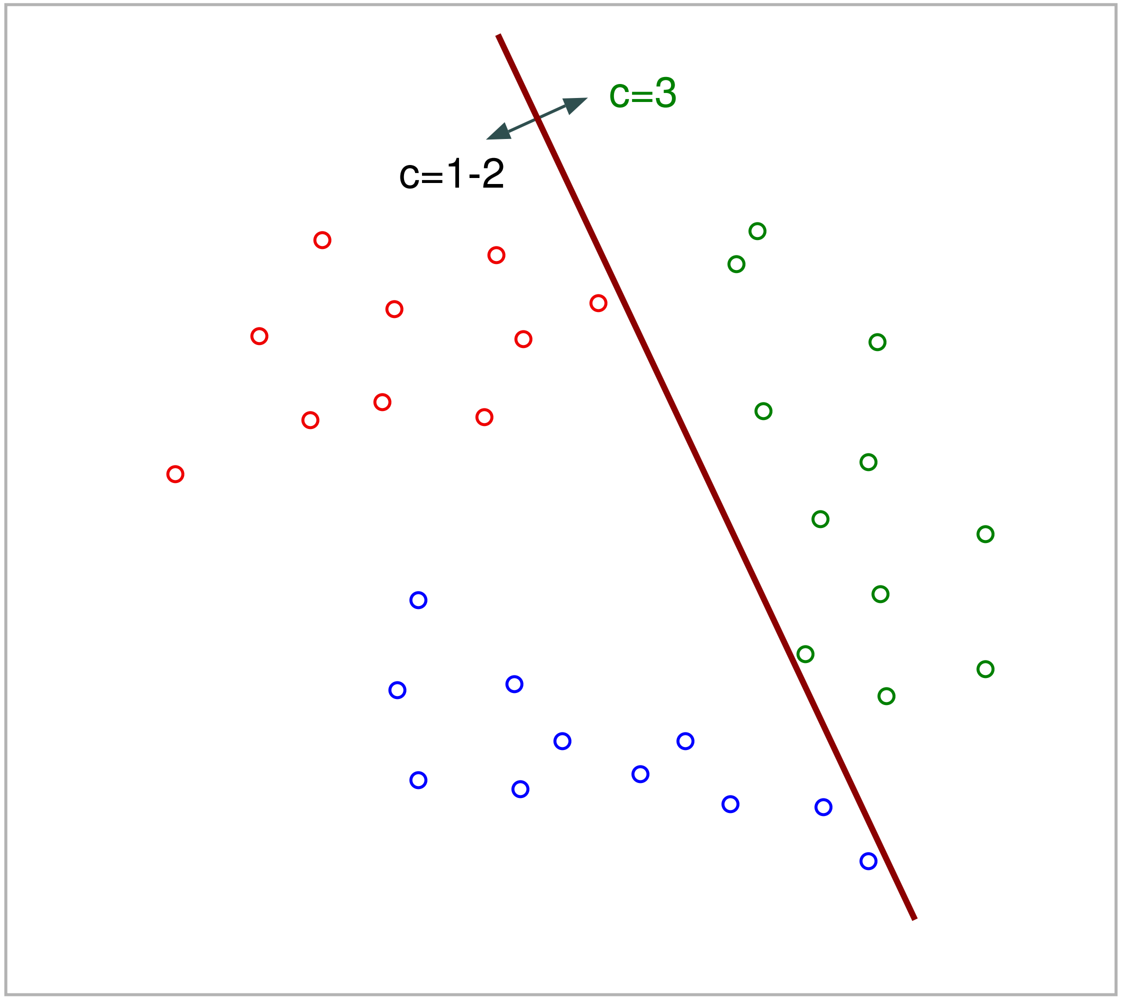
Clasificación multi-clase mediante clasificadores binarios: ejemplo

Uno-contra-resto



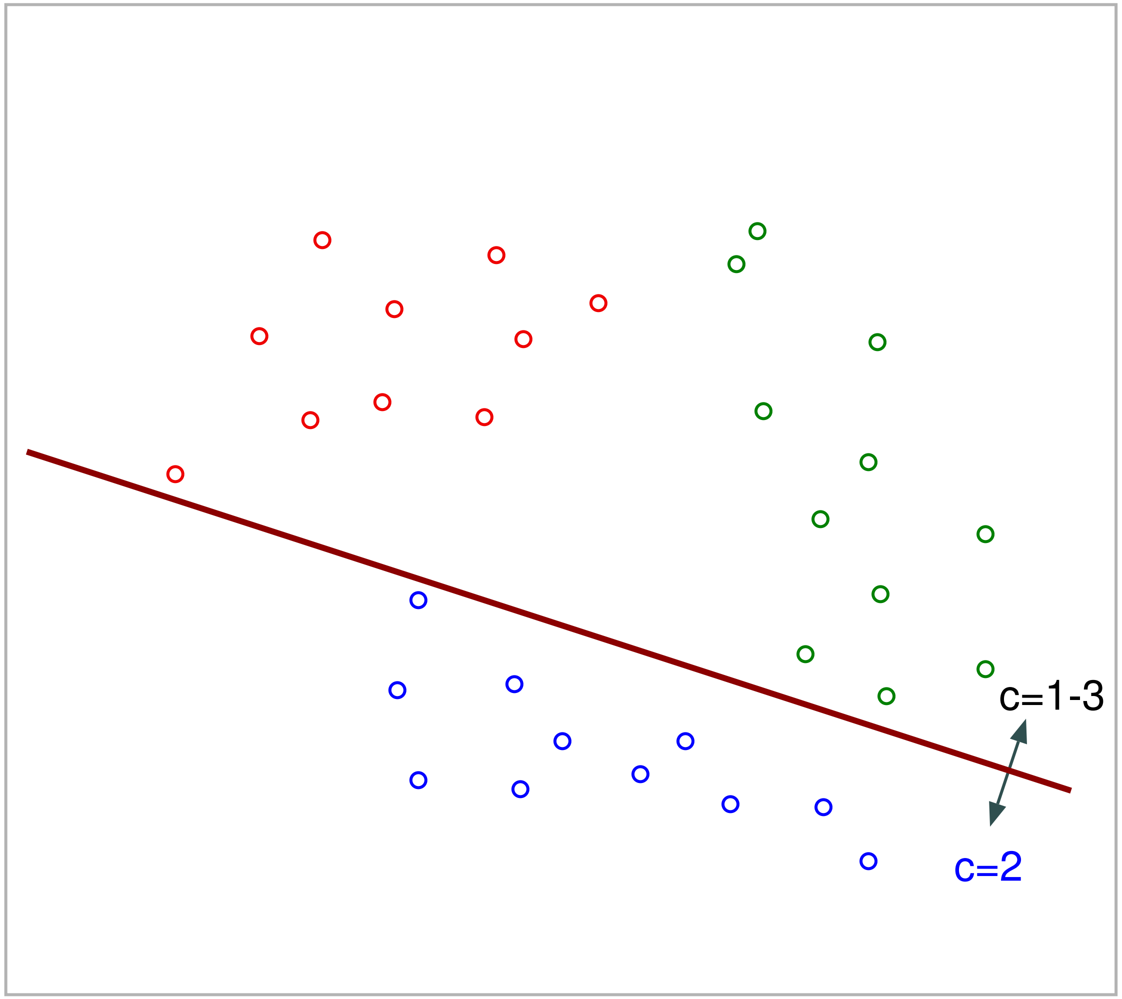
Clasificación multi-clase mediante clasificadores binarios: ejemplo

Uno-contra-resto



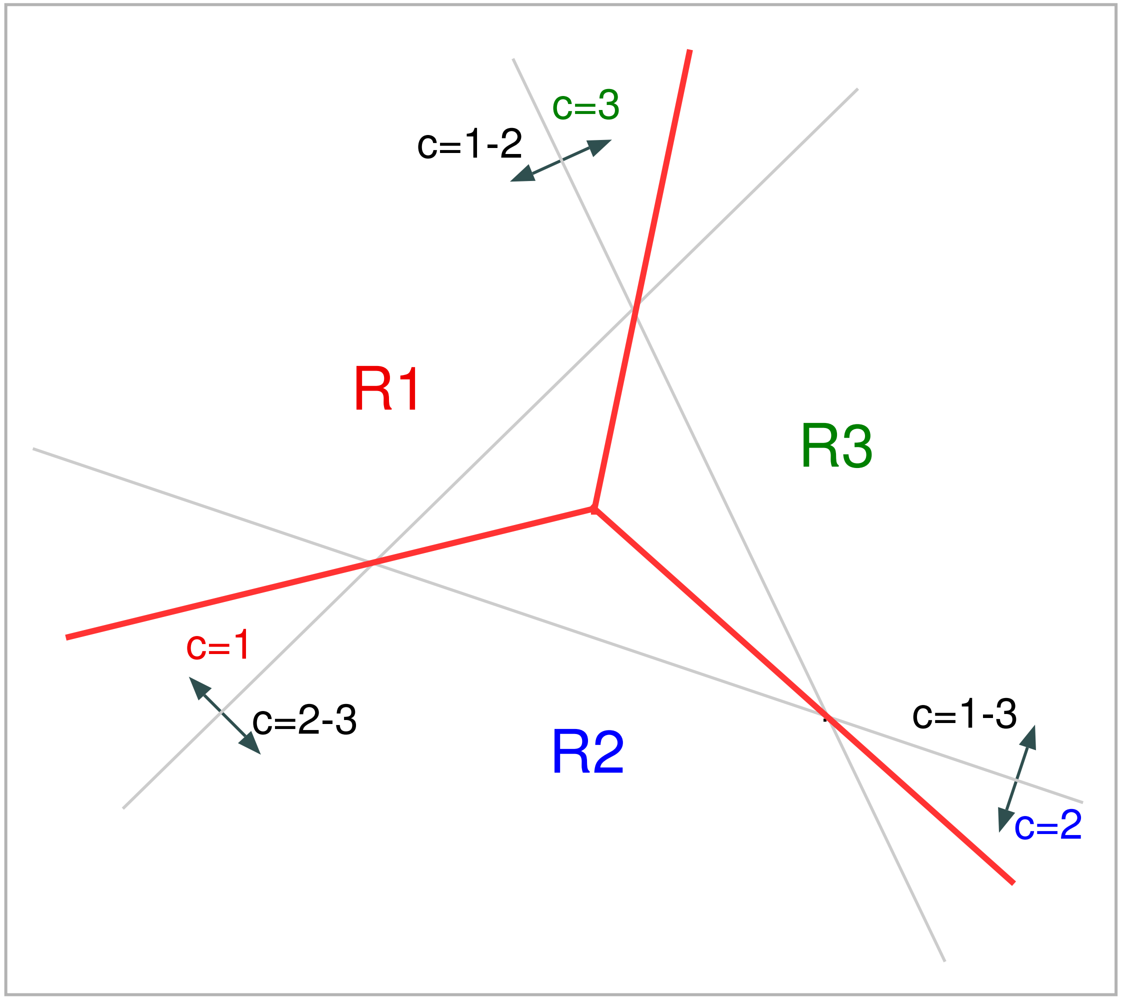
Clasificación multi-clase mediante clasificadores binarios: ejemplo

Uno-contra-resto



Clasificación multi-clase mediante clasificadores binarios: ejemplo

Uno-contra-resto



Index

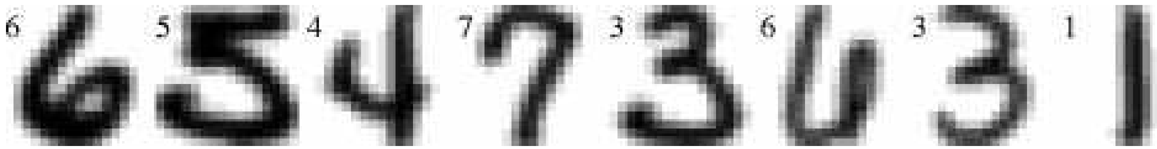
Aplicaciones: reconocimiento de caracteres manuscritos off-line

K.-R. Müller et al: An Introduction to Kernel-Based Learning Algorithms. IEEE Trans. on Neural networks. 2001[1]

A.M. HafizK & G.M. Baht: Handwritten Digit Recognition using Slope Detail Features. International Journal of Computer Applications. 2014[2]

Q. Wang et al. Convolutional 2D LDA for Nonlinear Dimensionality Reduction. Joint Conference on Artificial Intelligence. 2017.[3]

Corpus USPS: 7291 muestras



Técnica	Tasa de error (%)
SVM sin kernel	8.7[1]
k-vecino más próximo	5.7[1]
Redes neuronales radiales	4.1[1]
SVM virtuales	3.0[1]
Vecino más próximo utilizando la distancia tangente	2.5[1]
Humano	2.5[1]
SVM (características especiales)	1.3[2]
Redes convolucionales	2.1[3]

Aplicaciones diversas

- Búsqueda de imágenes
- Detección de caras
- Localización de las matrículas
- Detección de texto en imágenes
- Detección de humanos en movimiento
- Detección de mensajes ocultos en imágenes
- Clasificación de texto
- Predicción del nivel del agua de un lago
- Series temporales financieras
- Reconocimiento de secuencias en texto genómico

Index

Notación

- Representación de un objeto y su clase: $\boldsymbol{x} \in \mathbb{R}$ y $c \in \{+1, -1\}$ (para problemas de dos clases).

- Funciones discriminantes lineales: $\phi(\boldsymbol{x}; \boldsymbol{\Theta})$ para una entrada $\boldsymbol{x}$ y parámetros $\boldsymbol{\Theta}$ compuestos por vector de pesos y umbral $(\boldsymbol{\theta}, \theta_0)$.

- Conjunto de N muestras de entrenamiento: $S = \{(\boldsymbol{x}_1, c_1), \ldots, (\boldsymbol{x}_N, c_N)\}$

- Función de Lagrange: $\Lambda(\boldsymbol{\theta}, \theta_0, \boldsymbol{\alpha})$ con multiplicadores de Lagrange α_n

- Lagrangiana dual: $\Lambda_D(\boldsymbol{\alpha})$

- Conjunto de vectores soporte: $\mathcal{V}$

- Coeficientes de tolerancia para “márgenes blandos”: ζ_n

- Núcleo: $\mathcal{K}$