Aprendizaje Automático

Máquinas de Vectores Soporte

curso 2017-2018

Enrique Vidal, Jorge Civera, Francisco Casacuberta
Departamento de Sistemas Informáticos y Computación
Universitat Politècnica de València

1. Introducción

El objetivo de esta práctica es experimentar con las máquinas de vectores soporte, o *Support Vector Machine* (SVM), en la plataforma `Octave`. Para ello se utiliza la librería `LibSVM` que se puede descargar de:

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

Para poder emplear dicha librería se deben tener compilados los ejecutables: `svm-train` y `svm-predict`. Para usarla desde `Octave` se necesitan tener los ficheros de código `Octave` `svmtrain.mex` y `svmpredict.mex`. Todo ello en el directorio de trabajo.

Todos estos requerimientos se han tenido en cuenta en la elaboración del toolkit `apr_toolkit`, que está en el mismo directorio de esta práctica. Para la realización de esta práctica se aconseja copiar la carpeta `apr_toolkit` a un directorio de trabajo del usuario en el que se realizarán todos los ejercicios.

2. Ejemplo de entrenamiento y clasificación con SVM

Según la teoría de SVM, dado un conjunto de aprendizaje S, formado por N vectores y sus correspondientes etiquetas de clase, el sistema de aprendizaje obtiene los *multiplicadores de Lagrange*, α_n óptimos asociados a cada vector x_n de S, $1 \leq n \leq N$. Los multiplicadores no nulos definen los vectores de S que constituyen el *soporte* de la función discriminante lineal del clasificador (en dos clases, por el momento). Concretamente, a partir de los multiplicadores no-nulos de los correspondientes vectores soporte y de sus etiquetas de clase, se obtienen fácilmente el vector de pesos $\boldsymbol{\theta}$ y el término independiente o *umbral*, θ_0, que definen la función discriminante lineal del clasificador aprendido.

Por tanto, una vez obtenidos los multiplicadores (no-nulos), se puede construir de forma trivial un clasificador que prediga la etiqueta de clase asociada a cualquier vector (de prueba o "test").

LibSVM, implementa el proceso de aprendizaje mediante svm-train y svmtrain.mex, y la predicción mediante svm-predict y svmpredict.mex. Un detalle importante de esta librería es que los multiplicadores obtenidos por los programas de aprendizaje (y los que usan los programas de predicción) pueden ser positivos o negativos. Se asume que los positivos corresponden a vectores soporte de la clase +1 y los negativos de la −1. A todos los efectos, cualquiera de estos multiplicadores (que el toolkit denota como sv_coef), puede considerarse como el producto del verdadero multiplicador de Lagrange, por la etiqueta de clase del vector soporte correspondiente; es decir: $c_n\alpha_n$.

2.1. Corpus de ejemplo

Para introducir la funcionalidad básica de la librería LibSVM en Octave se propone emplear el corpus de hart que se encuentra en el directorio data. Es un corpus de dos clases donde los datos se representan en dos dimensiones ($\mathbb{R}^2$). Este conjunto de datos *no* es linealmente separable en su espacio de representación original, pero sí lo es en un espacio transformado mediante un *núcleo* (*"kernel"*) *de base radial* (RBF), cuya dimensionalidad es mucho mayor. Los pasos a seguir podrían ser los siguientes.

Primero ejecutamos Octave en el directorio apr_toolkit. Una vez en Octave, cargamos los ficheros con los datos y las etiquetas de clase tanto del corpus de entrenamiento como del de prueba:

```
octave:1> load data/hart/tr.dat ; load data/hart/trlabels.dat
```

Una vez cargados los datos se podemos visualizarlos mediante:

```
octave:2> plot (tr(:,1),tr(:,2),"x")
```

Si se examinan trlabels.dat y tslabels.dat, puede observarse que las etiquetas de clase son "1" y "2". LibSVM admite más de dos clases, que pueden denotarse mediante etiquetas numéricas (enteros positivos) cualesquiera. En el caso de dos clases, estas etiquetas se convierten internamente en +1 y −1 y esto se refleja en los los signos de los multiplicadores (sv_coef), como se ha explicado anteriormente.

Para poder distinguir los vectores de cada clase se pueden dibujar los de la clase 1 y los de la clase 2 de manera separada:

```
octave:3> plot(tr(trlabels==1,1),tr(trlabels==1,2),"x",tr(trlabels==2,1),
tr(trlabels==2,2),"s")
```

Se observa cómo estos datos *no* son linealmente separables (en su espacio original, $\mathbb{R}^2$).

2.2. Entrenamiento

Una breve ayuda para el uso de svmtrain se obtiene invocándolo sin argumentos:

```
octave:4> svmtrain
Usage: model = svmtrain(training_label_vector,
               training_instance_matrix, 'libsvm_options');
libsvm_options:
[...]
```

Como resultado podemos ver los diferentes parámetros que podemos usar para el aprendizaje: tipo de kernel, parámetro $\mathcal{C}$ (para conjuntos de entrenamiento no-separables), grado del kernel si es polinomial, etc. Realizaremos un entrenamiento con kernel tipo RBF (`-t 2`):

```
octave:5> res = svmtrain(trlabels, tr, '-t 2 -c 1');
.*.*
optimization finished, #iter = 2298
nu = 0.174579
obj = -108.403744, rho = -0.096434
nSV = 398, nBSV = 91
Total nSV = 398
```

El resultado del proceso de entrenamiento se ha almacenado en la variable `res`, que es un tipo estructurado que contiene, entre otros: los parámetros del modelo, los índices de los vectores que han resultado ser vectores soporte, el multiplicador de Lagrange (multiplicado por la correspondiente etiqueta de clase, $+1$ o -1) asociado a cada vector soporte, etc. El contenido completo de `res` puede visualizarse mediante:

```
octave:6> res
```

Se puede acceder a cada uno de los campos de `res` es con el operador ".". Por ejemplo se pueden mostrar los índices de los vectores soporte mediante:

```
octave:7> res.sv_indices
```

Y para mostrar los multiplicadores de Lagrange (multiplicados por las correspondientes etiquetas de clase, $+1$ o -1):

```
octave:8> res.sv_coef
```

Ejercicio propuesto: Representa gráficamente los vectores soporte, superponiéndolos a las muestras de entrenamiento.

2.3. Clasificación y estimación de la tasa de acierto

A partir del modelo entrenado en la etapa anterior (almacenado en la variable `res`), se pueden clasificar los vectores de un conjunto de prueba, que hay que cargar previamente:

```
octave:9> load data/hart/ts.dat ; load data/hart/tslabels.dat
```

La clasificación se realiza mediante la orden `svmpredict`. Como en el caso de `svmtrain`, para ver todas las opciones de `svmpredict` basta invocar `svmpredict` sin argumentos. Tanto en `svmtrain` como en `svmpredict` podremos poner entre ' ' cualquiera de las opciones que admite la librería `LibSVM`.

```
octave:10> svmpredict(tslabels,ts, res,' ');
Accuracy = 98.1% (981/1000) (classification)
```

El programa `svmtrain` *no* calcula los intervalos de confianza. Por tanto, estos intervalos los deberemos calcular nosotros como se ha visto en la practica 0.

3. Un pequeño ejercicio completo de aprendizaje (a entregar)

En el subdirectorio `data/mini` se encuentran dos pequeños conjuntos de datos de entrenamiento en dos dimensiones: `(trSep.dat, trSeplabels.dat)` y `(tr.dat, trlabels.dat)`. El primero es linealmente separable (sin *kernel*) y el segundo no. Para cada uno de estos conjuntos:

1. Obtener una SVM sin kernel (ses decir, kernel tipo lineal). Para simular la optimización estándar del caso separable basta usar un valor grande de $\mathcal{C}$;
2. Determinar a) los multiplicadores de Lagrange, α, asociados a cada dato de entrenamiento, b) los vectores soporte, c) el vector de pesos y umbral de la función discriminante lineal, y d) el margen correspondiente;
3. Calcular los parámetros de la frontera lineal (recta) de separación;
4. Representar gráficamente los vectores de entrenamiento, marcando los que son vectores soporte, y la recta separadora correspondiente.

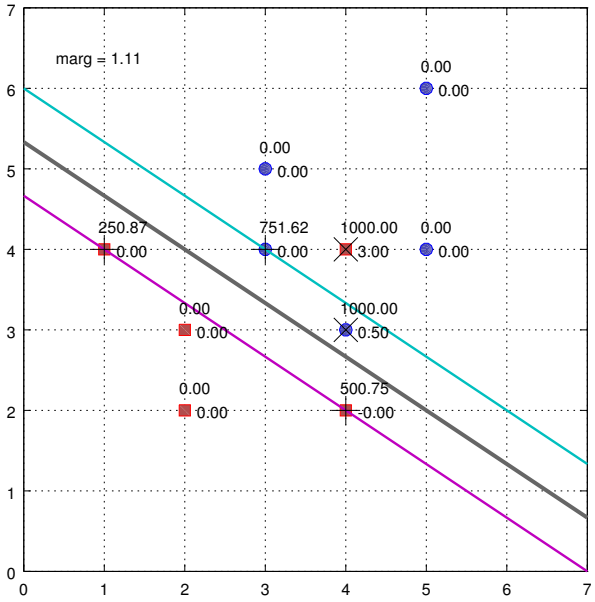
Además, para el conjunto no-separable:

2.1 Determinar los valores de tolerancia de margen, ζ, asociados a cada dato de entrenamiento;

4.1 En la representación gráfica, marcar los vectores soporte "erróneos";

4.2 Obtener los resultados (gráficas) indicados anteriormente para diversos valores relevantes de $\mathcal{C}$.

Un ejemplo "ideal" de representación gráfica para el caso no-separable, obtenido con $\mathcal{C} = 1000$, se muestra en la siguiente figura:



4. Ejercicios con un corpus de dos clases

Se propone la realización de un experimento de clasificación completo: entrenamiento y evaluación. Para ello se empleará un corpus, de dos clases para detección de *Spam* compuesto por 3220 muestras de aprendizaje y 1381 de test. Los documentos se representan mediante vectores de 58 componentes, que son proporcionales a las frecuencias de uso de un conjunto de 58 palabras clave. Los ficheros de entrenamiento y test se encuentran en el directorio `data/spam`.

Se pide determinar los parámetros del modelo, concretamente el tipo de kernel y el valor de $\mathcal{C}$, para los que se obtienen mejores resultados. Se deberá presentar una tabla y/o gráfica donde se muestre no solo el mejor resultado obtenido, sino también otros resultados relevantes que permitan poner de manifiesto la tendencia a mejorar o empeorar del modelo según varían el o los parámetros considerados.

Recordad que toda estimación de la probabilidad de error o de acierto de un clasificador, debe ir acompañada de sus correspondientes intervalos de confianza (al 95 %).

5. Ejercicios con un corpus multi-clase

Se propone la realización de un experimento de clasificación completo para un corpus de 10 clases (`USPS`) para reconocimiento de dígitos manuscritos. Está compuesto por 7291 muestras de aprendizaje y 2007 de test. Las dígitos se representan mediante vectores de 256 componentes, proporcionales a los valores de gris de imágenes de 16×16 píxeles. Los ficheros de entrenamiento y test se encuentran en el directorio `usps` de `data`. Se pide:

a) Determinar los parámetros del modelo, concretamente el tipo de kernel y el valor de $\mathcal{C}$, para los que se obtienen mejores resultados. Se deberá presentar una tabla y/o gráfica donde se muestre no solo el mejor resultado obtenido, sino también otros resultados relevantes que permitan poner de manifiesto la tendencia a mejorar o empeorar del modelo según varían el o los parámetros considerados.

   Recordad que toda estimación de la probabilidad de error o de acierto de un clasificador, debe ir acompañada de sus correspondientes intervalos de confianza (al 95 %).

b) Visualizar algunas de las imágenes de aprendizaje y algunos de los vectores (imágenes) soporte obtenidos en el mejor clasificador. Para ello pueden ser de ayuda los comandos de `Octave` ‘‘`imshow`’’ y ‘‘`reshape`’’.