# Support Vector Machine

Es un modelo enfocado a clasificación binaria, pero se puede extender a clasificación multiclase y regresión.

## Definición

**Definamos un *hiperplano***

Sea $f$ un hiperplano definido por la siguiente *función lineal*:

$$f(x_1, \ldots, x_p) = w_1 x_1 + \ldots + w_p x_p + b = 0$$

en forma matricial, se expresa como:

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

- $\mathbf{x}$ un vector de variables independientes (un punto sobre el hiperplano).
- $\mathbf{w}$ vector de coeficiente asociado a las variables independientes (o vector de pesos).
- $b$ un escalar denominado término independiente (o el bias).

> *En un espacio de 2 dimensiones corresponde a una linea pero en un espacio de 3 o más dimensiones nos referimos a un hiperplano.*

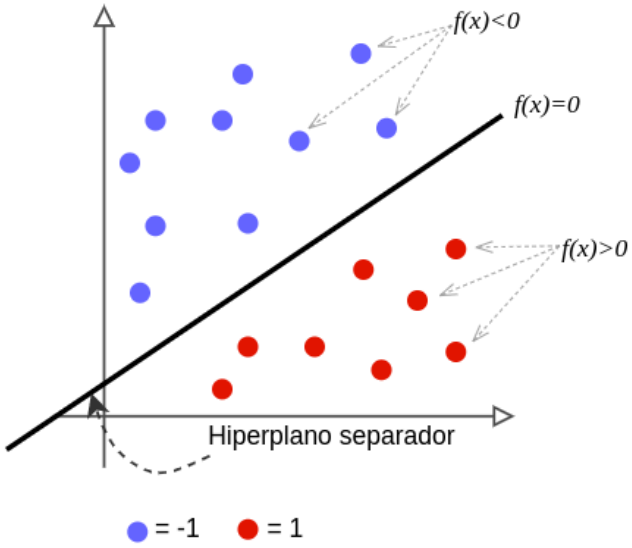
**Hiperplano separador**

Sea $X$ el conjunto de datos de $p$ características y $y$ la variable respuesta, tal que:

$$X = \{\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \ldots, \mathbf{x}_n\}, \quad \mathbf{x}_i \in \mathbb{R}^{1 \times p}, \quad y_i \in \{-1, 1\}, \quad i = 1, \ldots, n$$

- $\mathbf{x}_i$ es un vector correspondiente a la observación $i$.
- $y_i$ es la respuesta esperada correspondiente a $\mathbf{x}_i$.
- $n$ es el número de observaciones.

Supongamos un hiperplano ideal que separa completamente el conjunto de datos $X$ en dos clases:




Dado este escenario, observemos que:

- Cualquier punto sobre el hiperplano cumple con: $f(\mathbf{x}) = 0$.
- Los puntos que están a los lados del hiperplano cumplen: $f(\mathbf{x}_i) > 0$ o $f(\mathbf{x}_i) < 0$.

Tomando en cuenta estas observaciones y dado que las respuestas $y_i \in \{-1, 1\}$, podemos deducir lo siguiente:

$$y_i f(\mathbf{x}_i) > 0, \quad i = 1, \ldots, n$$

> *Significa que, si la función lineal (hiperplano) separa todos los puntos correctamente, entonces al hacer la multiplicación de la respuesta esperada $y_i$ con la respuesta estimada $f(\mathbf{x}_i)$, el resultado siempre será positivo.*

Si se cumple la anterior expresión para todas las observaciones $x_i$ entonces $f$ es un **hiperplano separador**.

**Regla de clasificación**

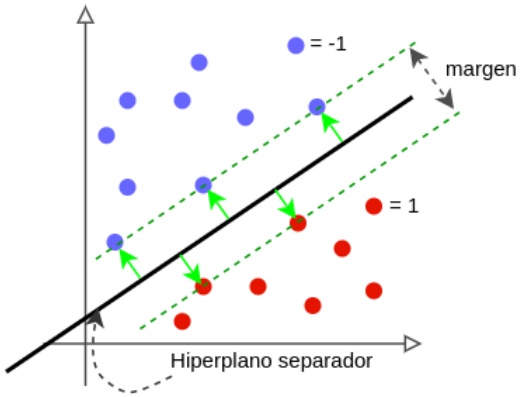
Dado que $f(\mathbf{x}_i) > 0$ o $f(\mathbf{x}_i) < 0$ podemos determinar una regla de clasificación de la siguiente manera:

$$\text{sign}(f(\mathbf{x}_i)) = \begin{cases} +1, & \text{si } f(\mathbf{x}_i) > 0 \\ -1, & \text{si } f(\mathbf{x}_i) < 0 \end{cases}$$

como se puede observar solo necesitamos conocer el signo para hacer la clasificación.

# ¿Cómo encontrar el mejor *hiperplano separador*?

Debemos plantear un problemas de optimización tal que la distancia mínima entre el hiperplano y los puntos más cercanos a este sea lo más grande posible, en otras palabras, **maximizar el margen**.




- Los puntos que están sobre el límite de margen (línea punteada) se denominan *support vectors*.

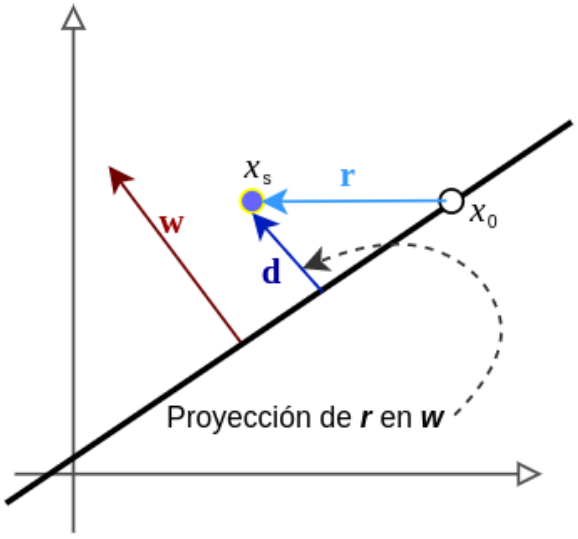
Para resolver este problema se recurre a métodos de *optimización dual*.

## Planteamiento del Problema primal

Sea $x_0$ un punto sobre el hiperplano separador y $x_s$ uno de los puntos de $X$ (es decir, una observación) **más cercano al hiperplano**.

Tomando estos dos puntos, podemos formar un vector $\mathbf{r} = x_s - x_0$.

Luego, por definición sabemos que el vector de pesos $\mathbf{w}$ es ortogonal al hiperplano, proyectando el vector $\mathbf{r}$ sobre el vector $\mathbf{w}$ obtenemos un vector $\mathbf{d}$ cuyo módulo (longitud) es la mínima distancia entre $x_s$ y el hiperplano, a esta distancia la denominamos *margen*




y se expresa como:

$$d = \|\mathbf{d}\| = \|\frac{\mathbf{r}^T\mathbf{w}}{\mathbf{w}^T\mathbf{w}}\mathbf{w}\|$$

por simplicidad omitiremos cálculos intermedios, llegando a la siguiente expresión:

$$d = \frac{|\mathbf{w}^T\mathbf{x}_s + b|}{\|\mathbf{w}\|}$$

bajo el supuesto que nuestro modelo clasifica correctamente, entonces tenemos que $|\mathbf{w}^T\mathbf{x}_s + b| = 1$, reemplazando esto en la anterior expresión, obtenemos que el *margen* es:

$$d = \frac{1}{\|\mathbf{w}\|}$$

definida esta métrica, debemos encontrar el mejor *margen*, por lo tanto necesitamos maximizar $d$

$$d = \max_{\mathbf{w},b}(\frac{1}{\|\mathbf{w}\|}) \qquad \text{sujeto a: } y_i(\mathbf{w}^T\mathbf{x}_i + b) \geq 1$$

> ***Nota**: Recordar que $y_i$ es 1 o -1, además si el modelo predice correctamente para todas las observaciones, entonces: $y_i f(\mathbf{x}_i) \geq 1 \implies y_i(\mathbf{w}^T\mathbf{x_i} + b) \geq 1$.*

Para expresarlo en términos de mínimización, vamos a invertir el término $\mathbf{w}$, de manera que suba al numerador. Ademas, **por conveniencia vamos a elevar al cuadrado y dividir entre dos**, esto para facilitar el cálculo de la derivada (esto es solo un truco matemático). Resultando en la siguiente expresión:

$$
\begin{aligned}
d &= \min_{\mathbf{w},b}(\frac{1}{2}\|\mathbf{w}\|^2) \\
&= \min_{\mathbf{w},b}(\frac{1}{2}\mathbf{w}^T\mathbf{w}) \qquad \text{sujeto a: } y_i(\mathbf{w}^T\mathbf{x_i}+b) \geq 1
\end{aligned}
$$

Luego, para resolver este problema podemos aplicar el método de ***multiplicadores de Lagrange***, obteniendo la siguiente expresión:

$$
L(\mathbf{w},b,\alpha) = \frac{1}{2}\mathbf{w}^T\mathbf{w} - \sum_{i=1}^{n}\alpha_i[y_i(\mathbf{w}^T\mathbf{x_i}+b)-1]
$$

$$
\text{sujeto a: } \alpha \geq 0
$$

- $\alpha$ es un multiplicador de Lagrange asociado a cada par $(\mathbf{x}_i, y_i)$.
- Los puntos $\mathbf{x}_i$ cuyo $\alpha > 0$ serán los *support vectors*, por ende los puntos cuyo $\alpha = 0$ se descartan.

obteniendo así la definición del **problema primal**.

Finalmente, **notemos que $L$ tiene una forma cuadrática** en $\mathbf{w}$, ademas depende de tres variables. El siguiente paso será encontrar una expresión equivalente que solamente dependa de los multiplicadores de Lagrange.

## Planteamiento del Problema dual

Tomando en cuenta el problema primal, donde obtuvimos $L$ (una función que depende de tres variables), ahora el objetivo será obtener una función que solo dependa de $\alpha$ (multiplicadores de Lagrange).

Derivamos $L$ respecto a $\mathbf{w}$ y $b$ e igualamos a cero:

$$
\begin{aligned}
\frac{\partial L}{\partial \mathbf{w}} &= \mathbf{w} - \sum_{i=1}^{n}\alpha_i y_i \mathbf{x}_i = 0 \\
\frac{\partial L}{\partial b} &= -\sum_{i=1}^{n}\alpha_i y_i = 0
\end{aligned}
$$

de las anteriores expresiones, obtenemos que:

$$
\mathbf{w} = \sum_{i=1}^{n}\alpha_i y_i \mathbf{x}_i \qquad (1)
$$

$$
\sum_{i=1}^{n}\alpha_i y_i = 0 \qquad (2)
$$

finalmente, reemplazando (1) y (2) en $L$ y reordenando, tenemos:

$$L(\alpha) = \sum_{i=1}^{n} \alpha_i - \frac{1}{2} \sum_{i=1}^{n} \sum_{m=1}^{n} \alpha_i \alpha_m y_i y_m \, \mathbf{x}_i \mathbf{x}_m$$

$$\text{sujeto a:} \quad \alpha_i \geq 0 \quad \text{y} \quad \sum_{i=1}^{n} \alpha_i y_i = 0$$

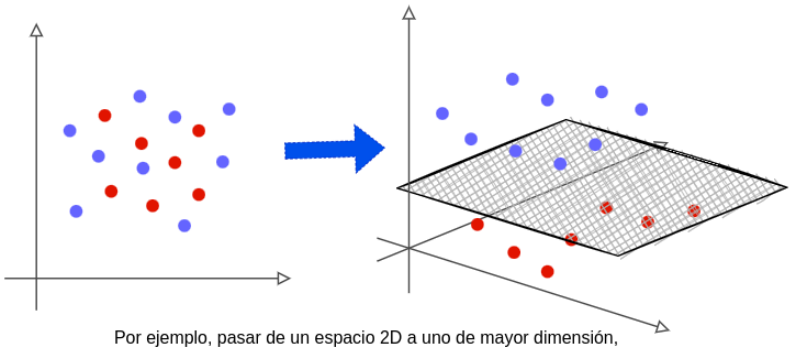
De esta forma obtenemos una función que solo depende de los multiplicadores de Lagrange $\alpha$, obteniendo así la definición del **problema dual**.

## Función Kernel

Notemos que la función $L(\alpha)$ tiene un producto escalar de dos vectores $\mathbf{x}_i \cdot \mathbf{x}_m$, este puede ser expresado como una **función kernel**:

$$k(\mathbf{x}_i, \mathbf{x}_m) = \mathbf{x}_i \cdot \mathbf{x}_m$$

Este "truco" del kernel es muy útil para transformar espacios no linealmente separables en espacios linealmente separables, tan solo modificando el kernel.



Por ejemplo, pasar de un espacio 2D a uno de mayor dimensión, tal que sea posible separar linealmente los puntos.

Existen diferentes tipos de kernel:

- Kernel Lineal: $k(\mathbf{x}_i, \mathbf{x}_m) = \mathbf{x}_i \cdot \mathbf{x}_m$
- Kernel Polinómico de grado $d$: $k(\mathbf{x}_i, \mathbf{x}_m) = (1 + (\mathbf{x}_i \cdot \mathbf{x}_m))^d$
- Kernel de Base Radial: $k(\mathbf{x}_i, \mathbf{x}_m) = \exp\left(-\gamma \|\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_m\|^2\right)$
- Kernel de Red Neuronal: $k(\mathbf{x}_i, \mathbf{x}_m) = \tanh\left(\lambda_1 (\mathbf{x}_i \cdot \mathbf{x}_m) + \lambda_2\right)$

Dado que se está cambiando el espacio, la **función de predicción** va a cambiar.

$$\hat{f}(\mathbf{x}_j) = \sum_{i=1}^{n} \alpha_i y_i k(\mathbf{x}_j, \mathbf{x}_i) + b$$

- $\mathbf{x}_j$ es un nuevo punto.
- $\mathbf{x}_i$ una observación del conjunto de datos de entrenamiento.

luego para determinar $b$ se puede resolver mediante $y_i f(x_i) = 1$, dando como resultado:

$$b = (y_i - \sum_{m=1}^{n} \alpha_m y_m k(x_i, x_m))_{\mathbb{S}}$$

- $\mathbb{S}$ es un subconjunto conformado por los *support vectors*: $(\mathbf{x}_i, y_i) \in \mathbb{S}$. Recordar que los *support vectors* son los puntos con $0 < \alpha_i < C$.
- $x_m$ una observación del conjunto de datos de entrenamiento.
- El resultado final será el promedio de todos los $b$ calculados.

> ***Importante**: estas expresiones son para cuando se tiene un modelo con un kernel no lineal solamente.*

---

Tomando en cuenta la definición del problema dual y la función kernel, **finalmente obtenemos un problema de optimización**:

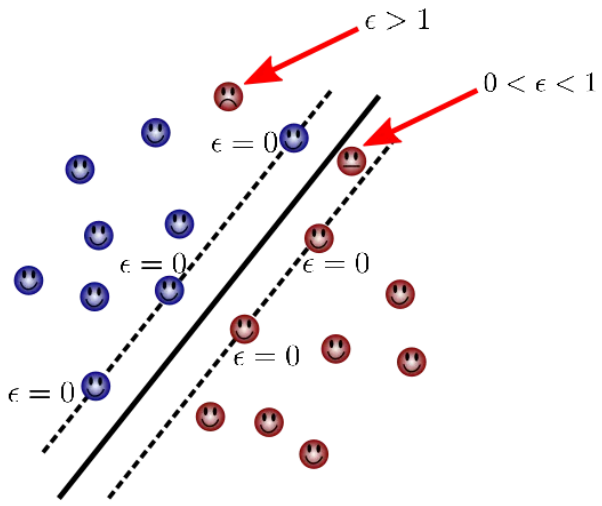
$$\max_{\alpha} L(\alpha) = \sum_{i=1}^{n} \alpha_i - \frac{1}{2} \sum_{i=1}^{n} \sum_{m=1}^{n} \alpha_i \alpha_m y_i y_m \, \mathbf{k}(\mathbf{x}_i, \mathbf{x}_m)$$

$$\text{sujeto a:} \quad \alpha_i \geq 0 \quad \text{y} \quad \sum_{i=1}^{n} \alpha_i y_i = 0$$

> ***Nota**:*
>
> - *$K$ es la función kernel.*
> - *$\alpha_i \geq 0$ es una restricción obtenida en el problema primal.*
> - *Los puntos $x_i$ cuyos $\alpha_i$ son mayor a cero, son los support vectors.*

# Soft-margin SVM

Todo lo analizado anteriormente tiene una limitante práctica, porque definimos un modelo que no permite errores, en otras palabras, el modelo **separa todos los puntos** correctamente, pero en problemas de la vida real esto no es posible.




Para permitir errores vamos a introducir una nueva variable de error $\epsilon$, recordemos la expresión $y_i f(\mathbf{x}_i) \geq 1$, por lo tanto ahora tenemos:

$$y_i(\mathbf{w}^T\mathbf{x}_i + b) \geq 1 - \epsilon_i$$

Considerando esta nueva expresión dentro del **problema primal**, tenemos:

$$\min \quad d = \frac{1}{2}\mathbf{w}^T\mathbf{w} + C\sum_{i=1}^{n}\epsilon_i \qquad \text{sujeto a: } y_i(\mathbf{w}^T\mathbf{x_i} + b) \geq 1 - \epsilon_i$$

- $C$ es un parámetro de regularización, define cuan estricto o permisivo será el margen. Si $C$ es muy grande la clasificación errónea general será menor, es decir, casi no se permiten errores; en cambio si $C$ es menor, se permite que las observaciones puedan estar del lado incorrecto.

escribiendo en términos de **multiplicadores de Lagrange**, tenemos:

$$L = \frac{1}{2}\mathbf{w}^T\mathbf{w} + C\sum_{i=1}^{n}\epsilon_i - \sum_{i=1}^{n}\alpha_i[y_i(\mathbf{w}^T\mathbf{x_i} + b) - 1 + \epsilon_i] - \sum_{i=1}^{n}\mu_i\epsilon_i$$
$$\text{sujeto a: } \alpha_i \geq 0, \quad \mu_i \geq 0$$

- $\mu$ es un nuevo multiplicador de Lagrange para los errores $\epsilon$.

Siguiendo el mismo procedimiento del **problema dual**, calcular las derivadas de $L$ respecto $\mathbf{w}$, $b$ y $\epsilon$ e igualar a cero:

$$\frac{\partial L}{\partial \mathbf{w}} = \mathbf{w} - \sum_{i=1}^{n}\alpha_i y_i \mathbf{x}_i = 0$$
$$\frac{\partial L}{\partial b} = -\sum_{i=1}^{n}\alpha_i y_i = 0$$
$$\frac{\partial L}{\partial \epsilon_i} = C - \alpha_i - \mu_i = 0$$

del cálculo anterior obtenemos las siguientes expresiones:

$$\mathbf{w} = \sum_{i=1}^{n} \alpha_i y_i \mathbf{x}_i, \quad \sum_{i=1}^{n} \alpha_i y_i = 0, \quad \alpha_i = C - \mu_i$$

> *Recordar que $\alpha_i \geq 0$ y $\mu_i \geq 0$, dado que $\alpha_i = C - \mu_i$ entonces la restricción de $\alpha_i$ cambia a:* $0 \leq \alpha_i \leq C$.

Remplazando estas expresiones en la función $L$ y reordenando, obtenemos la siguiente expresión:

$$\underset{\alpha}{\text{argmax}} \quad L(\alpha) = \sum_{i=1}^{n} \alpha_i - \frac{1}{2} \sum_{i=1}^{n} \sum_{m=1}^{n} \alpha_i \alpha_m y_i y_m \, \mathbf{k}(\mathbf{x}_i, \mathbf{x}_m)$$

$$\text{sujeto a:} \quad 0 \leq \alpha_i \leq C \quad \text{y} \quad \sum_{i=1}^{n} \alpha_i y_i = 0$$

- Los puntos $\mathbf{x}_i$ asociados a un $0 < \alpha_i < C$ son los *support vectors*.
- Notar que esta función es cuadrática en $\alpha$, por lo que se trata de un problema de *programación cuadrática*.

Notemos que esta expresión es la misma que se obtuvo en el planteamiento del problema dual, excepto que ahora $\alpha_i$ tiene un límite superior en $C$.

# Implementación

En primer lugar vamos a convertir $L(\alpha)$ en su forma matricial:

$$\underset{\alpha}{\text{argmax}} \quad L(\alpha) = \mathbf{1}^T \alpha - \frac{1}{2} \alpha^T (\mathbf{H}) \alpha$$

- $\alpha \in \mathbb{R}^n$ el vector de variables $\alpha_i$.
- $\mathbf{1} \in \mathbb{R}^n$ el vector de unos.
- $\mathbf{H} \in \mathbb{R}^{n \times n}$ la matriz tal que:
  - $\mathbf{H} = \mathbf{y}^T \mathbf{y} * \mathbf{K}$ el operador $*$ indica una multiplicación *elemento-a-elemento*.
  - $\mathbf{K} \in \mathbb{R}^{n \times n}$ la matriz kernel donde $K_{ij} = k(\mathbf{x}_i, \mathbf{x}_m)$, en forma matricial: $\mathbf{K} = k(\mathbf{X}, \mathbf{X})$.
  - $y \in \mathbb{R}^n$ el vector de respuestas (o etiquetas) $y_i$

Por lo general, las librerías requieren que la función objetivo de optimización esté en **términos de minimización**, para esto solamente hay que invertir el signo:

$$\underset{\alpha}{\text{argmin}} \quad L(\alpha) = \frac{1}{2} \alpha^T \mathbf{H} \alpha - \mathbf{1}^T \alpha \quad \text{sujeto a: } 0 \leq \alpha \leq C, \quad y^T \alpha = 0$$

Finalmente tenemos un problema de optimización que se puede resolver con ***Programación Cuadrática*** (en ingles QP).

---

## Programación Cuadrática o QP

Nos permite resolver problemas de optimización donde la **función objetivo es cuadrática** en las variables y las restricciones son lineales:

$$\min_x \quad \frac{1}{2}x^T P x + q^T x, \quad \text{sujeto a: } Gx \leq h, \quad Ax = b$$

- $P$ es una matriz simétrica (define la parte cuadrática).
- $q$ es un vector (parte lineal).
- $G, h$ son restricciones de desigualdad.
- $A, b$ son restricciones de igualdad.

> *Existen librerias de python como* `cvxopt/quadprog` *o* `scikit-learn` *para resolver este tipo de problemas..*

Aplicando esto al problema dual planteado (minimización de $L(\alpha)$), podemos verificar que precisamente se trata del mismo problema, porque:

- La función $L$ tiene una variable cuadrática en $\alpha$.
- Sus restricciones son lineales: en $0 \leq \alpha \leq C, \quad y^T\alpha = 0$

---

## Implementación con CVXOPT

Para resolver esta optimización, haremos uso de la libreria `cvxopt` de python, usando el método correspondiente a Quadrátic Program.

Primero hay que preparar los argumentos (matrices):

$$
\begin{aligned}
P &= \mathbf{H}_{n\times n} \\
q &= -\mathbf{1}_{n\times 1} \\
G &= \text{vstack}(-I_n, I_n) = \begin{pmatrix} -1 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & -1 & & \vdots \\ \vdots & & \ddots & 0 \\ 0 & \cdots & 0 & -1 \\ 1 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & 1 & & \vdots \\ \vdots & & \ddots & 0 \\ 0 & \cdots & 0 & 1 \end{pmatrix}_{2n\times n} \\
h &= \text{vstack}(0_{n\times 1}, C_{n\times 1}) = \begin{pmatrix} 0 \\ \vdots \\ 0 \\ C \\ \vdots \\ C \end{pmatrix}_{2n\times 1} \\
A &= \mathbf{y}_{1\times n} \\
b &= 0_{1\times 1}
\end{aligned}
$$

luego llamar a la función `solvers.qp()`:

```
def min_dual_problem(X, y, C, kernel="linear"):
  n = X.shape[0]
  y = y.reshape((1,n)) # conversión a array 2D

  #K = kernel_matrix(X, X, kernel)
  K = X @ X.T # para este ejercicio forzamos a kernel lineal
  H = (y.T @ y) * K

  # Conversión a formato cvxopt
  P = matrix(H)
  q = matrix(-np.ones((n, 1)))
  G = matrix(np.vstack([-np.eye(n), np.eye(n)]))
  h = matrix(np.vstack([np.zeros((n, 1)), C * np.ones((n, 1))]))
  A = matrix(y)
  b = matrix(0.0)

  solvers.options['show_progress'] = False
  solution = solvers.qp(P, q, G, h, A, b)

  # retornar alphas encontrados
```

```
  return np.array(solution['x']).flatten()
```

Para encontrar los mejores parámetros $\mathbf{w}$ y $b$, calculamos:

$$\mathbf{w} = \mathbf{X}^\intercal \alpha \mathbf{y}$$
$$b = (\mathbf{y} - \mathbf{X}\mathbf{w})_{\in S}$$

- $S$ es el subconjunto correspondiente a los *support vectors*.

```
def get_w_b(alphas, X, y, C):
  n = X.shape[0]

  # Recordar que los x_i con 0 < alphas < C son los support vectors
  support = (alphas > 1e-5) & (alphas < C - 1e-5)

  w = X.T @ (alphas * y)
  b = y[support] - (X[support] @ w)
  b = np.mean(b)
  return w, b, support

# entrenar el modelo
C = 1.0  # parámetro de regularización
alphas = min_dual_problem(X, y, C)
w, b, S = get_w_b(alphas, X, y, C)
print('Alphas: ', alphas[S][:10])
print('w: ', w)
print('b: ', b)
```

Para realizar las predicciones, usamos la **regla de clasificación**:

$$\begin{aligned}\hat{y} &= \text{sign}(f(\mathbf{x}_i)) \\ &= \text{sign}(\mathbf{w}^T \mathbf{x}_i + b)\end{aligned}$$

```
# predecir
def predict(X, w, b):
  return np.sign(X @ w + b)
```

## Kernel de base radial

En caso de cambiar a un kernel no lineal, cambia la expresión del cálculo de $b$:

$$b = (y_i - \sum_{m=1}^{n} \alpha_m y_m k(x_i, x_m))_{\mathbb{S}}$$

- $\mathbb{S}$ es un subconjunto conformado por los *support vectors*: $(\mathbf{x}_i, y_i) \in \mathbb{S}$. Recordar que los *support vectors* son los puntos con $0 < \alpha_i < C$.
- $x_m$ una observación del conjunto de datos de entrenamiento.
- Luego se debe promediar para obtener un único $b$.

```
def get_b_rbf(alphas, X, y, C, gamma):
  # Los support vectors son 0 < alphas < C
  support = (alphas > 1e-5) & (alphas < C - 1e-5)
  b = y[support] - np.sum(alphas * y * kernel_matrix(X[support], X, "radial", gamma), axis=1)
  b = np.mean(b)
  return b, support
```

y también cambia la función de estimación $\hat{f}(\mathbf{x}_i)$ :

$$\hat{f}(x_j) = \sum_{i=1}^{n} \alpha_i y_i k(x_j, x_i) + b$$

- $x_j$ es una nueva observación.
- $x_i$ una observación del conjunto de datos de entrenamiento.

La **regla de clasificación** es la misma $\hat{y} = \text{sign}(\hat{f}(\mathbf{x}_i))$

```
def predict_rbf(X_new, X, y, b, alphas, gamma):
    f_x = np.sum(alphas * y * kernel_matrix(X_new, X, "radial", gamma), axis=1) + b
    return np.sign(f_x)
```

En caso de un kernel polinómico (o polinomial), el cálculo de $b$ y la función de predicción son los mismos, la única diferencia es cambiar el kernel respectivo.

# Referencias


- The Elements of Statistical Machine Learning - Hastie, Tibshirani, Friedman (2008)
- Support Vector Machines for Classification - Oscar Contreras (2019) https://medium.com/data-science/support-vector-machines-for-classification-fc7c1565e3
- CVXOPT Documentation https://cvxopt.org/userguide/coneprog.html#quadratic-programming


---