Máquinas de Vetores de Suporte
Supprot Vector Machine

Aluizio Fausto Ribeiro Araújo

Universidade Federal de Pernambuco

Centro de Informática

Conteúdo

Introdução

- As Máquinas de Vetores Suporte (*Support Vector Machines* - *SVMs*) são baseadas na Teoria de Aprendizagem Estatística (TAE) proposta por Vapnik e Chernovemkis nas décadas de 1960 e 1970 (Vapnik, 1995);

- A Teoria de Aprendizagem Estatística visa encontrar condições matemáticas para escolha de uma função que separe dados a serem aprendidos em problemas de categorização. Esta separação deve considerar o menor erro de treinamento ao mesmo tempo que deve maximizar a capacidade de generalização de um classificador (para aprendizagem supervisionada);

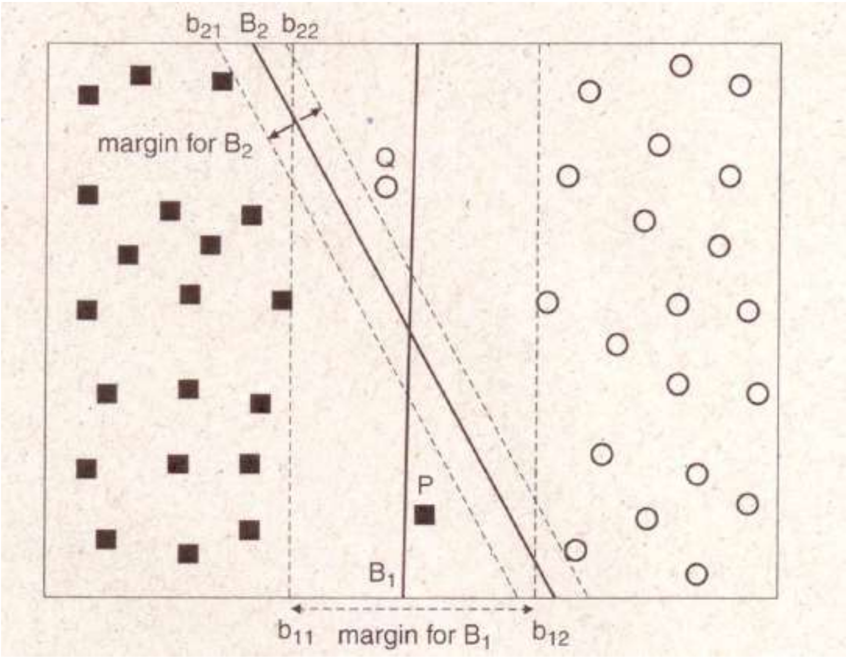
Introdução

- Método para escolha de função de separação de dados em categorias: Minimizar o erro de treinamento e a complexidade da função selecionada,
  - O nível da complexidade está associado com a capacidade de generalização;

- O conceito dimensão Vapnik-Chervonenkis (VC) é útil para obter as condições mencionadas acima. Ela mede a complexidade das hipóteses (funções) consideradas por um algoritmo de busca por soluções;

Introdução

- Função de separação de dados em categorias:



- Tipos de separações do espaço:
  - B1 faz a separação com maior margem;
  - B2 faria a separação considerando todos os dados como verdadeiros;
  - Pode-se adotar um critério de relaxamento de restrições (as fronteiras);

Introdução

- Características favoráveis ao uso de SVMs:

i. Capacidade de generalização alta, evitando sobretreinamento (*overfitting*);
ii. Robustez para categorização de dados com dimensões altas que tendem a ser sobretreinados em outros classificadores pois muitas micro-características são pouco discriminantes;
iii. Convexidade da função objetivo pois esta é uma função quadrática com apenas um ótimo global;
iv. Teoria bem estabelecida nas áreas de matemática e estatística.

Introdução

- Treinamento: Supervisionado ou Não-supervisionado;

- Classes de problemas em que são comumente usadas SVM:

i. Classificação de padrões;
ii. Regressão;
iii. Reconhecimento de padrões;
iv. Agrupamento.

- Exemplos de áreas de aplicação (dimensão alta dos dados):
  - Detecção de faces em imagens; categorização de textos; regressão linear; bioinformática.

Centro de Informática UFPE

Classificadores Binários
Função de Separação

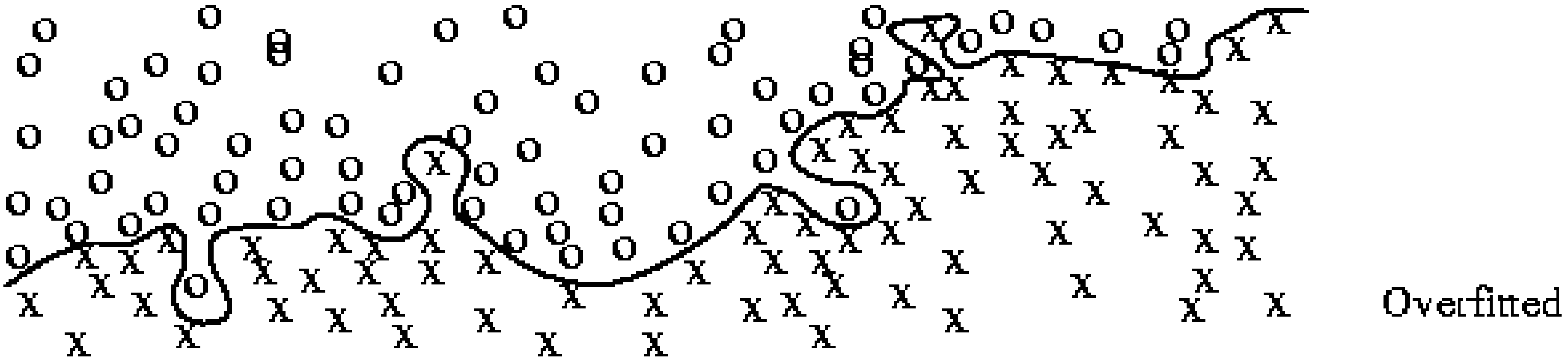
- A tarefa a ser realizada:
  - Um conjunto de dados finito $\{(\mathbf{x}, y)\}$ onde **x** representa uma entrada e *y* uma das duas classes à qual ela pode pertencer.

{0,1}, {-1,+1}, {o,x}, {♦,o}...

- A solução:
  - Aprender uma função que baseada em um grupo de padrões de treinamento (que pode ser muito pequeno), possa associar dados não vistos anteriormente à classe correta.

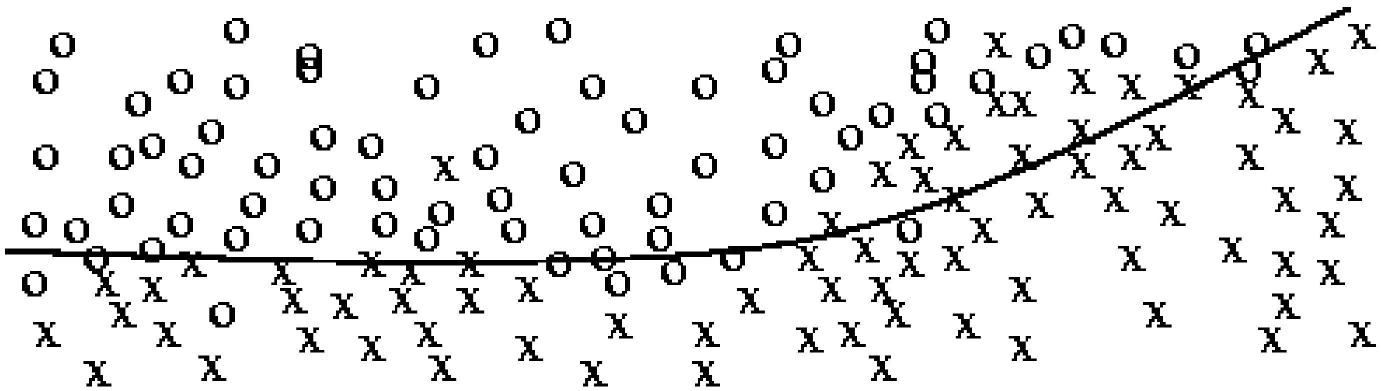
Classificadores Binários
Função de Separação

- A abordagem clássica é tomar uma função, como um polinômio, e ajustar seus parâmetros para separar os dados de treinamento colocando-os em uma das duas classes.
- No treinamento, aumentando o grau do polinômio é possível reduzir o erro nos dados de treinamento.
  - Esta estratégia pode levar ao sobretreinamento (*overfitting*) implicando em baixa capacidade de generalização.



Classificadores Binários
Função de Separação

- Procedimento alternativo:
  - Redução significativa do grau do polinômio.
  - Esta opção pode levar ao aumento do erro de classificação para os dados de treinamento, o *underfitting*.



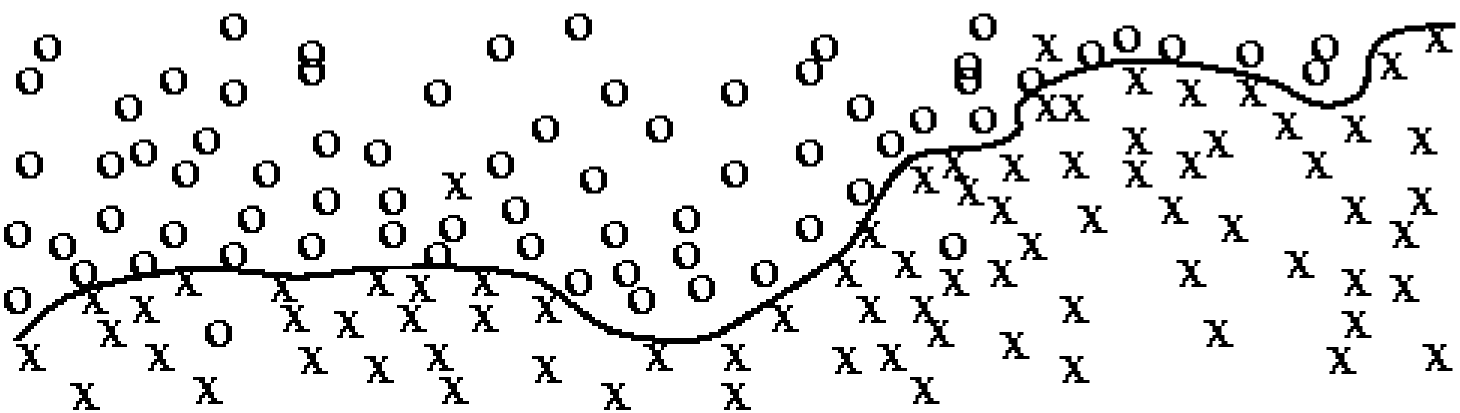
Aprendizagem Estatística
Minimização do Risco Estrutural

- A teoria de Aprendizagem Estatística visa determinar condições matemáticas para escolha de um classificador com desempenho desejado para conjuntos de treinamento e teste.
- É sempre possível encontrar um polinômio de alto grau que separe duas classes quaisquer.
  - Logo o risco empírico pode sempre ser minimizado para zero ao custo de uma função de decisão muito complexa.
  - A distribuição dos dados de treinamento pode não ser tão complexa mas, fatores como ruído podem fazer a distribuição parecer mais complexa para a máquina de aprendizagem.
- A teoria da Minimização do Risco Estrutural (MRE) formaliza o conceito de controle de complexidade e minimização de risco empírico.

Aprendizagem Estatística
Minimização do Risco Estrutural

- Se uma máquina de aprendizagem, como rede neural ou máquina de vetor suporte, pretende minimizar o risco esperado, ela deve minimizar tanto o risco empírico quanto o termo de complexidade.

$$\text{risco esperado} \leq \text{risco empírico} + \text{termo de complexidade}$$



Well-Trained

Aprendizagem Estatística
Minimização do Risco Empírico (treinamento)

- Critérios considerados para escolha de um classificador (*f*):
  - Minimização do risco empírico, relativo a erro durante o treinamento, no qual se considera:
    - O número de pares entrada-saída.
    - A função de custo que relacione a previsão de saída com a saída desejada.

$$R_{emp}(f) = \frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n}\frac{1}{2}c(f(\mathbf{x_i}), y_i)$$

Aprendizagem Estatística
Minimização do Risco Funcional (generalização)

- Critérios considerados para escolha de um classificador (*f*):
  - Minimização do risco funcional, relativo a erro durante a validação (generalização), no qual se considera:
    - Função de custo relacionando a previsão de saída com a saída desejada.
    - Distribuição de probabilidade dos pares.

$$R(f) = \int \frac{1}{2} c(f(\mathbf{x}), y) dP(\mathbf{x}, y)$$

Aprendizagem Estatística
Minimização do Risco Funcional (generalização)

- Limites do risco funcional determinam a escolha do classificador:
  - Os limites do risco funcional para funções sinal (classe de funções aqui considerada) relacionam o número de exemplos de treinamento, o risco empírico para este conjunto e a complexidade do espaço de hipóteses.
    - O risco funcional de uma função classificadora é minimizado se o número de observações do conjunto de treinamento for suficientemente grande.
  - A complexidade do espaço de hipóteses é medida através da dimensão Vapnik-Chervonenkis (VC).
    - O risco médio de uma função classificadora é minimizado se a dimensão VC do conjunto destas funções for suficientemente pequena.

Aprendizagem Estatística
Dimensão-VC

- A dimensão Vapnik-Chervonenkis (VC) é entendida como uma medida da capacidade ou complexidade de um conjunto de funções que podem ser aprendidas por um algoritmo estatístico de classificação binária, originalmente definida por Vladimir Vapnik e Alexey Chervonenkis;
- É determinada pela cardinalidade do maior conjunto de pontos que um algoritmo pode separar corretamente:
  - Um conjunto de *n* pontos que podem ser corretamente separados em classes dicotômicas por um classificador, atribuição correta de todos 2^n rótulos, e que não seja possível encontrar nenhum conjunto de n+1 pontos que permita particionamento válido;
  - Então a dimensão VC é igual a *n*.

Aprendizagem Estatística
Dimensão-VC

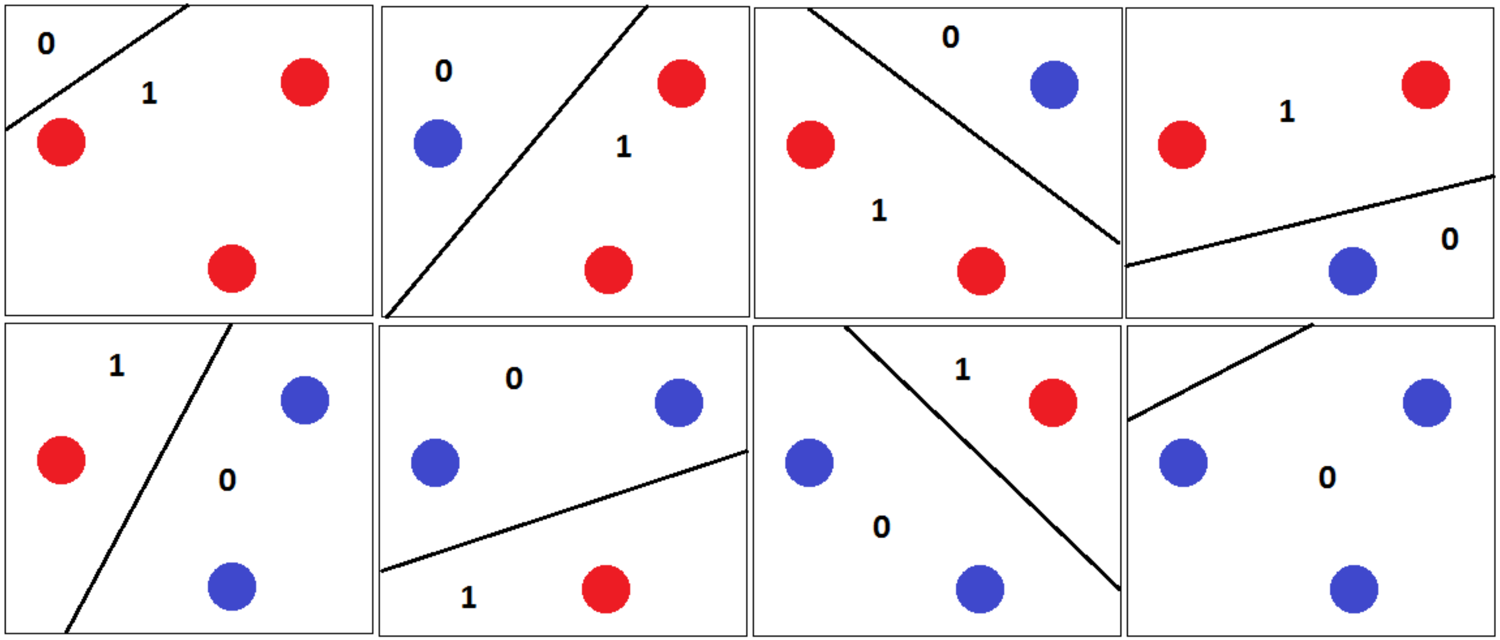
- Definição de Dimensão-VC:
  - Definição 1 (Particionamento de conjunto): Um subconjunto S de instâncias de um conjunto X é particionado por uma coleção de funções F se $\forall\, S' \subseteq S$, existe uma função $f \in F$ tal que:

$$f(x) = \begin{cases} 1, & x \in S' \\ 0, & x \in S - S' \end{cases}$$

  - Definição 2 (Dimensão-VC): A dimensão VC de um conjunto de funções F é definida como a cardinalidade do maior conjunto de dados que pode ser particionado por F.

Aprendizagem Estatística Dimensão-VC

- Seja *h* = {conjunto de classificadores lineares 2D} de forma que quaisquer 3 pontos podem ser classificados por *h* corretamente com a separação do hiperplano,



- A dimensão VC é *h*= 3 pois para quaisquer 4 pontos no plano 2D, um classificador linear não separa todas as combinações dos pontos.

Aprendizagem Estatística
Minimização do Risco Estrutural

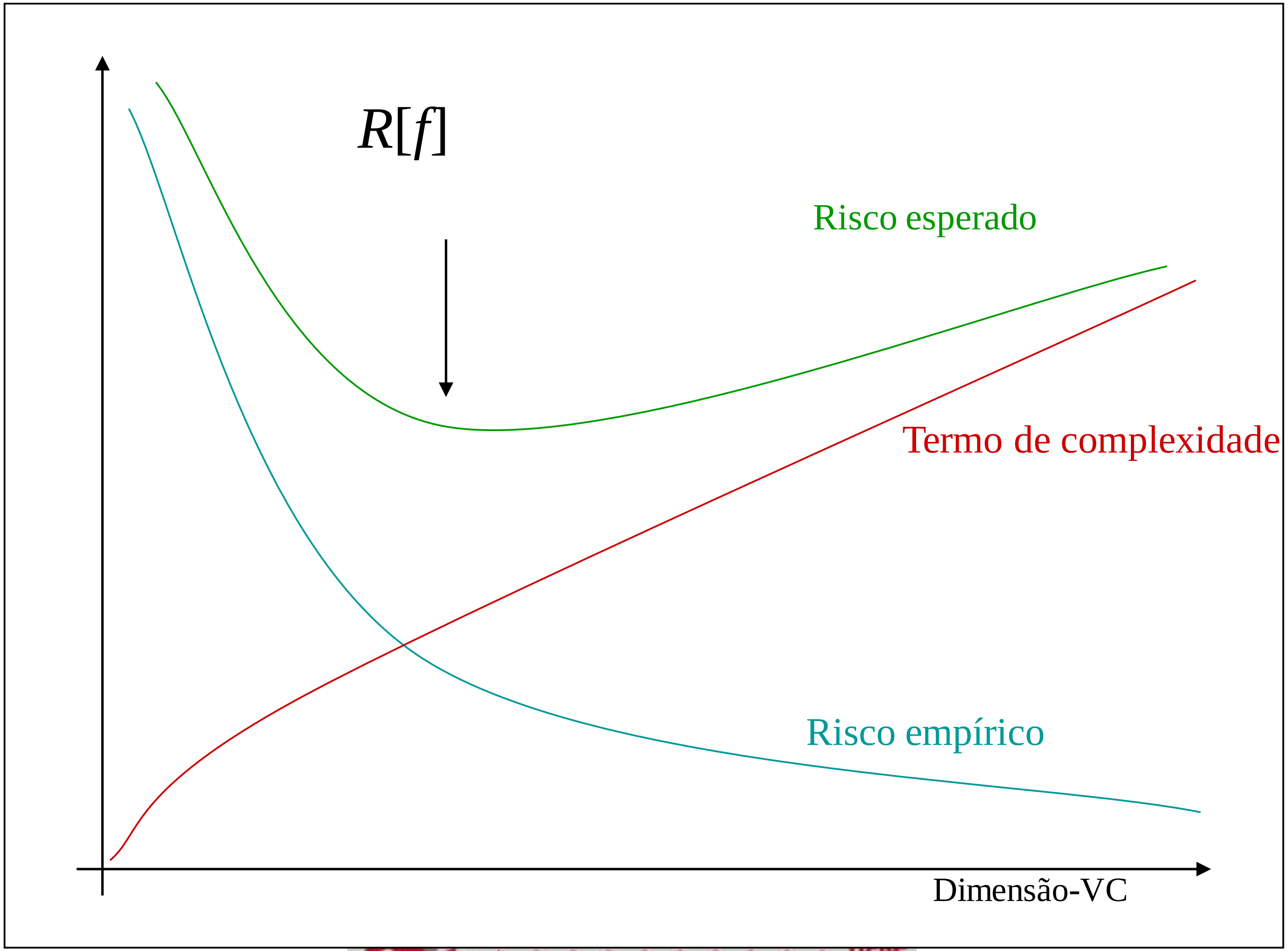
- A equação de delimitação pode ser re-escrita empregando a dimensão-VC, isto é, usando *h*.
  - Probabilidade da equação abaixo ser verdadeira: 1-δ.
  - O número de exemplos de treinamento é *n*.

$$\text{risco esperado} \leq \text{risco empírico} + \text{termo de complexidade}$$

$$R[f] \leq R_{emp}[f] + \sqrt{\frac{h\left(\ln\frac{2n}{h}+1\right) - \ln\frac{\delta}{4}}{n}}$$

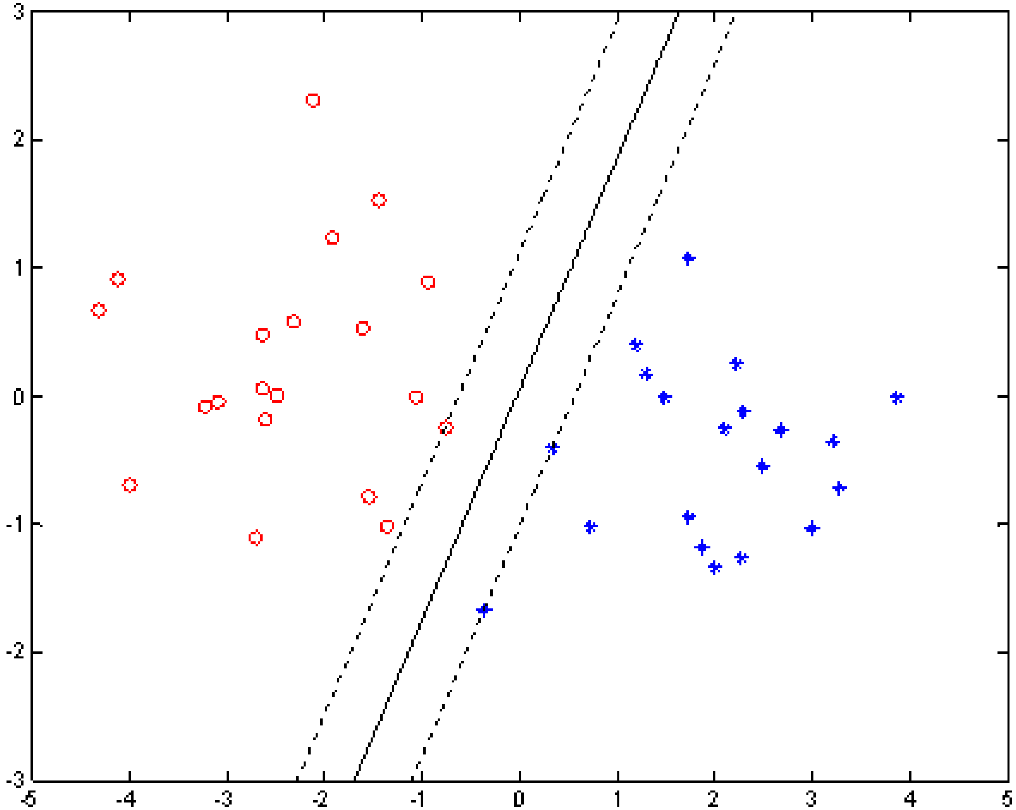
  - O crescimento de δ acarreta o aumento do risco esperado.

Aprendizagem Estatística
Minimização do Risco Estrutural



Aprendizagem Estatística
Margem de Separação

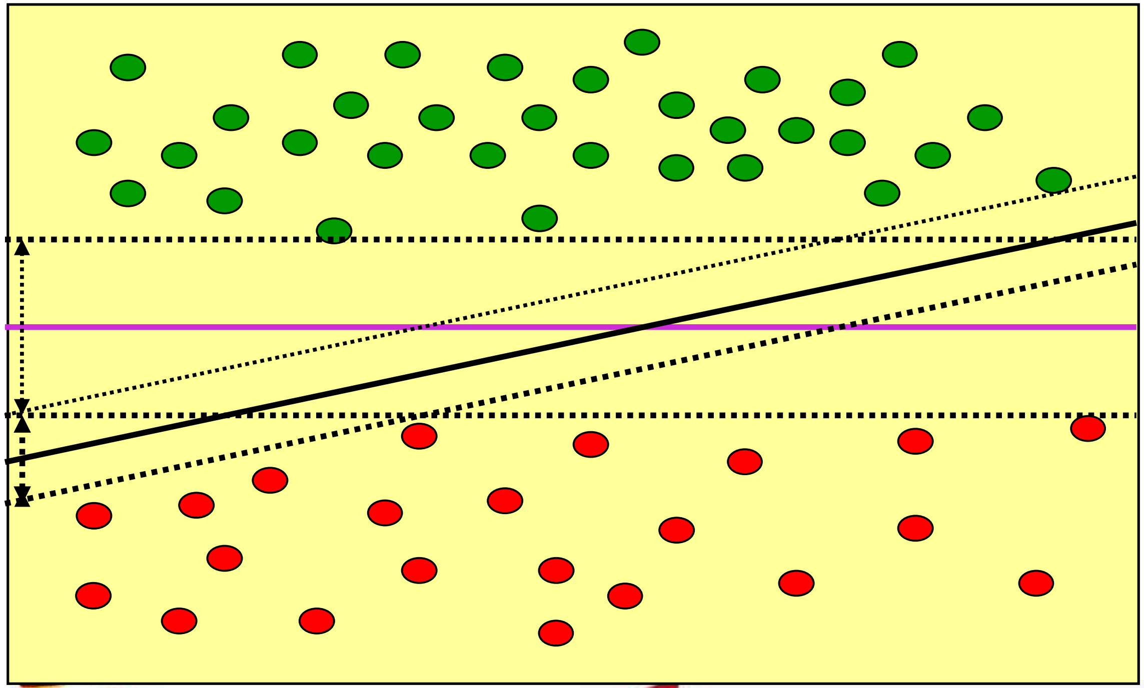
- A margem de separação de um classificador é definida como a menor distância entre exemplos do conjunto de treinamento e o hiperplano utilizado na separação destes dados em classes.



U F P E

Aprendizagem Estatística
Margem de Separação

- Podem existir vários hiperplanos separando os dados corretamente, contudo existe ao menos um melhor que os demais.
  - Pode-se notar que o hiperplano com maior margem de separação tem melhor capacidade de generalização pois diminui a possibilidade de erro.

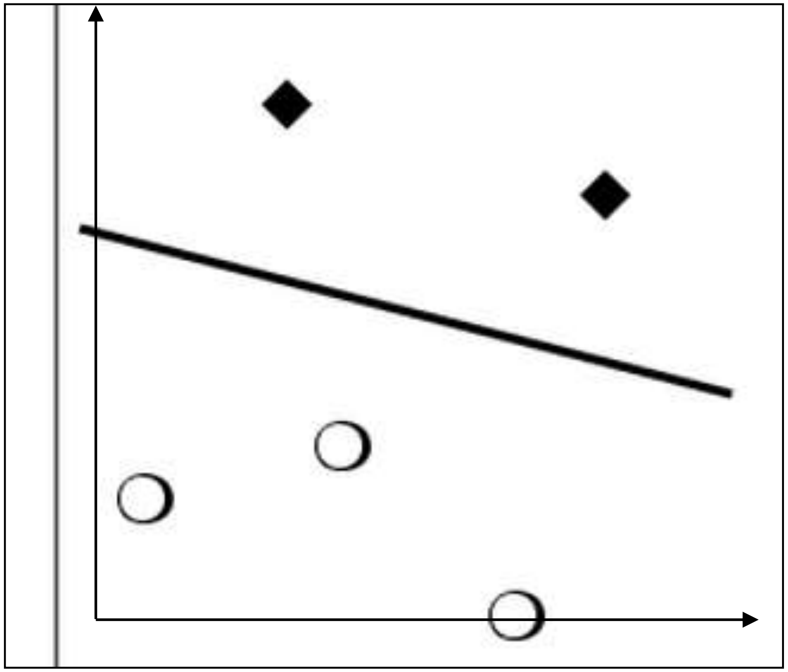


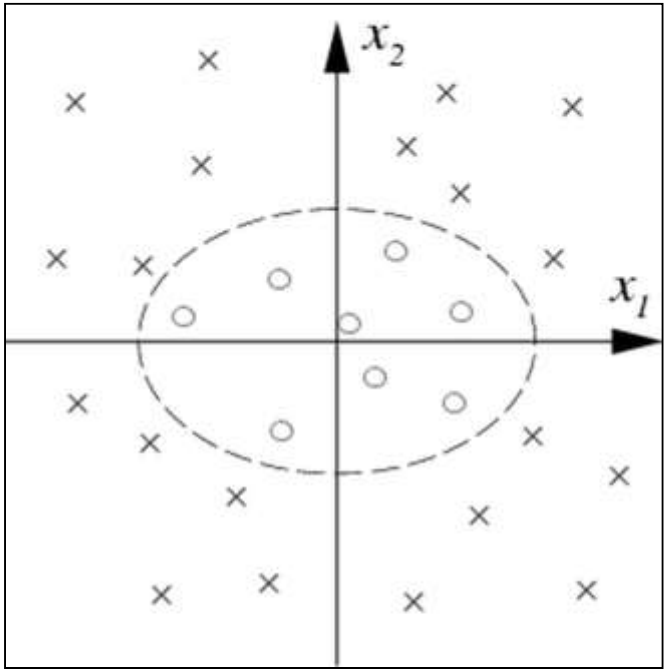
•Quanto maior a margem de um classificador menor será sua dimensão VC (prova está em teorema).

•Hiperplano com margem alta e que minimize os erros de treinamento e teste é chamado de hiperplano ótimo.

SVM com Margens Rígidas
Separabilidade Linear

- Um conjunto de pontos de treinamento é chamado linearmente separável se existe ao menos um hiperplano que é capaz de separá-los corretamente.





SVM com Margens Rígidas Hiperplano de Separação

- As SVMs foram originalmente projetadas para classificação de dados em duas classes, gerando dicotomias,
  - Problema de classificação considerado: Classificar objetos *m*-dimensionais (vetores) nas classes +1 e –1;
  - Conjunto de treinamento: formado por *n* observações dos vetores de entradas com suas respectivas classificações binárias;
- Um conjunto de dados é linearmente separável se for possível dividir seus elementos em duas classes através de ao menos um hiperplano;
- Os classificadores lineares podem ser definidos por:

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

- O produto escalar envolve um vetor normal ao hiperplano (**w**) e o vetor de entrada. O par (**w**,*b*) é determinado durante o treinamento;

UFPE

Centro de Informática UFPE

SVM com Margens Rígidas
Hiperplano de Separação

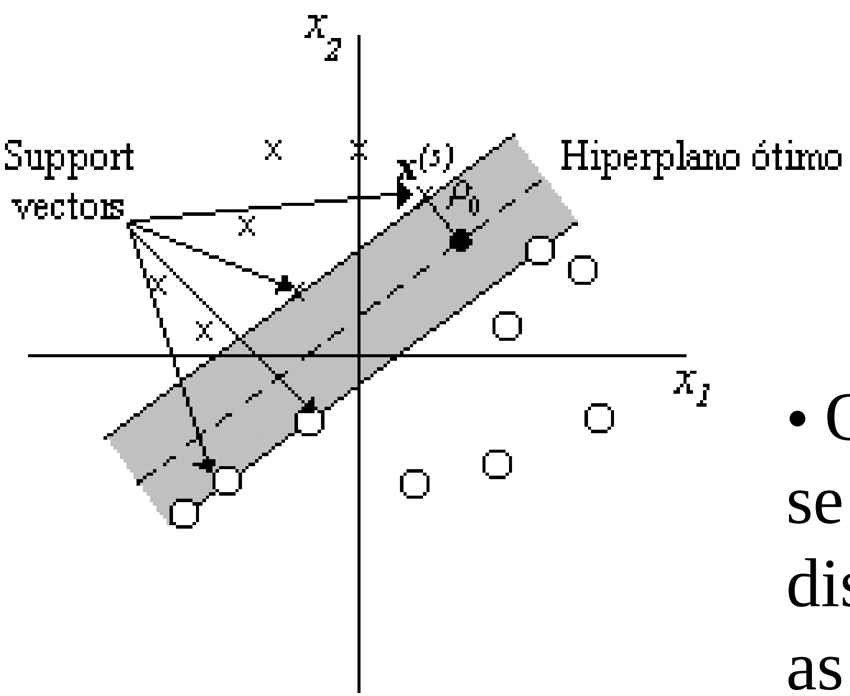
- A equação do hiperplano divide o espaço de entrada em duas regiões que produzem dois tipos de saídas através da uma função sinal:

$$y_i = \begin{cases} +1, & \text{se} \quad \mathbf{w}^T \cdot \mathbf{x}_i + b > 0 \\ -1, & \text{se} \quad \mathbf{w}^T \cdot \mathbf{x}_i + b < 0 \end{cases}$$

- Logo, um conjunto de treinamento será linearmente separável se for possível determinar ao menos um par ($\mathbf{w}$,b) que faça a função sinal classificar corretamente os exemplos de tal conjunto;

SVM com Margens Rígidas
Hiperplano Ótimo

- Deseja-se determinar o hiperplano ótimo para padrões linearmente separáveis
- Hiperplano ótimo tem máxima de separação (ρ_0) máxima;



$\mathbf{w_o}^T\mathbf{x} + b_\mathbf{o} = 0$, eq. Hiperplano ótimo

$\mathbf{w}_o$, vetor de pesos ótimo

b_o, bias ótimo

- Os vetores suporte são aqueles que se situam sobre os hiperplanos que distam ρ_0 do hiperplano que separa as classes.

SVM com Margens Rígidas
Hiperplano Ótimo

- O hiperplano ótimo é definido pelos valores ótimos do vetor de pesos ($\mathbf{w_o}$) e do bias (b_o) da seguinte forma: $\mathbf{w_o}^T\mathbf{x} + b_o = 0$.

- A função discriminante $g(\mathbf{x}) = \mathbf{w_o}^T\mathbf{x} + b_o$ dá uma medida algébrica da distância de $\mathbf{x}$ para o hiperplano ótimo;
- Neste caso, pode-se escrever:

$$\mathbf{x} = \mathbf{x}_p + r\frac{\mathbf{w}_0}{\|\mathbf{w}_0\|}$$

onde $\mathbf{x_p}$ é a projeção de $\mathbf{x}$ no hiperplano ótimo.

Para encontrar a distância r faz-se:

$$g(\mathbf{x}) = \mathbf{w}_0^T\mathbf{x} + b_0 = \mathbf{w}_0^T(\mathbf{x}_p + r\frac{\mathbf{w}_0}{\|\mathbf{w}_0\|}) + b_0 = \mathbf{w}_0^T\mathbf{x}_p + r\frac{\mathbf{w}_0^T\mathbf{w}_0}{\|\mathbf{w}_0\|} + b_0$$

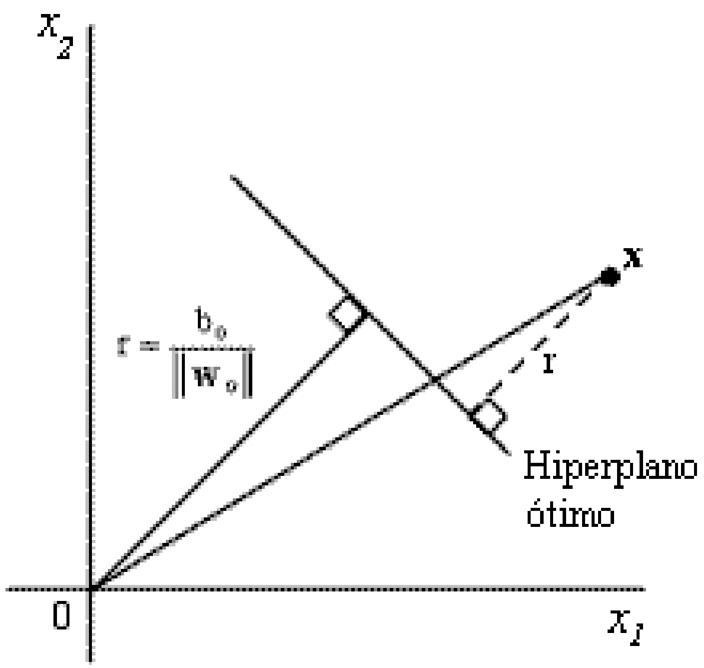
UFPE

Centro de Informática UFPE

SVM com Margens Rígidas
Hiperplano Ótimo

$$\therefore g(\mathbf{x}) = (\mathbf{w}_0^T \mathbf{x}_p + b_0) + r\frac{\|\mathbf{w}_0\|^2}{\|\mathbf{w}_0\|} \therefore g(\mathbf{x}) = g(\mathbf{x}_p) + r\|\mathbf{w}_0\| \therefore r = \frac{g(\mathbf{x})}{\|\mathbf{w}_0\|}$$

Se **x** estiver na origem então $r = \frac{b_0}{\|\mathbf{w}_0\|}$



Se $b_0 > 0$, a origem está no lado positivo do hiperplano ótimo;
Se $b_0 < 0$, a origem está no negativo do hiperplano ótimo;
Se $b_0 = 0$, o hiperplano ótimo passa pela origem.

SVM com Margens Rígidas
Vetores de Suporte

- Para um conjunto de treinamento linearmente separável, pode-se re-escalonar que **w** e b para que os pontos mais próximos do hiperplano separador que satisfaçam $|\mathbf{w}^T.\mathbf{x} + b| = 1$,
  - Isto permite a obtenção da representação canônica do hiperplano que facilita futuras considerações na determinação do hiperplano ótimo;

- Um vetor suporte é definido como: $g(\mathbf{x}^{(s)}) = \mathbf{w}_0^T\mathbf{x}^{(s)} \pm b_0 = \pm 1$,

  para $d^{(s)} = \pm 1$.

- Os vetores suporte são os mais difíceis para classificar por estarem mais próximos da superfície de decisão.

Centro de Informática UFPE

SVM com Margens Rígidas
Vetores de Suporte

- o valor de r dos vetores suporte para o hiperplano ótimo é calculada:

$$r = \frac{g(\mathbf{x}^{(s)})}{\|\mathbf{w}_0\|} = \begin{cases} \dfrac{1}{\|\mathbf{w}_0\|} & \text{se } d^{(s)} = +1 \\ -\dfrac{1}{\|\mathbf{w}_0\|} & \text{se } d^{(s)} = -1 \end{cases}$$

- Tem-se que ρ_0 é o valor ótimo da margem de separação entre as duas classes que formam o conjunto de treinamento. Assim tem-se que a expressão a seguir mede a distância entre os hiperplanos $\mathbf{w}_0{}^T\mathbf{x}^{(s)} \pm b_0 = \pm 1$:

$$\rho_0 = 2r = \frac{2}{\|\mathbf{w}_0\|}$$

- Conclui-se da expressão acima que a maximização da margem de separação é obtida pela minimização da norma Euclidiana de $\mathbf{w}_o$.

Centro de Informática UFPE

UFPE

SVM com Margens Rígidas Determinação dos Pesos Ótimos

- O hiperplano ótimo definido por $\mathbf{w}_0^T\mathbf{x} + b_0 = 0$ é único pois o vetor de pesos ótimo $\mathbf{w}_o$ dá a separação máxima possível de exemplos positivos e os negativos. A condição ótima é atendida pela minimização da norma euclidiana do vetor de pesos **w**.

- O problema de otimização com restrições a ser resolvido é:

  - Dado o conjunto de treinamento ($\mathbf{x}_i$, d_i), $i=1, \ldots, N$; Encontre o vetor de pesos **w** e o *bias* b ótimos que satisfaçam às restrições: $d_i(\mathbf{w}^T\mathbf{x}_i + b) \geq 1$, e **w** minimize a função de custo: $\Phi(\mathbf{w}) = (1/2)\,\mathbf{w}^T\mathbf{w}$

  - O fator de escala (1/2) é incluído por conveniência, a função de custo é convexa, as restrições são lineares.

  - Este problema pode ser resolvido através do Método de Multiplicadores de Lagrange.

SVM com Margens Rígidas
Pesos Ótimos por Multiplicadores de Lagrange

- Método dos Multiplicadores de Lagrange: Empregado para resolver problemas de extremos sujeitos a restrições de igualdade.
- Seja o problema a seguir:

$$\begin{array}{lll} \max\ (\min) & f(\mathbf{x}) & \\ \text{s.a.} & g_i(\mathbf{x}) = 0, & i=1,\ldots,N \end{array}$$

onde f e g_i (i=1,..,N) são funções reais de $n>N$ variáveis e duas vezes diferenciáveis num determinado conjunto D.

- Chama-se função de Lagrange ou lagrangiano à função:

$$L(\mathbf{x},\boldsymbol{\lambda}) = f(\mathbf{x}) + \sum_{i=1}^{N} \lambda_i g_i(\mathbf{x})$$

SVM com Margens Rígidas

Pesos Ótimos por Multiplicadores de Lagrange

- Função Lagrangiana:

$$J(\mathbf{w},b,\alpha)=\frac{1}{2}\mathbf{w}^T\mathbf{w}-\sum_{i=1}^{N}\alpha_i\left[d_i\left(\mathbf{w}^T\mathbf{x}_i+b\right)-1\right]$$

- O problema consiste em encontrar um ponto de sela que minimize *J*(.) em relação a **w** e *b* e maximize-a com respeito aos multiplicadores de Lagrange (α),
  - Minimizando $J(\mathbf{w},b,\alpha)$ em relação a **w** e *b* (condições de Kuhn-Tucker para o problema):.

$$\text{Condição 1:}\qquad \frac{\partial J(\mathbf{w},b,\alpha)}{\partial \mathbf{w}}=0\;\therefore\;\mathbf{w}=\sum_{i=1}^{N}\alpha_i d_i\mathbf{x}_i$$

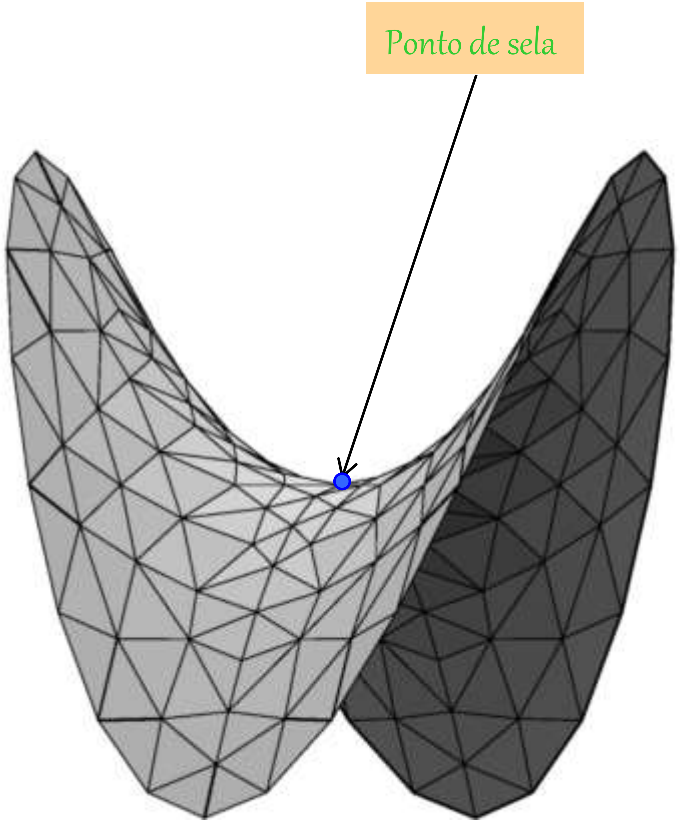
$$\text{Condição 2:}\qquad \frac{\partial J(\mathbf{w},b,\alpha)}{\partial b}=0\;\therefore\;\sum_{i=1}^{N}\alpha_i d_i=0$$

Centro de Informática UFPE

U F P E

SVM com Margens Rígidas
Pesos Ótimos por Multiplicadores de Lagrange

- Ponto de sela:



SVM com Margens Rígidas

Pesos Ótimos por Multiplicadores de Lagrange

- Expandindo a Função Lagrangiana tem-se:

$$J(\mathbf{w},b,\alpha)=\frac{1}{2}\mathbf{w}^T\mathbf{w}-\sum_{i=1}^{N}\alpha_i[d_i(\mathbf{w}^T\mathbf{x}_i+b)-1]\therefore$$

$$J(\mathbf{w},b,\alpha)=\frac{1}{2}\mathbf{w}^T\mathbf{w}-\sum_{i=1}^{N}\alpha_i d_i \mathbf{w}^T\mathbf{x}_i-b\sum_{i=1}^{N}\alpha_i d_i+\sum_{i=1}^{N}\alpha_i$$

- Para a expressão acima, tem-se que

$$\sum_{i=1}^{N}\alpha_i d_i=0;$$

$$\mathbf{w}=\sum_{i=1}^{N}\alpha_i d_i \mathbf{x}_i;$$

$$\mathbf{w}^T\mathbf{w}=\sum_{i=1}^{N}\alpha_i d_i \mathbf{w}^T\mathbf{x}_i=\sum_{i=1}^{N}\sum_{j=1}^{N}\alpha_i\alpha_j d_i d_j \mathbf{x}_i^T\mathbf{x}_j$$

-As expressões à esquerda geram o problema dual em função de α.

- Os vetores $\mathbf{x}_i$ e $\mathbf{x}_j$ são o vetor de entrada e o padrão de entrada pertencente ao j-ésimo exemplo,

SVM com Margens Rígidas
Pesos Ótimos por Multiplicadores de Lagrange

- Problema dual (problema de programação quadrática): Determinação dos multiplicadores de Lagrange que maximizem a Função Objetivo:

$$\text{Max} \quad J(\mathbf{w}, b, \alpha) = Q(\alpha) = \sum_{i=1}^{N} \alpha_i - \frac{1}{2} \sum_{i=1}^{N} \sum_{j=1}^{N} \alpha_i \alpha_j d_i d_j \mathbf{x}_i^T \mathbf{x}_j$$

$$\text{s.a.} \quad \sum_{i=1}^{N} \alpha_i d_i = 0$$

$$\alpha_i \geq 0, \quad \text{para } i = 1, 2, \ldots, N$$

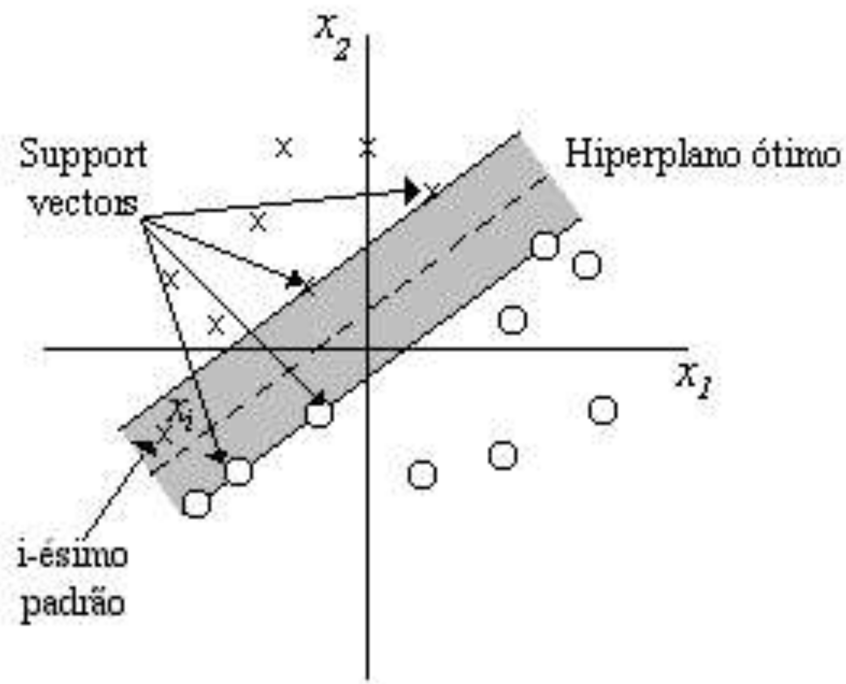
- Após determinar os multiplicadores ótimos ($\alpha_{0,\,i}$), $\mathbf{w}_0$ e b_0 são obtidos:

$$\mathbf{w}_0 = \sum_{i=1}^{N} \alpha_{0,\,i} d_i \mathbf{x}_i \qquad b_0 = 1 - \mathbf{w}_0^{\mathrm{T}} \mathbf{x}^{(s)}, \quad \text{para } d^{(s)} = 1$$

SVM com Margens Rígidas
Padrões Não-linearmente Separáveis

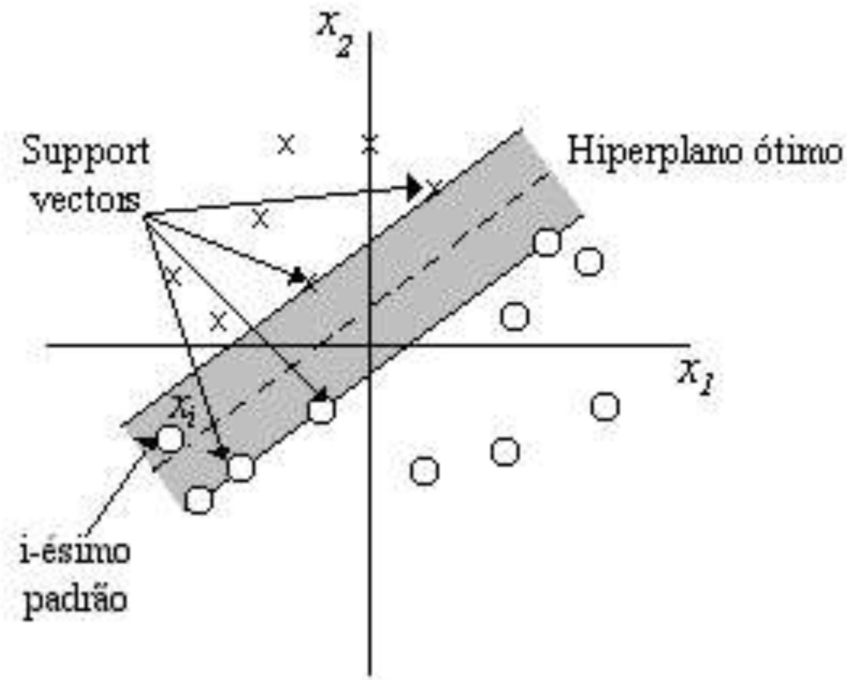
A condição $d_i(\mathbf{w}^T\mathbf{x}_i + b) \geq 1$, para $i = 1, 2, \ldots N$

pode ser violada em duas situações:



- 1^a situação de violação:
  - Ponto $(\mathbf{x}_i, d_i)$ está na região de separação, mas do lado correto da superfície de decisão.

SVM com Margens Rígidas
Padrões Não-linearmente Separáveis



- 2ª situação de violação:
  - Ponto ($\mathbf{x}_i$, d_i) está no lado incorreto da superfície de decisão.

SVM com Margens Rígidas
Padrões Não-linearmente Separáveis

- Determinação de Hiperplano com margem flexível (*soft*);
- A equação anterior pode ser re-escrita, com a introdução de um conjunto de variáveis escalares não negativas $\{\xi_i\}_{i=1}^{N}$,

$$d_i(\mathbf{w}^T\mathbf{x}_i + b) \geq 1 - \xi_i \text{ , para } i = 1, 2, \ldots N \qquad (21)$$

$$0 \leq \xi_i \leq 1: \ 1^a \text{ situação}$$

$$\xi_i > 1: \ 2^a \text{ situação}$$

- O conjunto $\{\xi_i\}_{i=1}^{N}$ é adicionado à função de custo:

$$\Phi(\mathbf{w}, \xi) = \frac{1}{2}\mathbf{w}^T\mathbf{w} + C\sum_{i=1}^{N}\xi_i$$

- que deve ser minimizada, sujeita às restrições: Eq. (21) e $\xi_i \geq 0$.

Centro de Informática UFPE

SVM com Margens Rígidas
Padrões Não-linearmente Separáveis

• A maximização de $Q(\alpha)$ é realizada com alteração em uma de suas restrições:

$$J(\mathbf{w}, b, \alpha) = Q(\alpha) = \sum_{i=1}^{N} \alpha_i - \frac{1}{2}\sum_{i=1}^{N}\sum_{j=1}^{N} \alpha_i \alpha_j d_i d_j \mathbf{x}_i^T \mathbf{x}_j$$

$$\sum_{i=1}^{N} \alpha_i d_i = 0 \quad \text{e} \quad 0 \leq \alpha_i \leq C, \text{ para } i = 1, 2, \ldots N$$

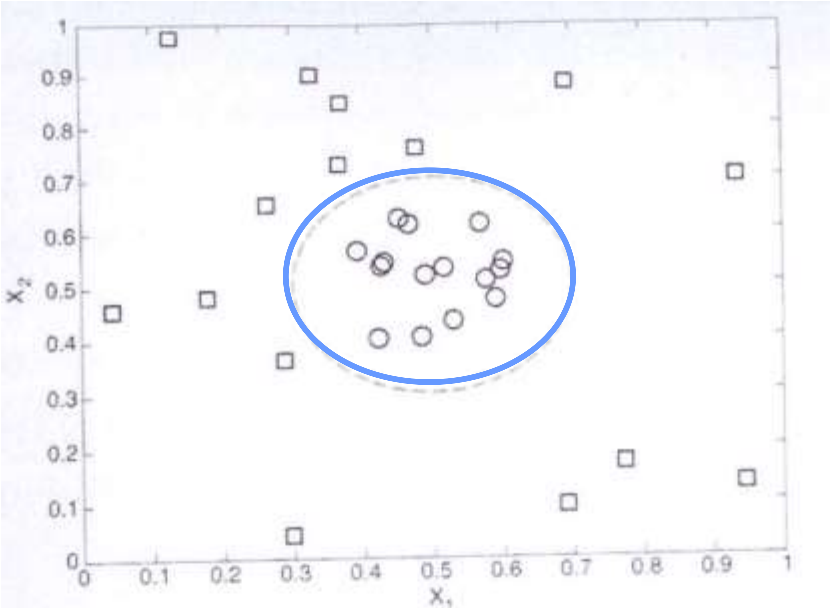
Logo, $\mathbf{w}_0$ é obtido por: $$\mathbf{w}_0 = \sum_{i=1}^{N} \alpha_{0,1} d_i \mathbf{x}_i$$

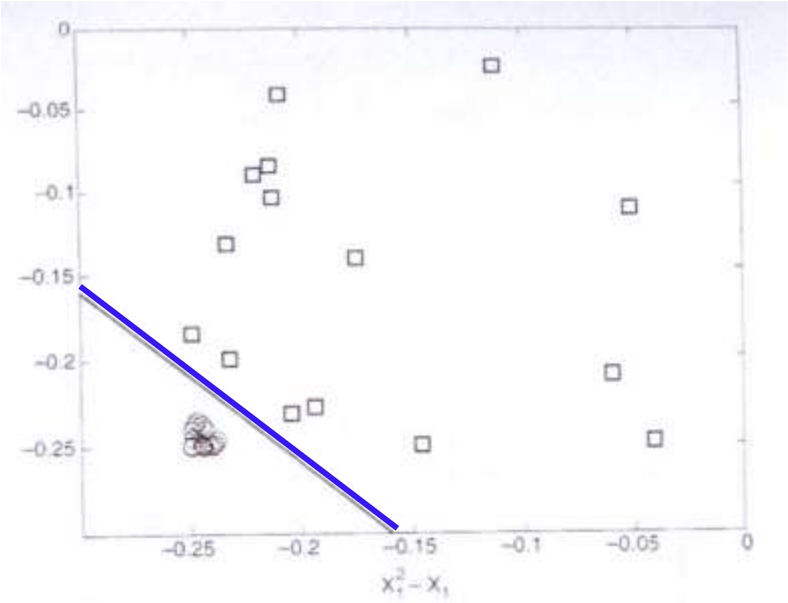
e b_0 através de: $$\alpha_i [y_i (\mathbf{w}_0^T \mathbf{x}_i + b_0) - 1 + \xi_i] = 0$$

Centro de Informática UFPE

SVM Separando Padrões Não-linearmente Separáveis - Mapeamento Φ

- Se não existir hiperplano que separe as categorias:
  - A Transformação $\Re^2 \rightarrow \Re^2$ precisaria ser não-linear;
  - Os dados devem ser transformados para permitir a separabilidade linear:





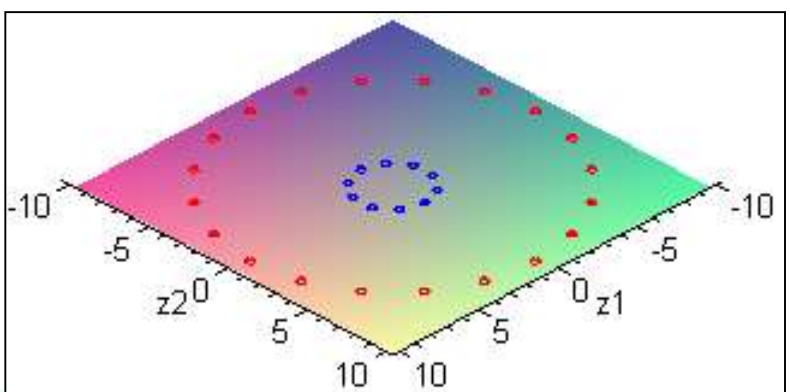
SVM Separando Padrões Não-linearmente Separáveis - Mapeamento Φ

• Classificadores lineares são limitados, veja a porta XOR. Contudo, eles possuem boas propriedades como função de decisão fácil;

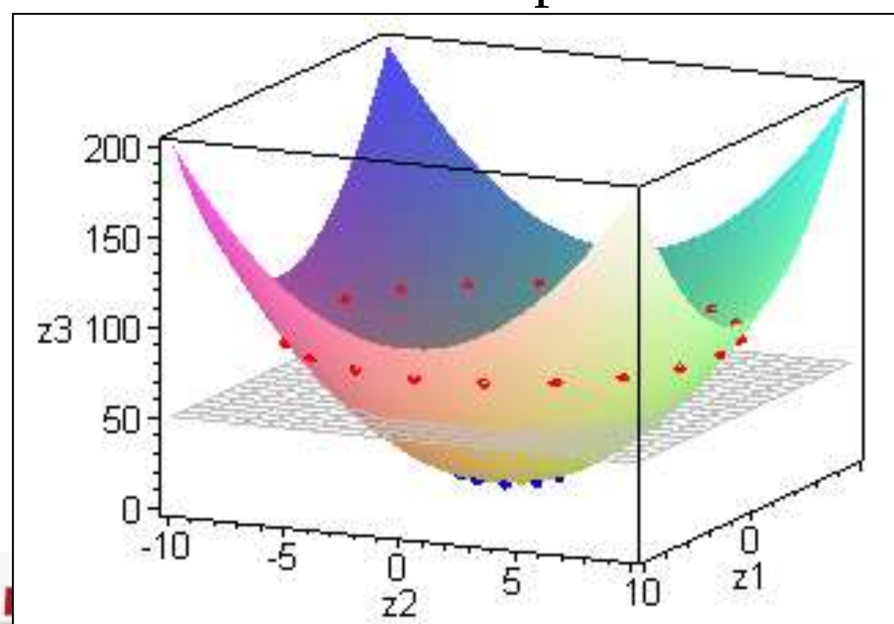
• Dados não-linearmente separáveis podem se tornar linearmente separáveis, em um espaço transformado através de um mapeamento Φ. Este novo espaço é chamado de espaço de características (*feature space*).

Feature Space

$$\phi := (x_1, x_2) \rightarrow (z_1, z_2, z_3) = (x_1, x_2, x_1^2 + x_2^2)$$



$\xrightarrow{\Phi}$



SVM Separando Padrões Não-linearmente Separáveis - Mapeamento Φ

- Deve-se substituir cada produto escalar no espaço de entrada por pontos transformados.

$$f(\mathbf{x}_j) = \operatorname{sgn}\left(\sum_{i=1}^{N} d_i \alpha_i (\mathbf{x}_j^T \cdot \mathbf{x}_i) + b_j \right) \Rightarrow$$

$$f(\mathbf{x}_j) = \operatorname{sgn}\left(\sum_{i=1}^{N} d_i \alpha_i \left(\boldsymbol{\Phi}\left(\mathbf{x}_j^T\right) \cdot \boldsymbol{\Phi}(\mathbf{x}_i)\right) + b_j \right)$$

- Possível problema:
  - O espaço transformado pode ter número muito alto, até infinito, de dimensões, impossibilitando o cálculo do produto interno;
  - É difícil também encontrar a função Φ que resolva o problema.

Centro de Informática UFPE

U F P E

SVM e a Função Kernel
Definição e Papel

- Com uma função especial, chamada função kernel é possível calcular o produto escalar $\mathbf{\Phi}(\mathbf{x}_i)\mathbf{\Phi}(\mathbf{x}_j)$ sem mesmo conhecer o mapeamento Φ:

$$f(\mathbf{x}_j) = \operatorname{sgn}\left(\sum_{i=1}^{N} d_i \alpha_i (\mathbf{x}_j^T \cdot \mathbf{x}_i) + b_j\right) = \operatorname{sgn}\left(\sum_{i=1}^{N} d_i \alpha_i K\big((\mathbf{x}_j, \mathbf{x}_i)\big) + b_j\right)$$

  - Funções de kernel estimam a similaridade entre dois vetores $\mathbf{x}_i$ e $\mathbf{x}_j$;

- Definição do kernel do produto interno
  - O produto interno de dois vetores induzidos no espaço de características por $\mathbf{x}_i$ e $\mathbf{x}_j$ compõem a definição do referido kernel:

$$K(\mathbf{x}_j, \mathbf{x}_i) = \mathbf{\Phi}^T(\mathbf{x}_j) \cdot \mathbf{\Phi}(\mathbf{x}_i) = \sum_{l=1}^{N} \Phi(\mathbf{x}_l)\Phi(\mathbf{x}_l)$$

  - O kernel do produto interno é comutativo com respeito a seus argumentos.

SVM e a Função Kernel
Definição e Papel

- A definição para K ($\mathbf{x}_i$,$\mathbf{x}_j$) é um caso particular do teorema de Mercer no âmbito de análise funcional:
  - Seja K ($\mathbf{x}$,$\mathbf{x}'$) um kernel contínuo e simétrico que é definido no intervalo fechado $\mathbf{a} \leq \mathbf{x} \leq \mathbf{b}$ e da mesma forma para $\mathbf{x}'$. O kernel pode ser expandido pela série:

$$K(\mathbf{x},\mathbf{x}') = \sum_{l=1}^{\infty} \lambda_l \Phi_l(\mathbf{x}) \Phi_l(\mathbf{x}'), \qquad \forall \lambda_l > 0$$

  - Expansão válida e convergente, absoluta e uniformemente, se e só se:

$$\int_{\mathbf{b}}^{\mathbf{a}}\int_{\mathbf{b}}^{\mathbf{a}} K(\mathbf{x},\mathbf{x}')\Psi(\mathbf{x})\Psi(\mathbf{x}')d\mathbf{x}d\mathbf{x}'$$

vale para quando $\int_{\mathbf{b}}^{\mathbf{a}} \Psi^2(\mathbf{x})d\mathbf{x} < \infty$

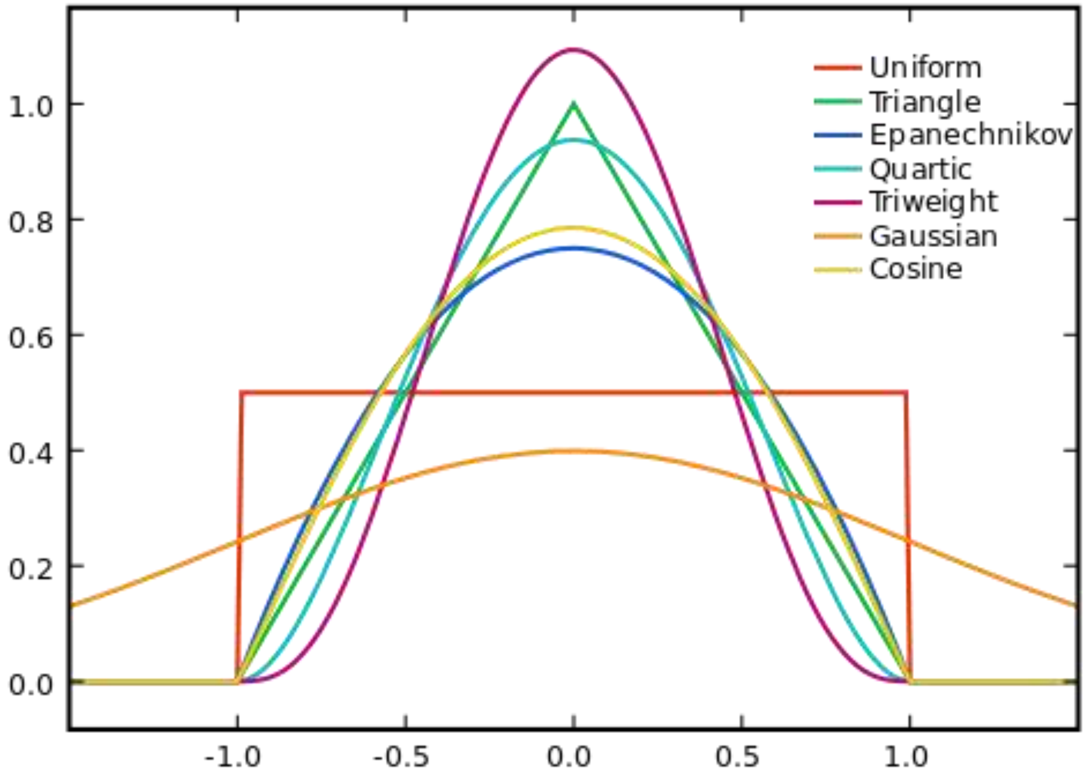
- As funções Φ_l são chamadas autofunções e os números λ_l são denominados autovalores.

Centro de Informática UFPE

U F P E

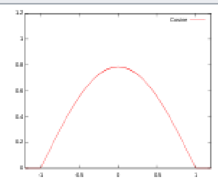
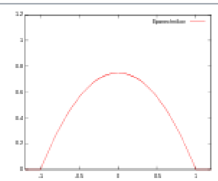
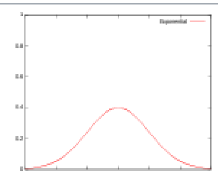
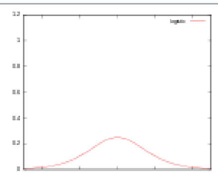
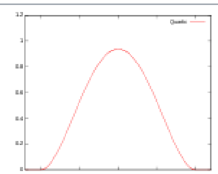
SVM e a Função Kernel
Definição e Papel

- Exemplos de funções de kernel:

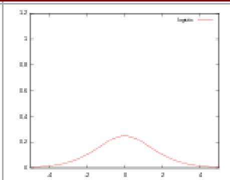
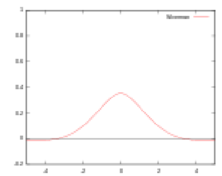
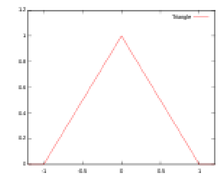
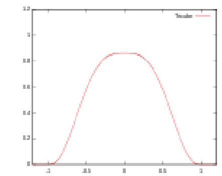
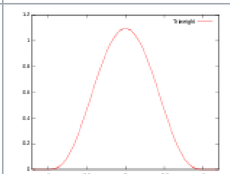
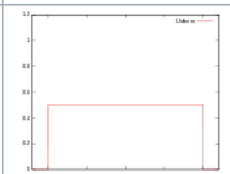


SVM e a Função Kernel
Definição e Papel

- Exemplos de funções de kernel:

Kernel Functions, $K(u)$			$\int u^2 K(u)du$	$\int K(u)^2 du$	relative to the Epanechnikov kernel
Cosine	$K(u) = \frac{\pi}{4}\cos\left(\frac{\pi}{2}u\right)$ Support: $\lvert u\rvert \leq 1$		$1 - \frac{8}{\pi^2}$	$\frac{\pi^2}{16}$	99.9%
Epanechnikov (parabolic)	$K(u) = \frac{3}{4}(1-u^2)$ Support: $\lvert u\rvert \leq 1$		$\frac{1}{5}$	$\frac{3}{5}$	100%
Gaussian	$K(u) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}e^{-\frac{1}{2}u^2}$		1	$\frac{1}{2\sqrt{\pi}}$	95.1%
Logistic	$K(u) = \frac{1}{e^u + 2 + e^{-u}}$		$\frac{\pi^2}{3}$	$\frac{1}{6}$	88.7%
Quartic (biweight)	$K(u) = \frac{15}{16}(1-u^2)^2$ Support: $\lvert u\rvert \leq 1$		$\frac{1}{7}$	$\frac{5}{7}$	99.4%

SVM e a Função Kernel
Definicão e Papel

Sigmoid function	$K(u) = \frac{2}{\pi} \frac{1}{e^u + e^{-u}}$		$\frac{\pi^2}{4}$	$\frac{2}{\pi^2}$	84.3%
Silverman kernel[5]	$K(u) = \frac{1}{2} e^{-\frac{\lvert u \rvert}{\sqrt{2}}} \cdot \sin\left(\frac{\lvert u \rvert}{\sqrt{2}} + \frac{\pi}{4}\right)$		0	$\frac{3\sqrt{2}}{16}$	not applicable
Triangular	$K(u) = (1 - \lvert u \rvert)$ Support: $\lvert u \rvert \leq 1$		$\frac{1}{6}$	$\frac{2}{3}$	98.6%
Tricube	$K(u) = \frac{70}{81}(1 - \lvert u \rvert^3)^3$ Support: $\lvert u \rvert \leq 1$		$\frac{35}{243}$	$\frac{175}{247}$	99.8%
Triweight	$K(u) = \frac{35}{32}(1 - u^2)^3$ Support: $\lvert u \rvert \leq 1$		$\frac{1}{9}$	$\frac{350}{429}$	98.7%
Uniform ("rectangular window")	$K(u) = \frac{1}{2}$ Support: $\lvert u \rvert \leq 1$	 "Boxcar function"	$\frac{1}{3}$	$\frac{1}{2}$	92.9%

SVM e a Função Kernel
Definição e Papel

• A expansão de K ($\mathbf{x}_j$,$\mathbf{x}_i$) permite a construção de superfície de decisão não-linear no espaço de entrada, com imagem linear no espaço de características. Tal expansão viabiliza o enunciado da forma dual da otimização com restrições de uma SVM:

Dado um conjunto de treinamento $\{(x_i, d_i)\}_{i=1}^{N}$, encontre os multiplicadores de Lagrange que maximizam a função objetivo

$$Q(\alpha) = \sum_{i=1}^{N} \alpha_i - \frac{1}{2} \sum_{i=1}^{N} \sum_{j=1}^{N} \alpha_i \alpha_j d_i d_j K(\mathbf{x}_i, \mathbf{x}_j)$$

s.a. $\sum_{i=1}^{N} \alpha_i d_i = 0$

$0 \le \alpha_i \le C$, para $i = 1, 2, ..., N$ e C é determinado pelo usuário.

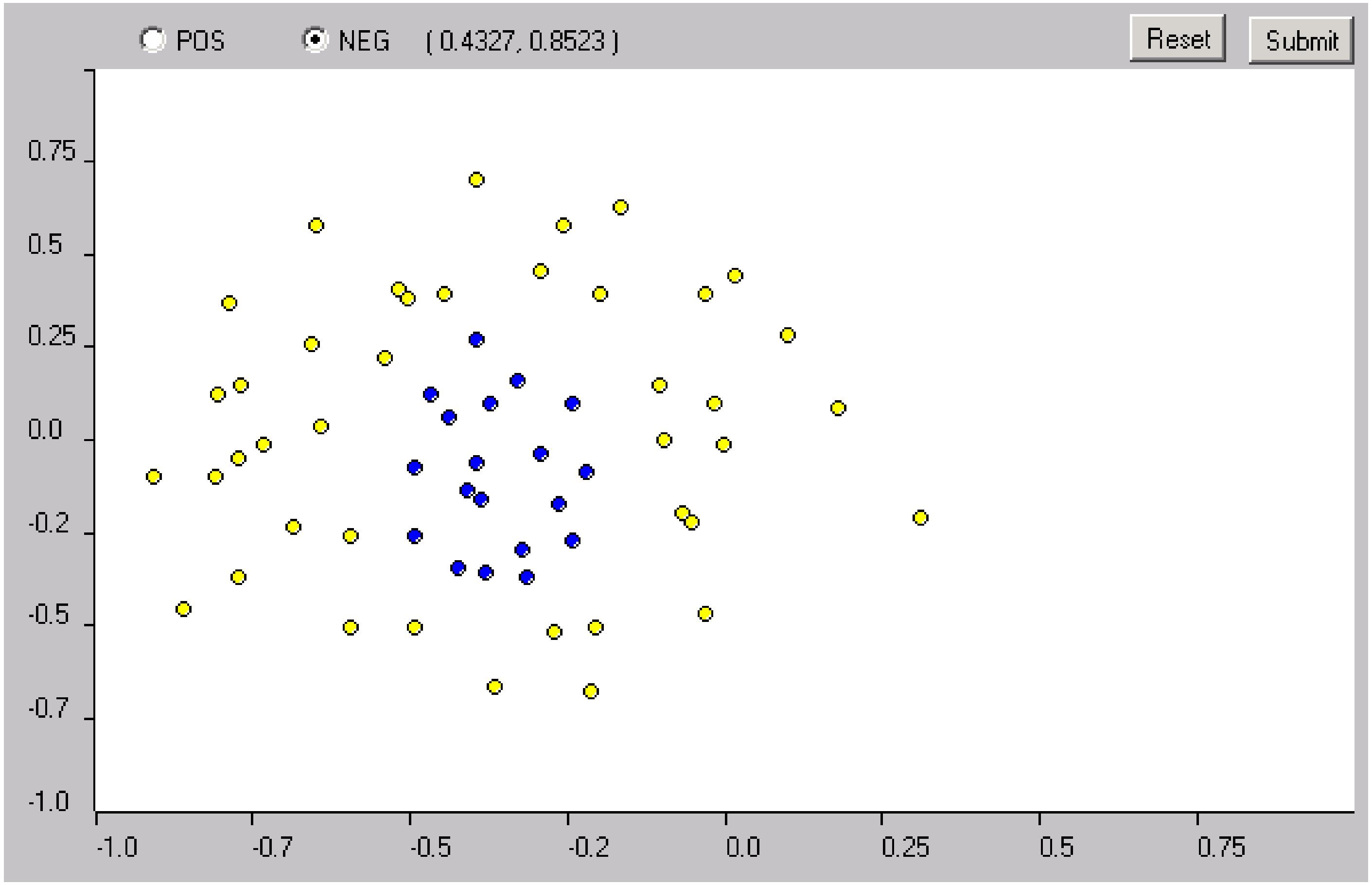
Centro de Informática UFPE

SVM e a Função Kernel
Definição e Papel

- Três ideias fundamentais:
  - Definição de um hiperplano ótimo de modo que ele possa ser identificado em maneira computacional eficiente: Maximização da margem;
  - Extensão da definição acima para problemas linearmente não-separáveis: Penalização para termos equivocadamente classificados;
  - Mapeamento dos dados para um espaço de dimensão mais alta no qual é viável realizar classificação com superfícies lineares de decisão: Transformação dos dados por mapeamento para este espaço.

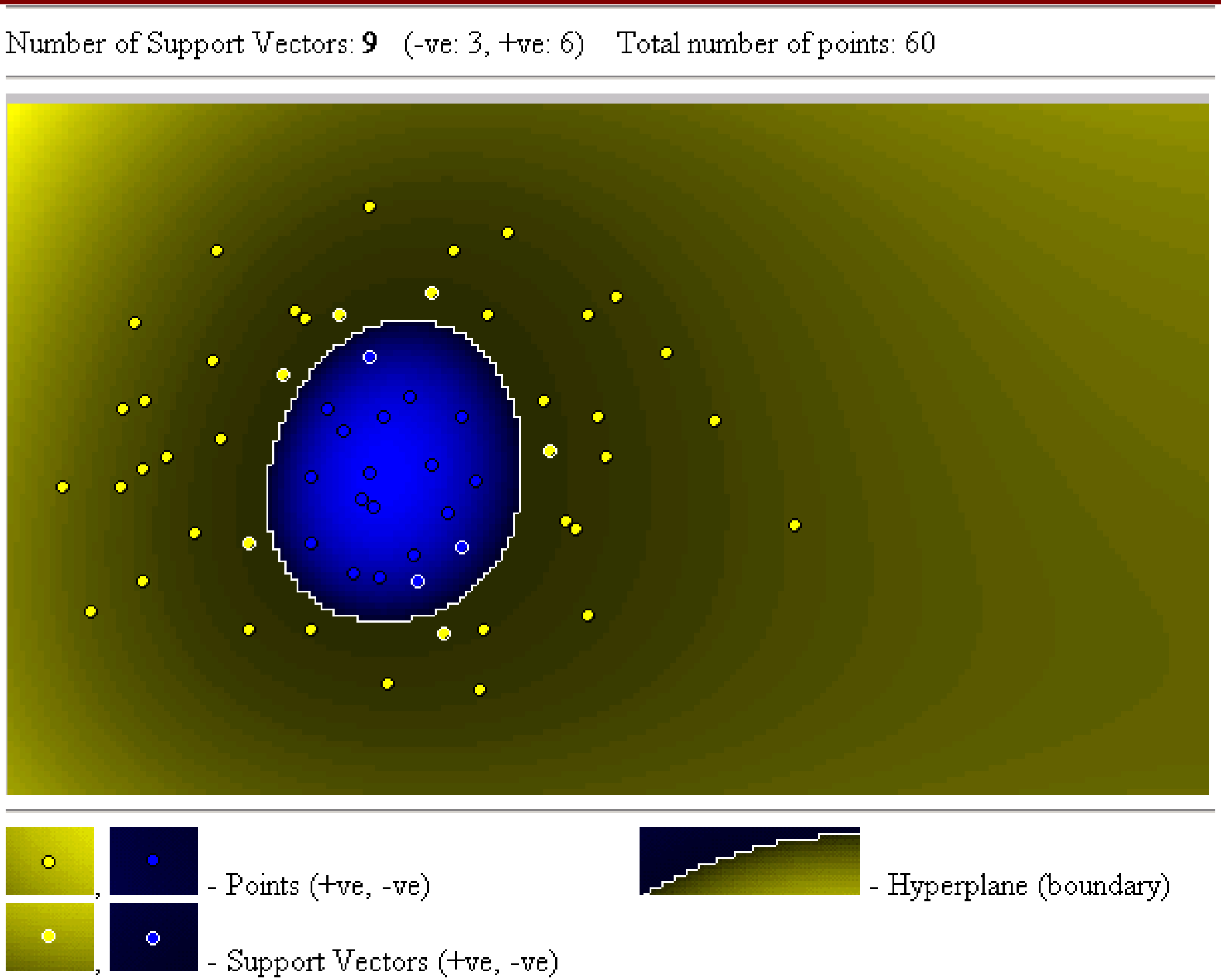
SVM Não-linear
Exemplo

- Dados:



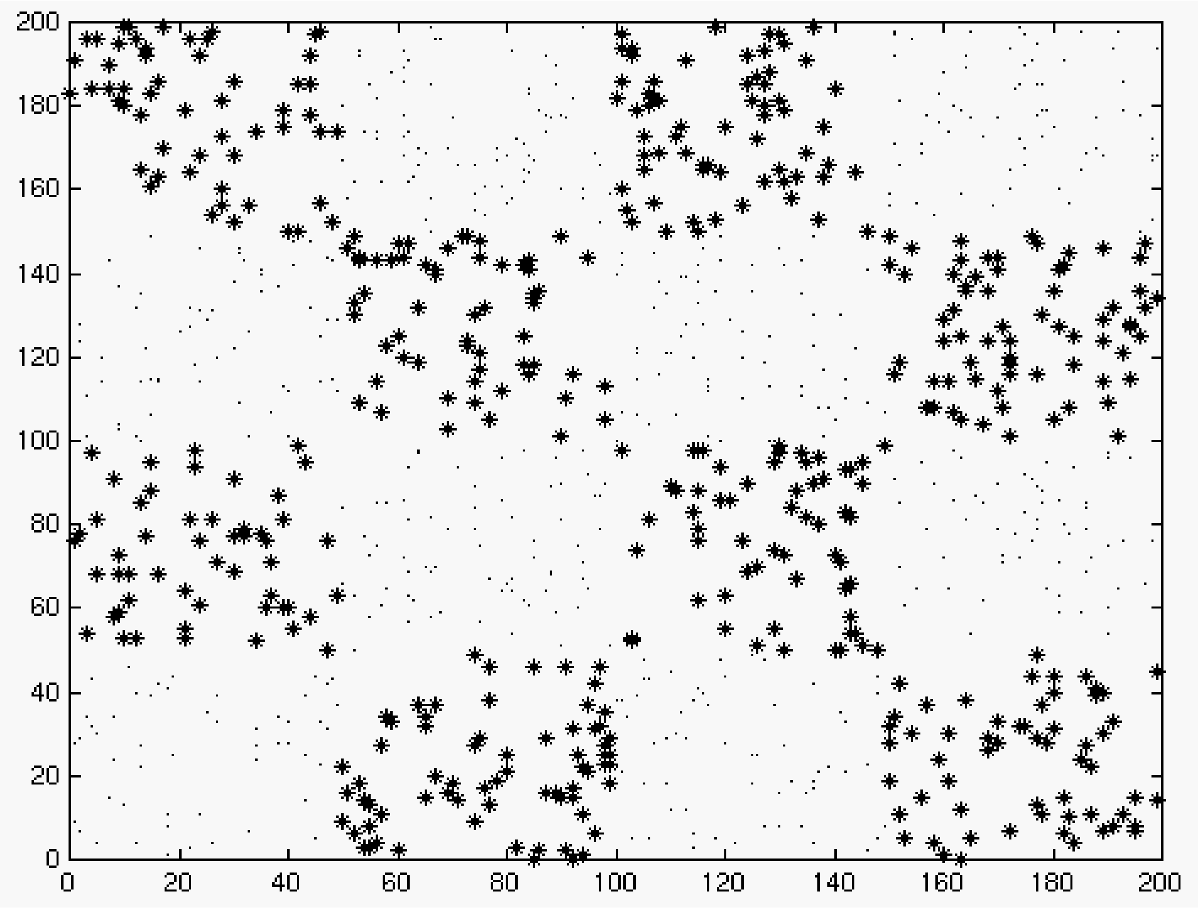
SVM não-linear
Definição e Papel

- Categorias:



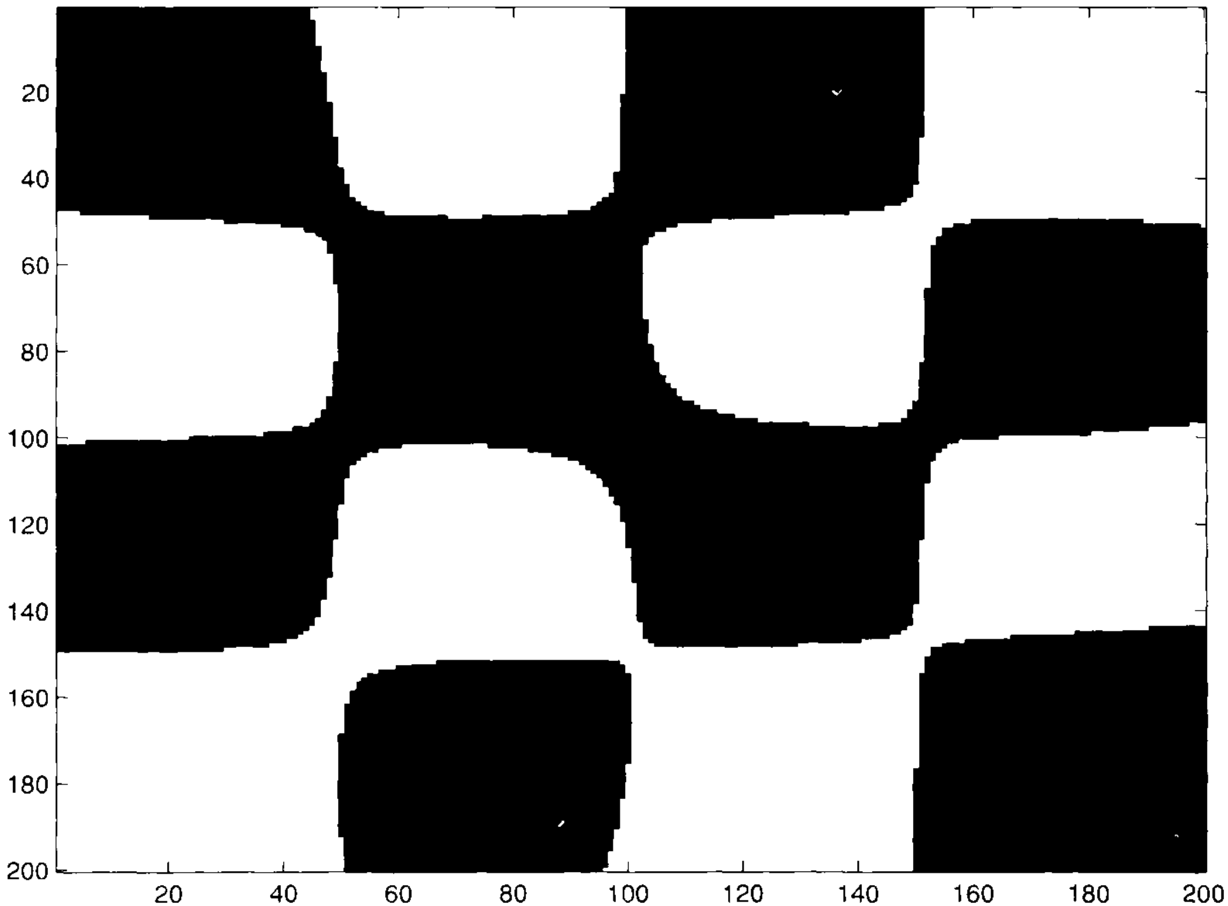
SVM Não-linear
Exemplo

- Dados: 1000 pontos no espaço 2D (486 asteriscos e 514 pontos)

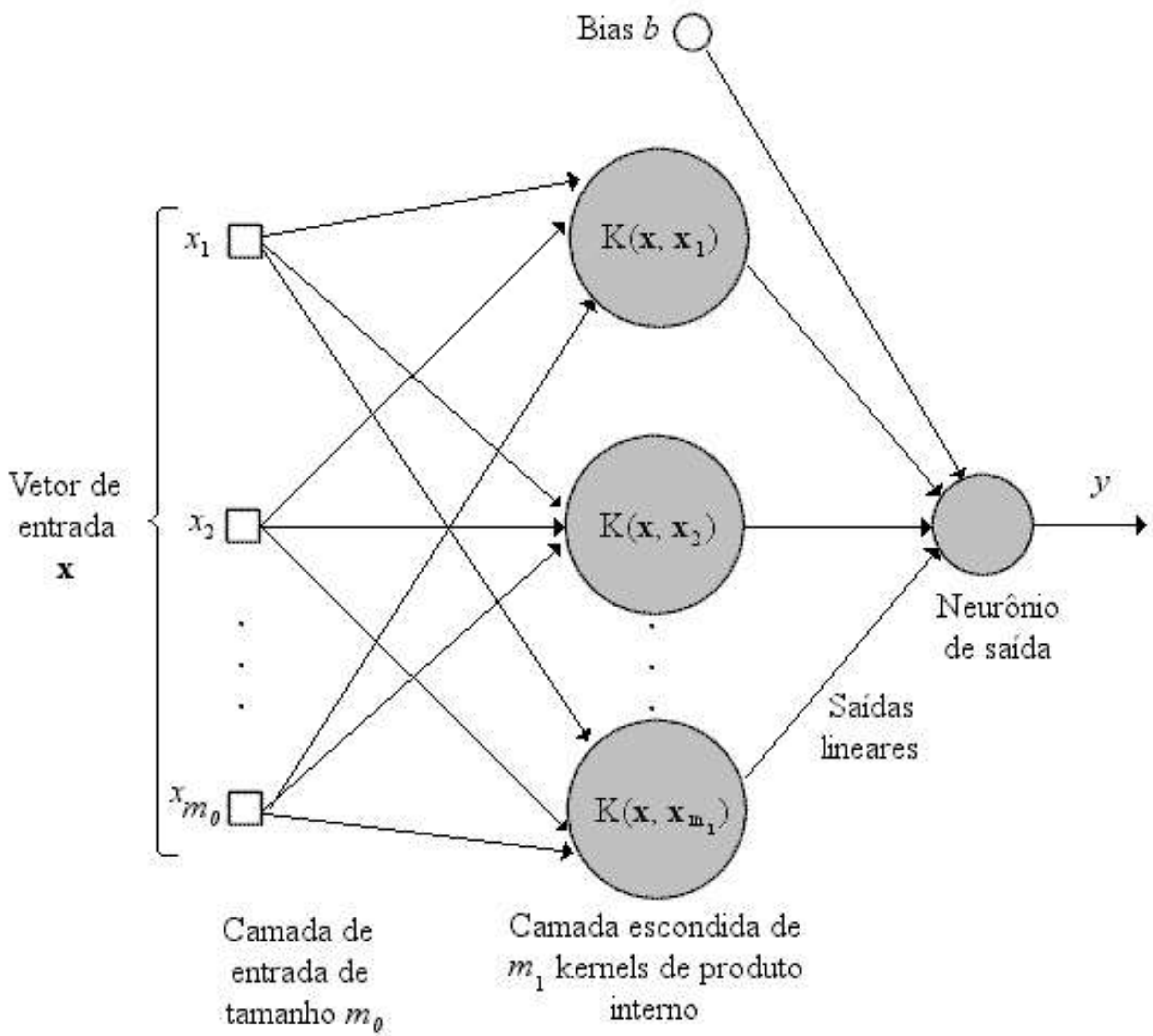


SVM não-linear
Definição e Papel

- Categorias:



SVM e a Função Kernel
Arquitetura



Treinamento de SVMs
Algumas Abordagens na Literatura

- Matriz de Kernel (**K**) Reduzida:
  - Emprega uma aproximação de posto (rank) baixo para **K**;
    - Métodos: Nystrom, aproximação gulosa, decomposição de matriz;
- v-SVM:
  - O parâmetro v para controla o número de vetores de suporte;
    - Classe de SVM para regressão e classificação;
- Técnica de Planos de Corte:
  - A complexidade de cálculo do termo de risco é reduzida;
    - Aproxima-se o termo de regularização usando planos de corte;

Treinamento de SVMs
Algumas Abordagens na Literatura

- Baseado no Gradiente:
  - Ajuste de hiperparâmetros para minimizar função de validação;
    - Gradiente da função de validação com relação a hiperparâmetros;
- Treinamento da SVM na formulação primitiva (principal):
  - Tratamento aproximado para o muito caro problema primitivo;
    - Solução típica aproximação do problema *dual* e mapeia-o em uma solução aproximada do problema *primal*;
- SVM baseado em Cluster:
  - Viabilizador de descrições finas de pontos próximos à fronteira de classificação e mais grosserias de pontos mais distantes;
    - Resultados promissores para bases de dados muito grandes e de baixa dimensão;

SVM de Múltiplas Classes
Principais Abordagens

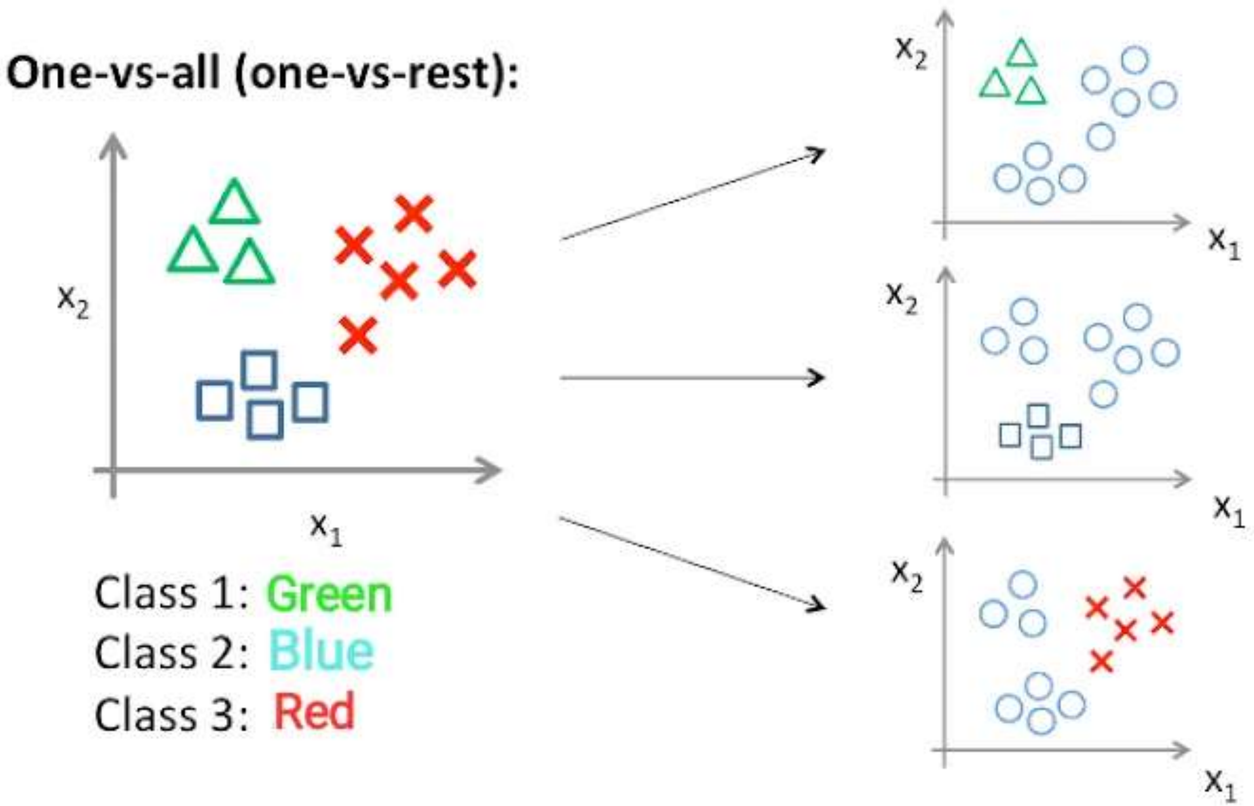
- Há 2 abordagens principais para lidar com reconhecimento de padrões para múltiplas classes:
  - O problema é tratado como uma sequência de problemas de classificação binária (1 contra todas as demais):
    - Conjunto de *k* classificadores é construído, um para cada classe;
    - Cada classificador produz um hiperplano entre uma classe considerada e as demais *k*-1 classes;
    - Um esquema de votação é usado para classificar um novo ponto;
  - O problema é resolvido pela construção de hiperplanos separando cada par de classes (1 a 1):
    - Constrói-se *k*(*k*-1)/2 hiperplanos;
    - Esquema de votação é usado para classificar um novo ponto.

UFPE

Centro de Informática UFPE

SVM de Múltiplas Classes
Principais Abordagens

- Exemplo de solução por comparação de um contra os demais (problema de 3 classes):



SVM de Múltiplas Classes
Principais Abordagens

- Exemplo de solução por comparação de um contra os demais (problema de 4 classes):

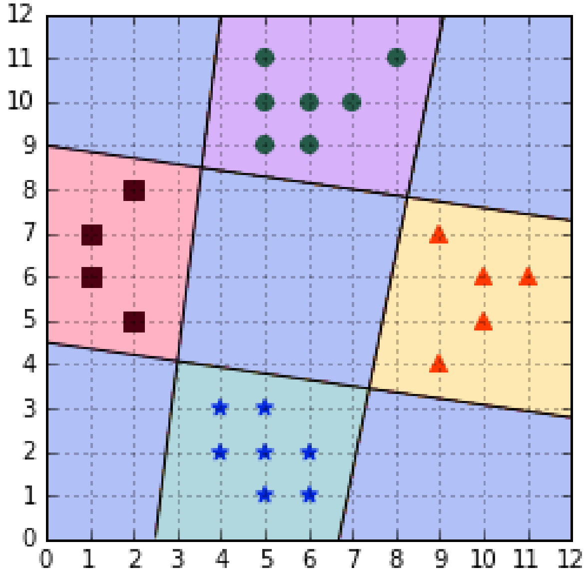


Figure 53: One-against-all leads to ambiguous decisions

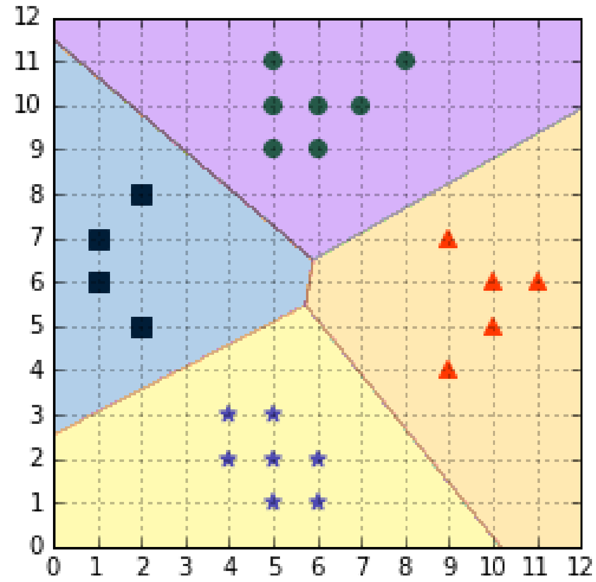


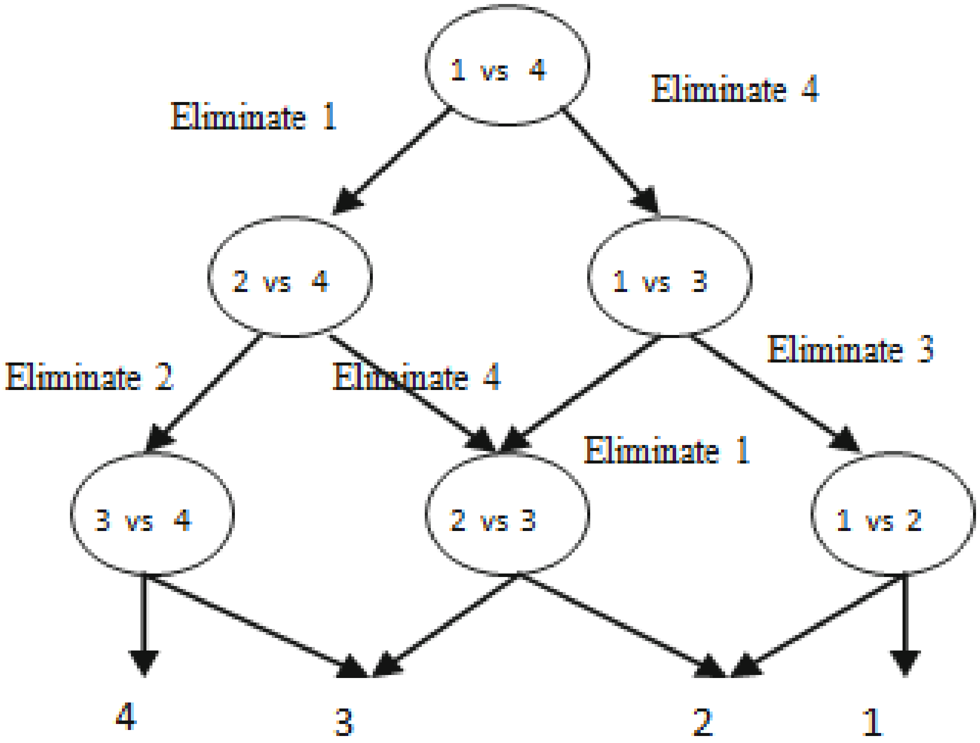
Figure 54: Applying a simple heuristic avoids the ambiguous decision proble

Centro de Informática UFPE

UFPE

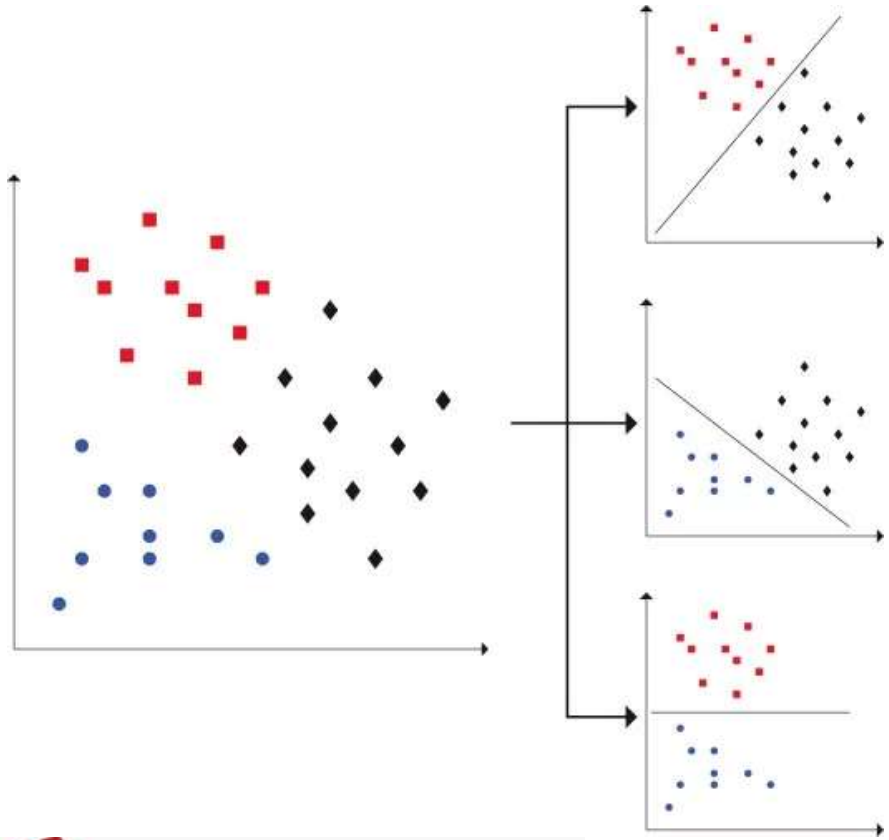
SVM de Múltiplas Classes
Principais Abordagens

- Exemplo de solução por comparação de uma a uma (problema de 4 classes):



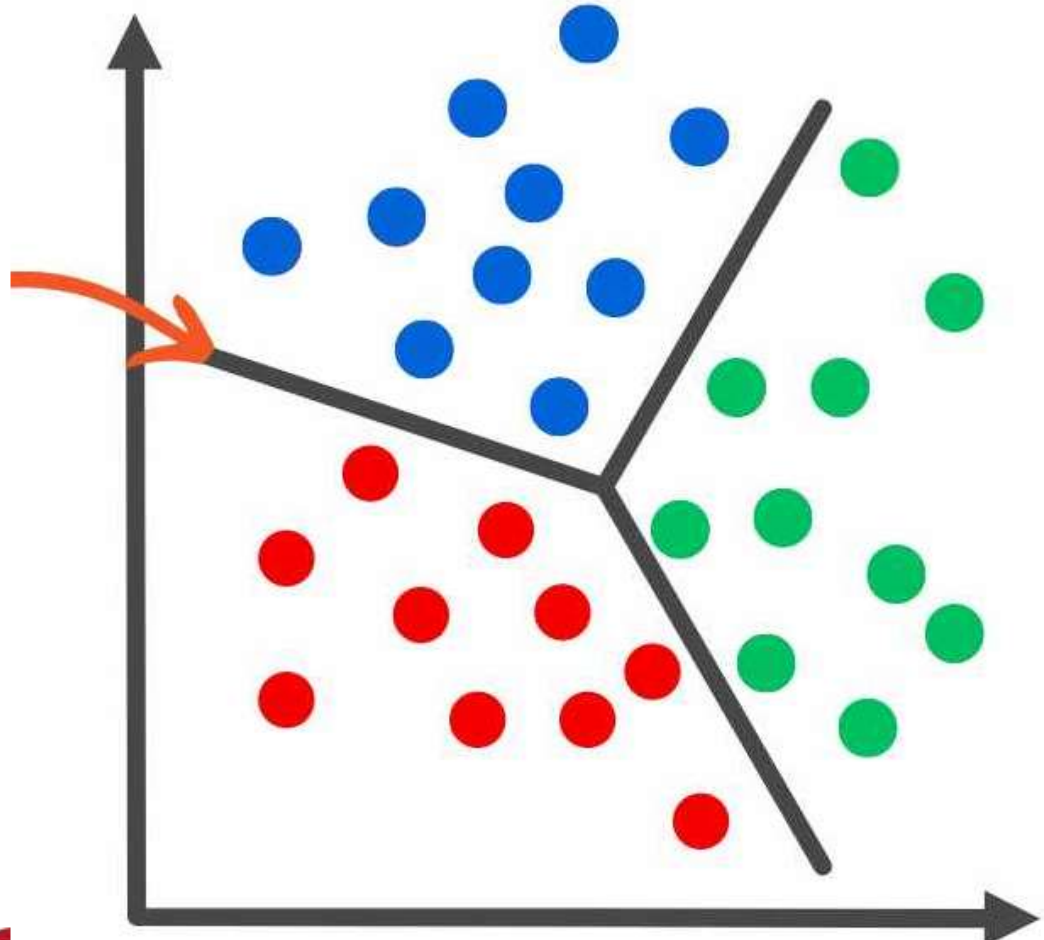
SVM de Múltiplas Classes
Principais Abordagens

- Exemplo de solução por comparação de uma a uma (problema de 3 classes):



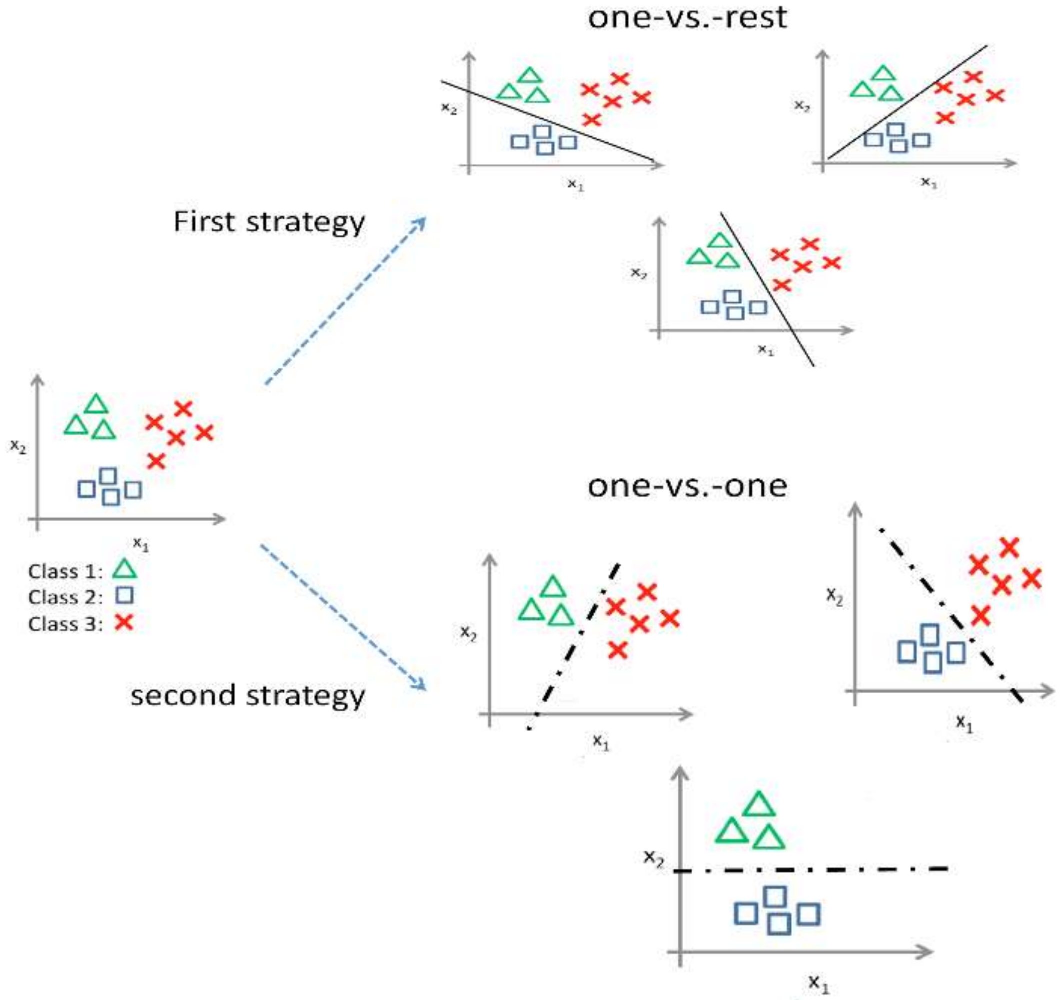
SVM de Múltiplas Classes
Principais Abordagens

- Exemplo: Composição das dos hiperplanos



SVM de Múltiplas Classes
Principais Abordagens

- Exemplo comparativo



Métodos de Treinamento
Minimização do Risco Funcional (generalização)

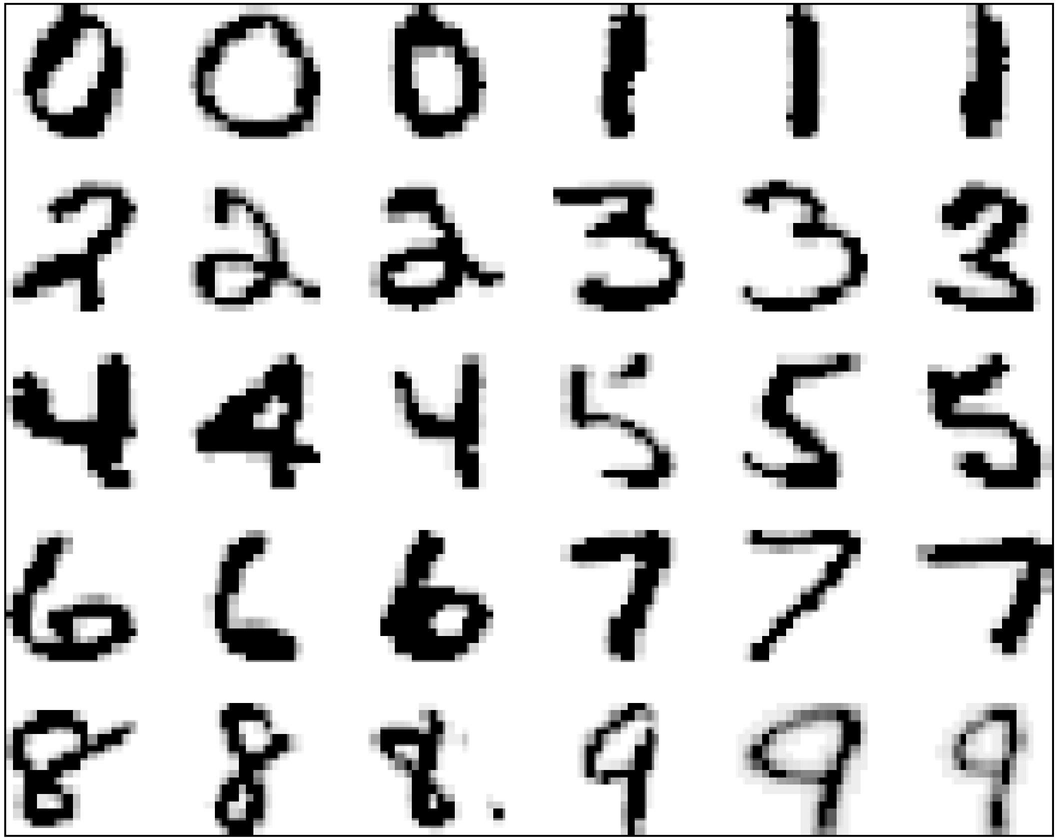
- Critérios considerados para escolha de um classificador (*f*):
  - Minimização do risco funcional, relativo a erro durante a validação (generalização), no qual se considera:
    - Função de custo relacionando a previsão de saída com a saída desejada.
    - Distribuição de probabilidade dos pares.

$$R(f) = \int \frac{1}{2} c(f(\mathbf{x}), y) dP(\mathbf{x}, y)$$

Centro de Informática UFPE

SVM: Aplicações

- Reconhecimento de caracteres manuscritos:
  - Exemplos de caracteres:



SVM: Aplicações

- Reconhecimento de caracteres manuscritos:
  - Desempenho de máquinas de aprendizagem distintas:

CLASSIFICATION ERROR IN % FOR OFF-LINE HANDWRITTEN CHARACTER RECOGNITION ON THE USPS WITH 7291 PATTERNS. INVARIANT SVMS ARE ONLY SLIGHTLY BELOW THE BEST EXISTING RESULTS (PARTS OF THE TABLE ARE FROM [136]). THIS IS EVEN MORE REMARKABLE SINCE IN [135]–[137], A LARGER TRAINING SET WAS USED, CONTAINING SOME ADDITIONAL MACHINE-PRINTED DIGITS WHICH HAVE BEEN FOUND TO IMPROVE THE ACCURACY

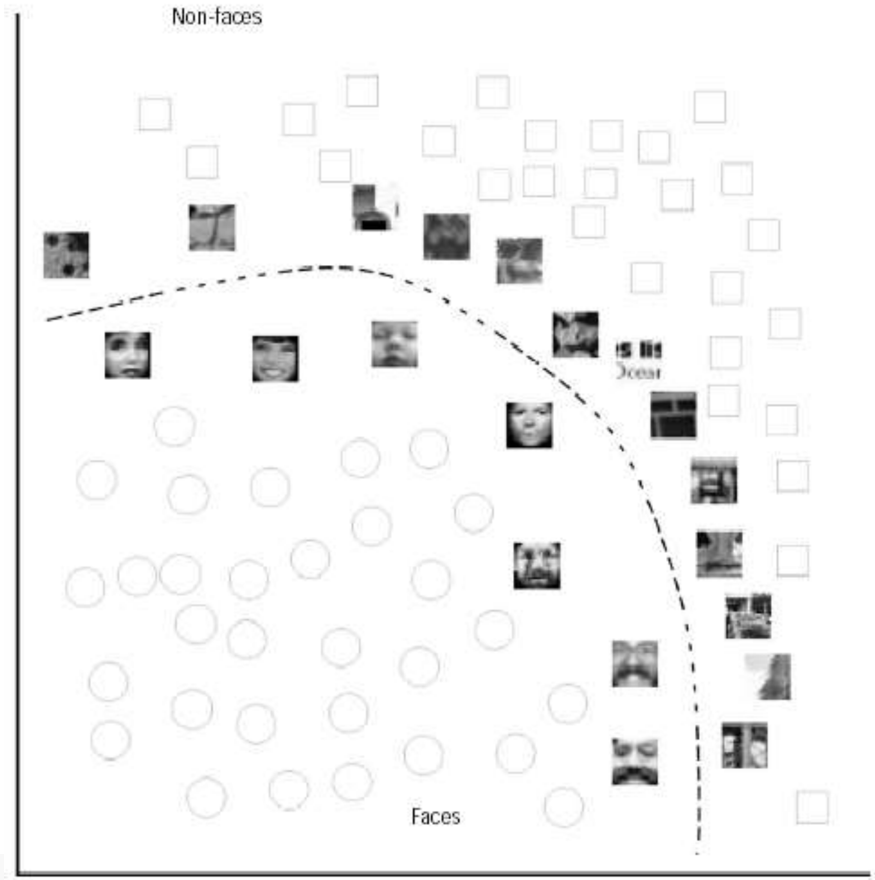
linear PCA & linear SVM (Schölkopf et. al. [11])	8.7%
k-Nearest Neighbor	5.7%
LeNet1 (LeCun et. al. [132], [133], [134])	4.2%
Regularized RBF Networks (Rätsch [128])	4.1%
Kernel-PCA & linear SVM (Schölkopf et. al. [11])	4.0%
SVM (Schölkopf et. al. [120])	4.0%
Virtual SVM (Schölkopf [4])	3.0%
Invariant SVM (Schölkopf et. al. [131])	3.0%
Boosting (Drucker et. al. [137])	2.6%
Tangent Distance (Simard et. al. [135], [136])	2.5%
Human error rate	2.5%

SVM: Aplicações

- Detecção de faces (definição): Dada uma imagem digital arbitrária determine se existe faces humanas nesta imagem.
    - Se existirem, retorne uma codificação de sua localização.
    - Codificação significa acomodar cada face em uma caixa de fronteiras definida pelas coordenadas das esquinas na imagem.
    - Pode ser extendida para reconhecimento de faces, HCI, sistemas de vigilância, etc.

SVM: Aplicações

- Detecção de faces (processo):
  - SVM treinada para padrões com tamanho fixo de face e não face.
  - Teste de candidatos de localização de imagens para padrões locais com procedimento de classificação que determina se padrão de imagem local é uma face.
  - Este problema de classificação, tem duas classes dicotômicas.



SVM: Aplicações

- Resultados experimentais em imagens estáticas:
  - Conjunto A: 313 com alta qualidade, mesmo número de faces.
  - Conjunto B: 23 com qualidade misturada, total de 155 faces.

	Test set A		Test set B	
	Detect rate (%)	False alarms	Detect rate (%)	False alarms
SVM	97.1	4	74.2	20
Sung	94.6	2	74.2	11

SVM: Aplicações

- Detecção de seres humanos em pé nas imagens
  - Classificação binária da detecção de objetos na imagem;
  - Usa-se o HOG (histogramas de gradientes orientados) para extração de características;
- Exemplo positivos:

Exemplo negativo

Centro de Informática UFPE

Discussão

- Os parâmetros têm grande influência no treinamento;
- SVM usa programação matemática para aprender;
- SVM emprega a transformação pelo *kernel* para mapear saídas para espaços de dimensões mais altas;
- SVM tem se caracterizado por bom desempenho, robustez, eficiência e versatilidade ao mesmo tempo que há teoria fundamentando sua capacidade de generalização;
- SVM perde desempenho com dados ruidosos;
- SVM lida com duas classes, portanto, para *n* classes:
  - Constrói-se SVMs que determinar o pertencimento a uma classe contra não pertencer a ela;

Sítios

- Alguns sítios interessantes de SVM:
  - https://www.csie.ntu.edu.tw/~cjlin/libsvm/
  - https://simulators.yobee.co.in/support-vector-machine
  - https://help.alteryx.com/current/en/designer/tools/predictive/support-vector-machine-tool.html#idp365638
  - https://web.mit.edu/6.034/wwwbob/svm-notes-long-08.pdf

U F P E

Centro de Informática UFPE

Referências

- Du, K.-L. & Swamy M. N. S. (2019). *Neural Networks and Statistical Learning*. Springer, 2nd edition.
- Haykin, S. (2009). *Neural Networks and Learning Machines*. Third Edition. Pearson.
- Smola, A. J., Barlett, P., Schölkopf, B., & Schuurmans, D. (1999). *Advances in Large Margin Classifiers*. The MIT Press (http://www.kernel-machines.org/nips98/lmc-book.pdf).
- Vapnik, V. N. (1995). *The Nature of Statistical Learning Theory*. Springer-Verlag.