MÁQUINAS DE VECTORES DE SOPORTE

- SVM (*Support Vector Machines*)
  - También llamadas Máquinas de soporte vectorial
  - Se derivan de la teoría de aprendizaje estadístico postulada por Vapnik y Chervonenkis
  - Fueron presentadas en 1992, y recibieron mucho interés en los años siguientes por:
    - Muy alta precisión en la clasificación
    - Base matemática muy firme
    - En muchos campos han demostrado superar en resultados a los sistemas de más éxito (RR.NN.AA.)
  - Clasificador en dos clases
    - Generalizable a más clases
    - Ampliable para problemas de regresión

MÁQUINAS DE VECTORES DE SOPORTE

- Se tiene una serie de observaciones, cada una consiste en un par de datos:
  - Un vector $x_i \in R^n, i = 1,\ldots,l$
  - Una etiqueta $y_i \in \{+1,-1\}$
- Supóngase que se tiene un hiperplano que separa las muestras positivas (+1) de las negativas (-1).
  - Problemas linealmente separables
  - Ejemplo, en R^2:

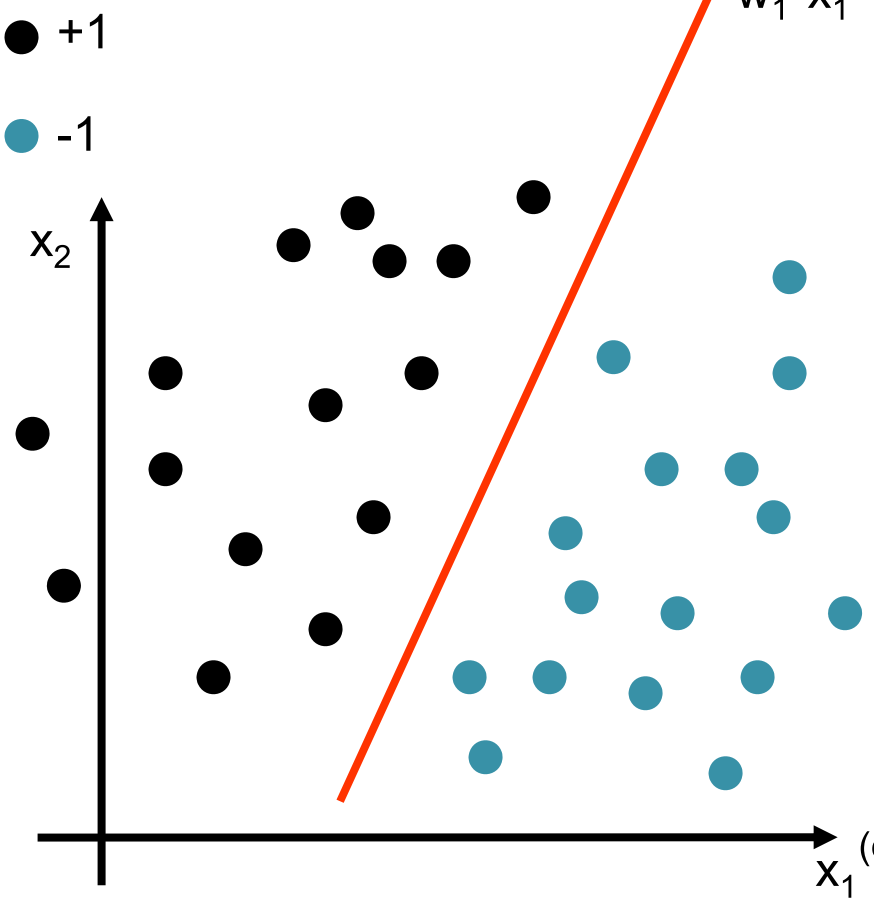
MÁQUINAS DE VECTORES DE SOPORTE

- Problemas linealmente separables
  - Ejemplo, en R^2:

hiperplano:
$w_1 * x_1 + w_2 * x_2 + b = 0$

$$w = \begin{bmatrix} w_1 \\ w_2 \end{bmatrix} \quad x = \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \end{bmatrix}$$

$$\mathbf{w^T x + b = 0}$$



Todos los patrones en el hiperplano cumplen:
w·x+b = 0

Todos los patrones ● cumplen:
w·x+b > 0

Todos los patrones ● cumplen:
w·x+b < 0

(en esta imagen los subíndices de x_1 y x_2 denotan la dimensión, no que sean los patrones 1 y 2)

Máquinas de Vectores de Soporte

- Se tiene una serie de observaciones, cada una consiste en un par de datos:
  - Un vector $x_i \in R^n, i = 1, \ldots, l$
  - Una etiqueta $y_i \in \{+1, -1\}$
- Supóngase que se tiene un hiperplano que separa las muestras positivas (+1) de las negativas (-1).
  - **Problemas linealmente separables**
  - Hiperplano, caso general: $w^T x + b = 0$
    - Los puntos $\mathbf{x}_i$ que están en el hiperplano satisfacen
      $$w^T x + b = 0$$
    - Los puntos $\mathbf{x}_i$ que están «a un lado» del hiperplano satisfacen
      $$w^T x + b > 0$$
    - Los puntos $\mathbf{x}_i$ que están «al otro lado» del hiperplano satisfacen
      $$w^T x + b < 0$$

Máquinas de Vectores de Soporte

- En el mundo real, la gran mayoría de los problemas no son linealmente separables
- Estudio de los SVM en tres casos distintos:
  - Problemas linealmente separables
    - SVM lineales
    - Región de separación: hiperplano
  - Problemas no linealmente separables
    - SVM lineales
    - Región de separación: hiperplano
    - Se permite cierto error en la clasificación
  - SVM no lineales
    - Aún admitiendo cierto error, no se puede separar los datos
    - Regiones de separación más complejas

MÁQUINAS DE VECTORES DE SOPORTE

- Problemas linealmente separables
  - Se desea encontrar el hiperplano

$$w \cdot x + b = 0$$

definido por el par (w, b), tal que se pueda separar el punto x_i de acuerdo a la función

$$f(x_i) = \begin{cases} 1 & w \cdot x_i + b > 0 \quad y_i=1 \\ -1 & w \cdot x_i + b < 0 \quad y_i=-1 \end{cases}$$

es decir

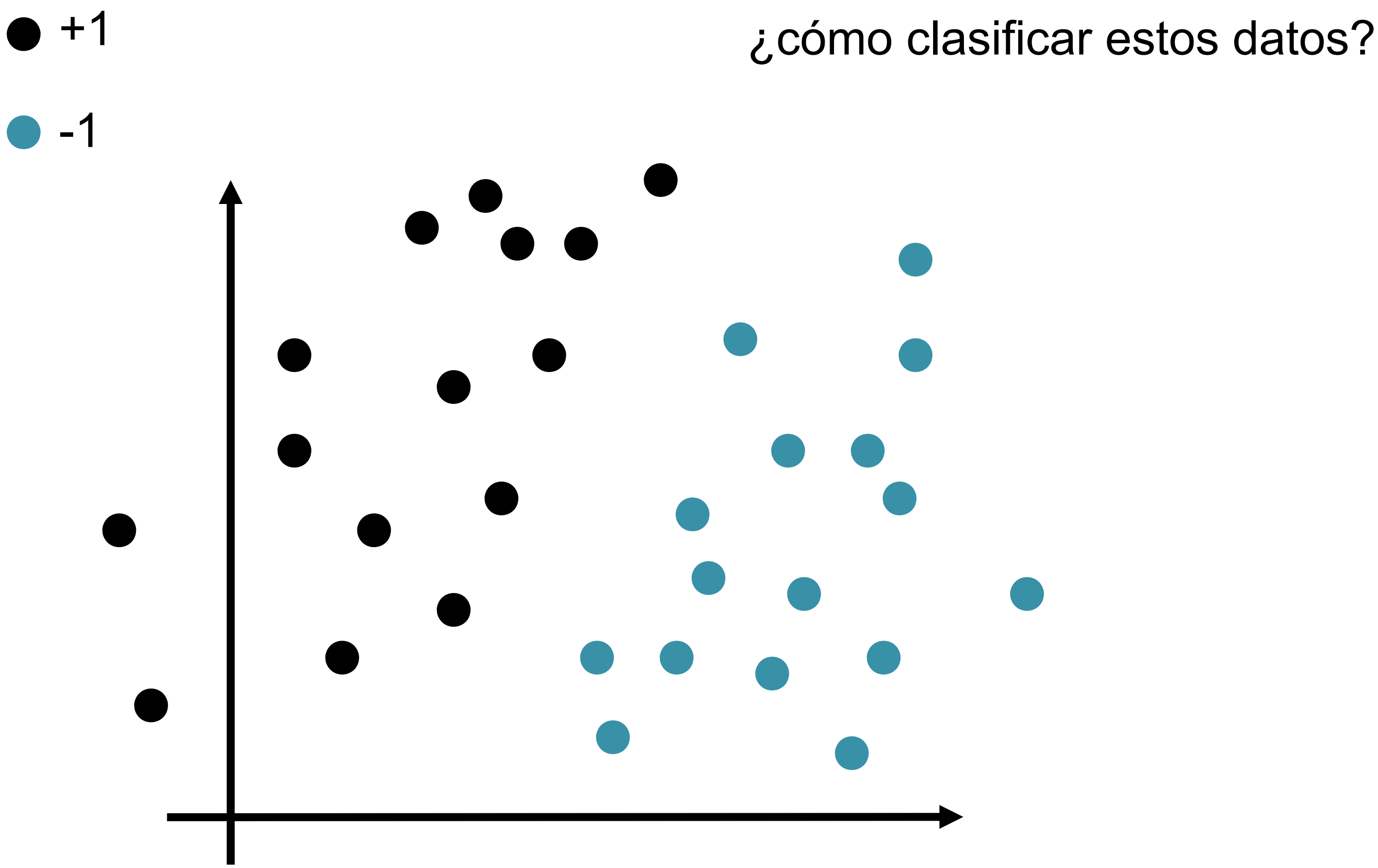
$$f(x_i) = sign(w \cdot x_i + b) = \begin{cases} 1 & y_i=1 \\ -1 & y_i=-1 \end{cases}$$

donde $x \in \Re^N$ y $b \in \Re$

- Es decir, la función f clasifica cada punto en +1 o -1

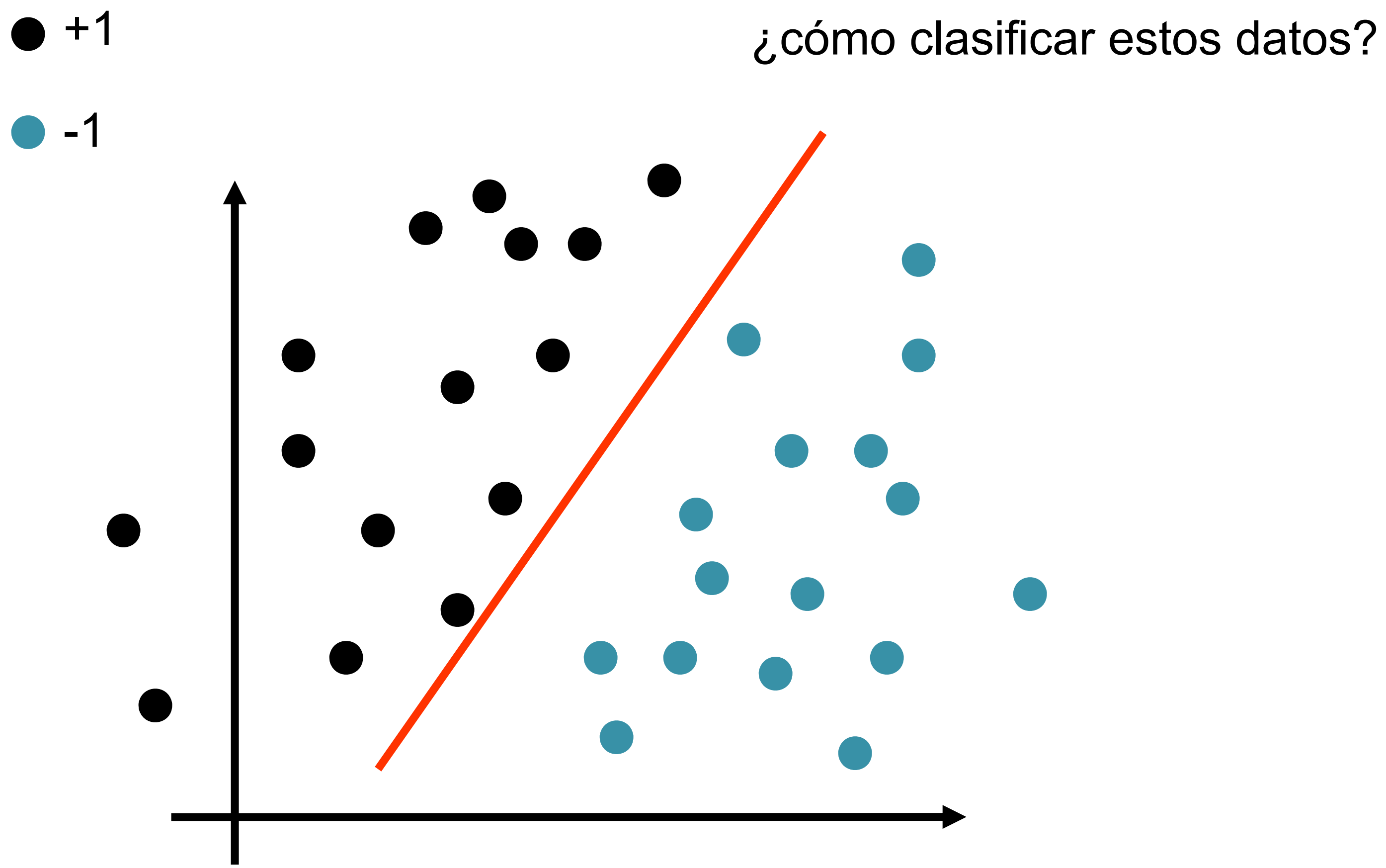
MÁQUINAS DE VECTORES DE SOPORTE

- Problemas linealmente separables



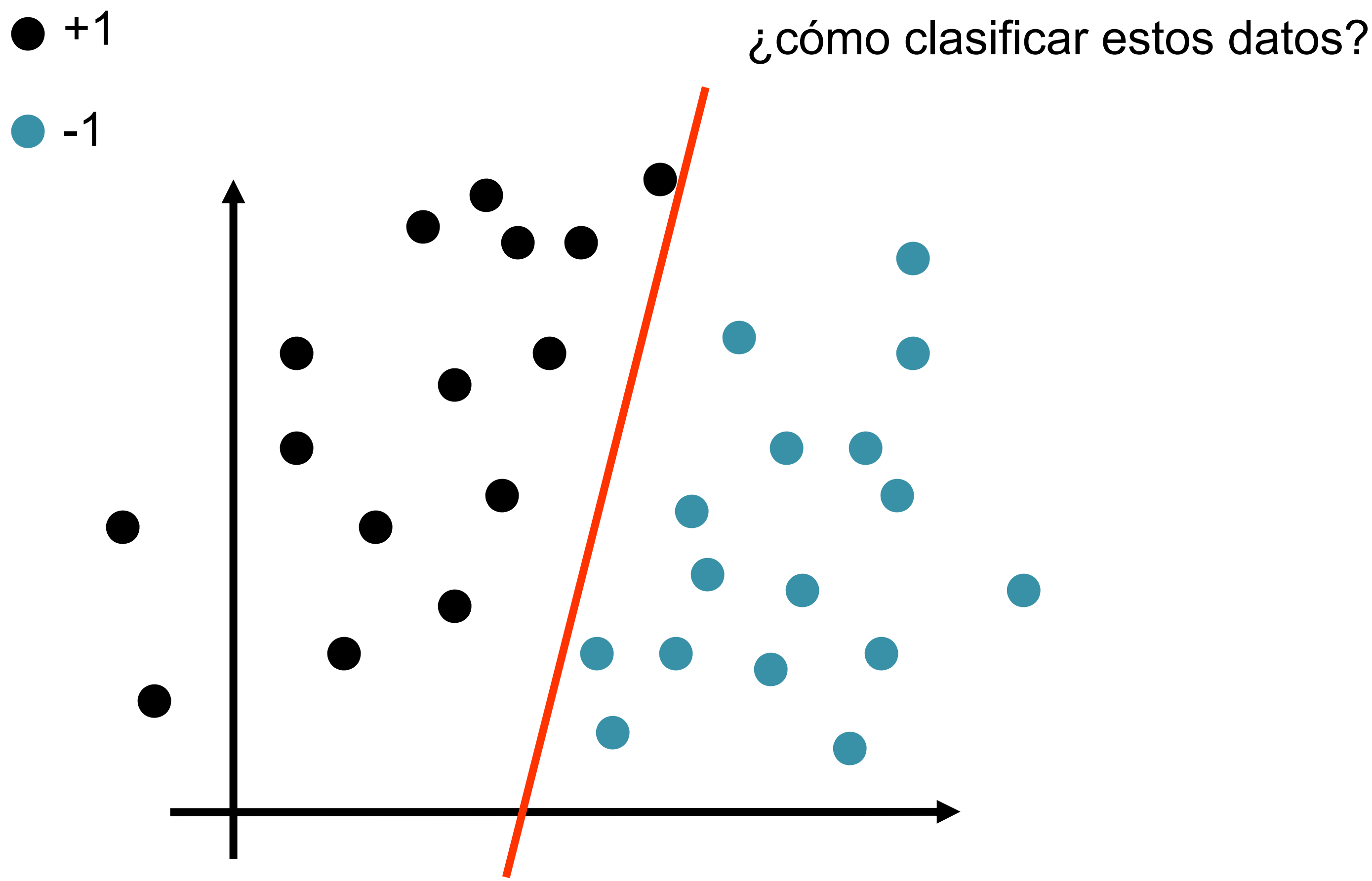
MÁQUINAS DE VECTORES DE SOPORTE

- Problemas linealmente separables



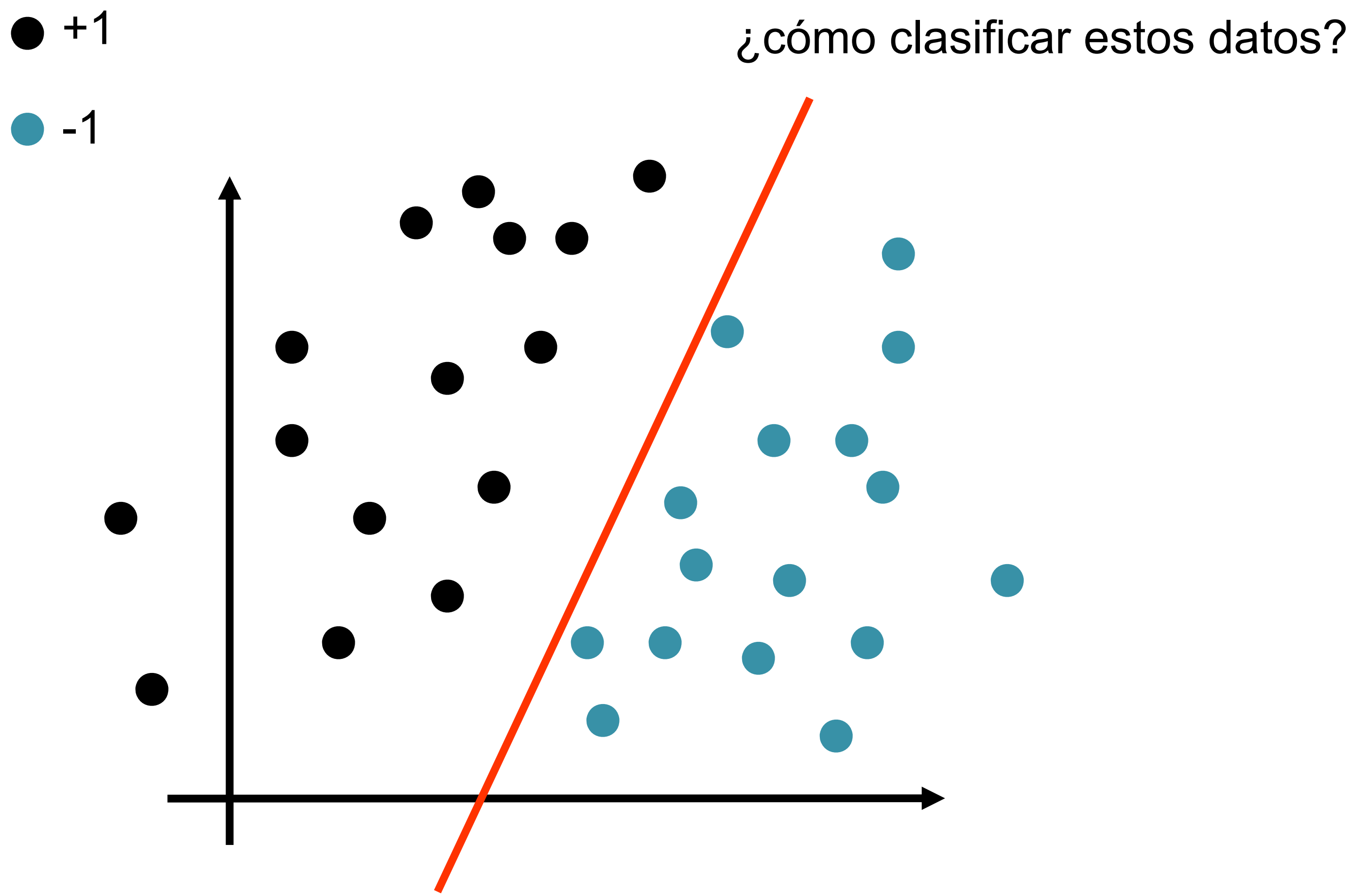
MÁQUINAS DE VECTORES DE SOPORTE

- Problemas linealmente separables



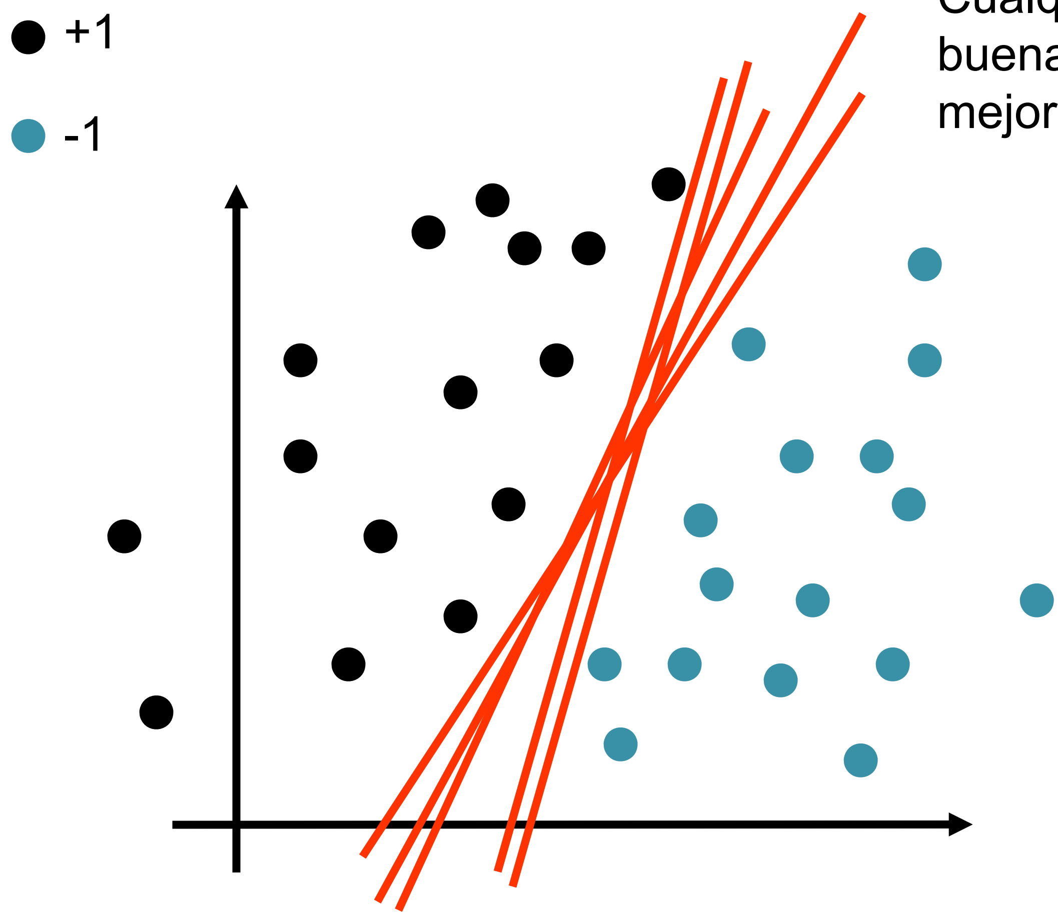
Máquinas de Vectores de Soporte

- Problemas linealmente separables



MÁQUINAS DE VECTORES DE SOPORTE

- Problemas linealmente separables

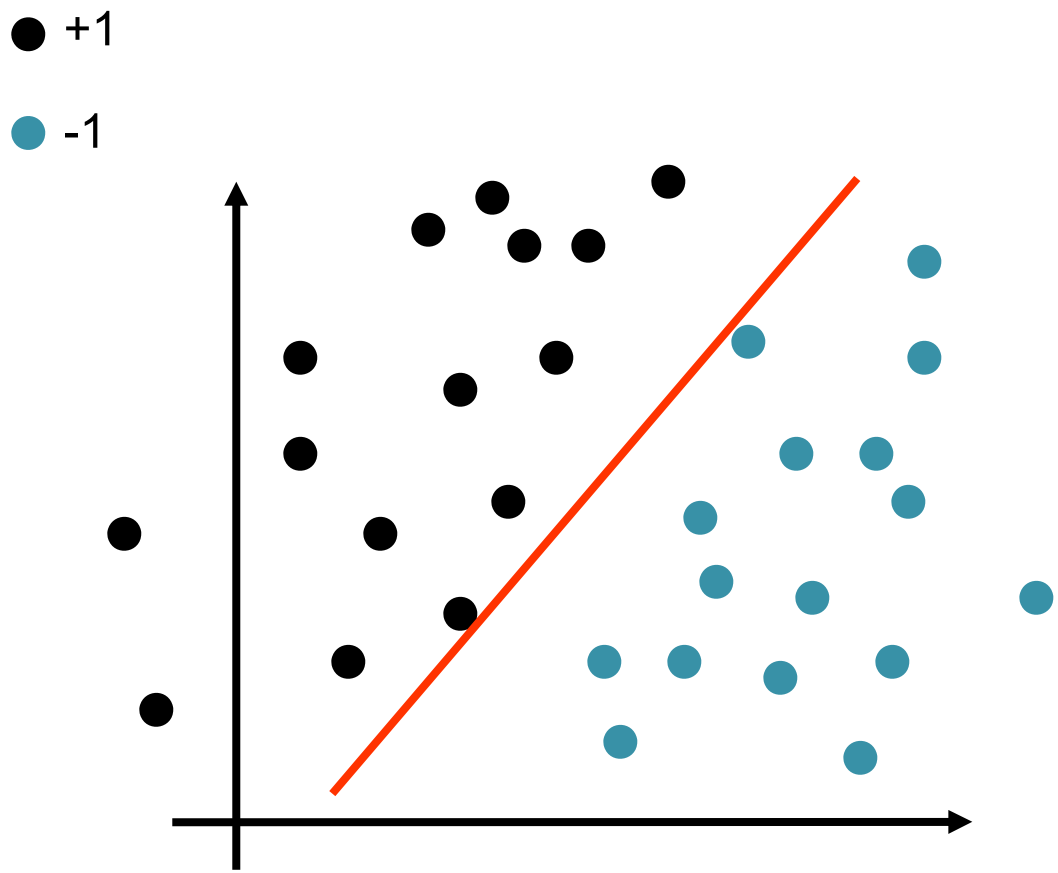


Cualquiera puede ser buena, ¿pero cuál es la mejor?

MÁQUINAS DE VECTORES DE SOPORTE

- Problemas linealmente separables

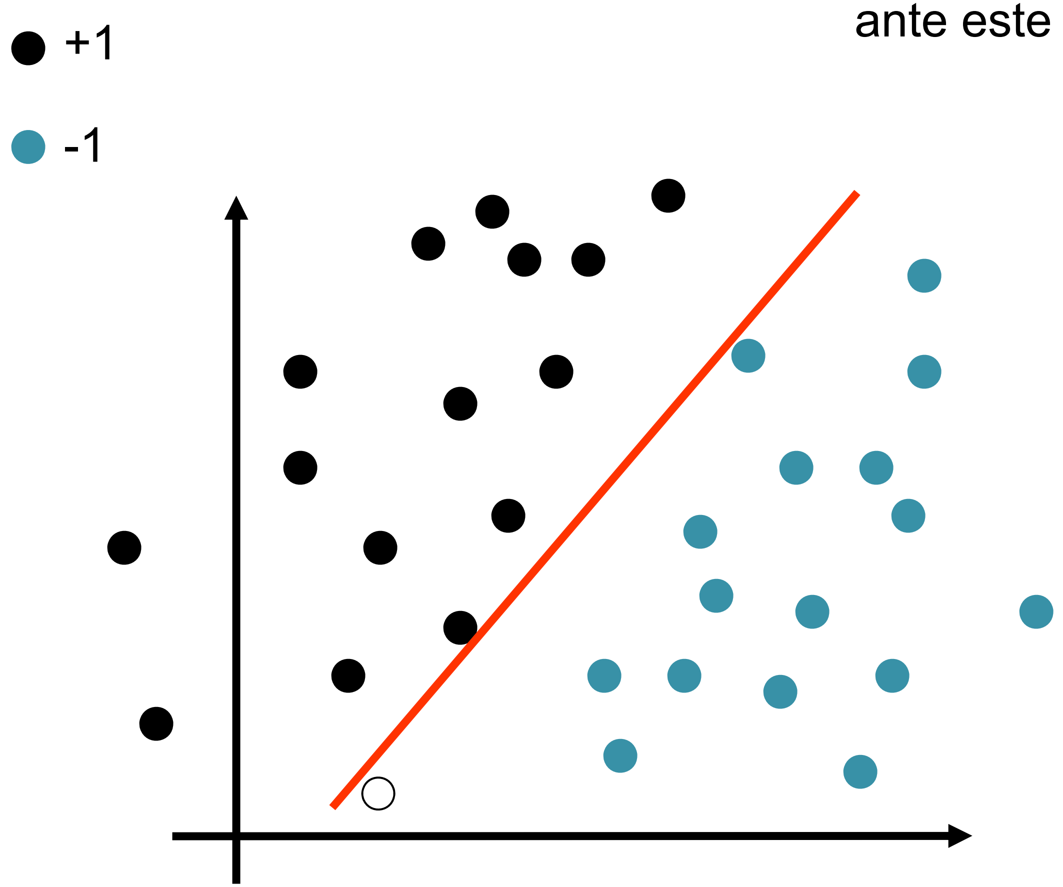
Si se escoge este hiperplano



Máquinas de Vectores de Soporte

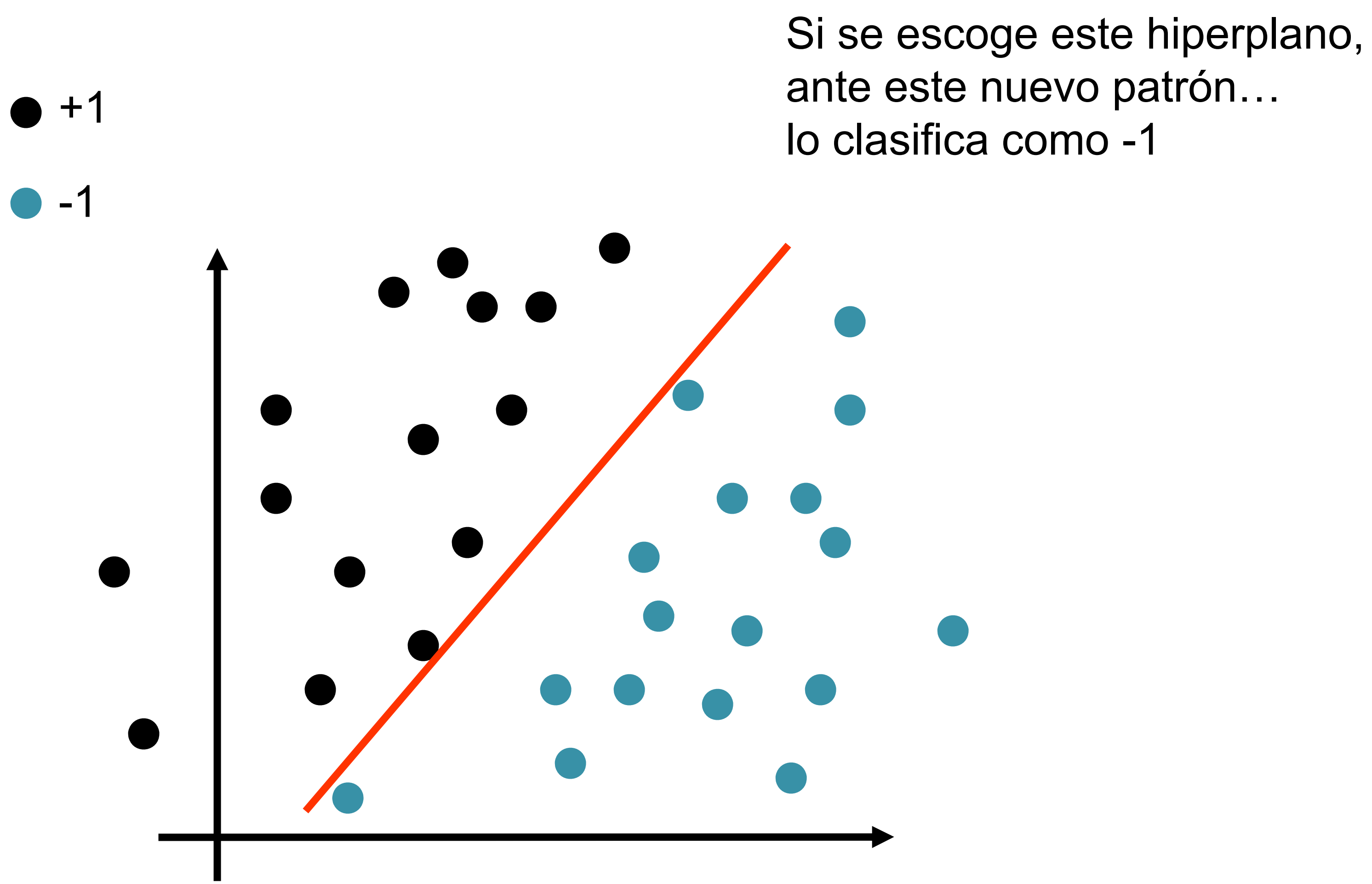
- Problemas linealmente separables

Si se escoge este hiperplano, ante este nuevo patrón…



MÁQUINAS DE VECTORES DE SOPORTE

- Problemas linealmente separables



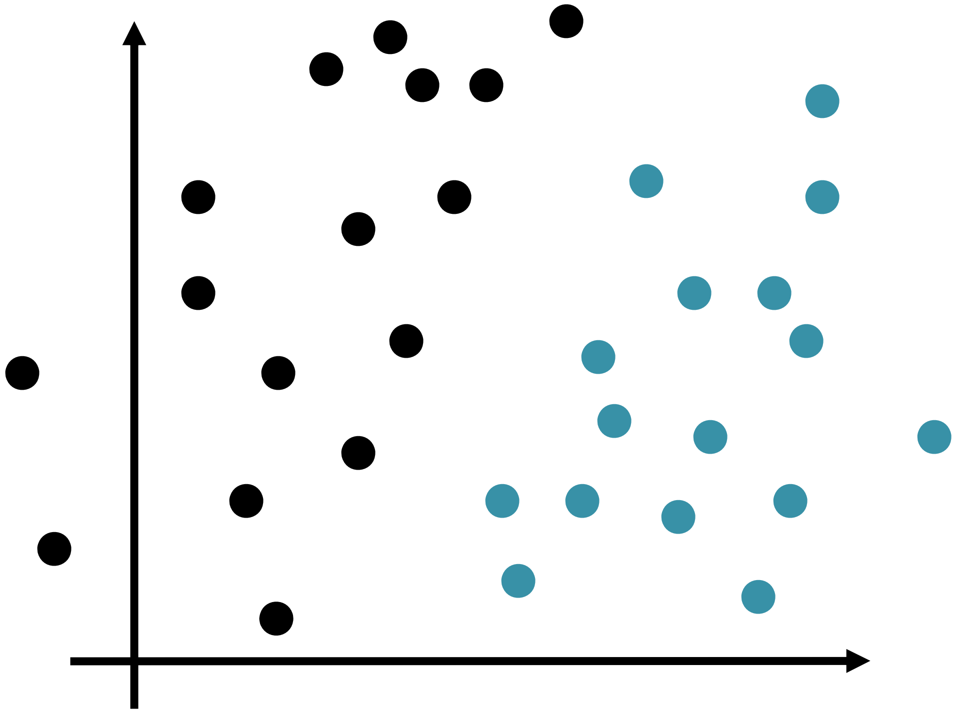
MÁQUINAS DE VECTORES DE SOPORTE

- Problemas linealmente separables

Si se escoge este hiperplano,
ante este nuevo patrón…
lo clasifica como -1
cuando debería ser +1

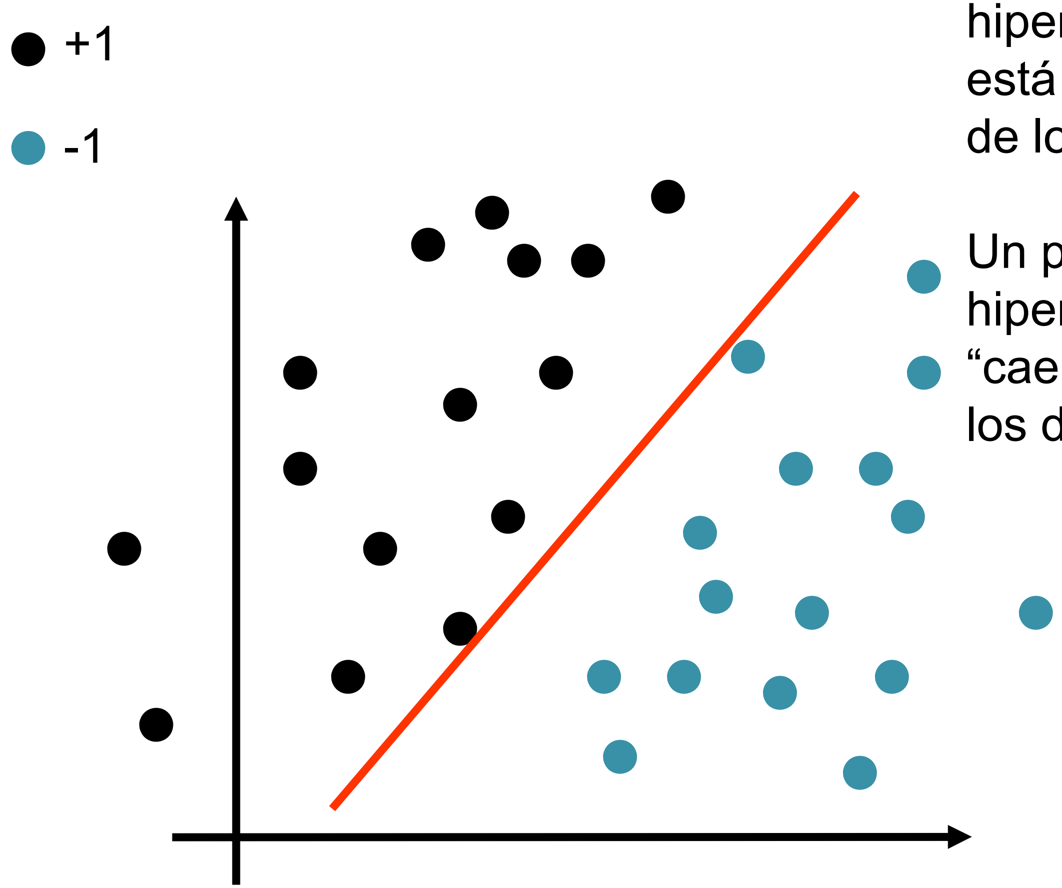
● +1

● -1



MÁQUINAS DE VECTORES DE SOPORTE

- Problemas linealmente separables

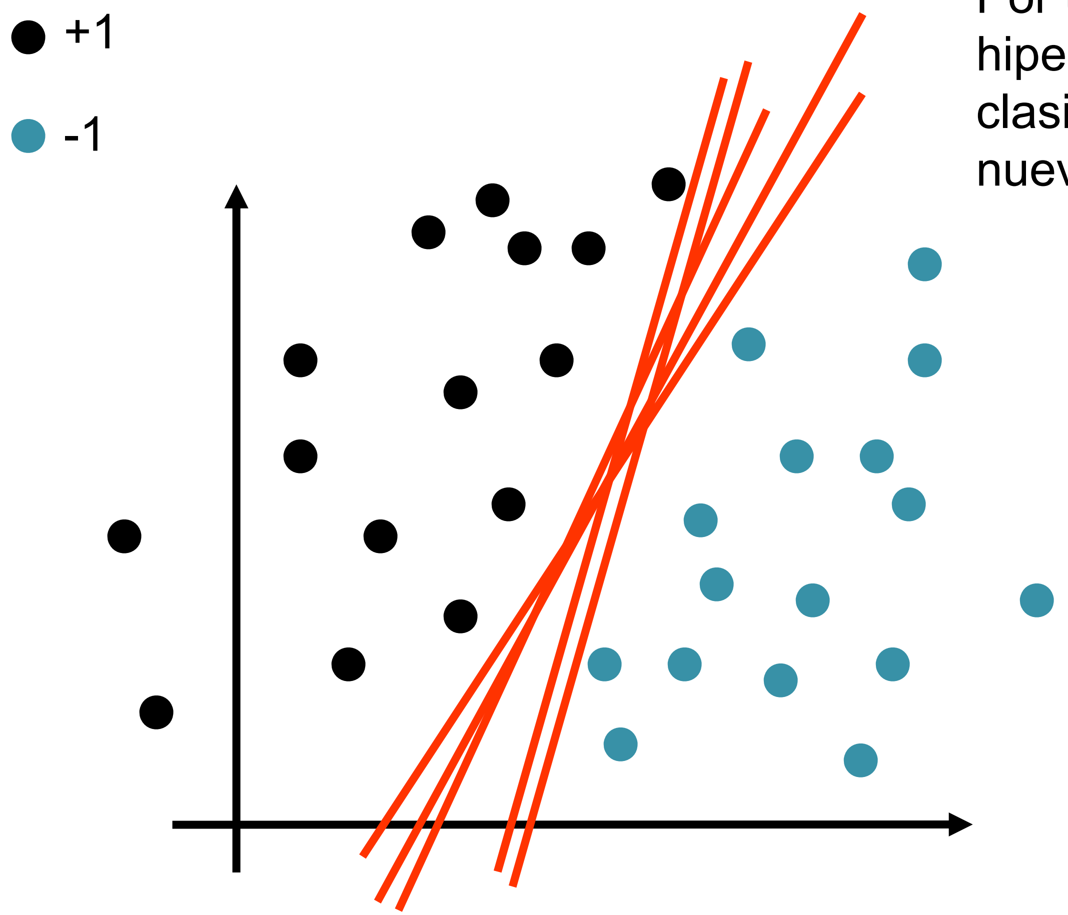


Problema del hiperplano escogido: está demasiado cerca de los patrones

Un patrón cercano al hiperplano podría “caer” a cualquiera de los dos lados

Máquinas de Vectores de Soporte

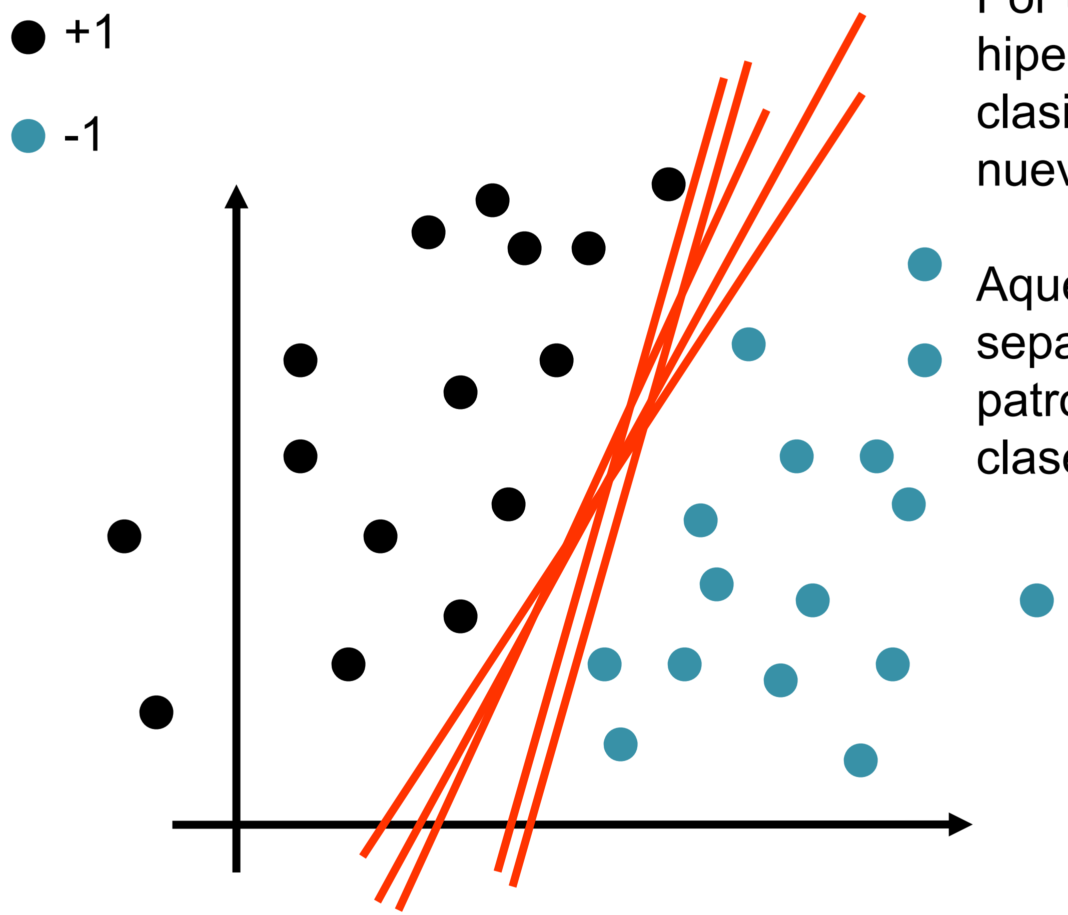
- Problemas linealmente separables



Por tanto, ¿cuál es el hiperplano que clasifique mejor casos nuevos?

MÁQUINAS DE VECTORES DE SOPORTE

- Problemas linealmente separables

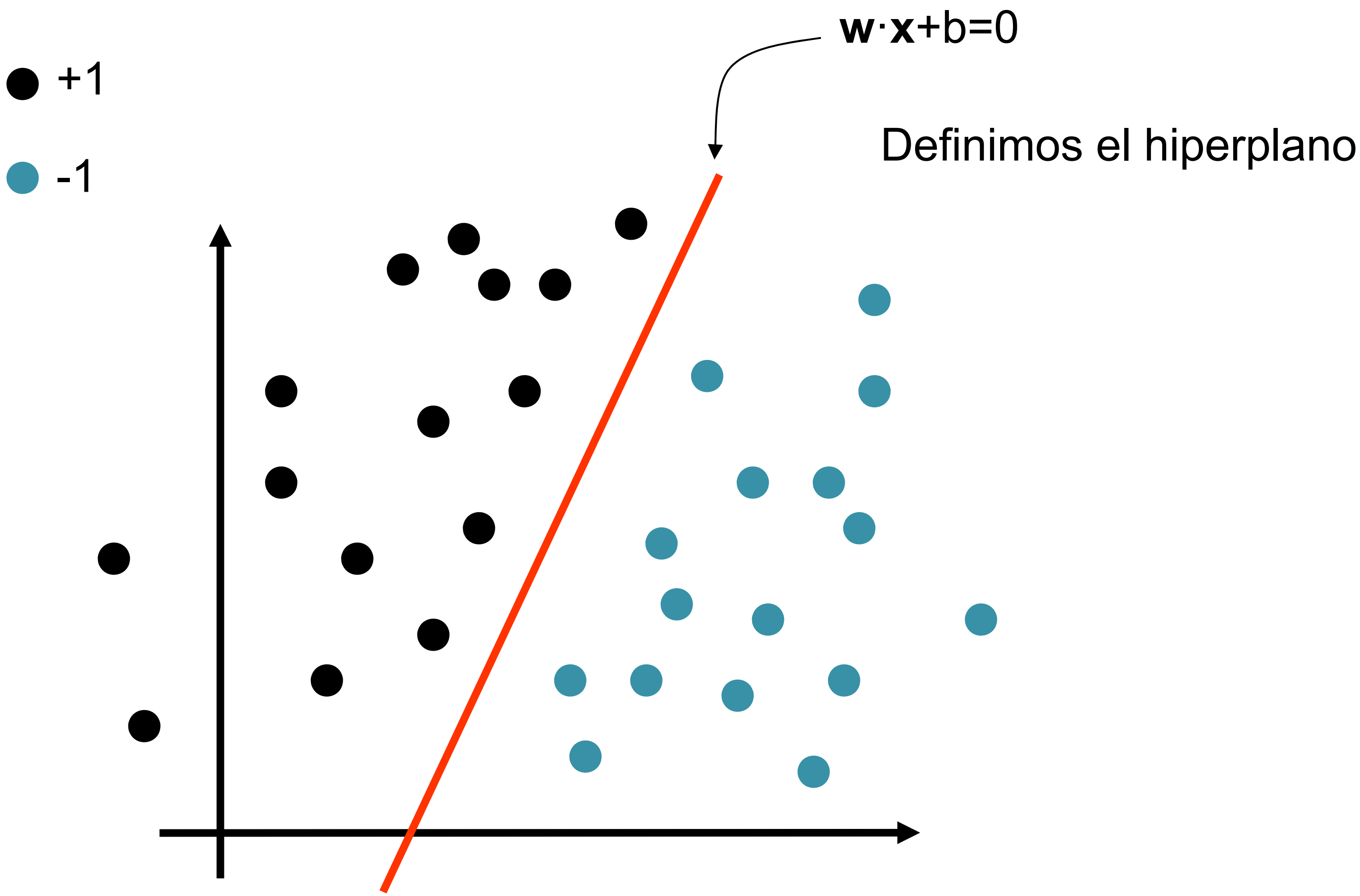


Por tanto, ¿cuál es el hiperplano que clasifique mejor casos nuevos?

Aquél que esté más separado de los patrones de ambas clases

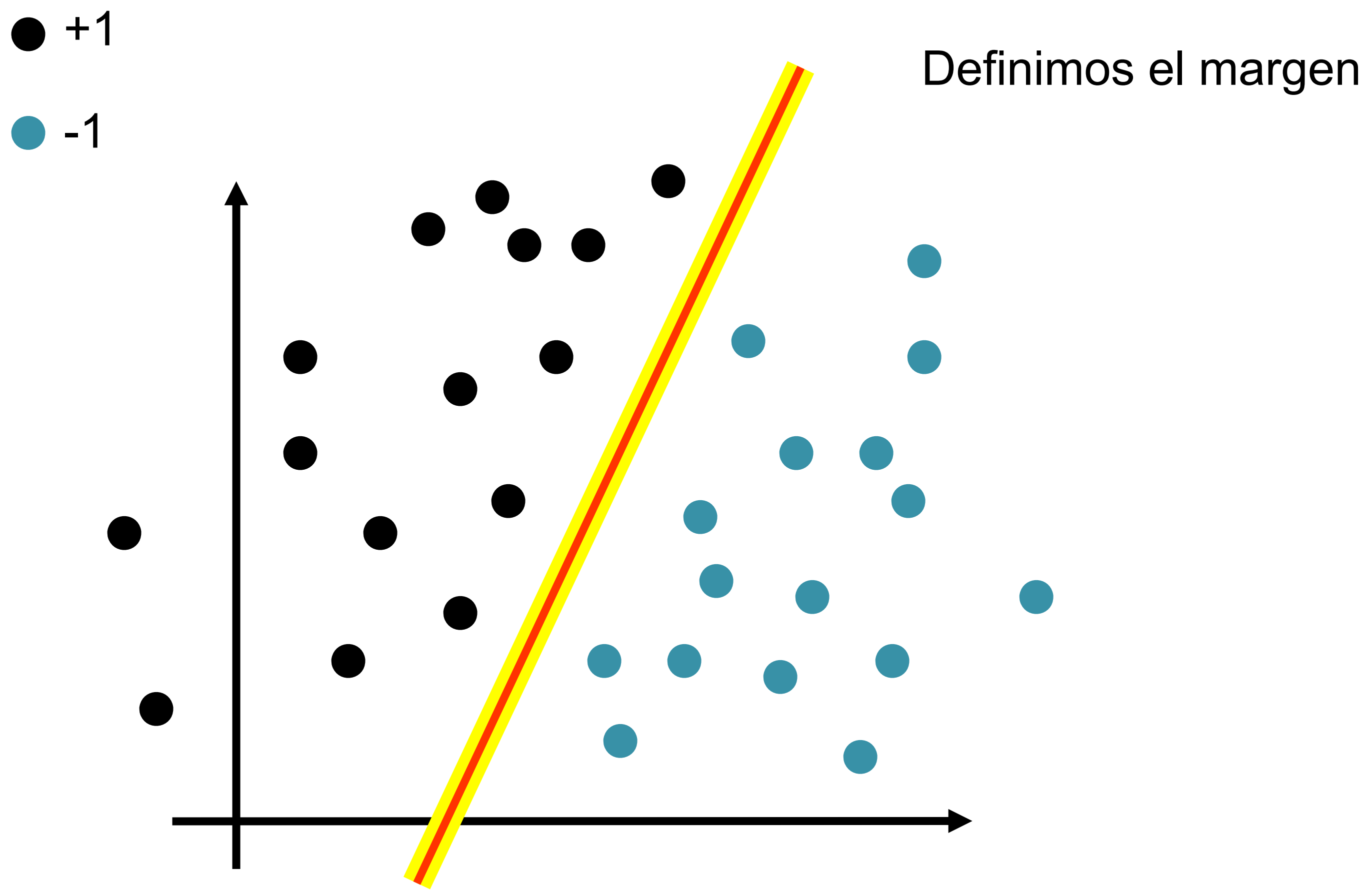
MÁQUINAS DE VECTORES DE SOPORTE

- Problemas linealmente separables



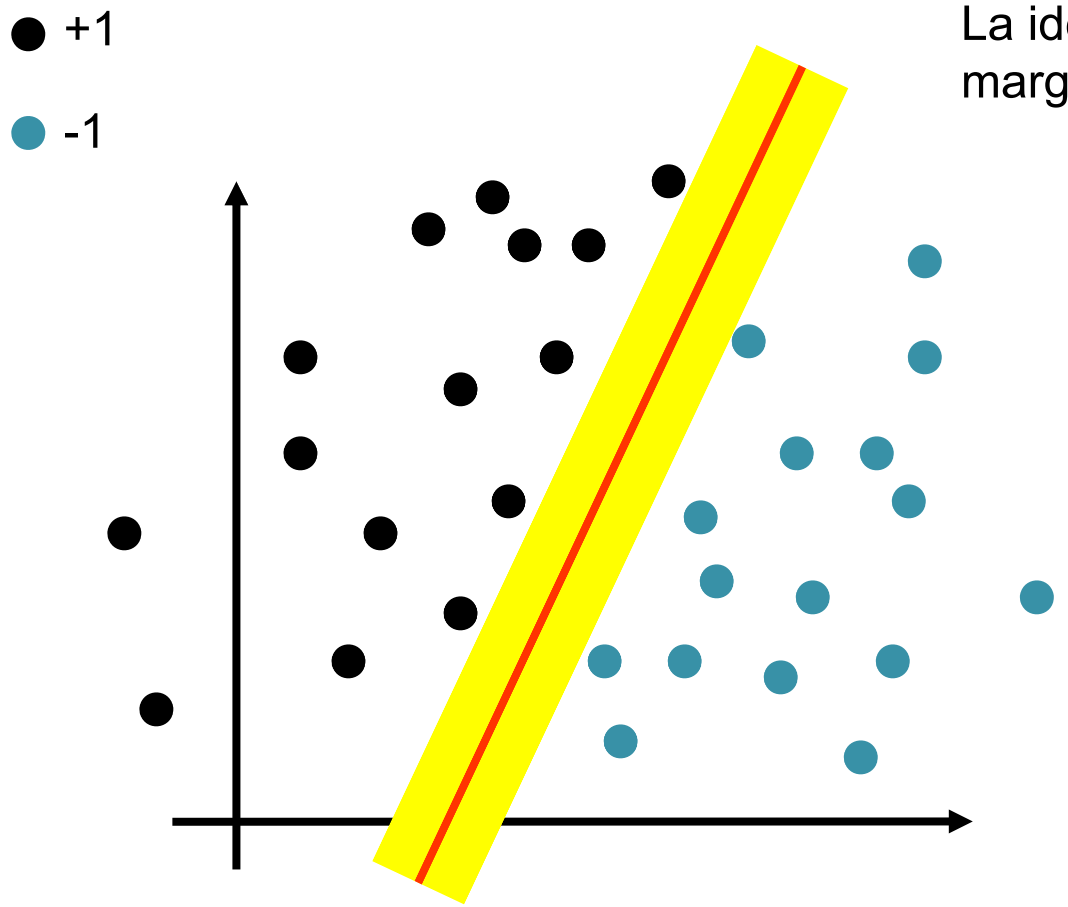
MÁQUINAS DE VECTORES DE SOPORTE

- Problemas linealmente separables



MÁQUINAS DE VECTORES DE SOPORTE

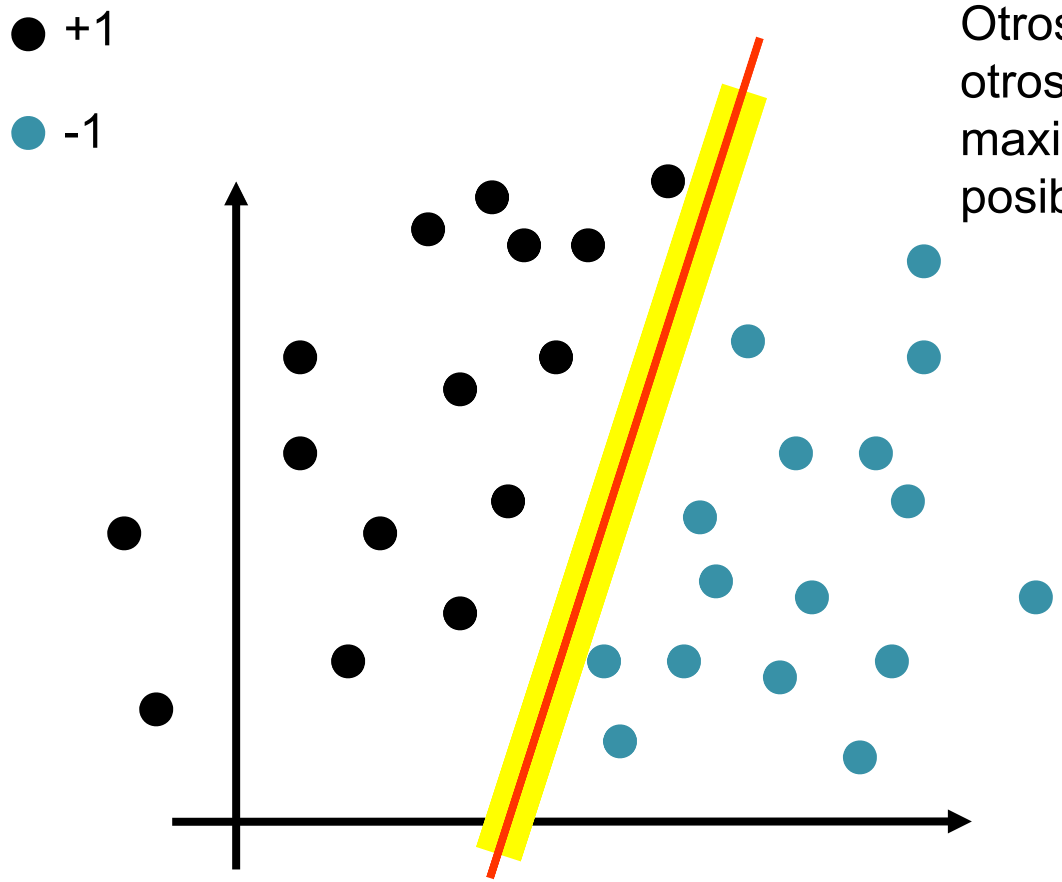
- Problemas linealmente separables



La idea es maximizar el margen.

MÁQUINAS DE VECTORES DE SOPORTE

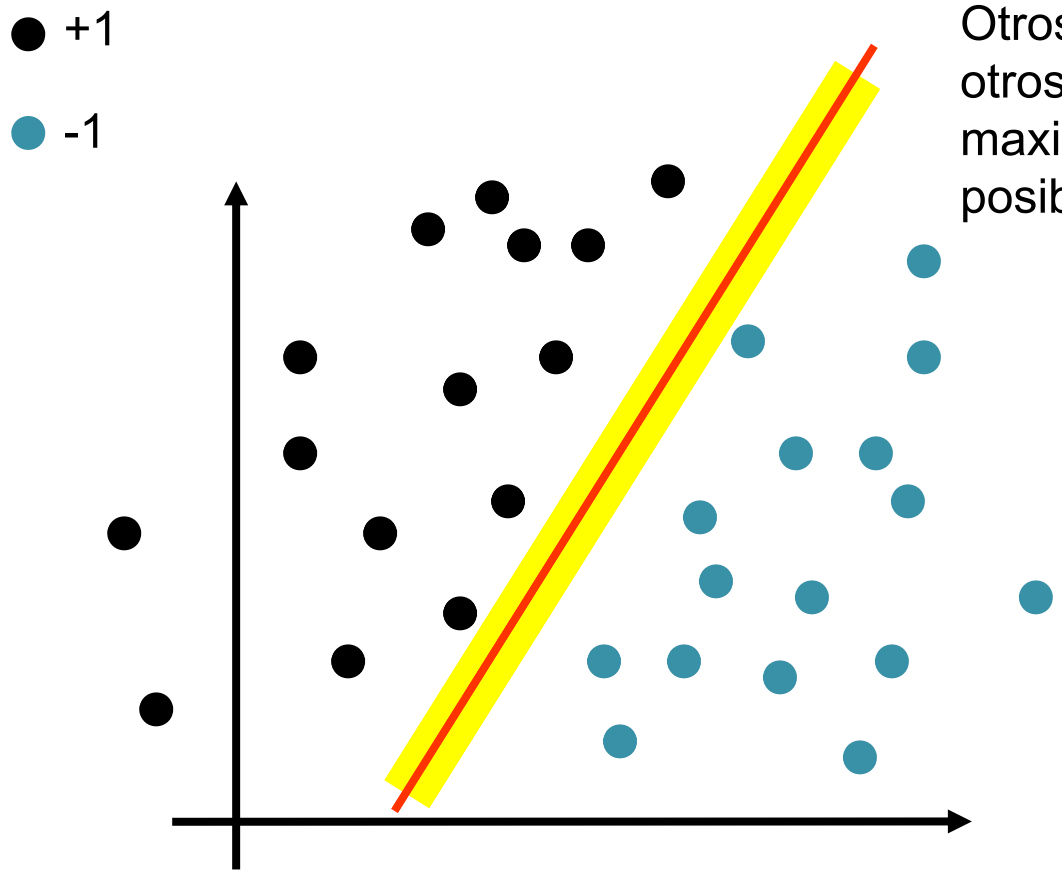
- Problemas linealmente separables



Otros hiperplanos con otros márgenes maximizados serían posibles.

MÁQUINAS DE VECTORES DE SOPORTE

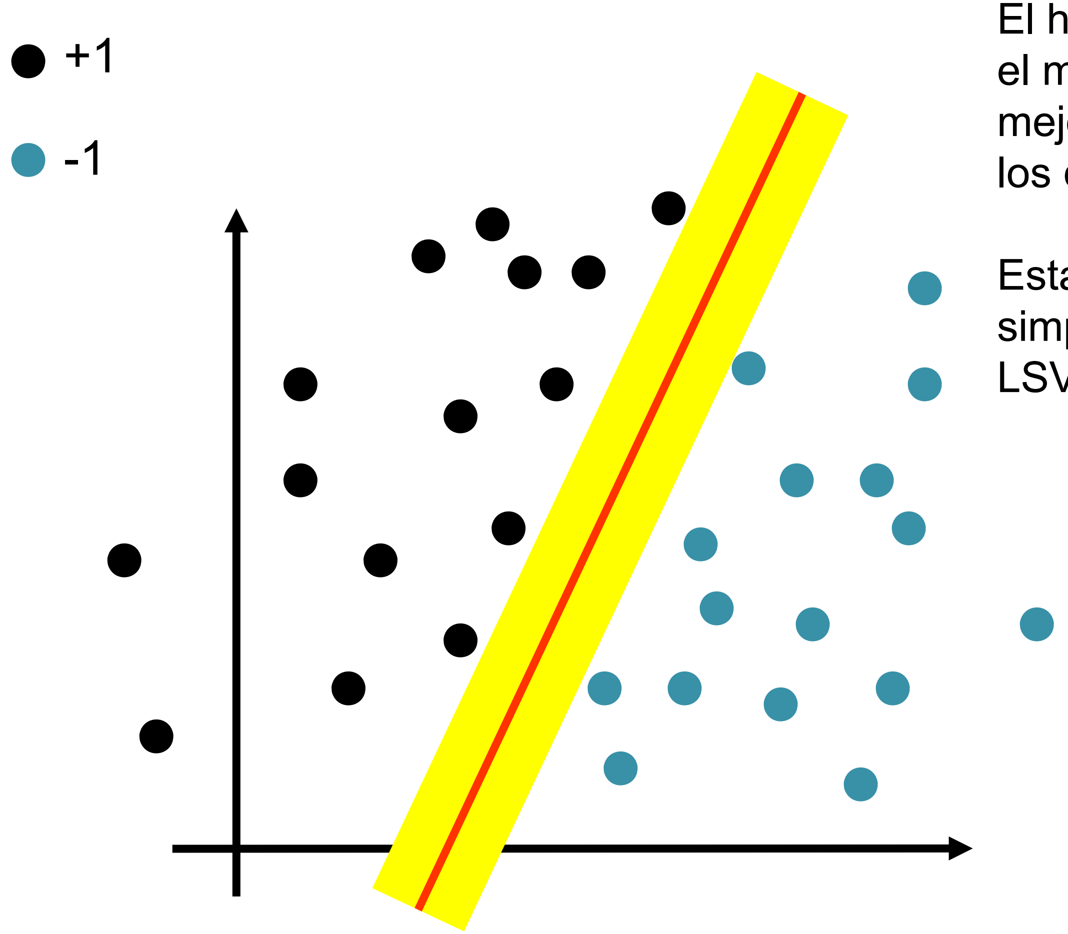
- Problemas linealmente separables



Otros hiperplanos con otros márgenes maximizados serían posibles.

MÁQUINAS DE VECTORES DE SOPORTE

- Problemas linealmente separables

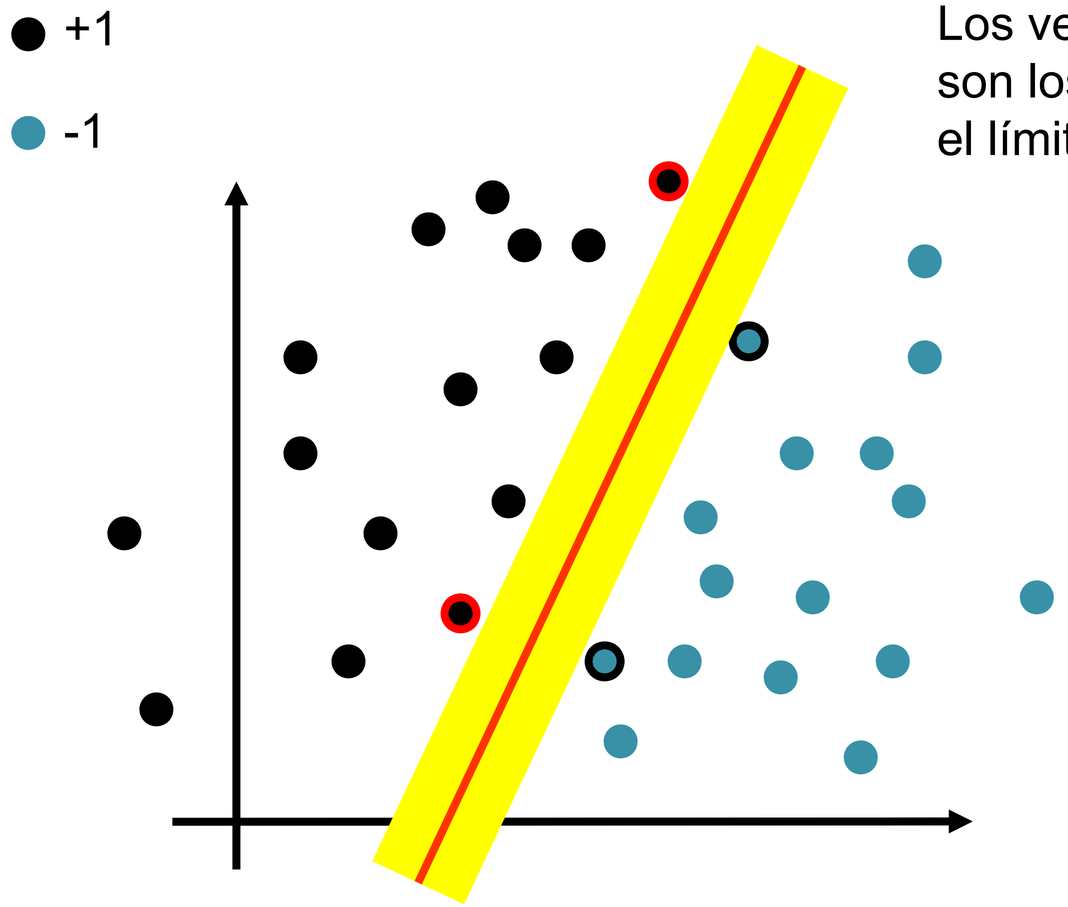


El hiperplano que tenga el mayor margen es el mejor clasificador de los datos.

Esta es la clase más simple de SVM, la LSVM.

MÁQUINAS DE VECTORES DE SOPORTE

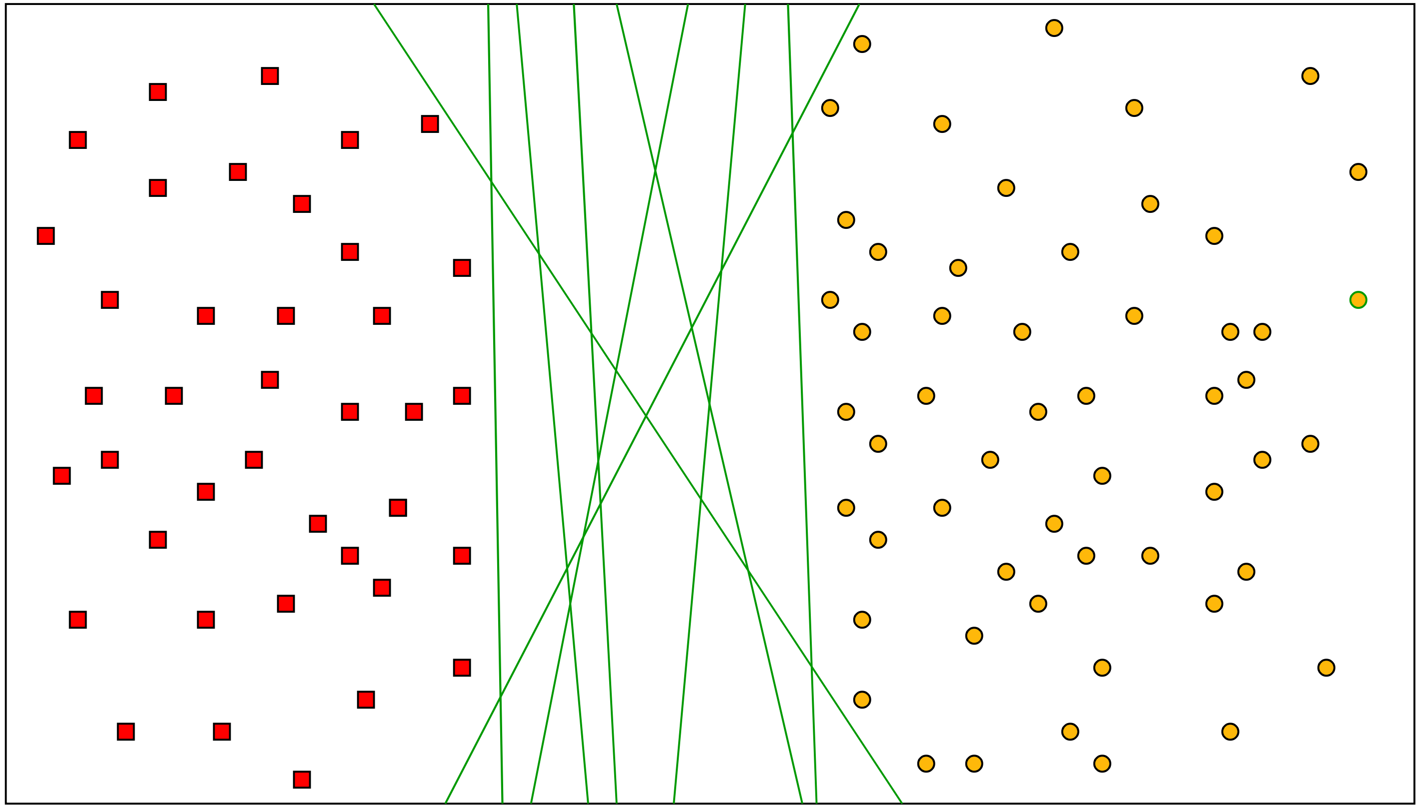
- Problemas linealmente separables



Los vectores de soporte son los puntos que tocan el límite del margen.

MÁQUINAS DE VECTORES DE SOPORTE

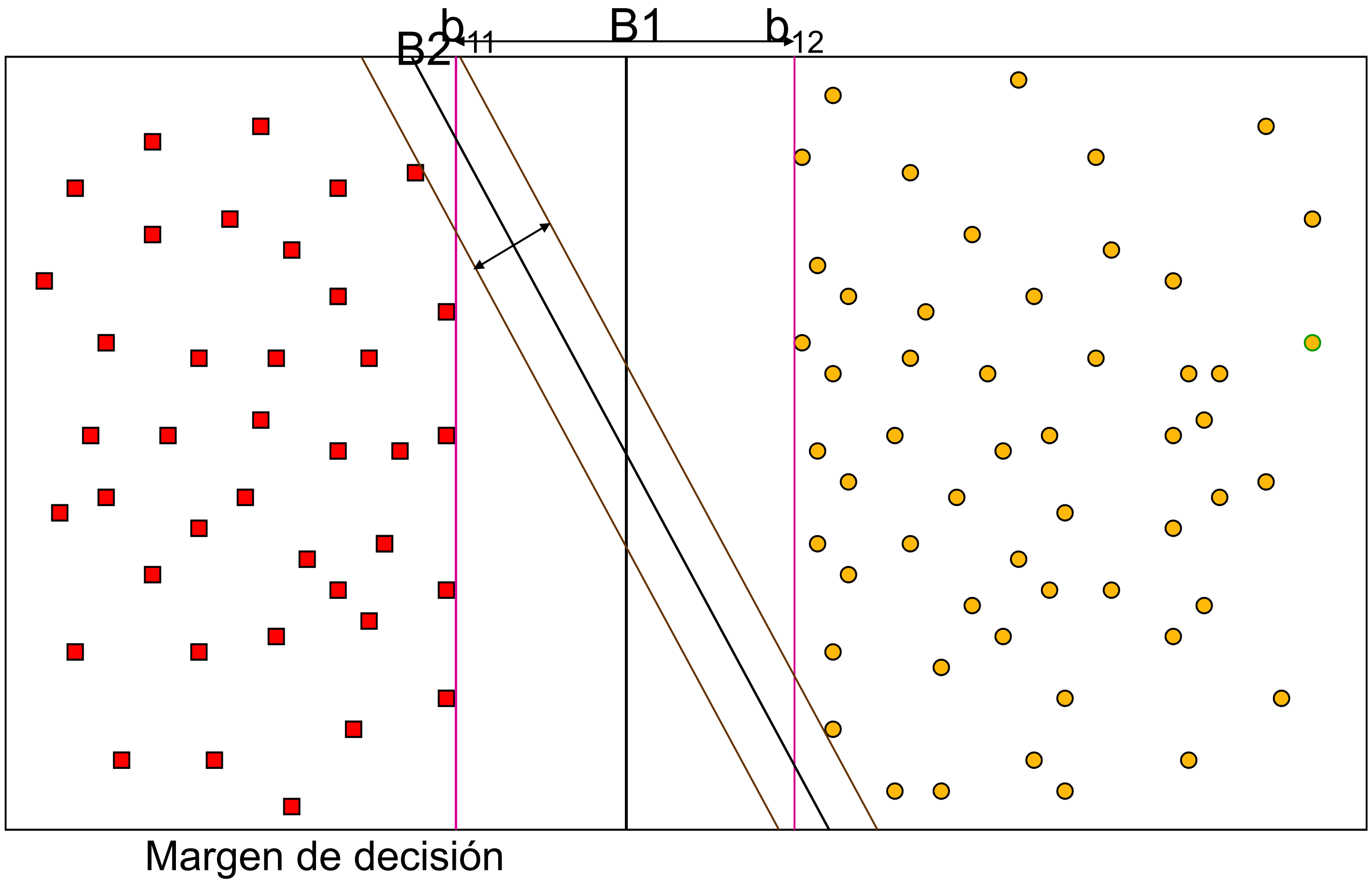
- Problemas linealmente separables



Posibles fronteras de decisión para datos linealmente separables

MÁQUINAS DE VECTORES DE SOPORTE

- Problemas linealmente separables

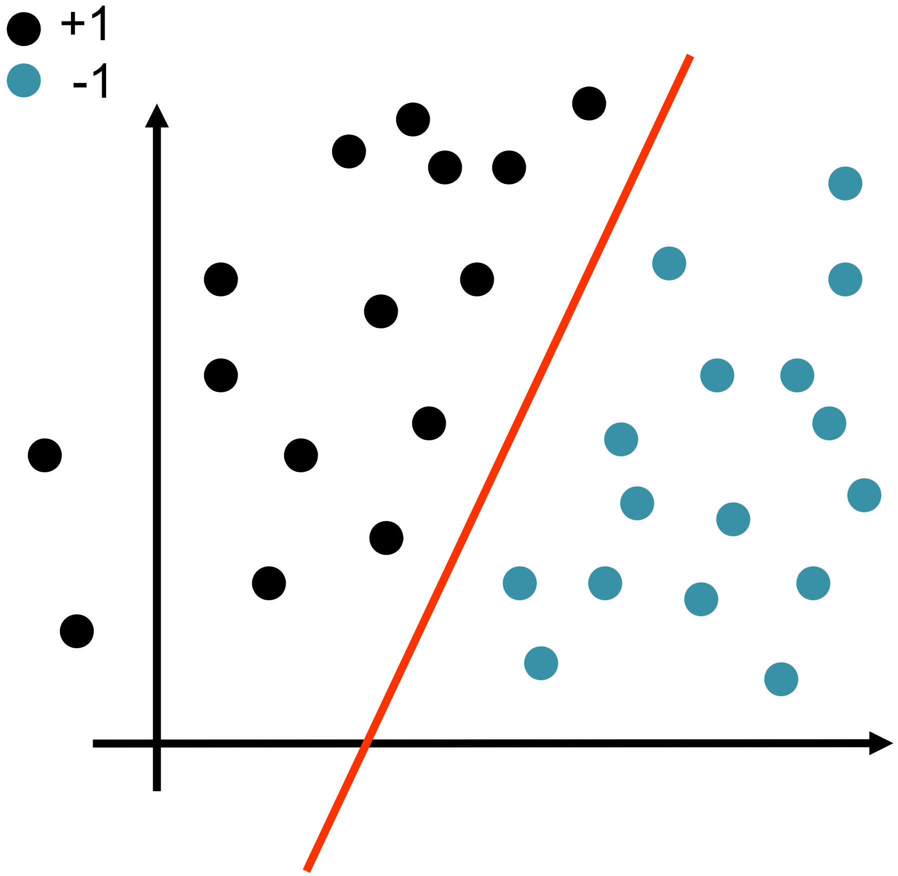


MÁQUINAS DE VECTORES DE SOPORTE

- Problemas linealmente separables
  - Dado un conjunto de ejemplos de entrenamiento,
  - Construir un hiperplano "w*x + b" como superficie de decisión de tal forma que la **separación de las dos clases sea máxima** (principio de generalización)
    - Margen de decisión lo más amplio posible
    - El entrenamiento busca encontrar w y b

Máquinas de Vectores de Soporte

- Problemas linealmente separables



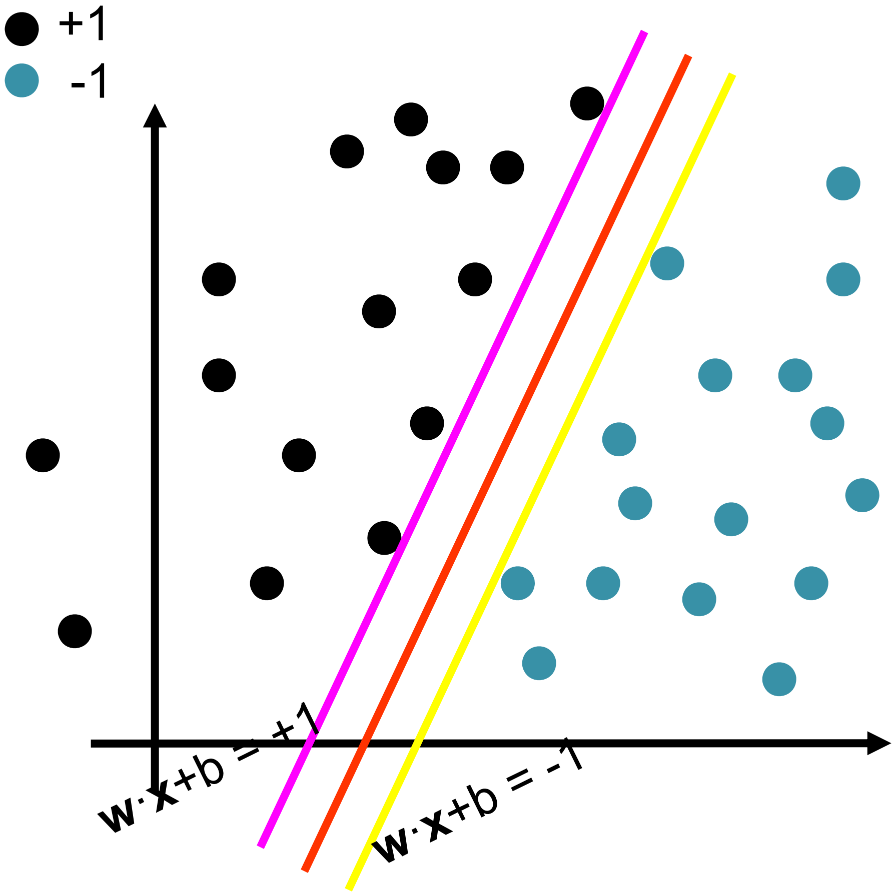
$$\mathbf{w^*x + b = 0}$$

$w^*x_i + b \geq 0$ para $y_i = +1$

$w^*x_i + b \leq 0$ para $y_i = -1$

Máquinas de Vectores de Soporte

- Problemas linealmente separables
  - Se definen los hiperplanos de los márgenes:



hiperplano "positivo": $\mathbf{w}\cdot\mathbf{x}+b = +1$

hiperplano "negativo": $\mathbf{w}\cdot\mathbf{x}+b = -1$

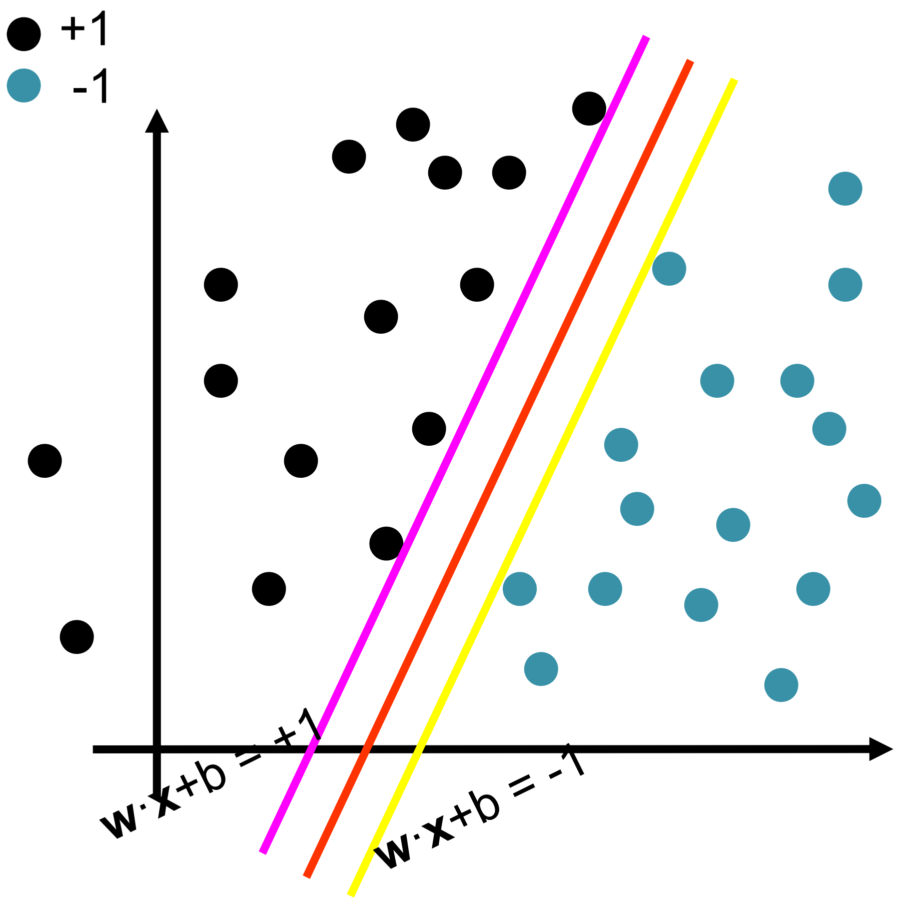
$\mathbf{w*x + b = 0}$

$w*x_i + b \geq 0 \quad \text{para } y_i = +1$

$w*x_i + b \leq 0 \quad \text{para } y_i = -1$

Máquinas de Vectores de Soporte

- Problemas linealmente separables
  - Se definen los hiperplanos de los márgenes:



hiperplano "positivo": **w**·**x**+b = +1

hiperplano "negativo": **w**·**x**+b = -1

w*x + b = 0

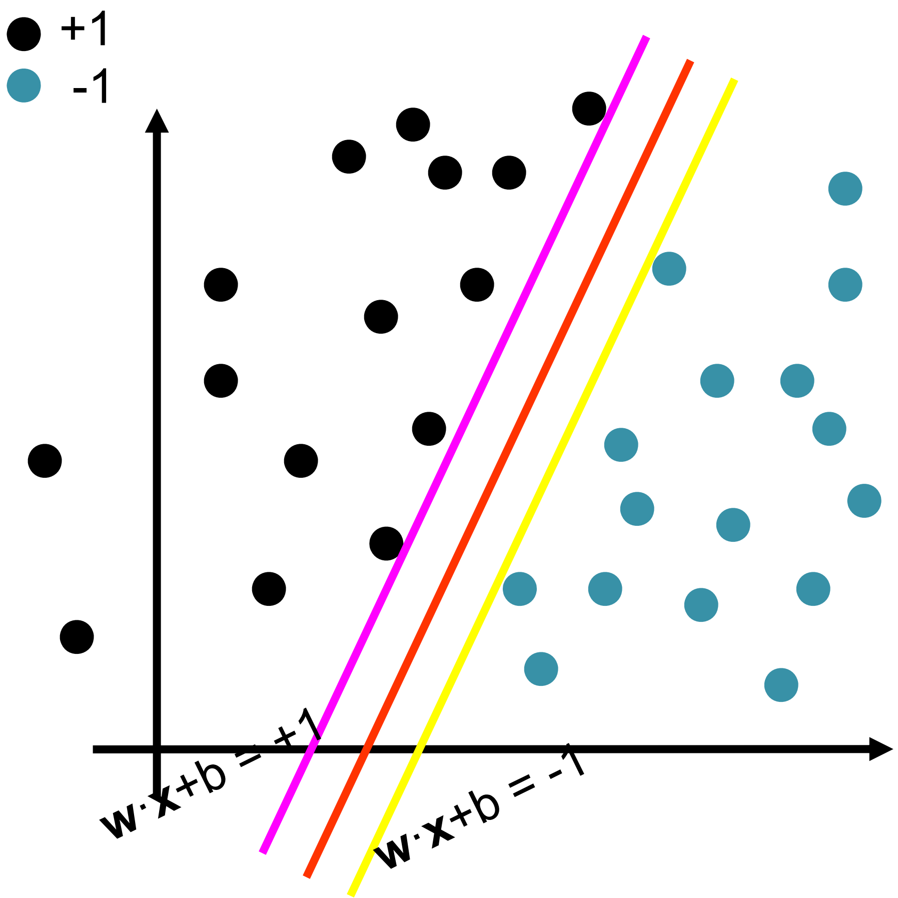
$w^*x_i + b \geq 0$ para $y_i = +1$

$w^*x_i + b \leq 0$ para $y_i = -1$

Se desea que dentro del margen no haya patrones:

Máquinas de Vectores de Soporte

- Problemas linealmente separables
  - Se definen los hiperplanos de los márgenes:



hiperplano "positivo": $\mathbf{w}\cdot\mathbf{x}+b = +1$

hiperplano "negativo": $\mathbf{w}\cdot\mathbf{x}+b = -1$

$\mathbf{w^*x + b = 0}$

$w^*x_i + b \geq 0 \quad$ para $y_i = +1$

$w^*x_i + b \leq 0 \quad$ para $y_i = -1$

Se desea que dentro del margen no haya patrones:

Todos los patrones ● cumplen: $\mathbf{w}\cdot\mathbf{x}+b \geq +1$

Todos los patrones ● cumplen: $\mathbf{w}\cdot\mathbf{x}+b \leq -1$

Máquinas de Vectores de Soporte

- Problemas linealmente separables
  - Si se trabaja con un conjunto de vectores (patrones) S, se dice que es linealmente separable si existe (w,b) tal que las inecuaciones

$$\begin{cases} (w \cdot x_i + b) \geq 1 & y_i=1 \quad \text{(casos positivos)} \\ (w \cdot x_i + b) \leq -1 & y_i=-1 \quad \text{(casos negativos)} \end{cases} \qquad i=1,\ldots,L$$

  - sean válidas para todos los elementos del conjunto S
    - Para el caso linealmente separable de S, se puede encontrar un **único hiperplano óptimo**, para el cual el margen entre los puntos de entrenamiento de dos diferentes clases es maximizado

Máquinas de Vectores de Soporte

- Problemas linealmente separables
  - Estas ecuaciones

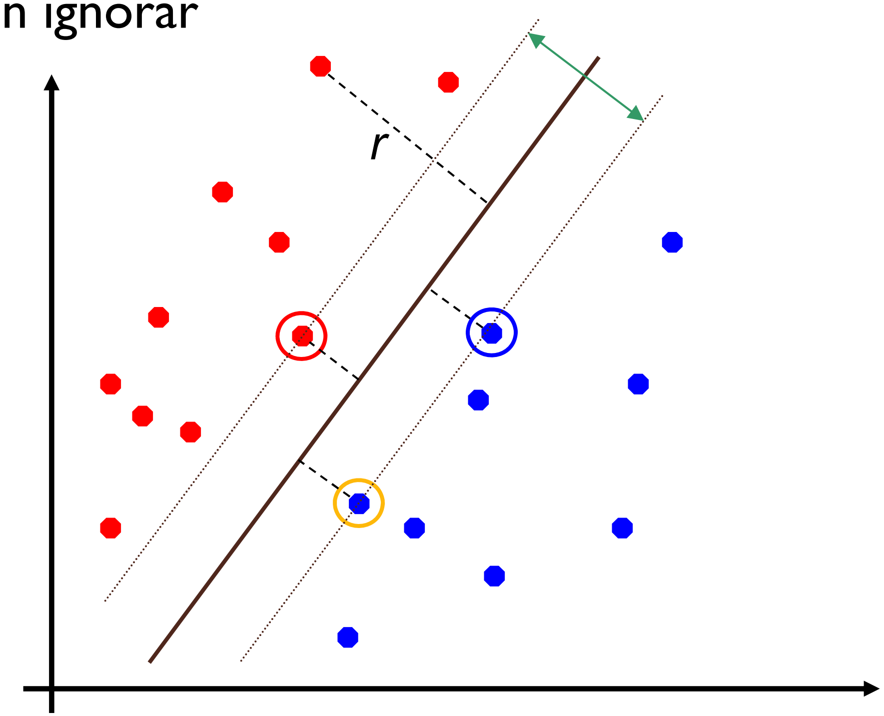
$$\begin{cases} (w \cdot x_i + b) \geq 1 & y_i=1 \\ (w \cdot x_i + b) \leq -1 & y_i=-1 \end{cases} \qquad i=1,\ldots,L$$

  - se pueden reformular a

$$y_i (w \cdot x_i + b) \geq 1 \qquad i=1,\ldots,L$$

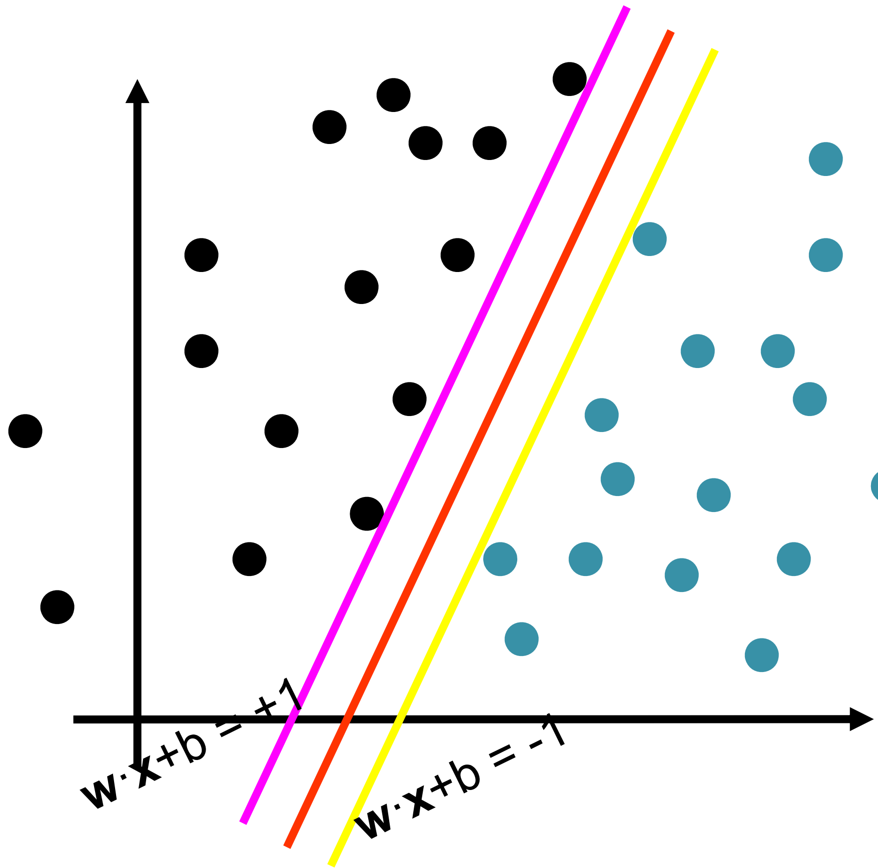
MÁQUINAS DE VECTORES DE SOPORTE

- Problemas linealmente separables
  - Los ejemplos más cercanos al hiperplano son los llamados vectores de soporte
    - Solo estos importan, el resto de ejemplos de entrenamiento se pueden ignorar



MÁQUINAS DE VECTORES DE SOPORTE

- Problemas linealmente separables
  - Función de decisión



$\mathbf{w^*x + b = 0}$

$w^*x_i + b \geq 0$ para $y_i = +1$

$w^*x_i + b \leq 0$ para $y_i = -1$

hiperplano "positivo": $\mathbf{w}\cdot\mathbf{x}+b = +1$
hiperplano "negativo": $\mathbf{w}\cdot\mathbf{x}+b = -1$

Todos los patrones ● cumplen:
$\mathbf{w}\cdot\mathbf{x}+b \geq +1$

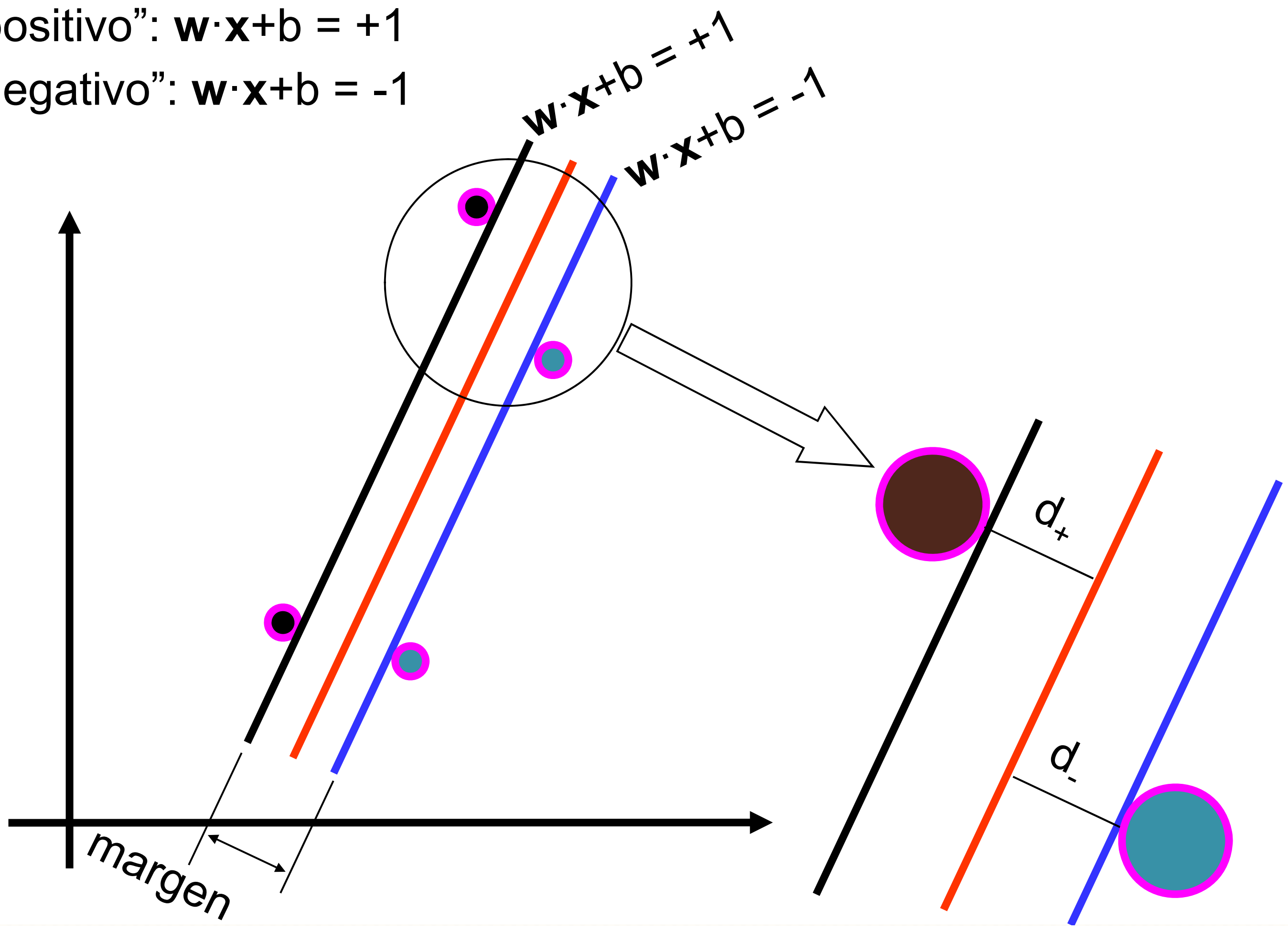
Todos los patrones ● cumplen:
$\mathbf{w}\cdot\mathbf{x}+b \leq -1$

Los vectores de soporte cumplen:
$\mathbf{w}\cdot\mathbf{x}+b = +1$
$\mathbf{w}\cdot\mathbf{x}+b = -1$

MÁQUINAS DE VECTORES DE SOPORTE

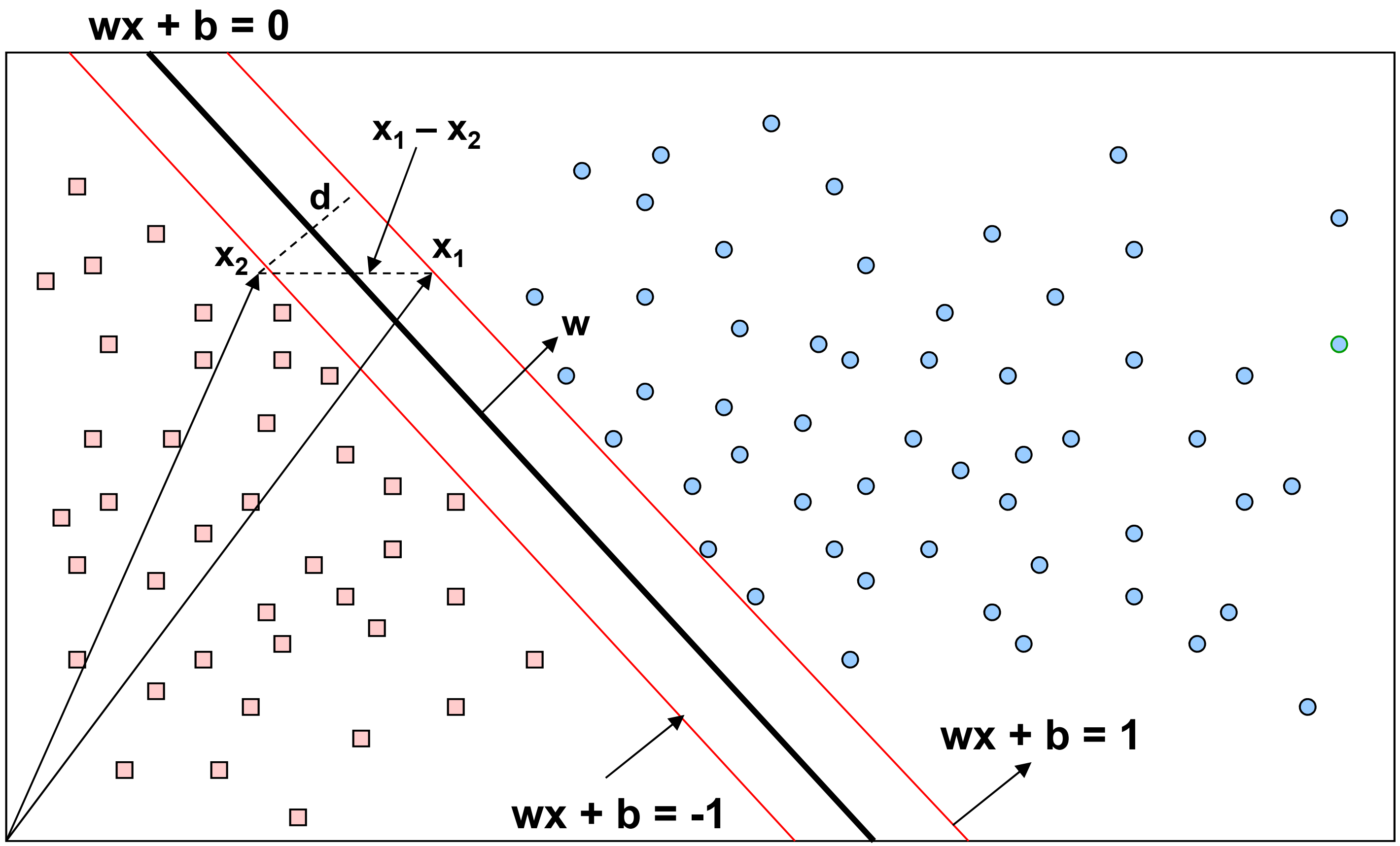
- Problemas linealmente separables

hiperplano “positivo”: $\mathbf{w}\cdot\mathbf{x}+b = +1$
hiperplano “negativo”: $\mathbf{w}\cdot\mathbf{x}+b = -1$



MÁQUINAS DE VECTORES DE SOPORTE

- Problemas linealmente separables
  - Maximizar el ancho del margen, **d**



Frontera de decisión y margen de SVM

Máquinas de Vectores de Soporte

- Problemas linealmente separables
  - Se desea hallar w y b tales que se maximice el margen
  - Sea el "margen" d la distancia entre los hiperplanos "positivo" y "negativo"
    - Se desea maximizar ese valor d
    - Para cada ejemplo de entrenamiento:

$$w^T x_i + b \leq -d/2 \qquad \text{si } y_i=-1$$

$$w^T x_i + b \geq d/2 \qquad \text{si } y_i=1$$

    - Es decir:

$$y_i\left(w^T x_i + b\right) \geq d/2$$

MÁQUINAS DE VECTORES DE SOPORTE

- Problemas linealmente separables
  - Para cada vector de soporte, la inecuación anterior es una igualdad

$y_i\left(w^T x_i + b\right) = d/2$ se puede transformar a la formulación anterior $y_i\left(w^T x_i + b\right) = 1$

reescalando w y b por d/2

- La distancia de un ejemplo x_i al plano separador es

$$r = \frac{\mathbf{w}^T \mathbf{x}_i + b}{\|\mathbf{w}\|}$$

- Un vector de soporte está en el límite del margen
  - Uniendo ambas ecuaciones: $r = \frac{y_i(\mathbf{w}^T \mathbf{x}_i + b)}{\|\mathbf{w}\|} = \frac{1}{\|\mathbf{w}\|}$
- Por lo tanto, el margen de separación a maximizar es:

$$d = 2r = \frac{2}{\|\mathbf{w}\|}$$

MÁQUINAS DE VECTORES DE SOPORTE

- Problemas linealmente separables
  - El margen es igual a: $2/\|\mathbf{w}\|$
  - La idea es encontrar un hiperplano con el máximo "margen"
    - Esto es un problema de optimización:

maximizar: $2/\|\mathbf{w}\|$ sujeto a: $y_i(w^T x_i + b) \geq 1$

que también se puede expresar como

minimizar: $\frac{1}{2}\|\mathbf{w}\|^2$ sujeto a: $y_i(w^T x_i + b) \geq 1$

- donde $\|\mathbf{w}\|^2$ es la norma euclídea de w
- Es decir, se necesita optimizar una función cuadrática sujeta a restricciones lineales
  - Una restricción por cada patrón

MÁQUINAS DE VECTORES DE SOPORTE

- Problemas linealmente separables
  - Los problemas de optimización cuadrática son una clase muy conocida de problemas matemáticos para los cuales existen varios algoritmos
  - Pero el problema se puede transformar para que sea más fácil de manejar:
    - Se asocian multiplicadores de Lagrange (α_i) a cada una de las inecuaciones del problema original
    - Se construye el problema dual:

$$L_P \equiv \frac{1}{2}\|\mathbf{w}\|^2 - \sum_{i=1}^{l} \alpha_i \left[y_i (\mathbf{w} \cdot \mathbf{x}_i + b) - 1 \right]$$

$$\alpha_i \geq 0 \quad para\ todo\ \alpha_i$$

- Se asocia un valor α_i a cada patrón x_i y a cada inecuación

MÁQUINAS DE VECTORES DE SOPORTE

- Problemas linealmente separables
  - Para construir el problema dual, se asocia un valor α_i a cada inecuación (y, por tanto, a cada patrón), para incluir las restricciones dentro de la expresión
    - Problema original:

minimizar: $\frac{1}{2}\|\mathbf{w}\|^2$ sujeto a: $y_i(w^T x_i + b) \geq 1$

    - Problema dual:

$$L_P \equiv \frac{1}{2}\|\mathbf{w}\|^2 - \sum_{i=1}^{l} \alpha_i [y_i(\mathbf{w}\cdot\mathbf{x}_i + b) - 1]$$

$$\alpha_i \geq 0 \quad para\ todo\ \alpha_i$$

    - Este problema debe de ser minimizado con respecto a w y b, y maximizado con respecto a α_i >= 0

Máquinas de Vectores de Soporte

- Problemas linealmente separables
  - Problema dual minimizado con respecto a w y b:
    - Se halla el gradiente de L_p con respecto a w y b y se iguala a 0

$$\frac{\partial L_P}{\partial b} = 0 \quad \Rightarrow \quad \sum_{i=1}^{l} \alpha_i y_i = 0$$

$$\frac{\partial L_P}{\partial w} = 0 \quad \Rightarrow \quad w = \sum_{i=1}^{l} \alpha_i y_i x_i$$

- Se sustituye esta expresión en la ecuación anterior:

$$L_P \equiv \tfrac{1}{2}\|\mathbf{w}\|^2 - \sum_{i=1}^{l} \alpha_i \left[y_i (\mathbf{w} \cdot \mathbf{x}_i + b) - 1 \right]$$

$$w = \sum_{i=1}^{l} \alpha_i y_i x_i$$

$$L_D = \sum_{i=1}^{l} \alpha_i - \frac{1}{2} \sum_{i=1}^{l} \sum_{j=1}^{l} \alpha_i \alpha_j y_i y_j \mathbf{x}_i^{T} \mathbf{x}_j$$

- que debe ser maximizada con respecto a α_i, con la restricción $\sum_{i=1}^{l} \alpha_i y_i = 0$

MÁQUINAS DE VECTORES DE SOPORTE

- Problemas linealmente separables
  - La forma para optimizar es, por tanto,

maximizar: $$L_D = \sum_{i=1}^{l} \alpha_i - \frac{1}{2} \sum_{i=1}^{l} \sum_{j=1}^{l} \alpha_i \alpha_j y_i y_j \mathbf{x}_i^T \mathbf{x}_j$$

sujeto a: $$\sum_{i=1}^{l} \alpha_i y_i = 0$$

$$\alpha_i \geq 0 \quad para\ todo\ \alpha_i$$

  - En esta expresión ya no aparecen w ni b, solamente los α_i
    - Uno para cada patrón

Máquinas de Vectores de Soporte

- Problemas linealmente separables
  - La forma para optimizar es, por tanto,

maximizar: $$L_D = \sum_{i=1}^{l} \alpha_i - \frac{1}{2} \sum_{i=1}^{l} \sum_{j=1}^{l} \alpha_i \alpha_j y_i y_j \mathbf{x}_i^T \mathbf{x}_j$$

sujeto a: $$\sum_{i=1}^{l} \alpha_i y_i = 0$$

$$\alpha_i \geq 0 \quad para\ todo\ \alpha_i$$

  - Esta optimización se puede resolver mediante técnicas de programación cuadrática (PQ) (Bertsekas 1995)

MÁQUINAS DE VECTORES DE SOPORTE

- Problemas linealmente separables
  - Dada una solución α a ese problema, la solución al problema "primario" sería, para w:

$$w = \sum_{i=1}^{l} \alpha_i y_i \mathbf{x}_i$$

- Expresión anterior
- Suma para cada patrón
- Cada α_i distinto de 0 indica que el correspondiente x_i es un **vector de soporte**
  - Si α_i es 0, ese vector x_i no influye en el cálculo de w (producto por 0)

MÁQUINAS DE VECTORES DE SOPORTE

- Problemas linealmente separables
  - Dada una solución α a ese problema, la solución al problema "primario" sería, para b:
    - Un vector de soporte cumple

$$y_k(w^T x_k + b) = 1$$

    - Entonces el parámetro b se calcula:

$$y_k(w^T x_k + b) = 1 \Rightarrow w^T x_k + b = 1/y_k = y_k \Rightarrow b = y_k - w^T x_k$$

para cualquier vector de soporte $\alpha_k > 0$

      - Para cualquiera va a dar el mismo valor
        - En la práctica, el valor de b se promedia para evitar problemas de redondeo:

$$b = \frac{1}{N_{VS}} \sum_{i=1}^{N_{VS}} (y_i - w^T x_i)$$

para cada vector de soporte
N_{VS}: número de vectores de soporte

Máquinas de Vectores de Soporte

- Problemas linealmente separables
  - Por tanto, la solución es:

$$w = \sum_{i=1}^{l} \alpha_i y_i \mathbf{x}_i \qquad b = y_k - w^T x_k$$

$$b = y_k - \sum_{i=1}^{l} \alpha_i y_i x_i^T x_k$$

para cualquier $\alpha_k > 0$

  - De esta manera, la función de clasificación es:

$$f(x) = \sum_{i=1}^{l} \alpha_i y_i \boxed{x_i^T x} + b$$

    - No se necesita calcular los w
    - En esta función se realiza el producto escalar entre el punto a clasificar y cada uno los vectores de soporte
      - Los patrones que no son vectores de soporte tienen $\alpha_i = 0$

MÁQUINAS DE VECTORES DE SOPORTE

- Problemas linealmente separables
  - Además, si los $\alpha_i \geq 0$, se pueden aplicar las condiciones de Karush Kuhn Tucker para convertir las desigualdades:

$$y_i(w^T x_i + b) \geq 1$$

    en varias ecuaciones de igualdad para cada ejemplo x_i:

$$\alpha_i(y_i(w^T x_i + b) - 1) = 0$$

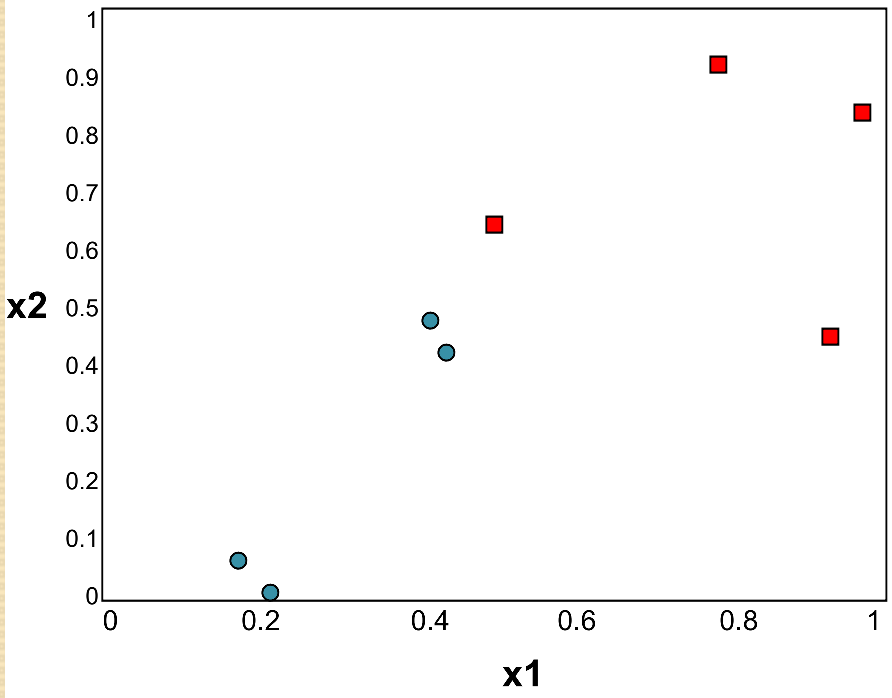
  - Todos los ejemplos donde los $\alpha_i > 0$ son los vectores de soporte
    - Si $\alpha_i \neq 0$, entonces

$$y_i(w^T x_i + b) - 1 = 0 \Rightarrow y_i(w^T x_i + b) = 1$$

y, por lo tanto, x_i está en el límite del margen de decisión

MÁQUINAS DE VECTORES DE SOPORTE

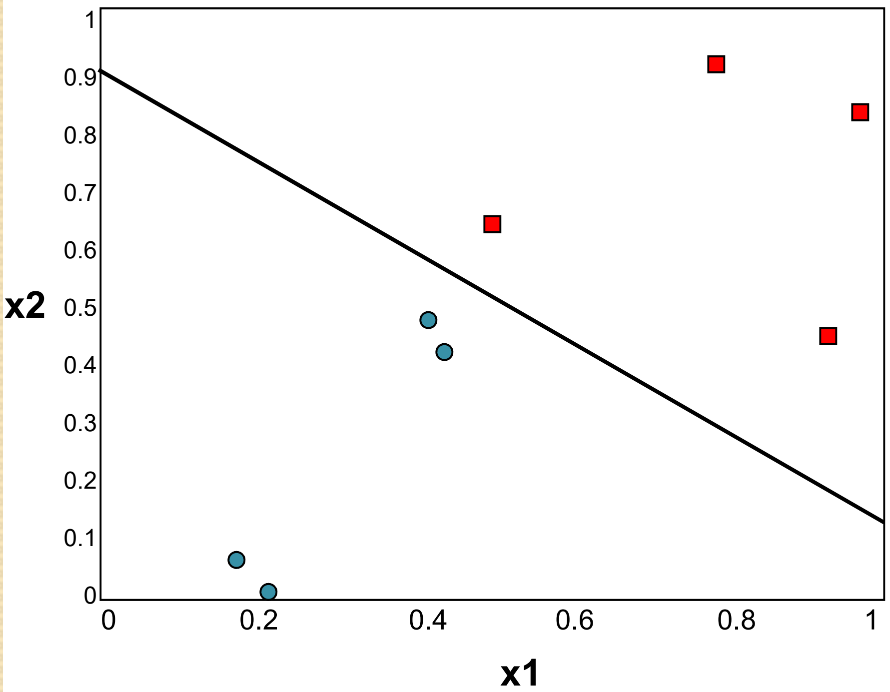
- Problemas linealmente separables: Ejemplo:



X1	X2	Y
0.3858	0.4687	1
0.4871	0.611	-1
0.9218	0.4103	-1
0.7382	0.8936	-1
0.1763	0.0579	1
0.4057	0.3529	1
0.9355	0.8132	-1
0.2146	0.0099	1

MÁQUINAS DE VECTORES DE SOPORTE

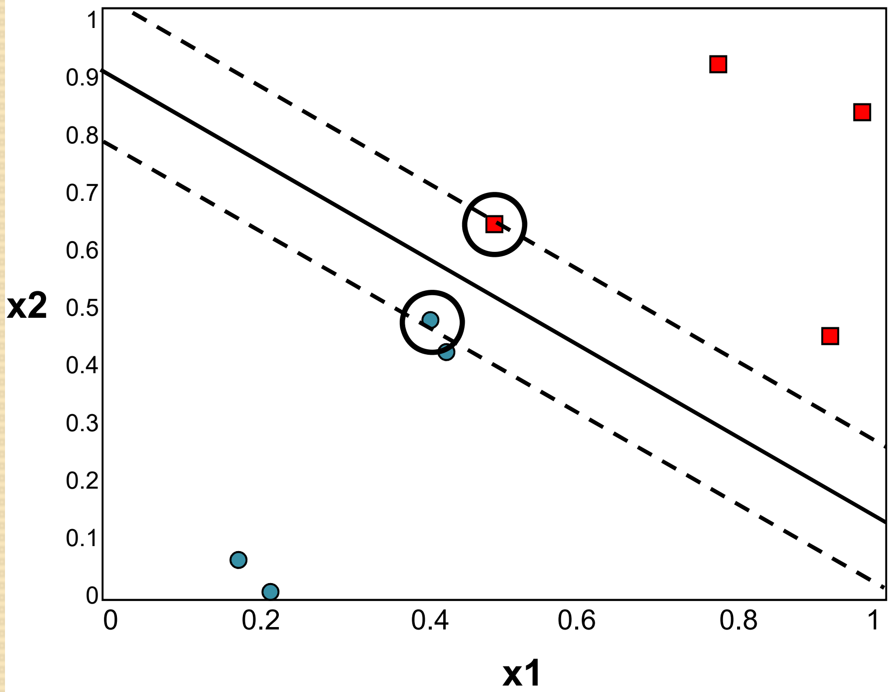
- Problemas linealmente separables: Ejemplo:



X1	X2	Y	α_i
0.3858	0.4687	1	65.5261
0.4871	0.611	-1	65.5261
0.9218	0.4103	-1	0
0.7382	0.8936	-1	0
0.1763	0.0579	1	0
0.4057	0.3529	1	0
0.9355	0.8132	-1	0
0.2146	0.0099	1	0

MÁQUINAS DE VECTORES DE SOPORTE

- Problemas linealmente separables: Ejemplo:



X1	X2	Y	α_i
0.3858	**0.4687**	**1**	65.5261
0.4871	**0.611**	**-1**	65.5261
0.9218	0.4103	-1	0
0.7382	0.8936	-1	0
0.1763	0.0579	1	0
0.4057	0.3529	1	0
0.9355	0.8132	-1	0
0.2146	0.0099	1	0

MÁQUINAS DE VECTORES DE SOPORTE

- Problemas linealmente separables: Ejemplo:
  - Solución:
    - Cálculo de w:

$$w = \sum_{i=1}^{l} \alpha_i y_i \mathbf{x}_i = 65.5621 * 1 * \begin{bmatrix} 0.3858 \\ 0.4687 \end{bmatrix} + 65.5621 * (-1) * \begin{bmatrix} 0.4871 \\ 0.611 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -6.64 \\ -9.32 \end{bmatrix}$$

    - Cálculo de b:
      - Con el primer patrón:

$$b = y_k - w^T x_k = 1 - \begin{bmatrix} -6.64 & -9.32 \end{bmatrix} * \begin{bmatrix} 0.3858 \\ 0.4687 \end{bmatrix} = 1 - (-6.929996) = 7.929996$$

      - Con el segundo patrón:

$$b = y_k - w^T x_k = -1 - \begin{bmatrix} -6.64 & -9.32 \end{bmatrix} * \begin{bmatrix} 0.4871 \\ 0.611 \end{bmatrix} = -1 - (-8.928862) = 7.928864$$

      - Se promedian ambos valores: b = 7.929

MÁQUINAS DE VECTORES DE SOPORTE

- Problemas linealmente separables: Ejemplo:
  - Para clasificar un nuevo patrón x:

$$f(x) = w \cdot x + b$$

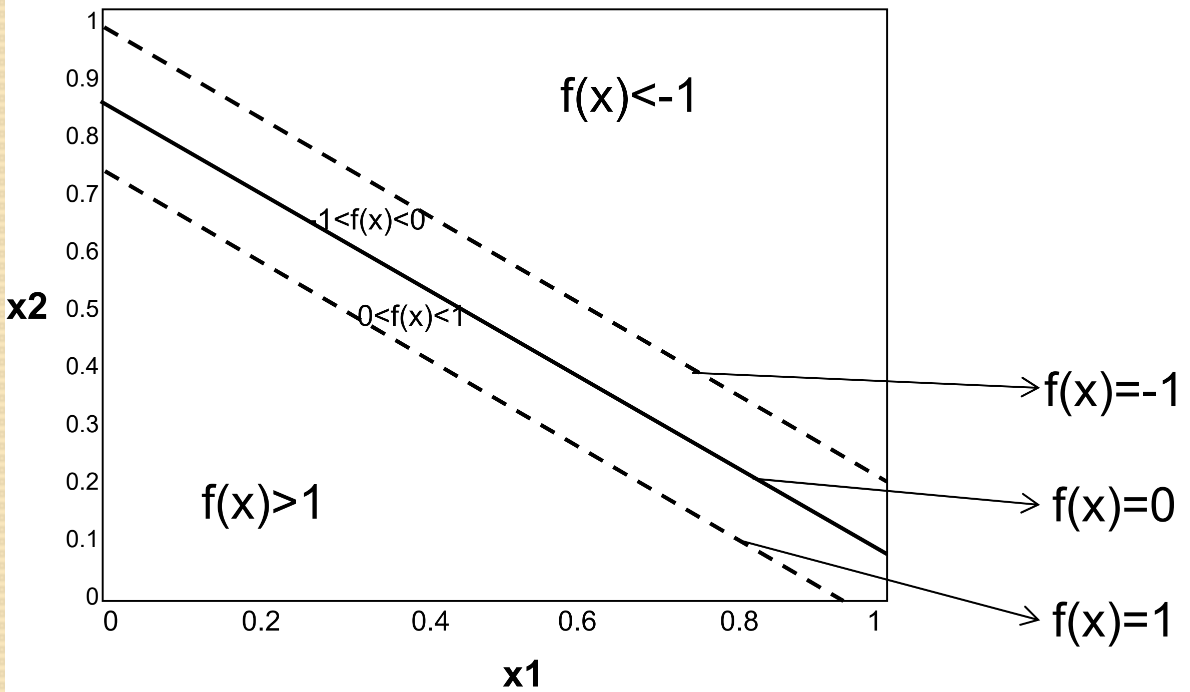
o bien

$$f(x) = \sum_{i=1}^{l} \alpha_i y_i x_i^T x + b$$

- Clasificación:
  - Si f(x)>0 ⇨ 1
  - Si f(x)<0 ⇨ -1
  - f(x) da un nivel de **confianza** sobre la pertenencia de ese patrón a una de las clases
    - Cuanto mayor es su valor absoluto, más confianza
      - Más alejado de la región de separación

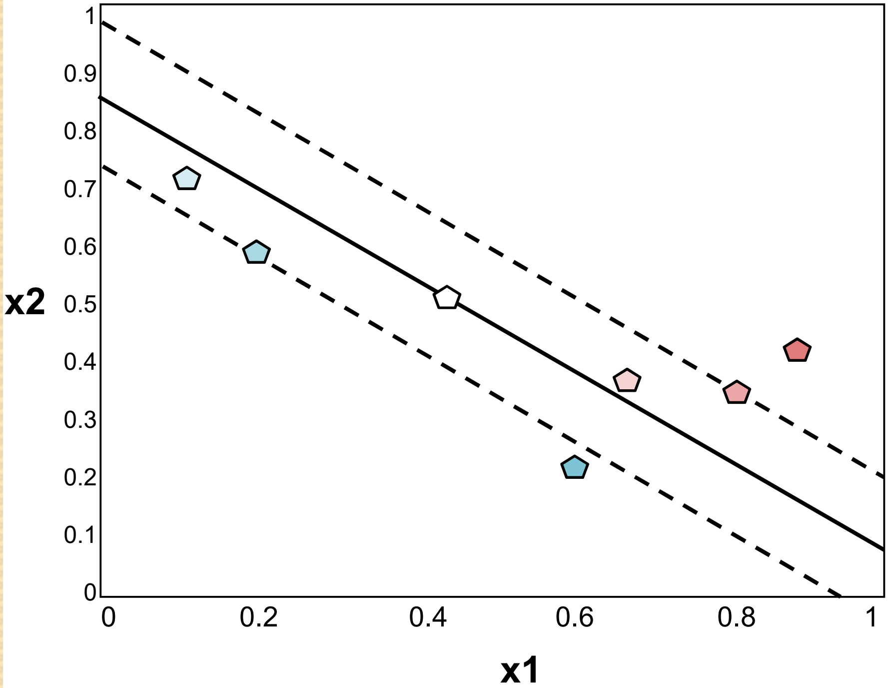
MÁQUINAS DE VECTORES DE SOPORTE

- Problemas linealmente separables: Ejemplo:
  - Para clasificar un nuevo patrón x:



Máquinas de Vectores de Soporte

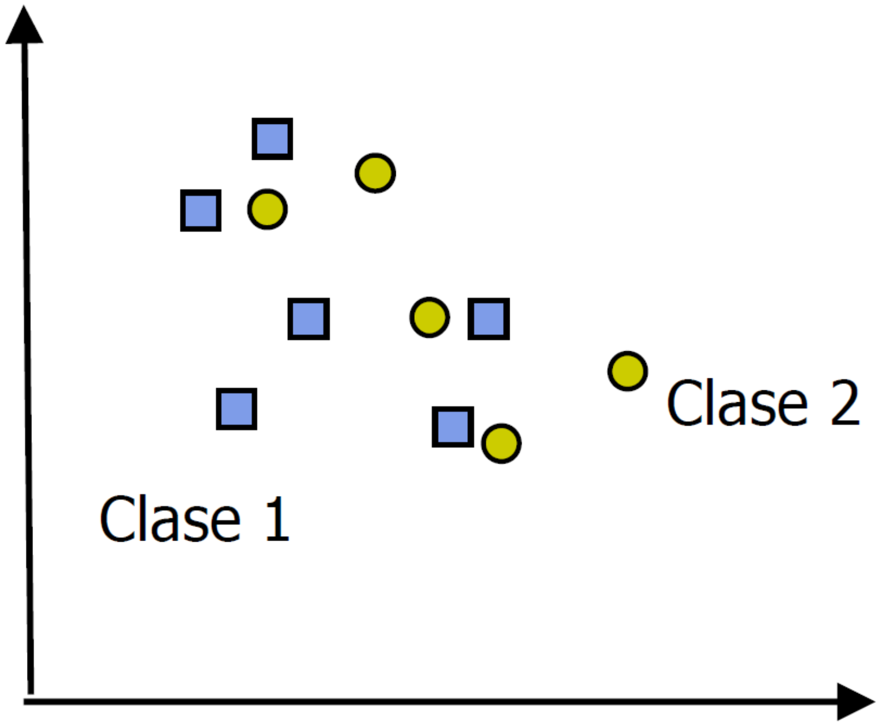
- Problemas linealmente separables: Ejemplo:
  - Para clasificar un nuevo patrón x:
    - Ejemplos:



	X1	X2	f(x)
	0,4	0,5658	0
	0,15	0,7042	0,37
	0.2	0.601	1
	0,6	0,2623	1,5
	0.65	0.4091	-0.2
	0.8	0.3881	-1
	0.9	0.4563	-2.3

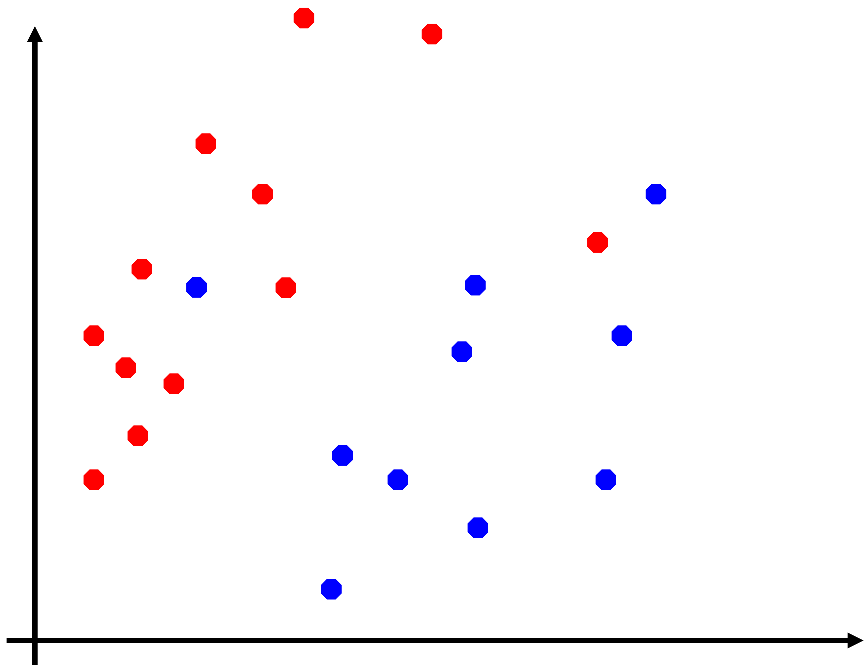
MÁQUINAS DE VECTORES DE SOPORTE

- Problemas no linealmente separables
  - Si el conjunto S no es linealmente separable, se debe permitir alguna violación a la clasificación en la formulación



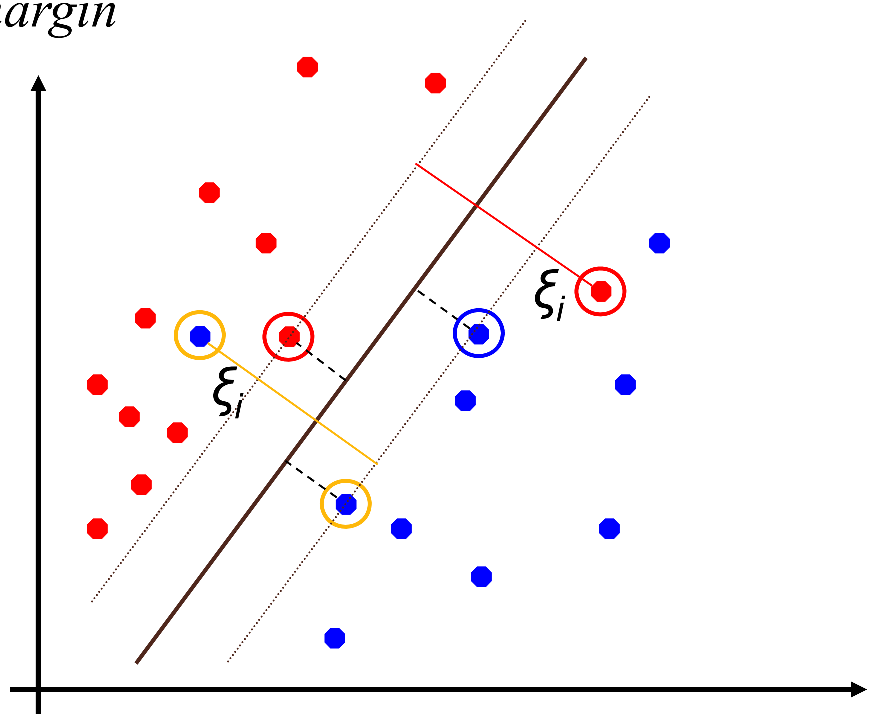
MÁQUINAS DE VECTORES DE SOPORTE

- Problemas no linealmente separables



MÁQUINAS DE VECTORES DE SOPORTE

- Problemas no linealmente separables
  - En estos casos se añaden unas variables especiales ξ_i para permitir instancias incorrectamente clasificadas
    - Por ser difíciles de clasificar, o tener ruido
    - *Soft margin*



MÁQUINAS DE VECTORES DE SOPORTE

- Problemas no linealmente separables
  - La función de coste anterior:

    Encontrar w y b tal que

    minimizar: $\frac{1}{2}\|\mathbf{w}\|^2$ sujeto a: $y_i(w^T x_i + b) \geq 1$

    cambiaría a:

    Encontrar w y b tal que

    minimizar: $\frac{1}{2}\|\mathbf{w}\|^2 + C\sum_{i=1}^{l}\xi_i$ sujeto a: $y_i(w^T x_i + b) \geq 1 - \xi_i \quad \xi_i \geq 0$

    - El parámetro C puede verse como una forma de controlar el sobreajuste:
      - Es un compromiso entre la importancia relativa de maximizar el margen y ajustar los datos de entrenamiento

MÁQUINAS DE VECTORES DE SOPORTE

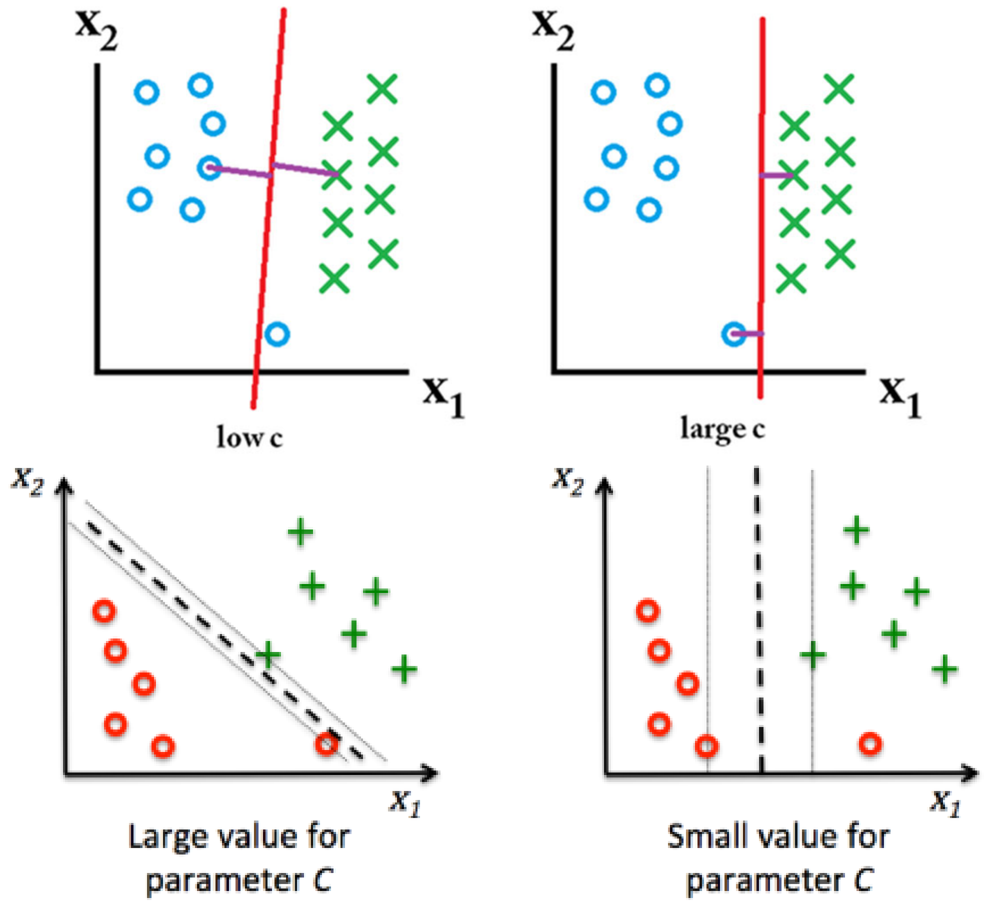
- Problemas no linealmente separables

  minimizar: $\frac{1}{2}\|\mathbf{w}\|^2 + C\sum_{i=1}^{l}\xi_i$

  - El parámetro C:
    - Valores altos:
      - Se da más importancia a minimizar los errores $C\sum_{i=1}^{l}\xi_i$ y menos a maximizar el margen $\frac{1}{2}\|\mathbf{w}\|^2$
        - Es decir, que los errores en la clasificación sean los mínimos
        - Márgenes más estrechos
      - Mayor precisión en la clasificación ➡ Posible sobreentrenamiento
    - Valores bajos:
      - Se da menos importancia a minimizar los errores $C\sum_{i=1}^{l}\xi_i$ y más a maximizar el margen $\frac{1}{2}\|\mathbf{w}\|^2$
      - Buscar márgenes más amplios, permitir algunos errores en la clasificación ➡ menos sobreentrenamiento, más generalización

MÁQUINAS DE VECTORES DE SOPORTE

- Problemas no linealmente separables
  - El parámetro C:



Máquinas de Vectores de Soporte

- Problemas no linealmente separables
  - Función de coste:

minimizar: $\underbrace{\frac{1}{2}\|\mathbf{w}\|^2}_{\text{Inverso del margen}} + \underbrace{C\sum_{i=1}^{l}\xi_i}_{\text{Pérdida (\textit{loss})}}$ sujeto a: $y_i(w^T x_i + b) \ge 1-\xi_i \quad \xi_i \ge 0$

- Las SVM también usan regularización L2
  - C es como λ en Regresión Logística, pero con efecto inverso:
    - Cuanto mayor es C, menor es la regularización

MÁQUINAS DE VECTORES DE SOPORTE

- Problemas no linealmente separables
  - Igual que antes, se construye el problema dual asociando multiplicadores de Lagrange α_i, β_i:
    - Problema original:

minimizar: $\frac{1}{2}\|\mathbf{w}\|^2 + C\sum_{i=1}^{l}\xi_i$ sujeto a: $y_i(w^T x_i + b) \geq 1 - \xi_i$ $\xi_i \geq 0$

    - Problema dual:

$$L_P \equiv \frac{1}{2}\|\mathbf{w}\|^2 - C\sum_{i=1}^{l}\xi_i - \sum_{i=1}^{l}\alpha_i\left[y_i(\mathbf{w}\cdot\mathbf{x}_i + b) - 1 + \xi_i\right] - \sum_{i=1}^{l}\beta_i\xi_i$$

    - Este problema debe de ser minimizado con respecto a w, b y ξ, y maximizado con respecto a α_i y β_i

MÁQUINAS DE VECTORES DE SOPORTE

- Problemas no linealmente separables
  - Problema dual minimizado con respecto a w, b y ξ:
    - Se halla el gradiente de L_P con respecto a w y b y se iguala a 0

$$\frac{\partial L_P}{\partial b} = 0 \Rightarrow \sum_{i=1}^{l} \alpha_i y_i = 0 \qquad \frac{\partial L_P}{\partial w} = 0 \Rightarrow w = \sum_{i=1}^{l} \alpha_i y_i x_i$$

      - Iguales al caso lineal

$$\frac{\partial L_P}{\partial \xi} = 0 \Rightarrow \alpha_i + \beta_i = C$$

    - Sustituyendo en la ecuación anterior:

$$L_D = \sum_{i=1}^{l} \alpha_i - \frac{1}{2} \sum_{i=1}^{l} \sum_{j=1}^{l} \alpha_i \alpha_j y_i y_j \mathbf{x}_i^T \mathbf{x}_j$$

    - que debe ser maximizada con respecto a α_i, con la restricción $\sum_{i=1}^{l} \alpha_i y_i = 0$

MÁQUINAS DE VECTORES DE SOPORTE

- Problemas no linealmente separables
  - El problema dual se transformaría en

Encontrar $\alpha_1 \ldots \alpha_N$ tal que

maximicen: $\sum_{i=1}^{L} \alpha_i - \frac{1}{2} \sum_{i=1}^{L} \sum_{j=1}^{L} \alpha_i \alpha_j y_i y_j x_i^T x_j$ idéntica a la anterior

sujeto a : $\sum_{i=1}^{L} y_i \alpha_i = 0$

$0 < \alpha_i < C$ i = 1, …, L

- Mismas técnicas para hallar los α_i
- Nuevamente, los patrones x_i con α_i distintos de cero serán vectores de soporte

MÁQUINAS DE VECTORES DE SOPORTE

- Problemas no linealmente separables
  - Una vez hallados los α, la solución sería similar:
    - w:

$$w = \sum_{i=1}^{l} \alpha_i y_i \mathbf{x}_i$$

    - b: para cualquier vector de soporte ($\alpha_k > 0$):

$$y_k(w^T x_k + b) = 1 - \xi_k \Rightarrow w^T x_k + b = \frac{1-\xi_k}{y_k} = y_k(1-\xi_k) \Rightarrow$$

$$\Rightarrow b = y_k(1-\xi_k) - w^T x_k \qquad b = y_k(1-\xi_k) - \sum_{i=1}^{l} \alpha_i y_i x_i^T x_k$$

  - Igual que antes, no es necesario calcular w para realizar la clasificación:

$$f(x) = \sum_{i=1}^{l} \alpha_i y_i x_i^T x + b$$

Máquinas de Vectores de Soporte

- Problemas no linealmente separables
  - Nuevamente, si los $\alpha_i \geq 0$, se puede aplicar el teorema de Kuhn-Tucker para convertir las desigualdades:

    $$y_i(w^T x_i + b) \geq 1 - \xi_i$$

    en varias ecuaciones de igualdad para cada ejemplo i:

    $$\alpha_i(y_i(w^T x_i + b) - 1 + \xi_i) = 0 \qquad (C - \alpha_i)\xi_i = 0$$

  - Todos los x_i donde los $\alpha_i > 0$ son los vectores de soporte
    - Si $\alpha_i \neq 0$, entonces

      $$y_i(w^T x_i + b) - 1 + \xi_i = 0 \;\Rightarrow\; y_i(w^T x_i + b) = 1 - \xi_i$$

      y, por lo tanto, x_i podría estar en el límite del margen de decisión
      - Si $\xi_i > 0$, x_i no está en el límite del margen, pero es vector de soporte

Máquinas de Vectores de Soporte

- Problemas no linealmente separables
  - Los puntos x_i con α_i >0 son los vectores de soporte.
    - Los que tocan y definen los límites del margen
  - Los vectores soporte son los elementos críticos del conjunto de entrenamiento y estos son los más cercanos a la cota de decisión.
  - En un caso no separable hay dos tipos:
    - 0< α_i <C:
      - Dado que $(C-\alpha_i)\xi_i = 0$ y $\alpha_i < C$, se deduce que $\xi_i = 0$
      - En este caso, el vector de soporte x_i satisface las igualdades

$$y_i(w \cdot x_i + b) = 1 \qquad \xi_i = 0$$

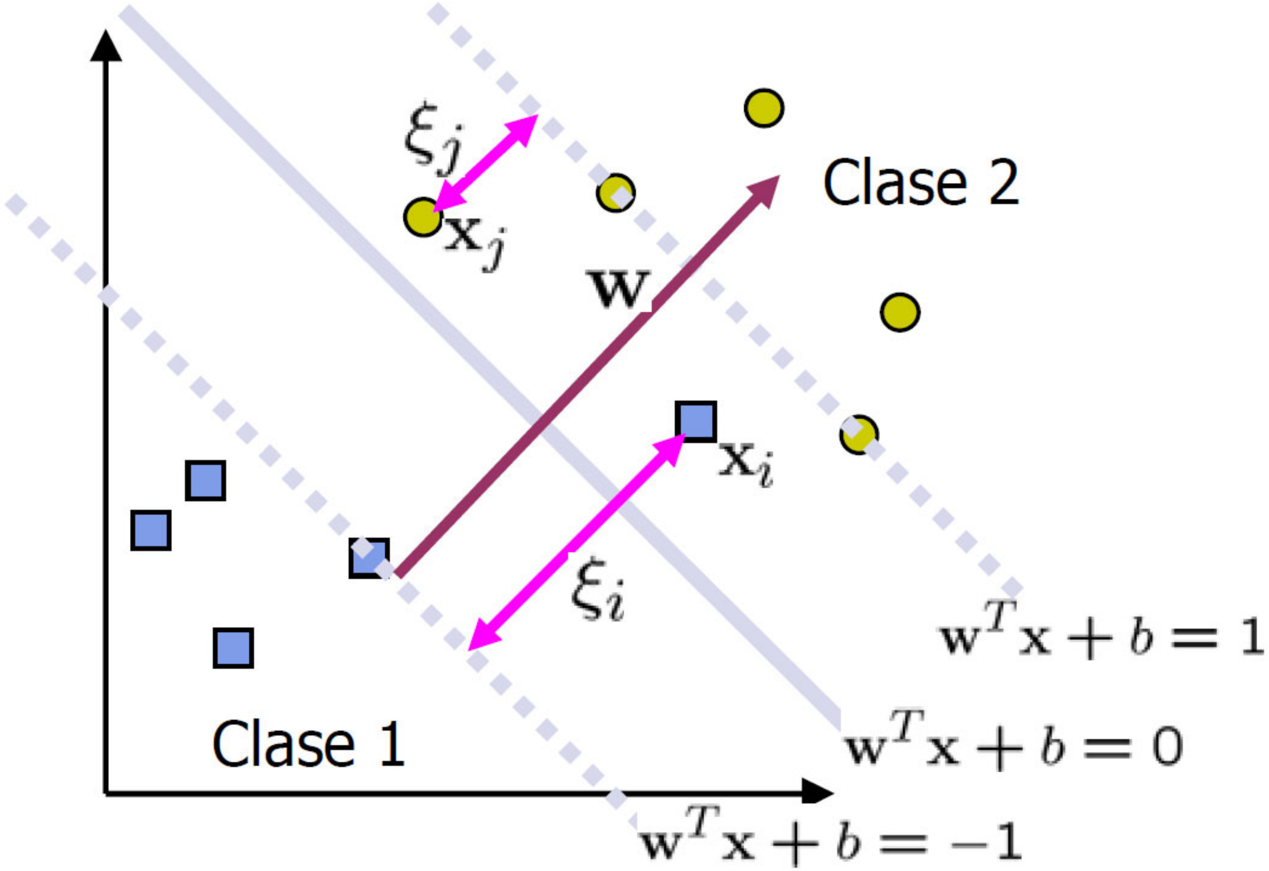
      - El vector de soporte está en el límite del margen

MÁQUINAS DE VECTORES DE SOPORTE

- Problemas no linealmente separables
  - Los puntos x_i con α_i >0 son los vectores de soporte.
    - Los que tocan y definen los límites del margen
  - Los vectores soporte son los elementos críticos del conjunto de entrenamiento y estos son los más cercanos a la cota de decisión.
  - En un caso no separable hay dos tipos:
    - α_i =C
      - En este caso $\xi_i \neq 0$
      - Por lo tanto, el correspondiente x_i no satisface $y_i(w^T x_i + b) = 1$
      - Pero sí satisface $y_i(w^T x_i + b) = 1 - \xi_i$
      - Es decir, es un error de clasificación
      - Pero si se le suma el valor de error ξ_i, se "desplaza" este x_i al límite del margen

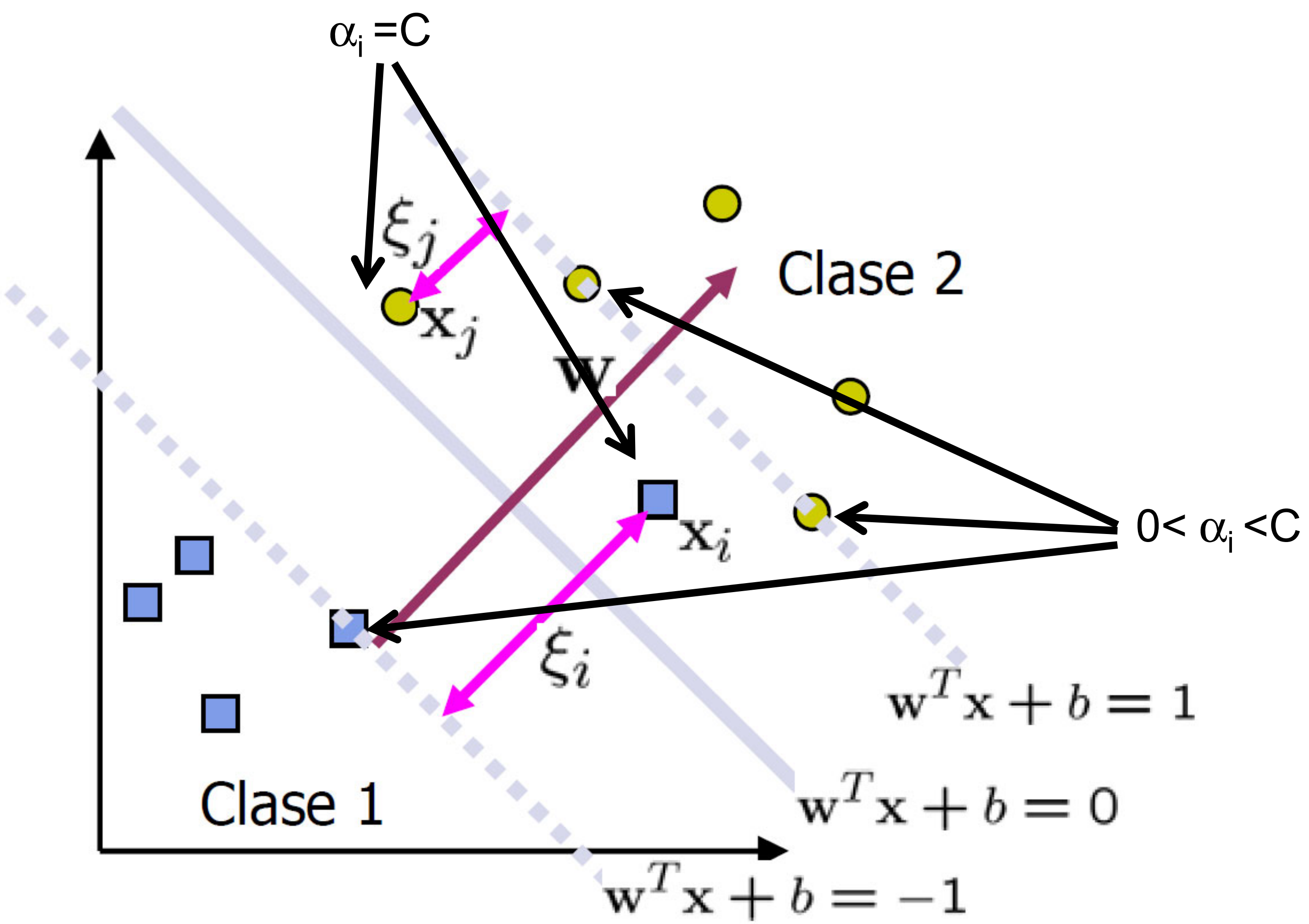
Máquinas de Vectores de Soporte

- Problemas no linealmente separables



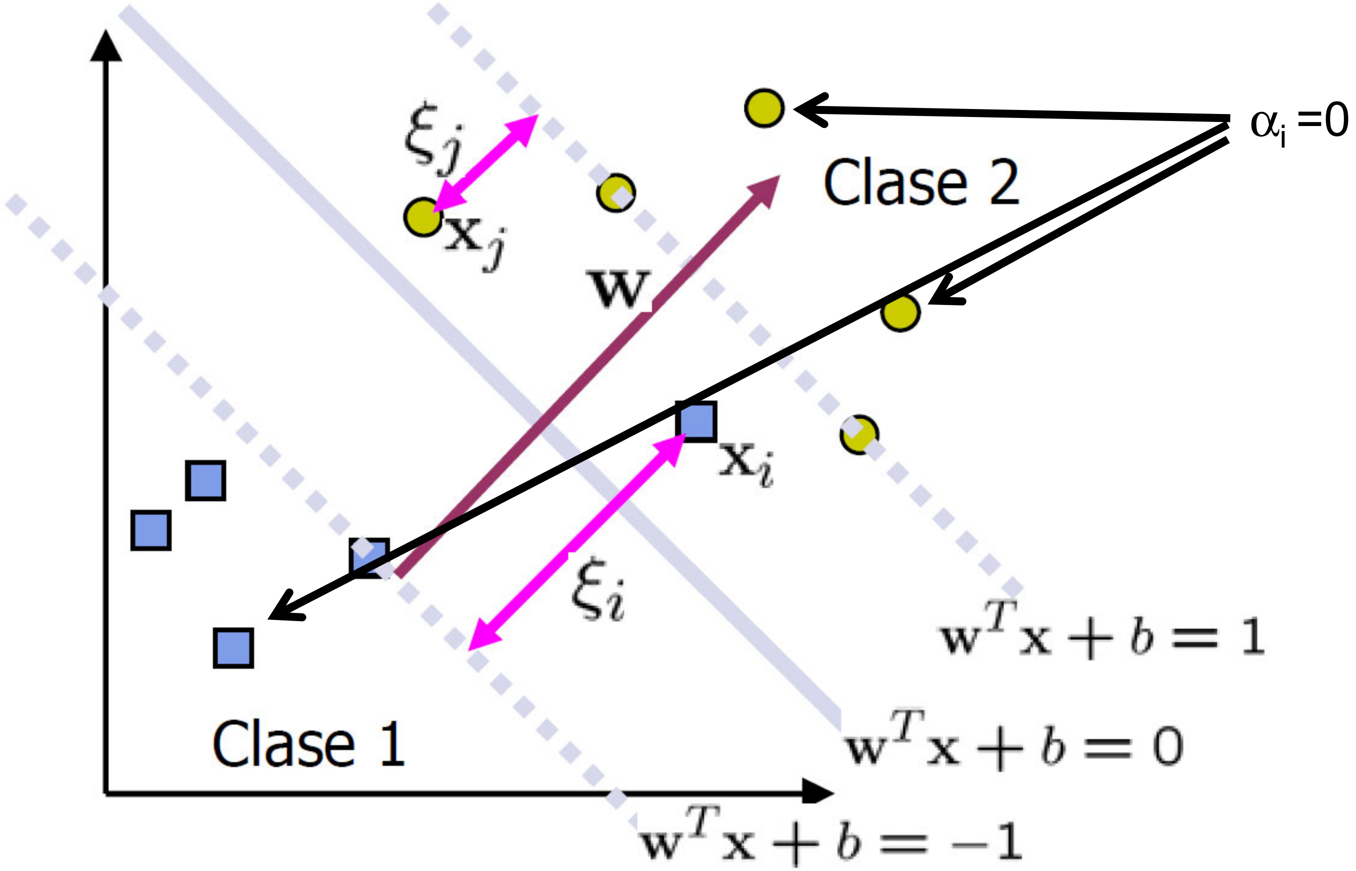
Máquinas de Vectores de Soporte

- Problemas no linealmente separables



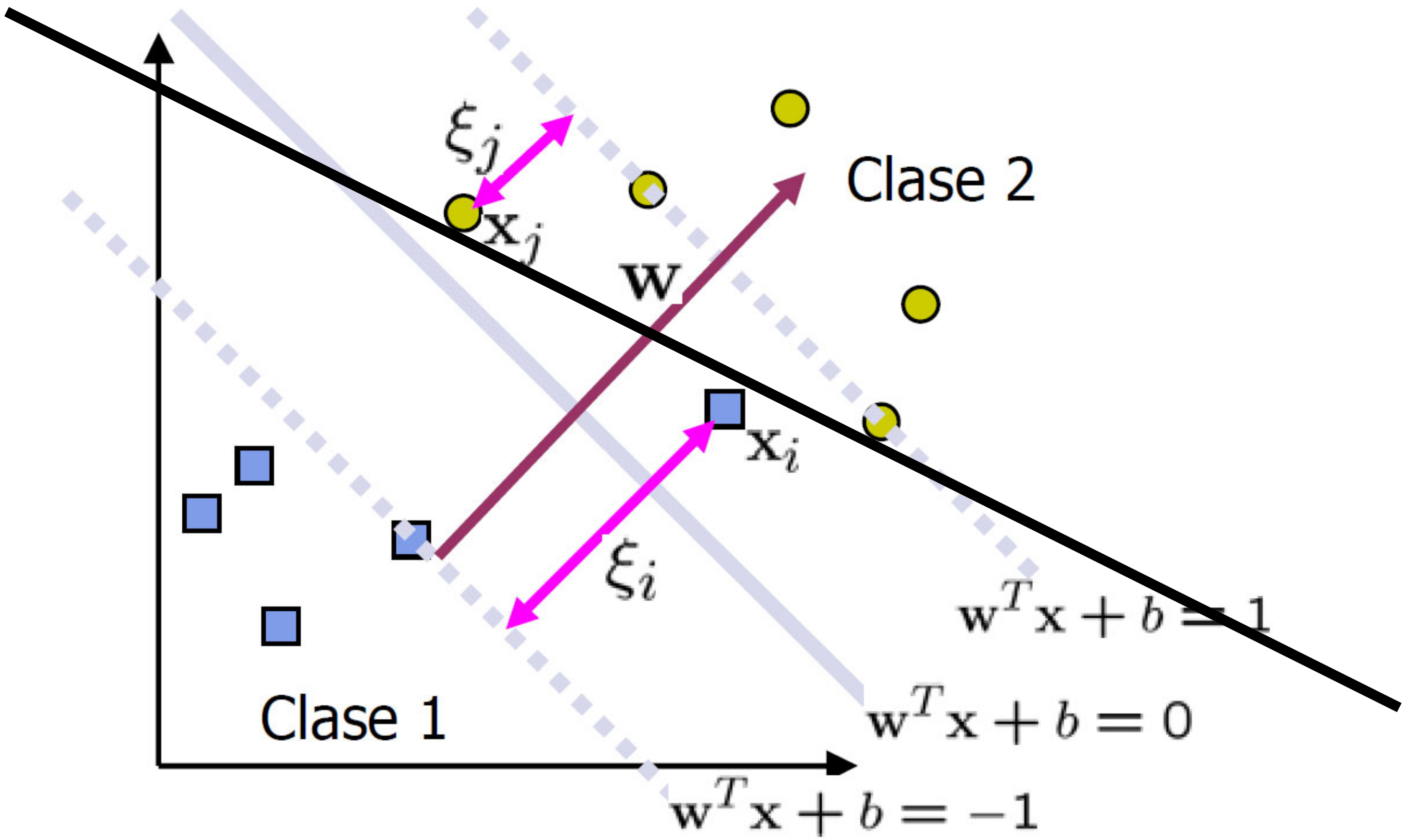
MÁQUINAS DE VECTORES DE SOPORTE

- Problemas no linealmente separables
  - Además, el caso α_i=0 se corresponde con puntos que están claramente alejados del margen de decisión:



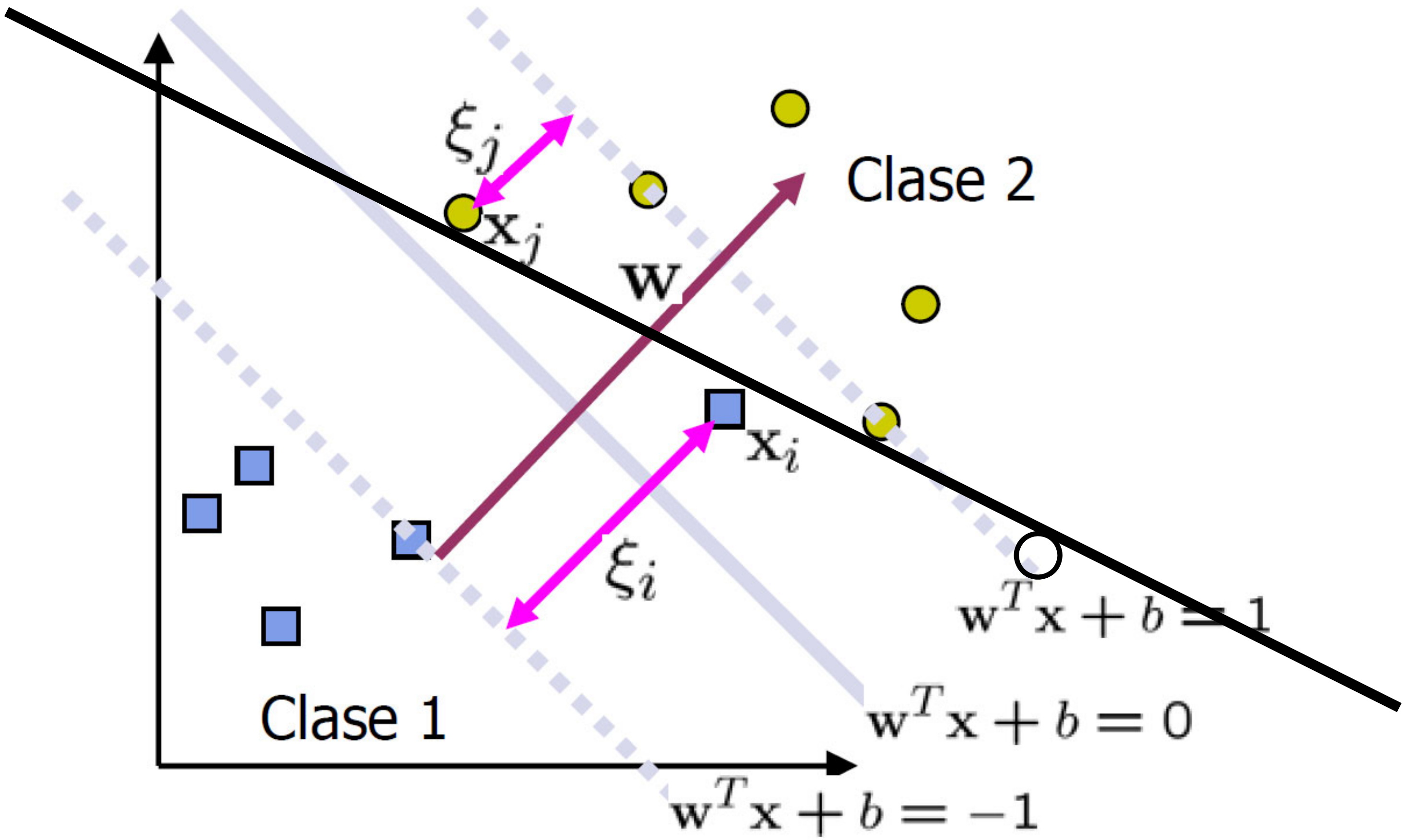
MÁQUINAS DE VECTORES DE SOPORTE

- Problemas linealmente y no linealmente separables
  - Este problema es linealmente separable:



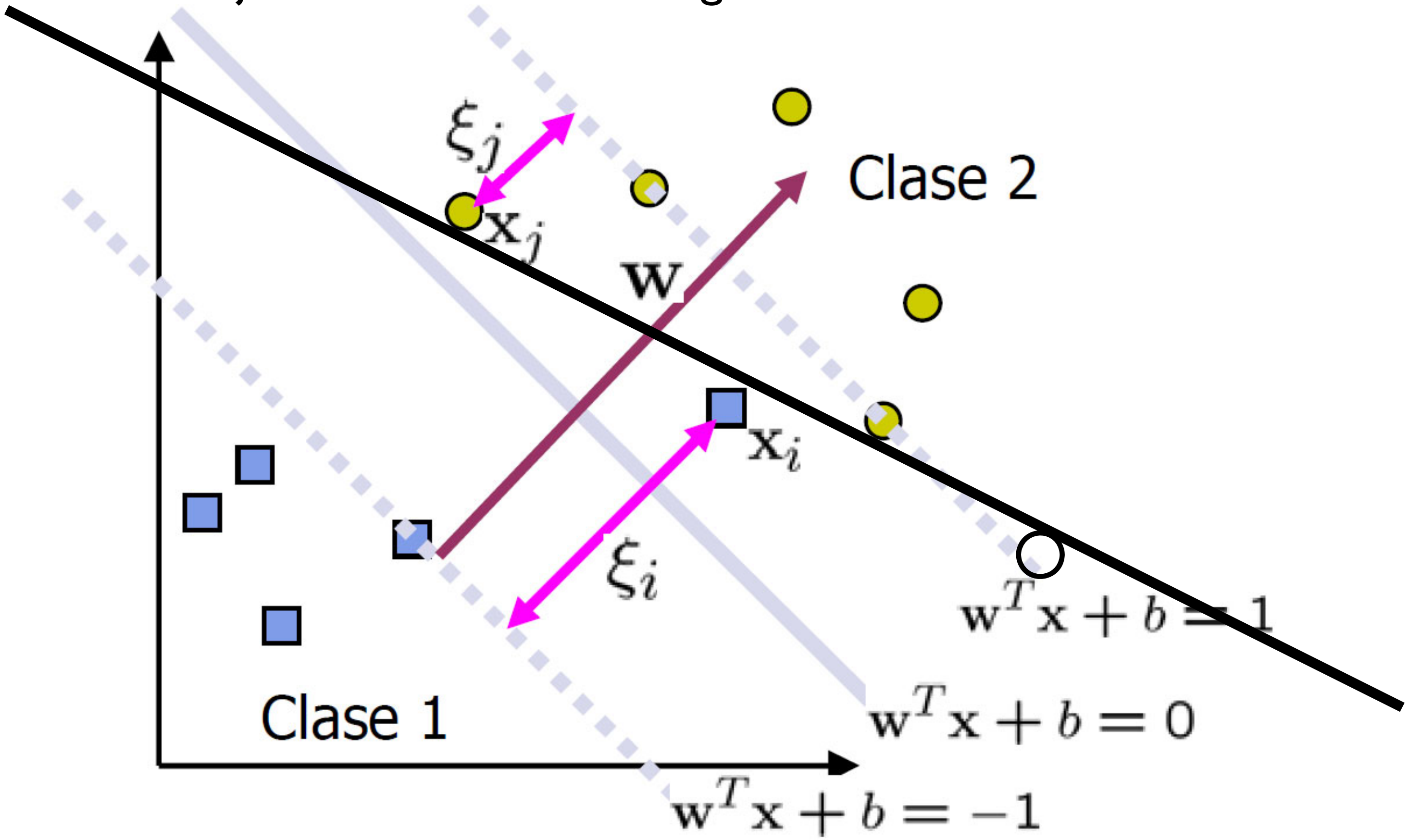
MÁQUINAS DE VECTORES DE SOPORTE

- Problemas linealmente y no linealmente separables
  - ¿Pero qué ocurriría con este nuevo patrón?



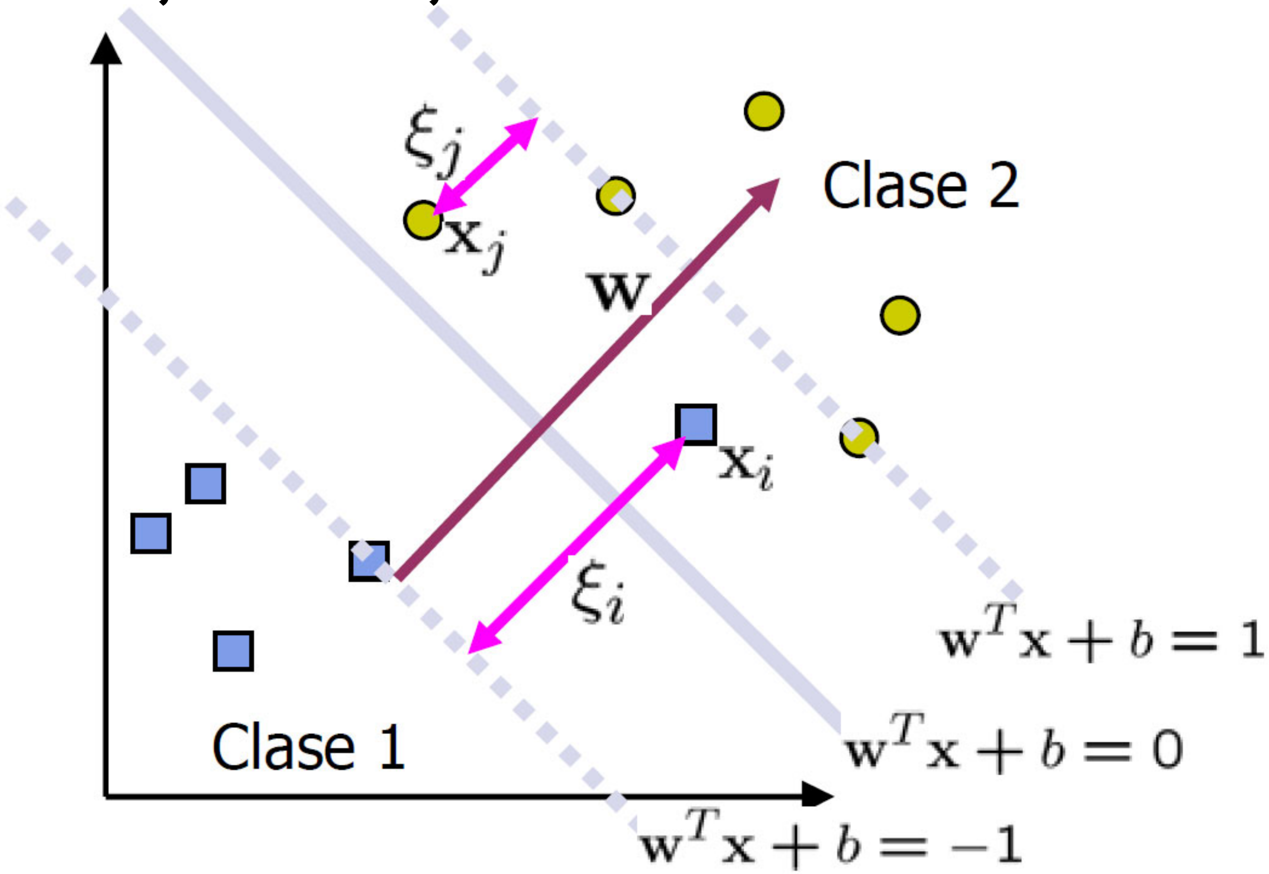
MÁQUINAS DE VECTORES DE SOPORTE

- Problemas linealmente y no linealmente separables
  - Margen demasiado estrecho
    - Sobreajustado: Problemas de generalización



MÁQUINAS DE VECTORES DE SOPORTE

- Problemas linealmente y no linealmente separables
  - Permitir cierto nivel de error (ξ) para evitar el sobreajuste: C bajo



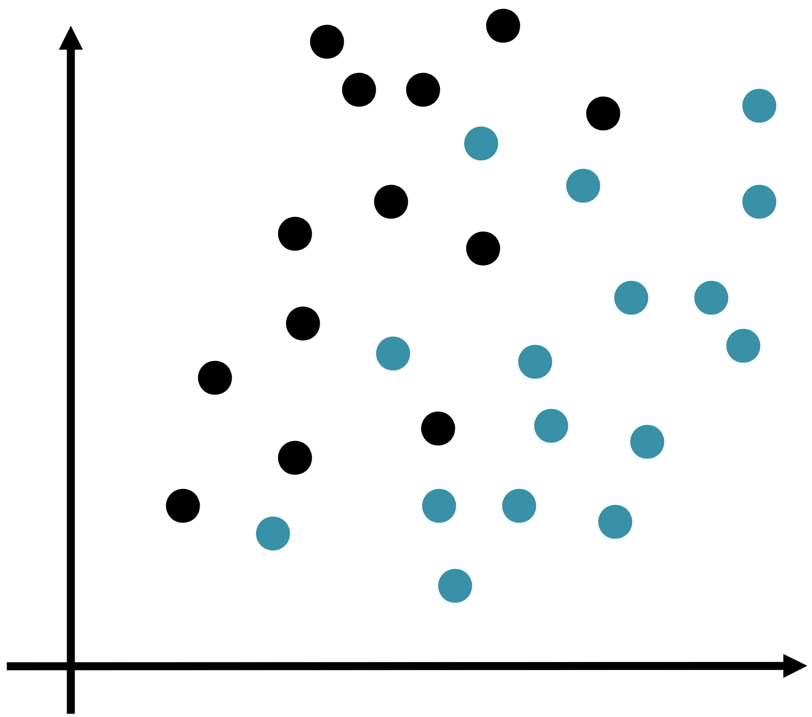
MÁQUINAS DE VECTORES DE SOPORTE

- SVM lineales:
  - El clasificador es un hiperplano separador
  - Los patrones de entrenamiento más importantes son vectores de soporte
    - Ellos definen el hiperplano
  - Los algoritmos de optimización cuadrática permiten identificar qué patrones de entrenamiento x_i son vectores de soporte, con multiplicadores de Lagrange no nulos α_i
  - Tanto en la formulación dual del problema como en la solución aparecen solamente **productos escalares**:

$$\sum_{i=1}^{L}\alpha_i - \frac{1}{2}\sum_{i=1}^{L}\sum_{j=1}^{L}\alpha_i\alpha_j y_i y_j \boxed{x_i^T x_j} \qquad f(x) = \sum_{i=1}^{l}\alpha_i y_i \boxed{x_i^T x} + b$$

Máquinas de Vectores de Soporte

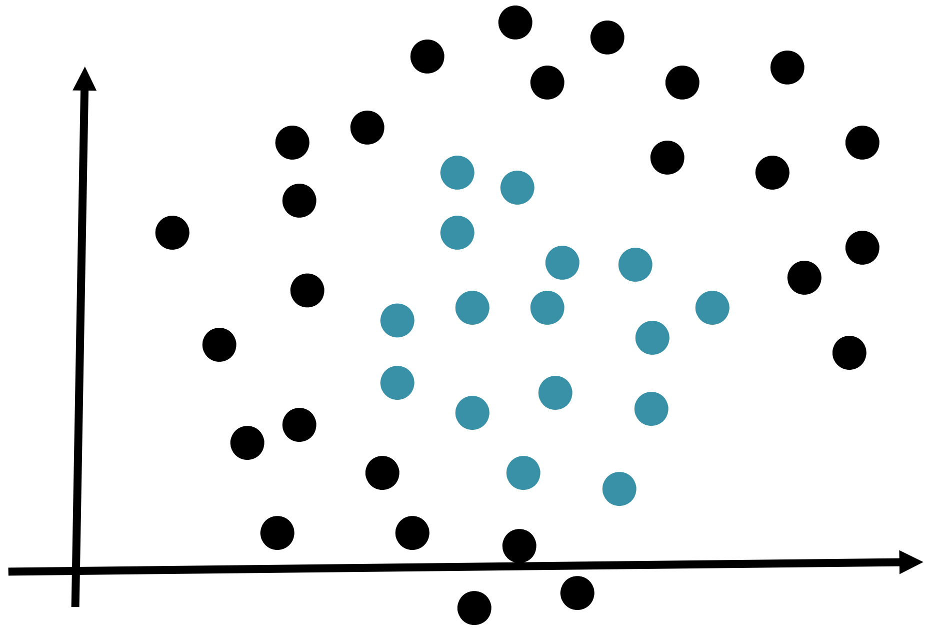
- SVM no lineales
  - El modelo anterior funciona bien con bases de datos con algo de ruido



Máquinas de Vectores de Soporte

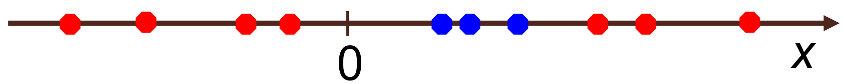
- SVM no lineales
  - Pero, ¿qué ocurre si los datos tienen una distribución muy difícilmente separable mediante un hiperplano?
    - Por ejemplo:

      (2 dimensiones)



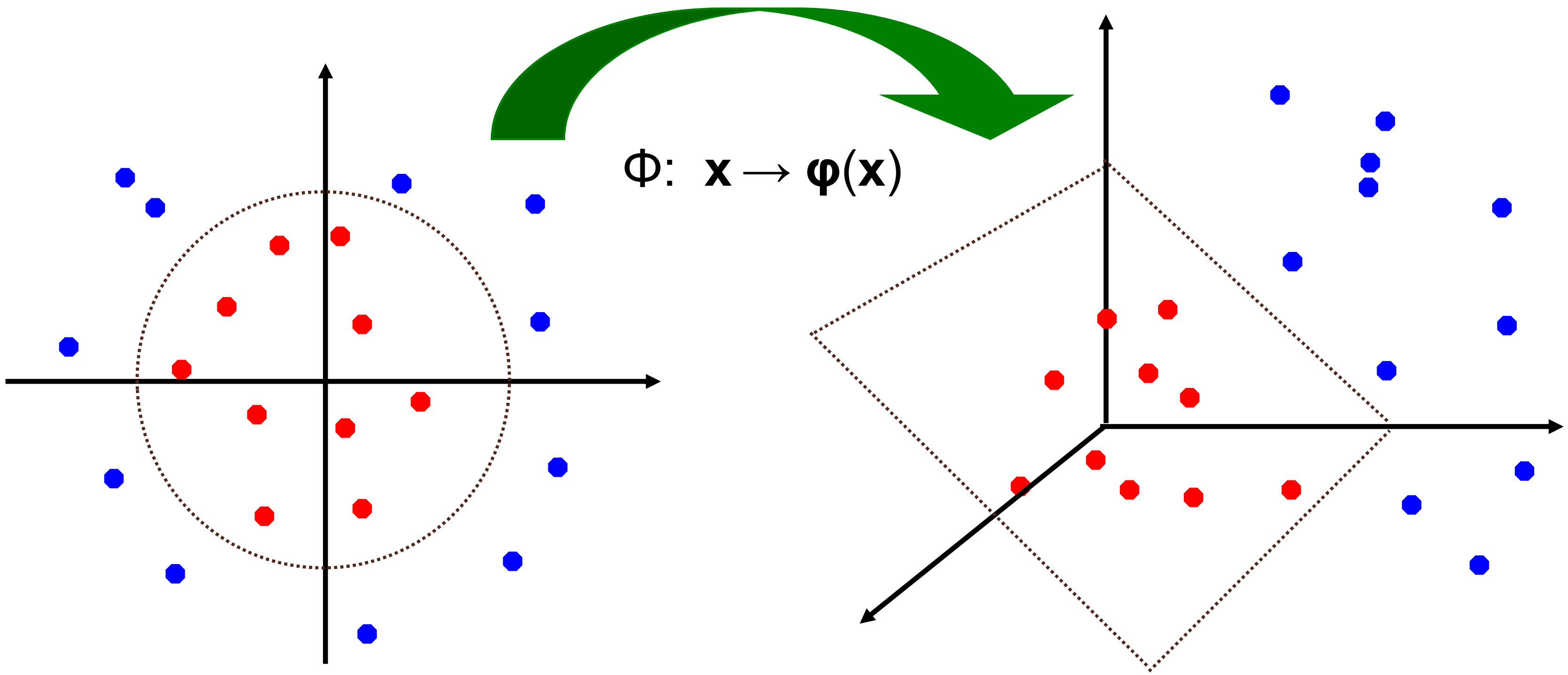
    - Por ejemplo:

      (1 dimensión)



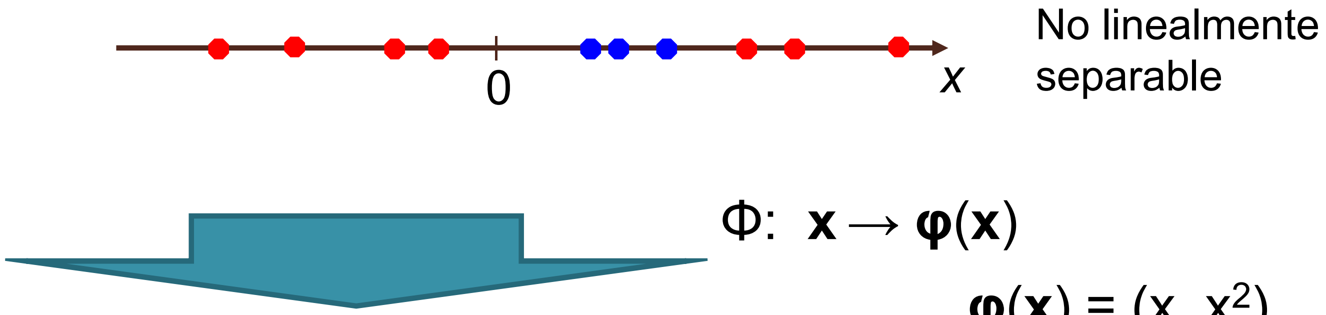
MÁQUINAS DE VECTORES DE SOPORTE

- SVM no lineales
  - Solución: mapear los datos a un espacio de mayor dimensión donde el conjunto de entrenamiento sea separable



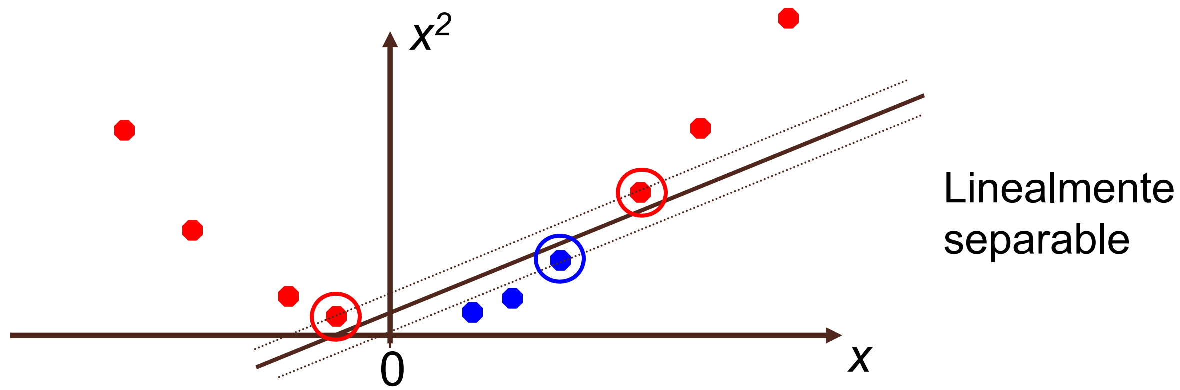
MÁQUINAS DE VECTORES DE SOPORTE

- SVM no lineales
  - Por ejemplo:



Φ: $\mathbf{x} \rightarrow \boldsymbol{\varphi}(\mathbf{x})$

$\boldsymbol{\varphi}(\mathbf{x}) = (x, x^2)$



MÁQUINAS DE VECTORES DE SOPORTE

- SVM no lineales
  - Los SVM lineales se basan en el producto escalar:

$$f(x) = \sum_{i=1}^{l} \alpha_i y_i x_i^T x + b$$

  - La idea es proyectar cada patrón por medio de una transformación Φ: $\mathbf{x} \rightarrow \boldsymbol{\varphi}(\mathbf{x})$ a un nuevo espacio de mayor dimensionalidad de tal manera que en ese nuevo espacio los patrones sean linealmente separables
    - o se pueda aplicar una separación lineal tolerando cierto error
    - Se aplican las ecuaciones anteriores (separación lineal) en ese nuevo espacio:

$$f(x) = \sum_{i=1}^{l} \alpha_i y_i \varphi(x_i)^T \varphi(x) + b$$

      - Se realiza producto escalar en el nuevo espacio
    - ¿Cuál es esta transformación Φ: $\mathbf{x} \rightarrow \boldsymbol{\varphi}(\mathbf{x})$?

MÁQUINAS DE VECTORES DE SOPORTE

- SVM no lineales
  - En lugar de definir esta transformación $\Phi: \ \mathbf{x} \rightarrow \boldsymbol{\varphi}(\mathbf{x})$, se puede definir el producto escalar en este nuevo espacio, pero operando con los valores en el espacio original:

$$K(\mathbf{x}_i,\mathbf{x}_j) = \boldsymbol{\varphi}(\mathbf{x}_i)^T\boldsymbol{\varphi}(\mathbf{x}_j)$$

  - Una función de *kernel* es una función que es equivalente a un producto escalar en un espacio determinado
    - Pero con los valores de x_i y x_j en el espacio original

Máquinas de Vectores de Soporte

- SVM no lineales
  - Por ejemplo, con vectores de 2 dimensiones, se podría definir la función de kernel $K(\mathbf{x}_i,\mathbf{x}_j)=(1 + \mathbf{x}_i^{\mathbf{T}}\mathbf{x}_j)^2$
  - Demostración de que $K(\mathbf{x}_i,\mathbf{x}_j)=(1 + \mathbf{x}_i^{\mathbf{T}}\mathbf{x}_j)^2$ es una función de kernel:
    - Es necesario definir la función $\boldsymbol{\varphi}(\mathbf{x})$ tal que $K(\mathbf{x}_i,\mathbf{x}_j)= \boldsymbol{\varphi}(\mathbf{x}_i)^{\mathbf{T}}\boldsymbol{\varphi}(\mathbf{x}_j)$
    - $K(\mathbf{x}_i,\mathbf{x}_j)=(1 + \mathbf{x}_i^{\mathbf{T}}\mathbf{x}_j)^2_{,}= 1+ x_{i1}^2x_{j1}^2 + 2\, x_{i1}x_{j1}\, x_{i2}x_{j2}+ x_{i2}^2x_{j2}^2 + 2x_{i1}x_{j1} + 2x_{i2}x_{j2}=$

$$= [1\ \ x_{i1}^2\ \ \sqrt{2}\, x_{i1}x_{i2}\ \ x_{i2}^2\ \ \sqrt{2}x_{i1}\ \ \sqrt{2}x_{i2}]^{\mathbf{T}}\, [1\ \ x_{j1}^2\ \ \sqrt{2}\, x_{j1}x_{j2}\ \ x_{j2}^2\ \ \sqrt{2}x_{j1}\ \ \sqrt{2}x_{j2}] =$$

$$= \boldsymbol{\varphi}(\mathbf{x}_i)^{\mathbf{T}}\boldsymbol{\varphi}(\mathbf{x}_j) \text{ donde } \boldsymbol{\varphi}(\mathbf{x}) = [1\ \ x_1^2\ \ \sqrt{2}\, x_1x_2\ \ x_2^2\ \ \sqrt{2}x_1\ \ \sqrt{2}x_2]$$

MÁQUINAS DE VECTORES DE SOPORTE

- SVM no lineales
  - El truco del kernel (1/2):
    - En el espacio original, se calcularía el producto escalar
      - $x_i^T x$
    - Sin embargo, como el problema es complejo los vectores se proyectan en un nuevo espacio
      - Φ: $x \rightarrow \varphi(x)$
    - Por lo tanto, será necesario calcular el producto escalar en ese espacio $\varphi(x_i)^T \varphi(x)$
      - Implicaría proyectar ambos vectores al nuevo espacio y calcular su producto escalar

MÁQUINAS DE VECTORES DE SOPORTE

- SVM no lineales
  - El truco del kernel (2/2):
    - Sin embargo, se puede definir una función que calcule el producto escalar en el nuevo espacio $\varphi(x_i)^T\varphi(x)$, a partir de los vectores originales
      - De esta forma, no se necesita calcular las proyecciones en el nuevo espacio
        - No se necesita calcular $\varphi(x)$ ni conocer el nuevo espacio
      - Función de kernel: $\varphi(x_1)^T\varphi(x_2) = K(x_1,x_2)$
    - Por tanto, la función de kernel implícitamente mapea los datos a un espacio de mayor dimensionalidad
      - Sin necesidad de computar explícitamente cada $\boldsymbol{\varphi}(\mathbf{x})$
      - "El truco del kernel", común a todos los métodos basados en kernels

MÁQUINAS DE VECTORES DE SOPORTE

- Métodos basados en *kernels*
  - Son una serie de métodos de reconocimiento y análisis de patrones, conocidos fundamentalmente por los SVM
  - La característica principal de estos métodos es la aproximación distinta que utilizan
    - Estos métodos mapean los datos en espacios de más dimensiones con la esperanza de que en este espacio los datos se vuelvan más fácilmente separables, o mejor estructurados
    - No hay restricciones en la forma de mapear
    - Esta función de mapear, sin embargo, apenas necesita ser computada gracias a una herramienta llamada **el truco del kernel**

MÁQUINAS DE VECTORES DE SOPORTE

- Métodos basados en *kernels*
  - El truco del kernel es una herramienta matemática que puede ser aplicada a cualquier algoritmo que **solamente dependa del producto escalar de dos vectores**
  - Cuando un producto escalar se vaya a realizar, se reemplaza por una función de kernel
  - Si se aplican adecuadamente, esos **algoritmos lineales candidatos se transforman en algoritmos no lineales**
    - Esos algoritmos no lineales son equivalentes a los originales lineales que operan en el espacio ϕ
    - Sin embargo, dado que se usan los kernels, la función $\boldsymbol{\varphi}(\mathbf{x})$ no necesita ser explícitamente computada

MÁQUINAS DE VECTORES DE SOPORTE

- Métodos basados en *kernels*
  - Escoger un kernel apropiado depende del problema que se quiera resolver
  - Por ejemplo:
    - Un kernel polinómico permite modelizar conjunciones de los valores hasta el orden del polinomio
    - Una función de base radial (*radial basis function*) permite construir círculos (o hiperesferas)
    - Un kernel lineal permite construir líneas (o hiperplanos)
  - Además, ajustar los parámetros puede ser un proceso tedioso

Máquinas de Vectores de Soporte

- Métodos basados en *kernels*
  - Algunos kernels más usados son:
    - Lineal: el más sencillo. $\varphi(x)=x$
      - Los algoritmos kernel que utilizan este tipo, suelen ser iguales a los correspondientes no-kernel
        - Por ejemplo, KPCA (kernel PCA, versión de PCA con kernels) es igual que PCA cuando el kernel es lineal
        - Un SVM con kernel lineal es igual que un SVM lineal

$$k(x,y)=x^T y+c$$

    - Polinómico.
      - Son adecuados para problemas donde todos los datos de entrenamiento están normalizados

$$k(x,y)=(\alpha x^T y+c)^d$$

      - Parámetros ajustables son la pendiente α, el término constante c, y el grado del polinomio d

MÁQUINAS DE VECTORES DE SOPORTE

- Métodos basados en *kernels*
  - Algunos kernels más usados son:
    - Gausiano: este es un ejemplo de kernel de función de base radial

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

φ(x) es infinito dimensional: cada punto se mapea a una función (Gausiana)

      - El parámetro sigma juega un papel importante en el funcionamiento del kernel, y su valor debe de ser cuidadosamente fijado:
        - Si se sobreestima, la exponencial se comportará casi linealmente, y la proyección en un espacio de más dimensiones empezará a perder su poder no lineal
        - Por la contra, si toma valores demasiado bajos, los límites de decisión se volverán muy sensibles al ruido en los datos de entrenamiento
    - Exponencial: también es un kernel de función de base radial
      - Muy parecido al anterior

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

Máquinas de Vectores de Soporte

- Métodos basados en *kernels*
  - Algunos kernels más usados son:
    - Laplaciano: también kernel de función de base radial
      - Totalmente equivalente al exponencial, excepto por ser menos sensible a los cambios en el parámetro sigma

$$k(x, y) = \exp\left(-\frac{\| x - y \|}{\sigma}\right)$$

      - Las observaciones realizadas sobre el parámetros sigma en el kernel Gausiano también se pueden aplicar al exponencial y al laplaciano.
    - Hiperbólico tangente
      - También se conoce como kernel sigmoidal, o kernel perceptrón multicapa
      - Viene del mundo de las RR.NN.AA. (se usa como función de transferencia)
      - Un SVM que utilice un kernel sigmoidal es equivalente a un perceptrón de dos capas

$$k(x, y) = \tanh(\alpha x^T y + c)$$

      - Dos parámetros: la pendiente α, y la constante c.
        - Un valor común para alfa suele ser 1/N, donde N es el número de dimensiones.

MÁQUINAS DE VECTORES DE SOPORTE

- Métodos basados en *kernels*
  - Otros kernels:
    - ANOVA
    - Cuadrático racional
    - Multicuadrático
    - Multicuadrático inverso
    - Circular
    - Esférico
    - Logarítmico
    - Spline
    - B-Spline
    - Cauchy
    - Chi-Cuadrado
    - Bayesiano
    - Wavelet
    - etc.

MÁQUINAS DE VECTORES DE SOPORTE

- SVM no lineales
  - La formulación anterior:

    Encontrar w y b tal que

    minimizar: $\frac{1}{2}\|\mathbf{w}\|^2 + C\sum_{i=1}^{l}\xi_i$ sujeto a: $y_i(w^T x_i + b) \geq 1 - \xi_i \quad \xi_i \geq 0$

    cambiaría a:

    Encontrar w y b tal que

    minimizar: $\frac{1}{2}\|\mathbf{w}\|^2 + C\sum_{i=1}^{l}\xi_i$ sujeto a: $y_i(w^T \varphi(x_i) + b) \geq 1 - \xi_i \quad \xi_i \geq 0$

  - **φ(x)** realiza una transformación de los datos a un espacio de mayor dimensionalidad
    - Se busca el hiperplano que separe los datos en ese nuevo espacio
    - Sin embargo, no es necesario conocer esta transformación
      - Es suficiente con conocer una función, kernel, que calcule el producto escalar

MÁQUINAS DE VECTORES DE SOPORTE

- SVM no lineales
  - El problema dual se transformaría:

Encontrar $\alpha_1 \ldots \alpha_N$ tal que maximicen:

$$\sum_{i=1}^{L} \alpha_i - \frac{1}{2} \sum_{i=1}^{L} \sum_{j=1}^{L} \alpha_i \alpha_j y_i y_j \varphi(x_i) \varphi(x_j)$$

sujeto a : $\sum_{i=1}^{L} y_i \alpha_i = 0 \qquad 0 < \alpha_i < C$ i = 1, …, L

Encontrar $\alpha_1 \ldots \alpha_N$ tal que maximicen:

$$\sum_{i=1}^{L} \alpha_i - \frac{1}{2} \sum_{i=1}^{L} \sum_{j=1}^{L} \alpha_i \alpha_j y_i y_j K(x_i, x_j)$$

sujeto a : $\sum_{i=1}^{L} y_i \alpha_i = 0 \qquad 0 < \alpha_i < C$ i = 1, …, L

MÁQUINAS DE VECTORES DE SOPORTE

- SVM no lineales
  - Solución al problema:
    - Función de decisión:

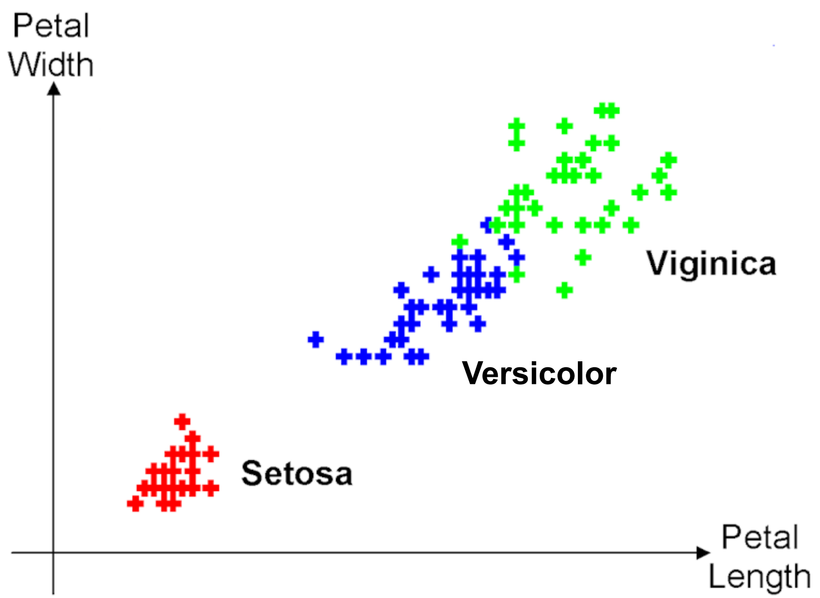
$$f(x) = \sum_{i=1}^{l} \alpha_i y_i \varphi(x_i)^T \varphi(x) + b$$

$$f(x) = \sum_{i=1}^{l} \alpha_i y_i K(x_i, x) + b$$

    - La técnica de optimización para hallar los α_i sigue siendo la misma

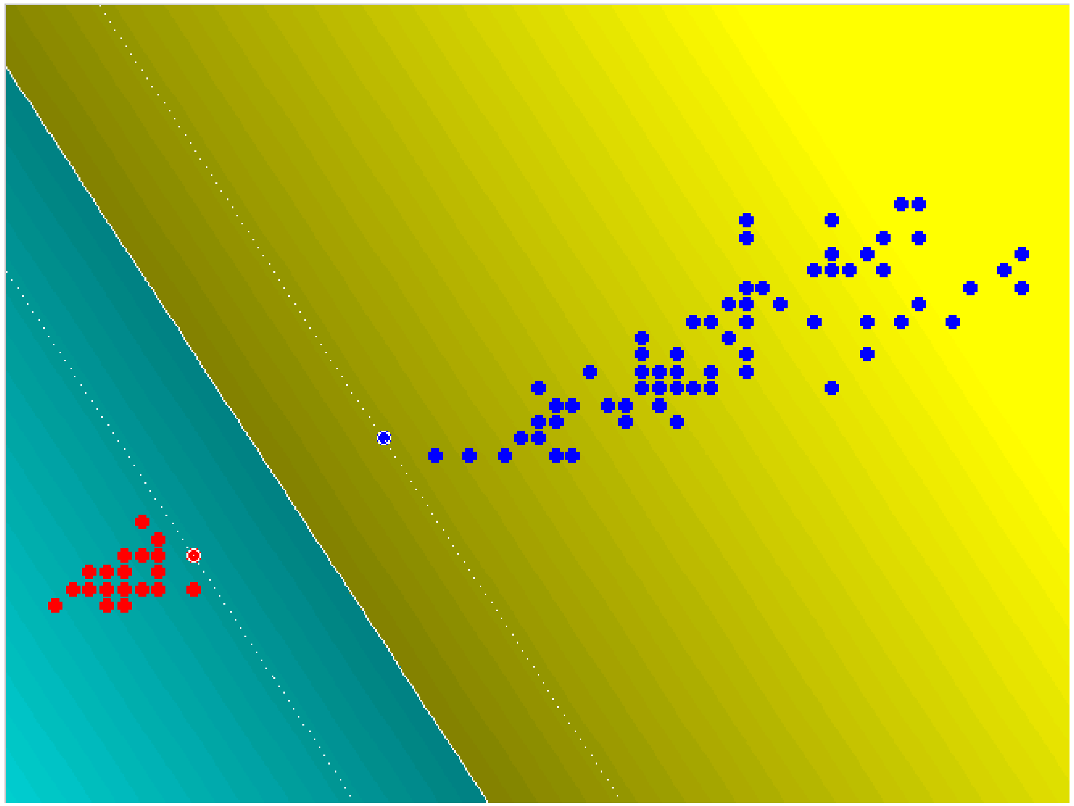
MÁQUINAS DE VECTORES DE SOPORTE

- Ejemplo: Clasificación de flores iris:
  - Conocida base de datos de clasificación
  - Contiene datos de 150 flores iris, cada una con 4 atributos, clasificables en 3 posibles clases: setosa, virginica y versicolor
    - Los patrones se pueden representar mediante los 2 atributos que contienen más información
    - Se entrenan con esos dos atributos
  - Estrategia "uno contra el resto"



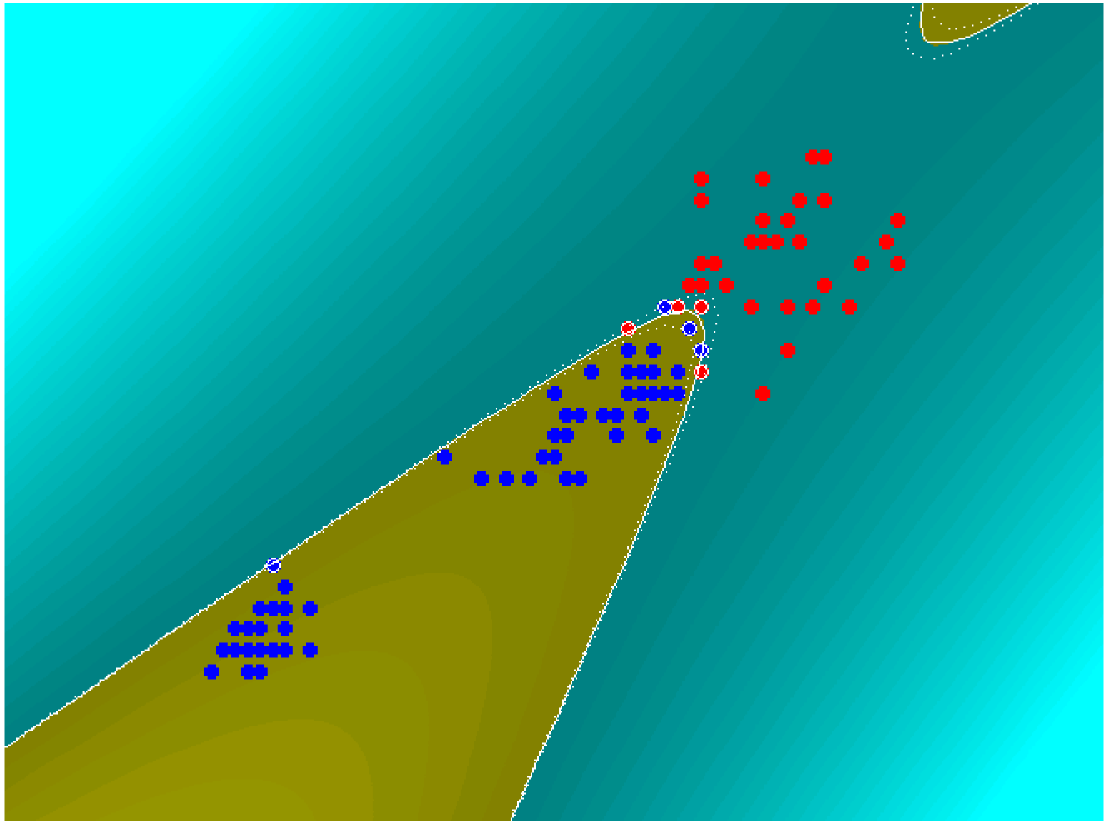
MÁQUINAS DE VECTORES DE SOPORTE

- Ejemplo: Clasificación de flores iris:
  - Separación de "setosa" mediante un SVM lineal (C=inf)



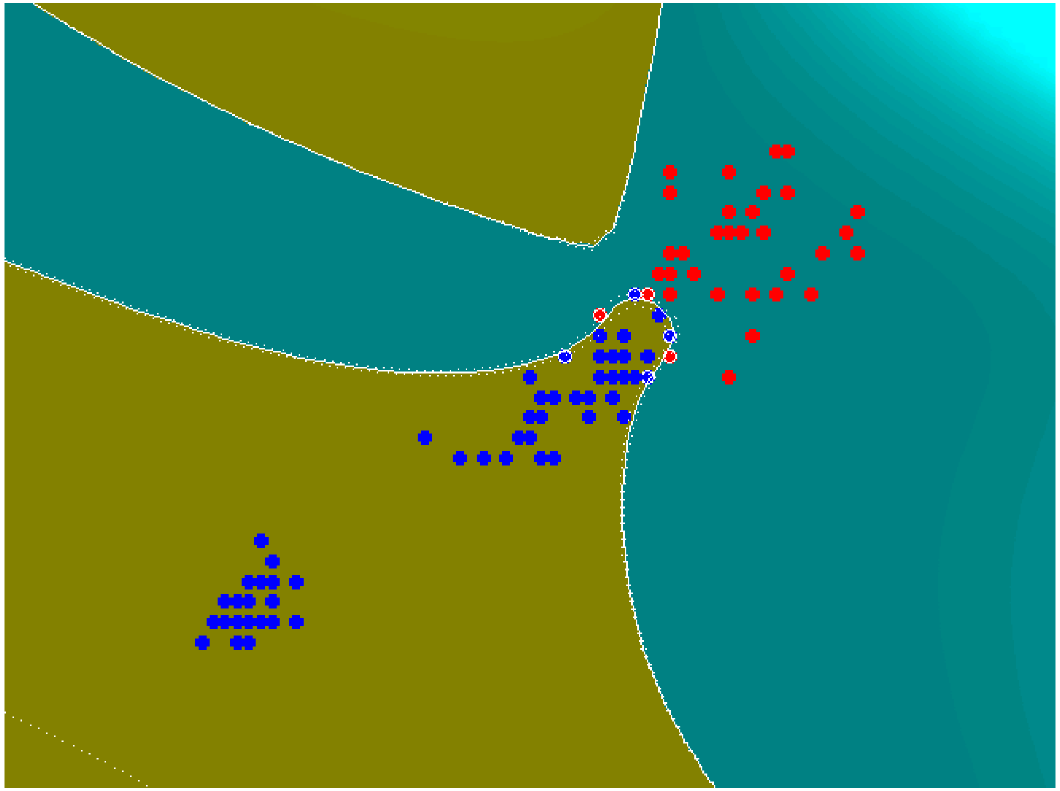
MÁQUINAS DE VECTORES DE SOPORTE

- Ejemplo: Clasificación de flores iris:
  - Separación de "Virginica" con un SVM polinómico (grado 2, C = inf)



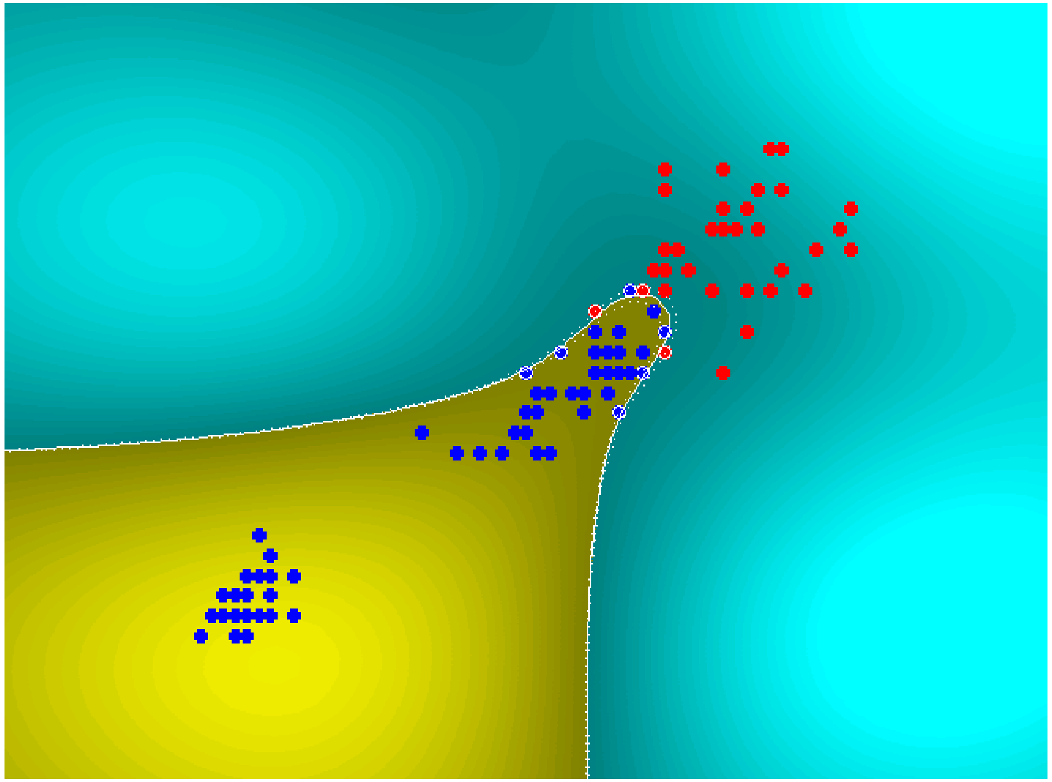
MÁQUINAS DE VECTORES DE SOPORTE

- Ejemplo: Clasificación de flores iris:
  - Separación de "Virginica" con un SVM polinómico (grado 10, C = inf)
    - Hiperplano en un espacio de 55 dimensiones
    - Sobreajustado



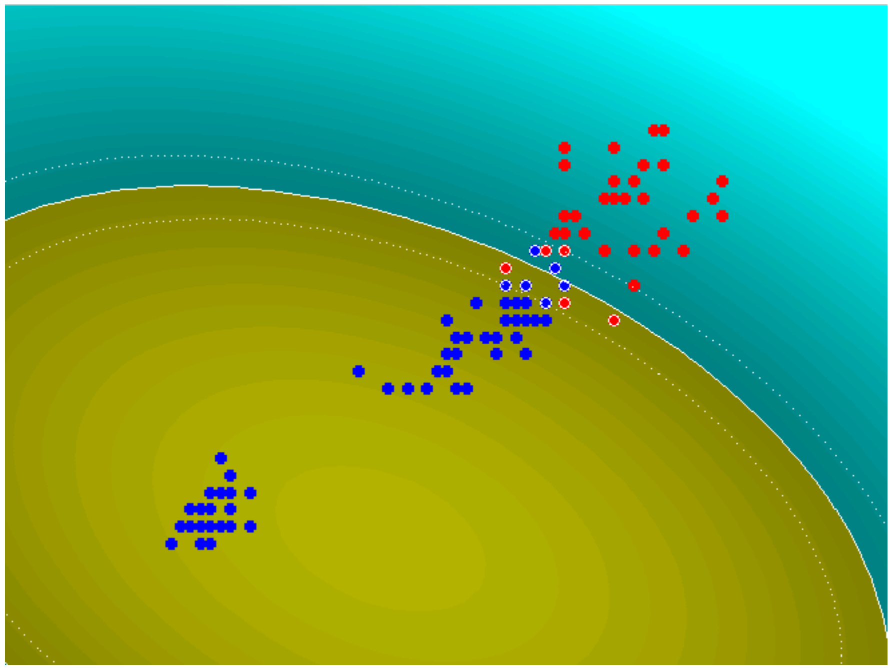
MÁQUINAS DE VECTORES DE SOPORTE

- Ejemplo: Clasificación de flores iris:
  - Separación de "Virginica" con un SVM de función de base radial (σ = 1.0, C = inf)
    - Bastante similar al polinómico de grado 2



MÁQUINAS DE VECTORES DE SOPORTE

- Ejemplo: Clasificación de flores iris:
  - "Virginica" con un SVM polinómico (grado 2, C = 10)
    - C=10 → Alguna tolerancia a errores en la clasificación
    - Parece dar una buena generalización
      - Esto enfatiza la importancia de tolerar ciertos errores en la clasificación
      - Esto es necesario debido a la naturaleza no separable de los datos usando sólo dos atributos



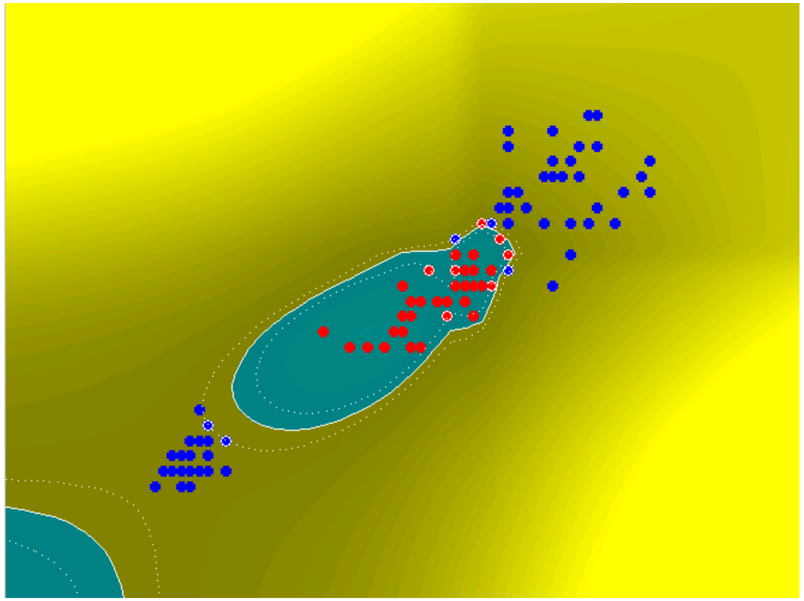
MÁQUINAS DE VECTORES DE SOPORTE

- Ejemplo: Clasificación de flores iris:
  - Para mostrar el efecto de la tolerancia a los errores en la clasificación en los límites del clasificador, se muestran distintos ejemplos
    - Spline lineal, con varios grados de tolerancia
    - Separación de "Versicolor"
    - Valores altos de C dan unos límites más cerrados

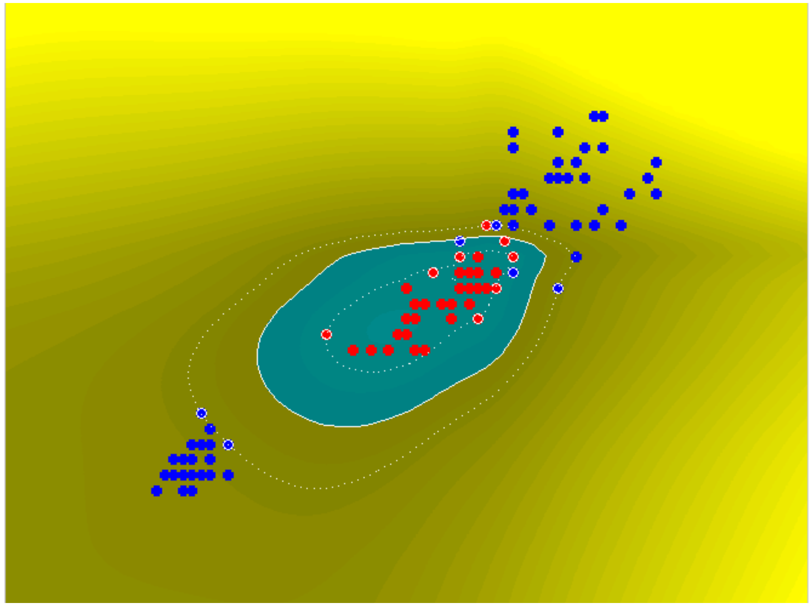
MÁQUINAS DE VECTORES DE SOPORTE

- Ejemplo: Clasificación de flores iris:

C = inf



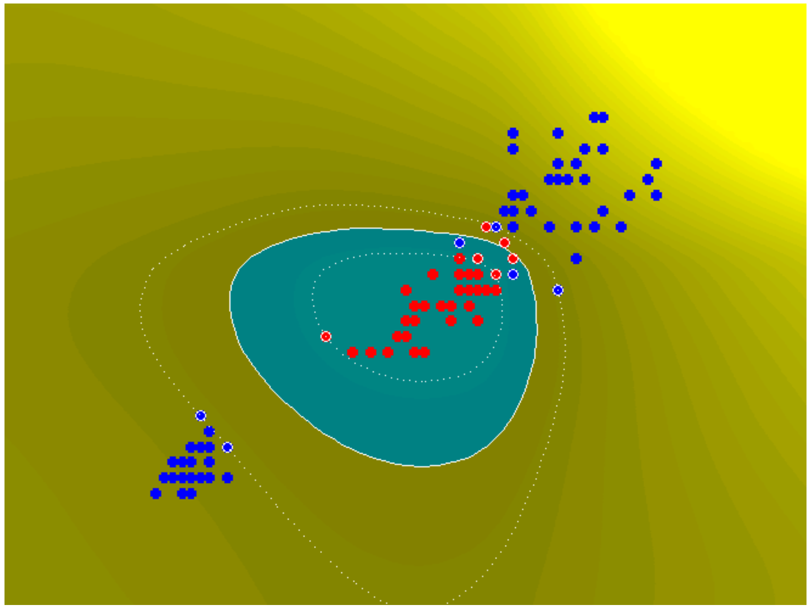
C = 1000



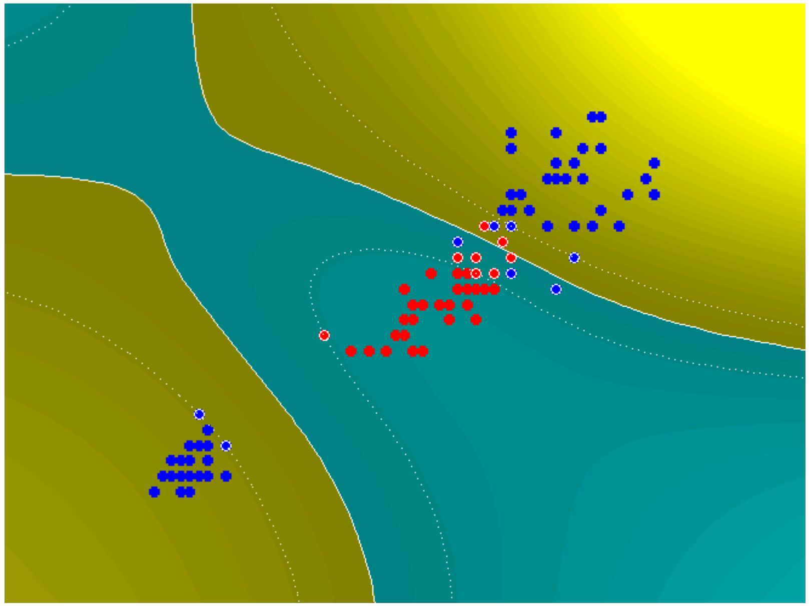
MÁQUINAS DE VECTORES DE SOPORTE

- Ejemplo: Clasificación de flores iris:

C = 100



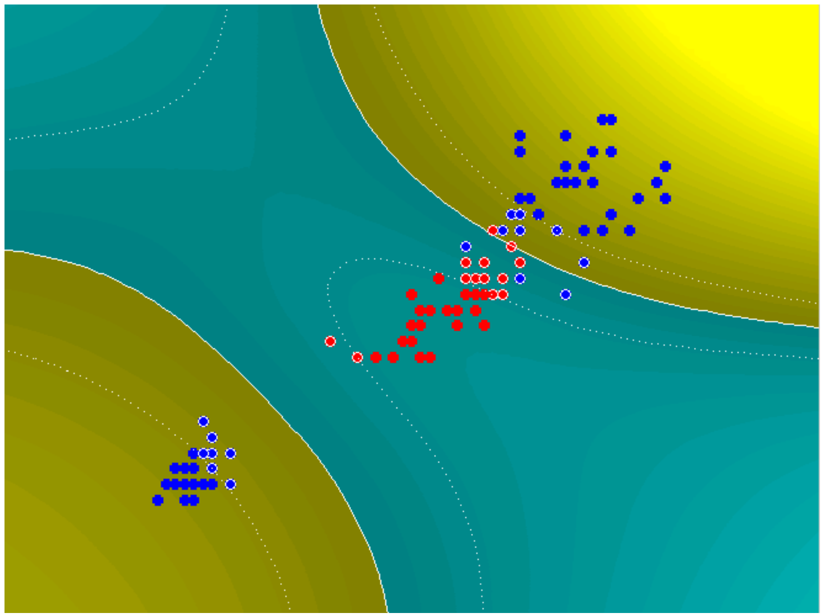
C = 10



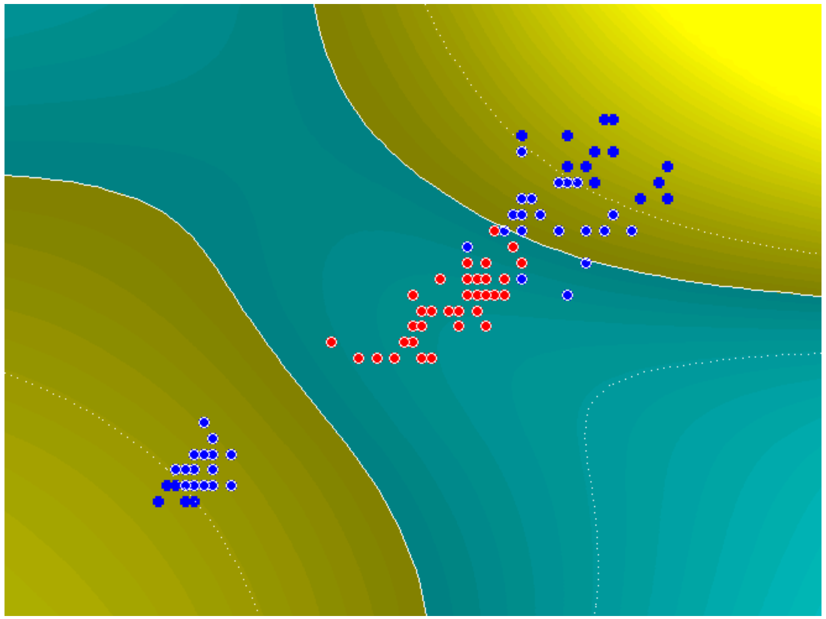
Máquinas de Vectores de Soporte

- Ejemplo: Clasificación de flores iris:

C = 1

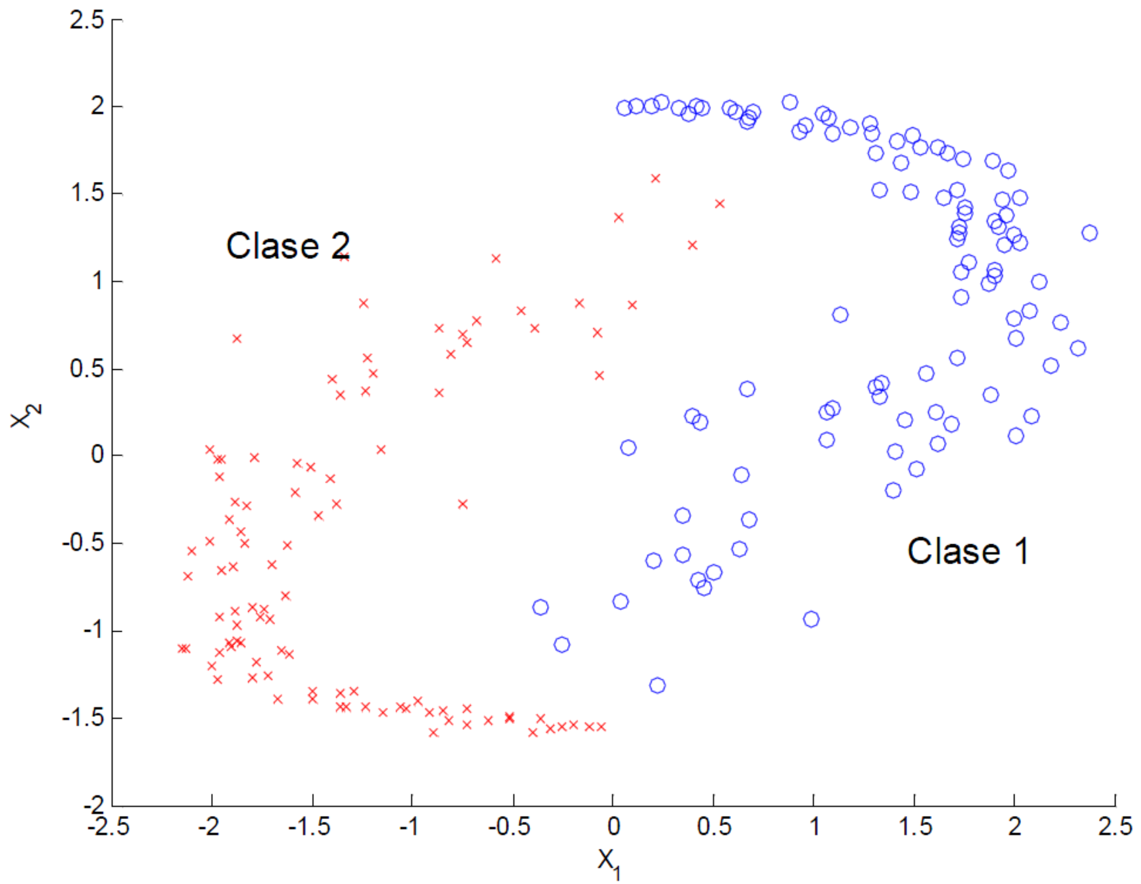


C = 0.1



Máquinas de Vectores de Soporte

- Ejemplo: Doble espiral:
  - 200 puntos en dos clases, no linealmente separables



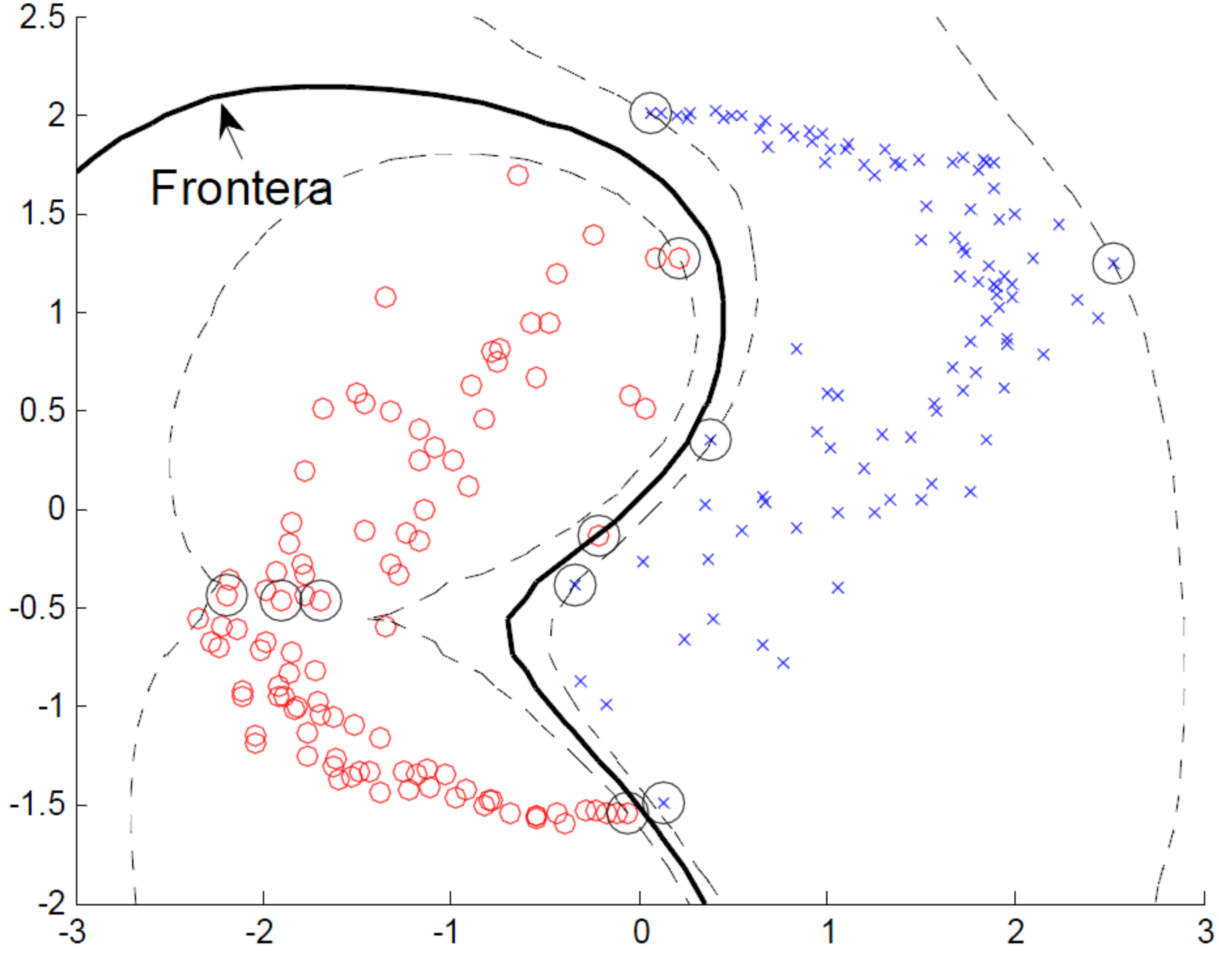
MÁQUINAS DE VECTORES DE SOPORTE

- Ejemplo: Doble espiral:
  - kernel Gaussiano con σ=1 y C=100
  - Entrenado el SVM con el algoritmo SMO (*Sequential Minimal Optimizer*)
  - Resultados:
    - α = [4.3475 0.1072 19.8084 75.8903 86.2008 -94.5622 -0.5096 -0.1663 -1.2177 -84.3138 -5.5846]
    - b = 0.1484
    - 11 vectores de soporte:

0.0625	2.0007
2.5263	1.2379
0.3844	0.3465
-0.3321	-0.3822
0.1254	-1.4875
-0.0573	-1.5489
-2.1932	-0.4391
-1.6895	-0.4672
-1.9075	-0.4692
-0.2136	-0.1409
0.2116	1.2649

MÁQUINAS DE VECTORES DE SOPORTE

- Ejemplo: Doble espiral:



Kernel Gausiano, σ=1 y C=100

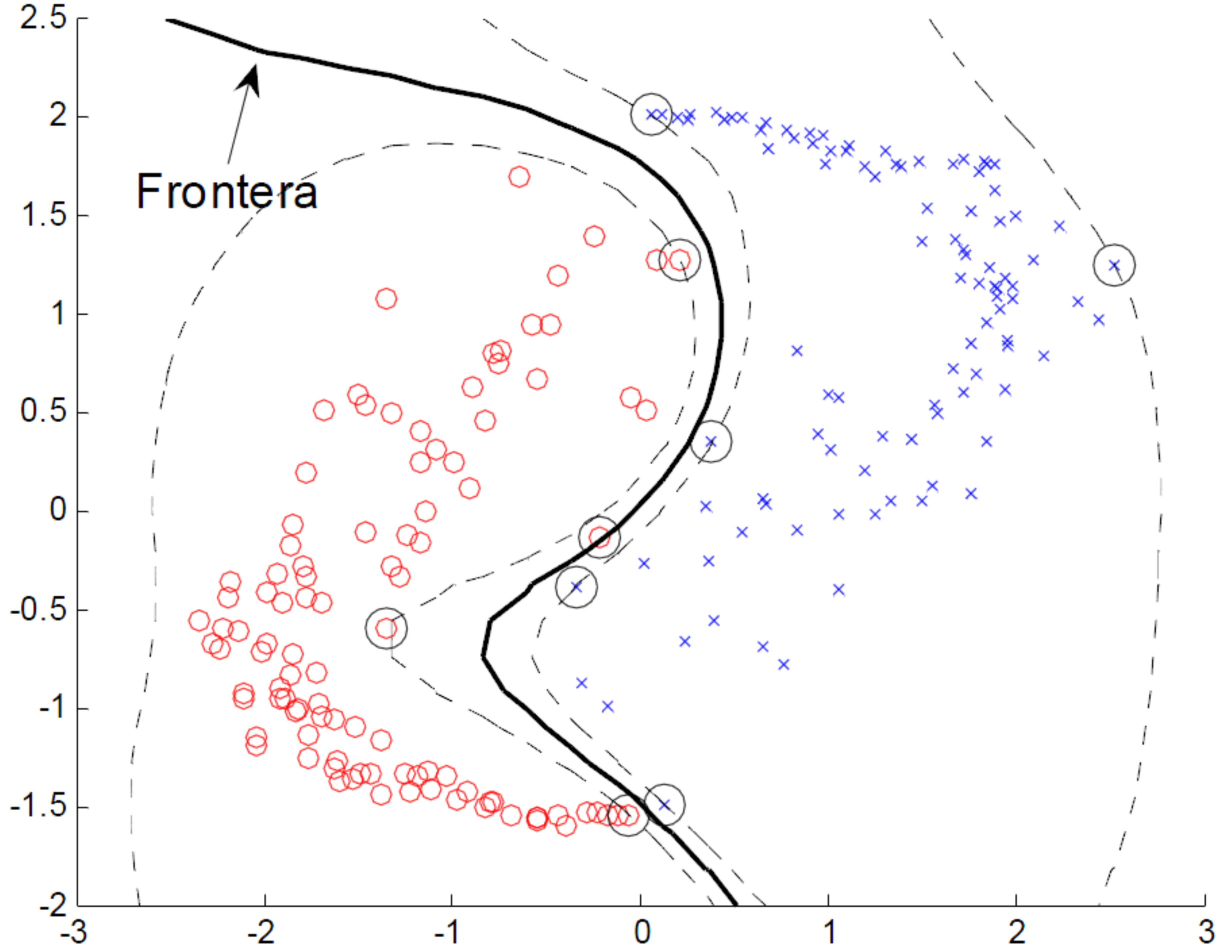
Máquinas de Vectores de Soporte

- Ejemplo: Doble espiral:
  - Se refina más la frontera de decisión con kernel Gaussiano con σ=1 y C=1000
  - Resultados:
    - α = [5.0305 0.1825 22.7773 85.4252 60.4037 -69.9884 -4.1113 -93.0078 -6.7117]
    - b = -0.0223
    - 9 vectores de soporte:

0.0625	2.0007
2.5263	1.2379
0.3844	0.3465
-0.3321	-0.3822
0.1254	-1.4875
-0.0573	-1.5489
-1.3457	-0.6016
-0.2136	-0.1409
0.2116	1.2649

MÁQUINAS DE VECTORES DE SOPORTE

- Ejemplo: Doble espiral:



Kernel Gausiano, σ=1 y C=1000

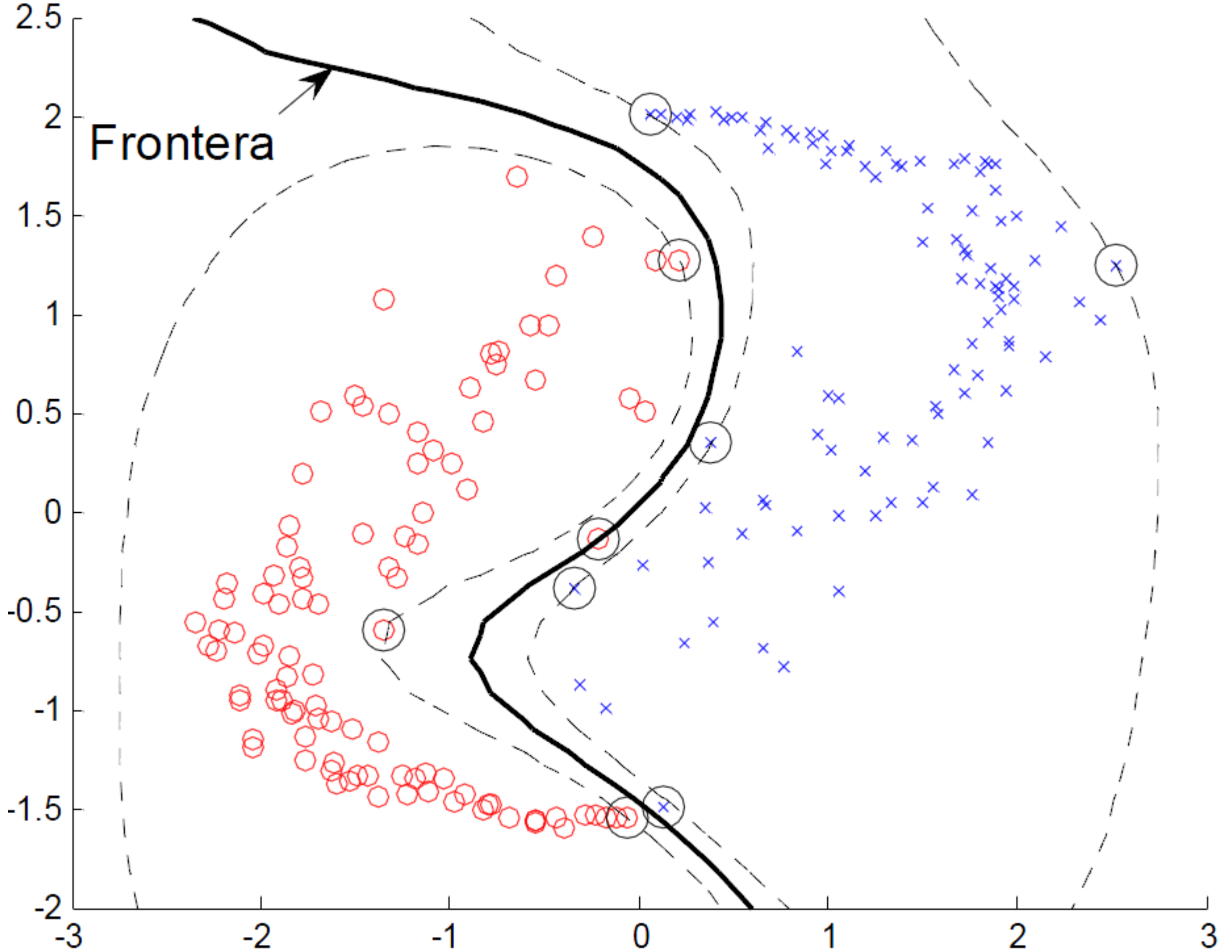
Máquinas de Vectores de Soporte

- Ejemplo: Doble espiral:
  - Se refina más la frontera de decisión con kernel Gaussiano con σ=1 y C=10000
  - Resultados:
    - α = [5.4094 0.2671 22.1051 80.4316 49.6585 -58.8928 -4.3958 -87.2509 -7.3322]
    - b = -0.0552
    - 9 vectores de soporte (los mismos que antes):

0.0625 2.0007
2.5263 1.2379
0.3844 0.3465
-0.3321 -0.3822
0.1254 -1.4875
-0.0573 -1.5489
-1.3457 -0.6016
-0.2136 -0.1409
0.2116 1.2649

MÁQUINAS DE VECTORES DE SOPORTE

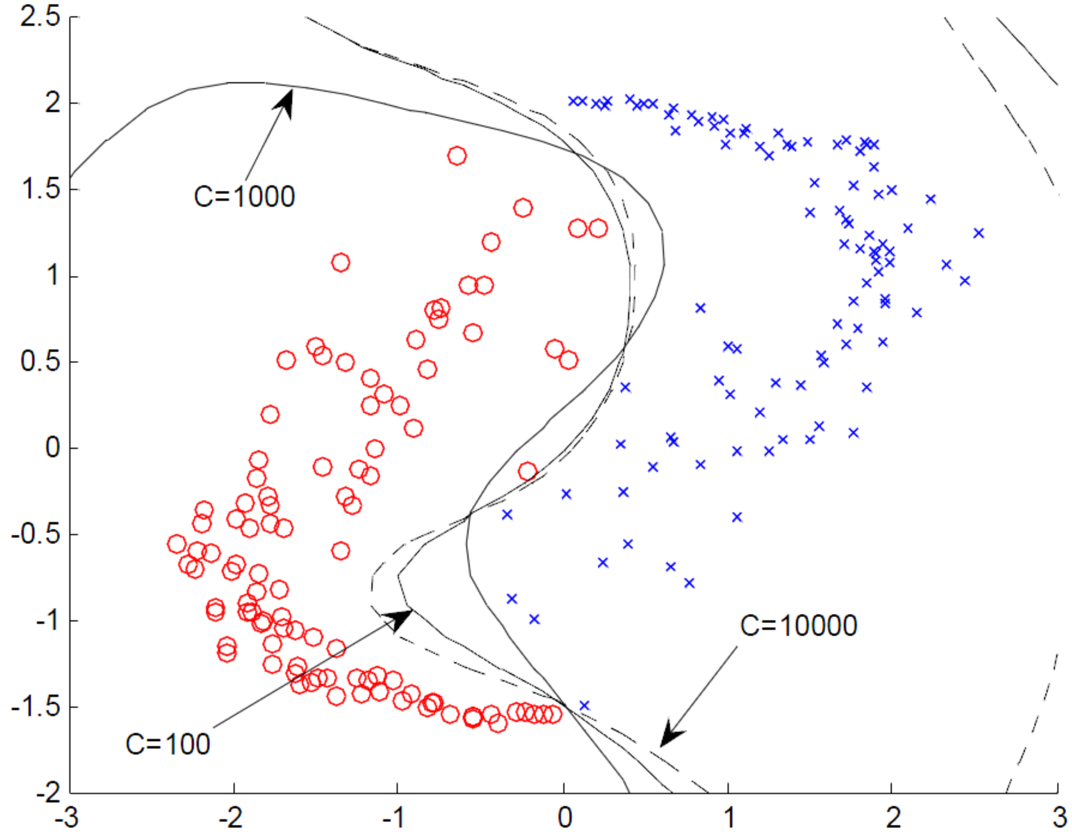
- Ejemplo: Doble espiral:



Kernel Gausiano, σ=1 y C=10000

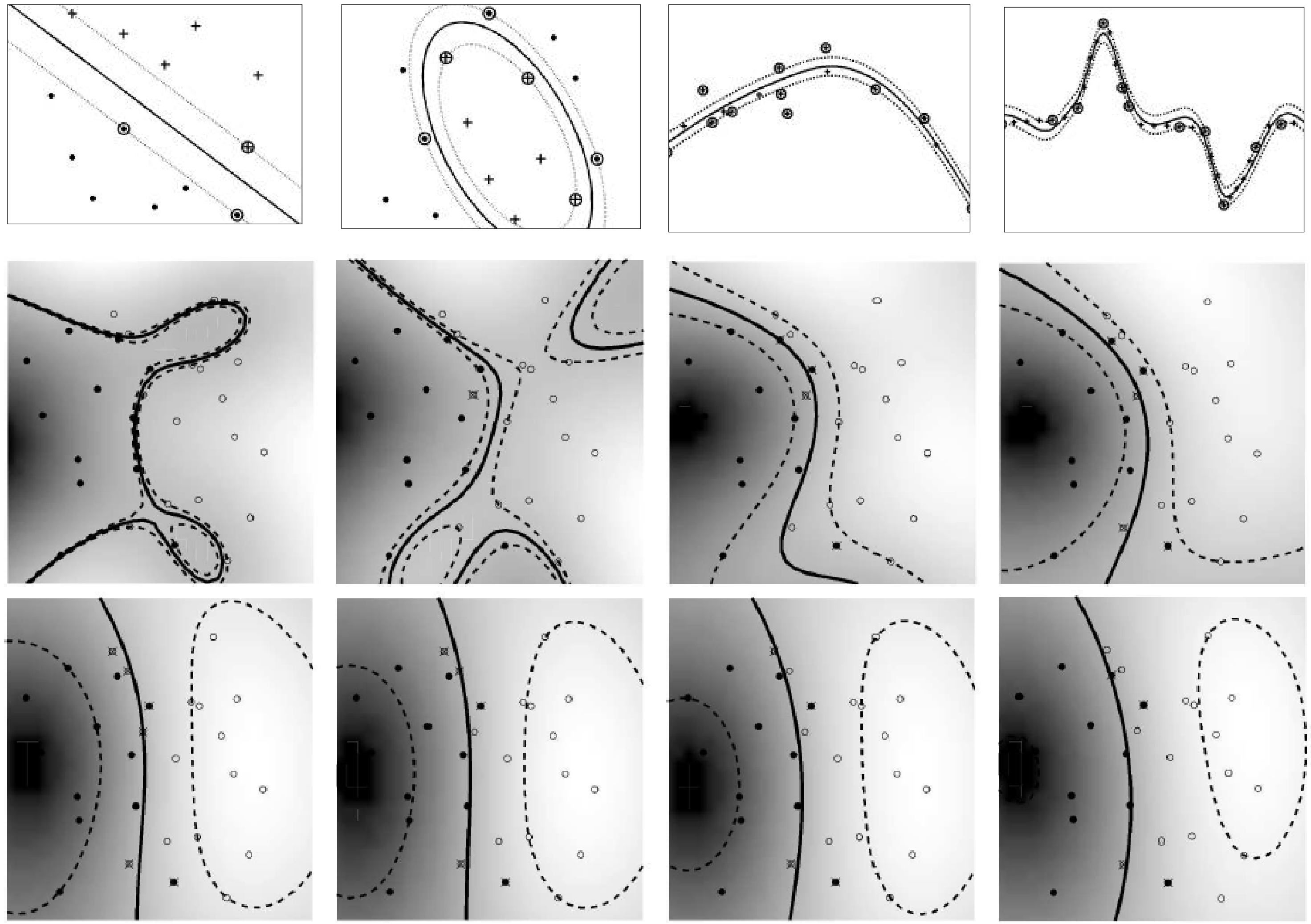
MÁQUINAS DE VECTORES DE SOPORTE

- Ejemplo: Doble espiral:
  - Uniendo las tres gráficas en una:
    - "Idealmente", la frontera óptima se logra cuando C = infinito



Máquinas de Vectores de Soporte

- Más ejemplos:



Máquinas de Vectores de Soporte

- Los SVMs fueron propuestos originalmente por Boser, Guyon y Vapnik en 1992, y su popularidad se fue incrementando a finales de los 90.
- Los SVM actualmente están entre los sistemas clasificadores que ofrecen los mejores resultados para un gran número de tareas de clasificación, desde texto a datos genómicos.
- Los SVM se pueden aplicar a tipos de datos complejos que se basan en vectores de características (por ejemplo, gráficos, secuencias, datos relacionales) mediante el diseño de funciones de kernel para esos datos.
- Los SVM han sido extendidos para un número de tareas como regresión [Vapnik *et al.* '97], análisis de componentes principales [Schölkopf *et al.* '99], etc.
- Los algoritmos de optimización para SVM más populares utilizan descomposición para realizar un *hill-climbing* sobre un conjunto de α_i de cada vez, por ejemplo SMO [Platt '99] [Joachims '99]

Máquinas de Vectores de Soporte

- Clasificadores para 2 clases
  - Se puede cambiar la formulación del algoritmo QP para permitir clasificación multiclase
  - Más comúnmente, los datos son divididos "inteligentemente" en dos partes de diferentes formas y una SVM es entrenada para cada forma de división
  - La clasificación multiclase es hecha combinando la salida de todos los clasificadores
- El modelado de la SVM es tal que no necesita de toda la totalidad de puntos disponibles para hallar una solución al problema de maximización de la separación entre clases

Máquinas de Vectores de Soporte

- Ventajas:
  - El entrenamiento es relativamente fácil
  - No hay óptimo local, como en las redes neuronales
  - Se escalan relativamente bien para datos en espacios dimensionales altos
  - El compromiso entre la complejidad del clasificador y el error puede ser controlado explícitamente
  - Datos no tradicionales como cadenas de caracteres y árboles pueden ser usados como entrada a la SVM, en vez de vectores de características

MÁQUINAS DE VECTORES DE SOPORTE

- Debilidades:
  - Se necesita una "buena" función *kernel*, es decir, se necesitan metodologías eficientes para sintonizar los parámetros de inicialización de la SVM
  - Ajustar los parámetros de los SVM continúa siendo un proceso laborioso
    - Seleccionar un kernel específico y los parámetros generalmente se realiza mediante prueba y error