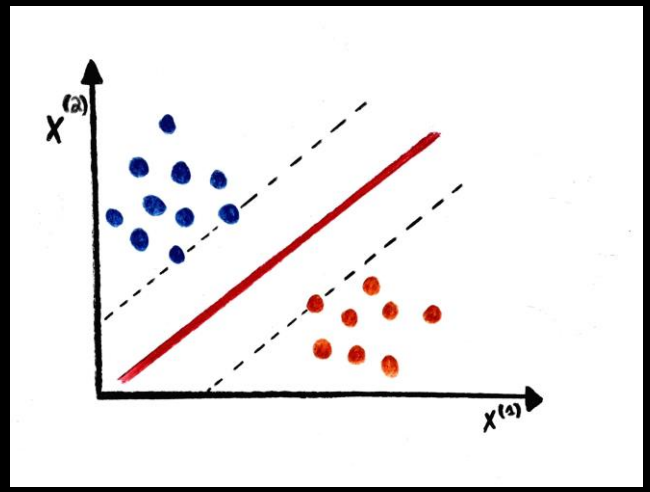
Machine Learning – Support Vector Machines

Definición

Algoritmo supervisado de Machine Learning capaz de resolver problemas lineales, no lineales, de clasificación y regresión.

Es uno de los modelos más utilizados debido a su versatilidad y precisión.

Son algoritmos sensibles al escalado, por lo que se suelen estandarizar antes del entrenamiento.



Linear
Support Vector Classifier

Hiperplano

Es un subespacio plano y afín (no tiene por qué pasar por el origen), de dimensión p-1, que divide el espacio en dos mitades

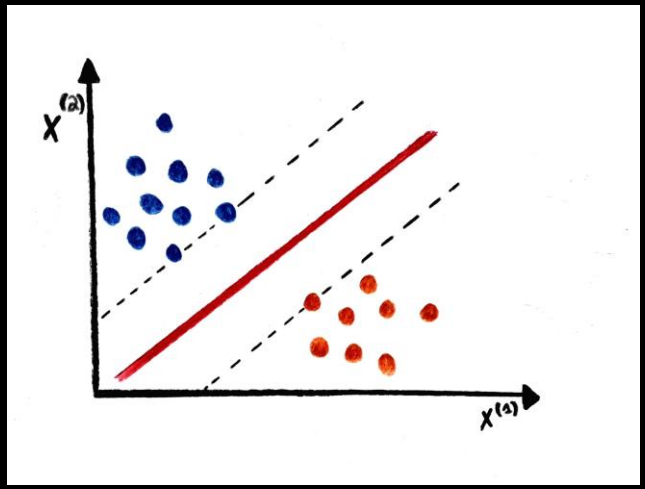
Todos los puntos que caigan en el hiperplano cumplirán:

$$\beta_0 + \beta_1 X_1 + \beta_2 X_2 + \ldots + \beta_p X_p = 0$$

O caerán a un lado u otro del hiperplano:

$$\beta_0 + \beta_1 X_1 + \beta_2 X_2 + \ldots + \beta_p X_p > 0$$

$$\beta_0 + \beta_1 X_1 + \beta_2 X_2 + \ldots + \beta_p X_p < 0$$

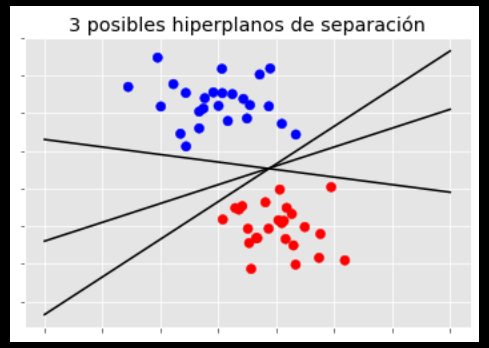


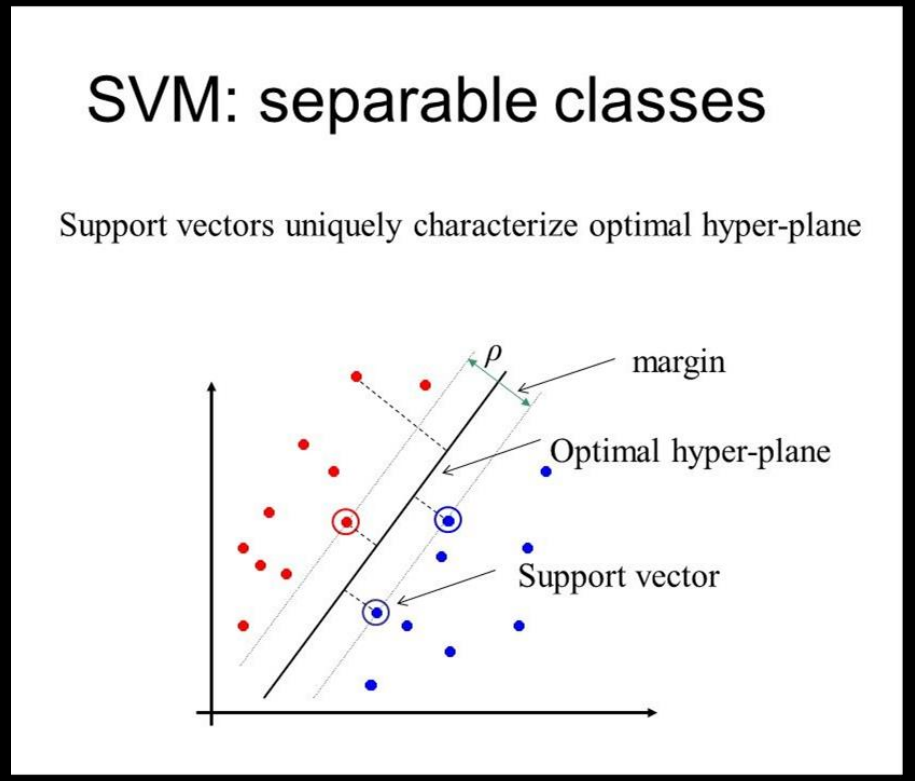
Hiperplano óptimo

Para un problema de clasificación binaria con buena separación de las clases, existen infinitos hiperplanos que los separen, pero solo un hiperplano óptimo que maximiza la distancia entre las observaciones y el hiperplano.

Hiperplano óptimo
Aquel que tenga la mayor distancia mínima de las observaciones al hiperplano, el mayor **margen.**

Support Vector
Son los vectores que aguantan (*soportan*) al hiperplano óptimo de separación. Si estos cambian, el hiperplano también lo hará. El movimiento del resto de observaciones no tiene impacto.



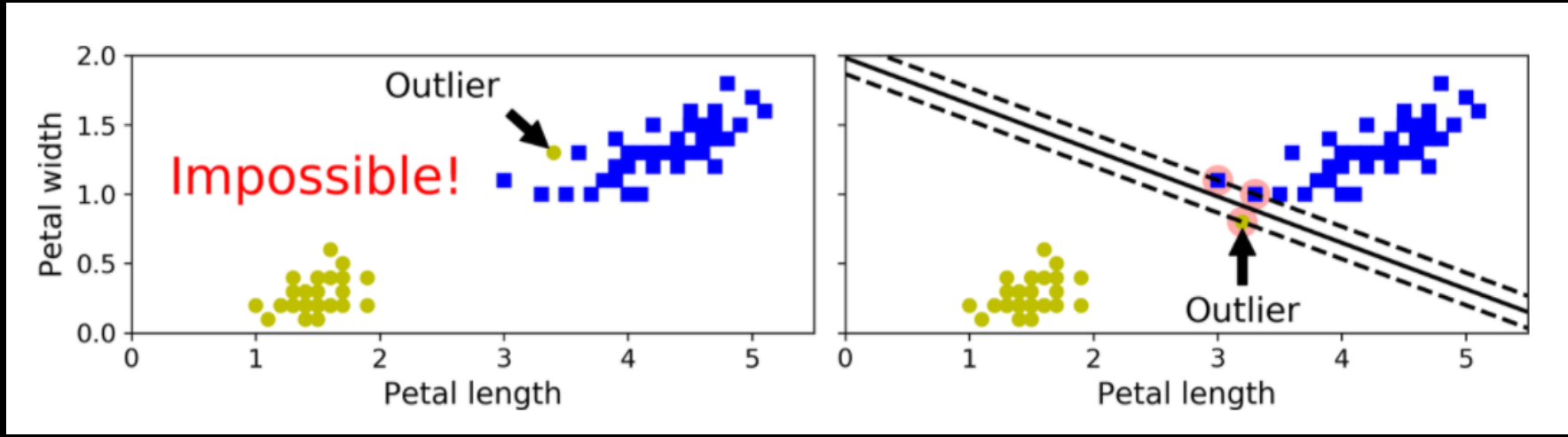


Optimización Dual

Hard margin classifier

Son los clasificadores que utilizan un hiperplano óptimo. Presentan ciertos problemas:

- Son sensibles a overfitting
- Funcionan si los datos están linealmente separados
- Muy sensible a outliers

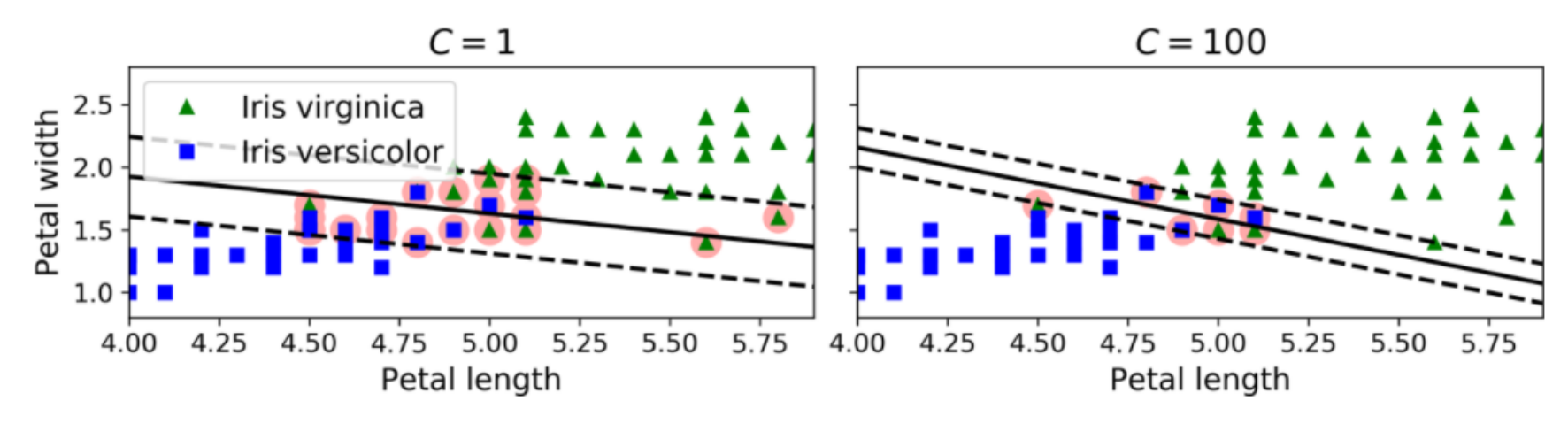


Soft margin classifier

Hiperplano que no separa perfectamente las clases, permitiendo que algunas observaciones caigan del lado incorrecto.

Ahora los **support vectors** serán tanto los que se encuentren en el margen como los que violen el margen.

Esta flexibilidad se controla mediante C. Cuanto menor es C, más es la flexibilidad/tolerante es mi modelo, y por tanto generalizará mejor. Más robusto, y por tanto, menos overfitting. Bias vs Variance.

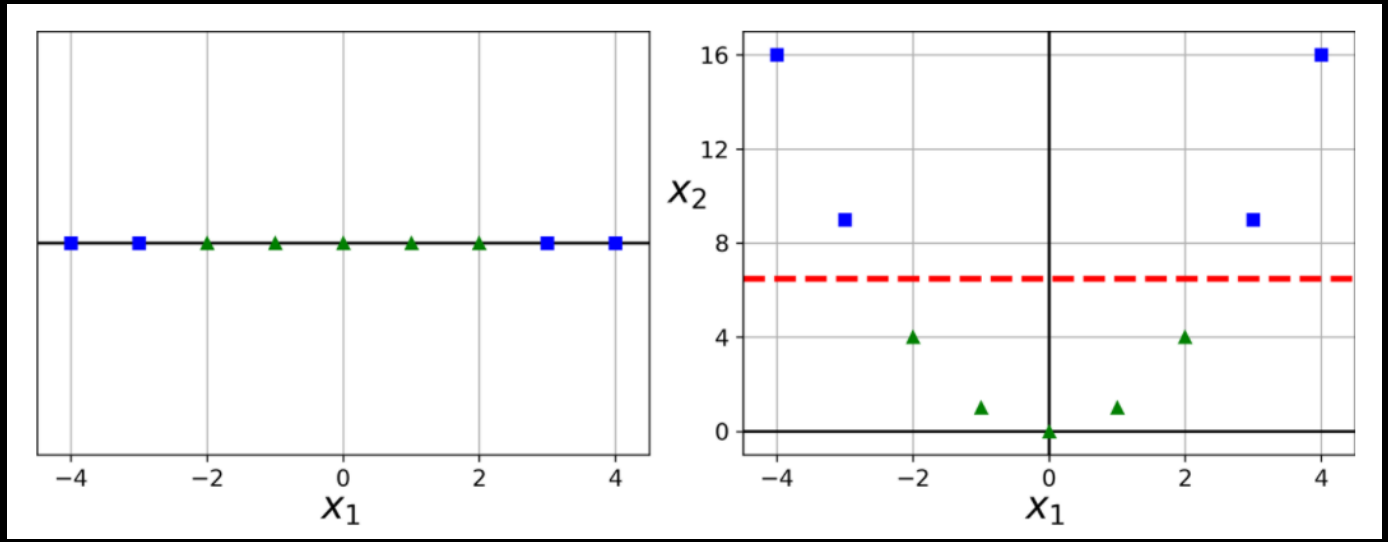


Nonlinear
Support Vector Classifier

Nonlinear SVC

Los SVC lineales funcionan muy bien, pero para problemas lineales, que en la vida real son problemas poco frecuentes.

Una posible solución es introducir nuevas features polinómicas (feature expansion). El problema es que las regresiones polinómicas no se adaptan bien a datasets complejos, y le añaden demasiada **compejidad al modelo, provocando que sea muy lento y podamos caer en overfitting.**

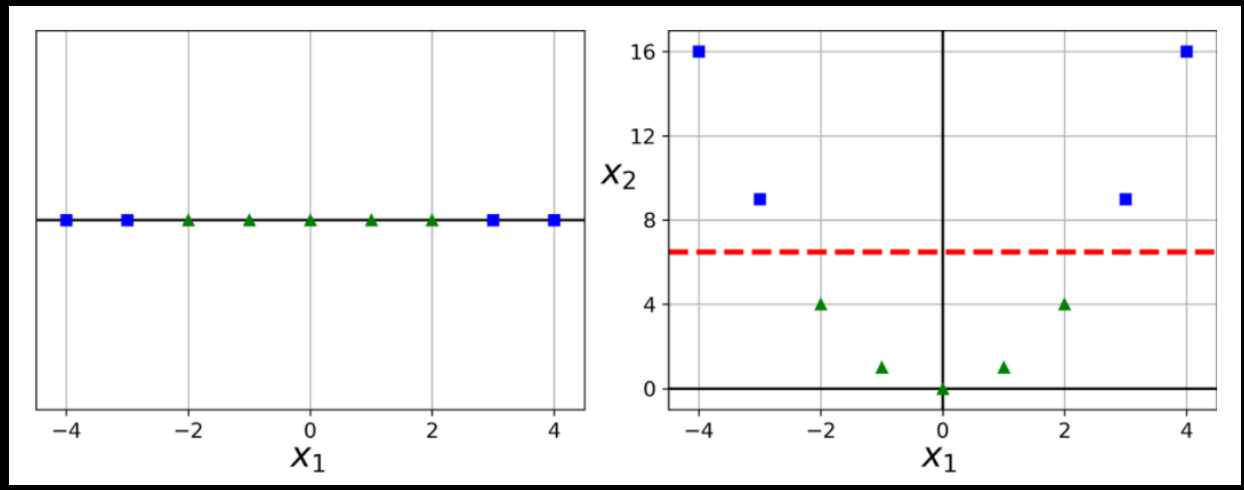


kernels

Para el caso del kernel polinómico, podemos obtener el mismo resultado que añadiendo features polinómicas, pero realmente sin que las estemos añadiendo. Esta simulación es lo que se conoce como **kernel trick**. Son funciones que devuelven el product escalar de dos vectores , realizado en un nuevo espacio dimensional.

Kernels

$$
\begin{aligned}
\text{Linear:} \quad & K(\mathbf{a}, \mathbf{b}) = \mathbf{a}^\intercal \mathbf{b} \\
\text{Polynomial:} \quad & K(\mathbf{a}, \mathbf{b}) = (\gamma \mathbf{a}^\intercal \mathbf{b} + r)^d \\
\text{Gaussian RBF:} \quad & K(\mathbf{a}, \mathbf{b}) = \exp\left(-\gamma \|\mathbf{a} - \mathbf{b}\|^2\right) \\
\text{Sigmoid:} \quad & K(\mathbf{a}, \mathbf{b}) = \tanh(\gamma \mathbf{a}^\intercal \mathbf{b} + r)
\end{aligned}
$$



¿Cuándo usar un kernel u otro? Probar siempre primero con el lineal (LinearSVC más rápido que SVC(linear)). Si el set de datos no es muy grande, prueba con Gaussian RBF (Radial Basis Function) y el Polynomial, que dan buenos resultados.

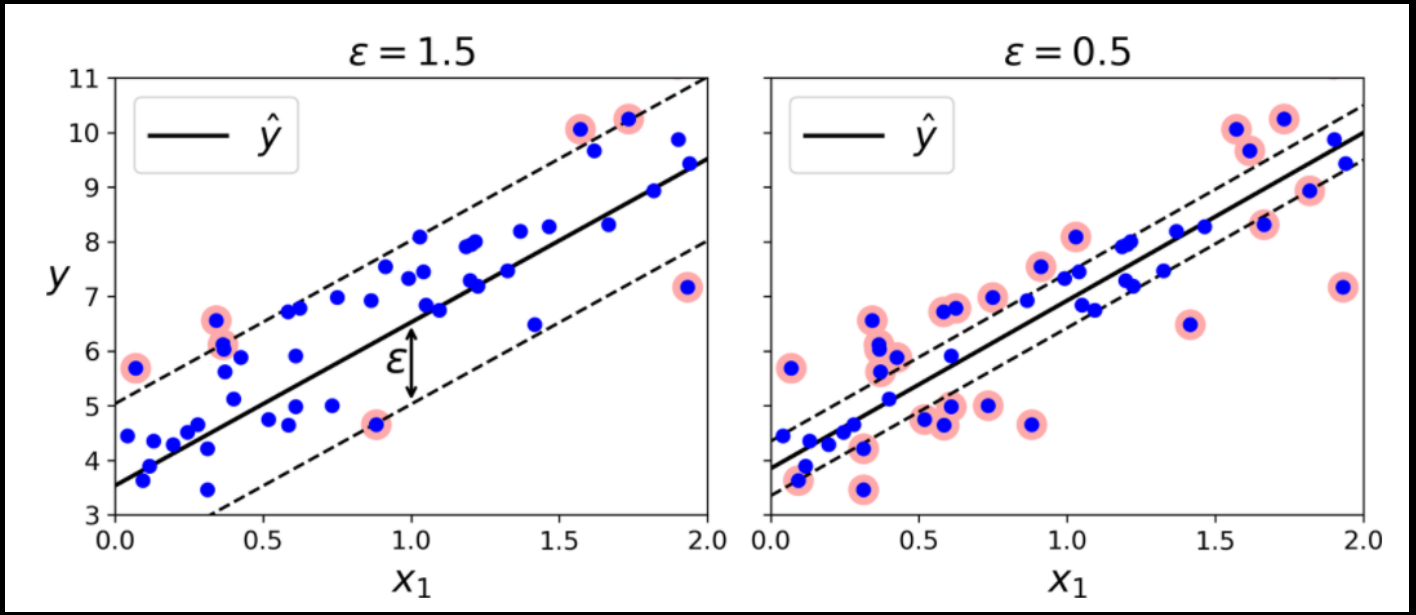
Support Vector Regression

Support Vector Regression

Podemos utilizar SVM para algoritmos de regresión. A diferencia de clasificación, el objetivo es el inverso, SVM Regression intenta ajustarse al máximo para que abarque la mayor cantidad de muestras.

La anchura de los márgenes la controlaremos con el hiperparámetro ε, que es la tolerancia, cuanto más bajo, peor generalizará.

También podemos usar kernels para problemas no lineales.



Ventajas

1. Efectivo con muchas features
2. Eficaz computacionalmente
3. Varios kernels para varios problemas
4. Clasificación/Regresión
5. Robustos frente overfitting
6. Robustos frente outliers

Desventajas

1. Mal performance si nº features > nº samples
2. Hay que realizar mucha combinatoria de kerneles e hiperparámetros para conseguir el modelo óptimo
3. Es caja negra