

# MODELOS COMPUTACIONALES: CUARTO CURSO DEL GRADO DE ING. INFORMÁTICA EN COMPUTACION



# Introducción a las Máquinas de Vectores Soporte, SVM

César Hervás-Martínez Pedro A. Gutiérrez Peña

Grupo de Investigación AYRNA

Departamento de Informática y Análisis
Numérico
Universidad de Córdoba
Campus de Rabanales. Edificio Einstein.
Email: chervas@uco.es
pagutierrez@uco.es

2021-2022



### **INDICE**



**SVMs** Lineales

**SVMs No Lineales** 

Aplicación de las SVMs

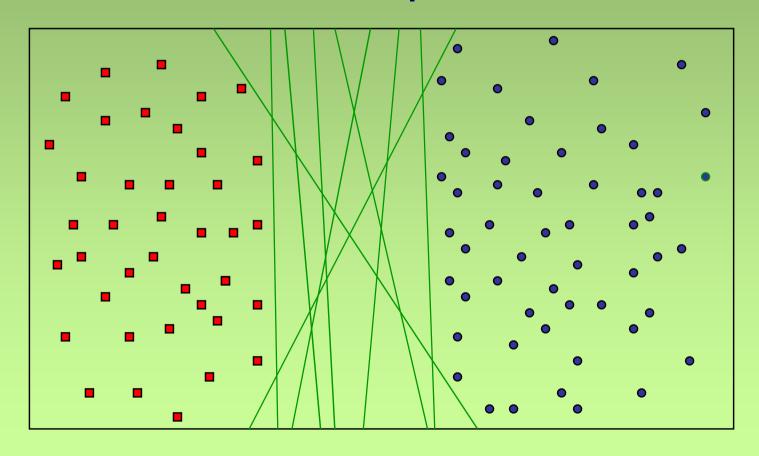
**Conclusiones y Futuro** 



#### **INTRODUCCION**



# Posibles fronteras de decisión para datos linealmente separables





## **INTRODUCCION**



## **Objetivo**

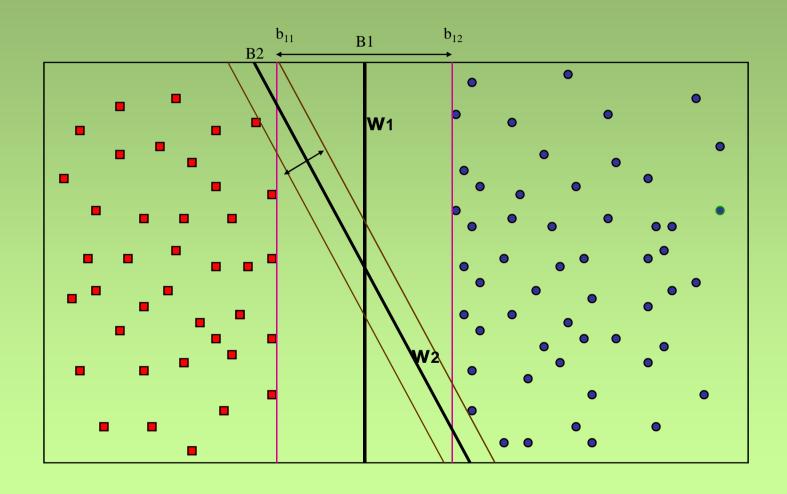
Dado un conjunto de ejemplos de entrenamiento construir un hiperplano "w" como superficie de decisión. De tal forma que la separación de las dos clases sea máxima (principio de generalización)



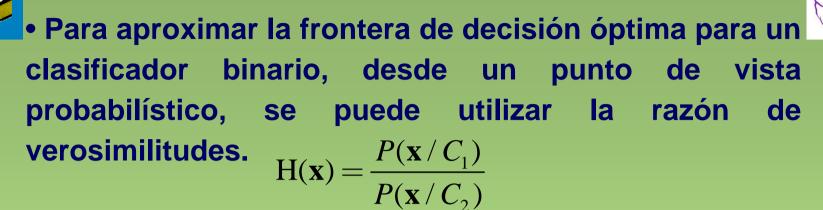
## **INTRODUCCION**



## Diferentes márgenes de decisión



#### Clasificadores lineales o cuasi-lineales



También la aproximación se puede hacer utilizando:

- Una función lineal:

$$g(\mathbf{x}) = w_0 + \mathbf{w}^{\mathsf{T}} \mathbf{x} = w_0 + w_1 x_1 + w_2 x_2 + \dots + w_d x_d$$

- Una combinación de función lineal y logística:

$$h(\mathbf{x}) = \frac{1}{1 + \exp(-g(\mathbf{x}))}$$

• En ambos casos la frontera de decisión generada es lineal o *cuasi* lineal.



## REGLA DE DECISIÓN BAYES

A veces, desde un punto de vista analítico, es mas conveniente trabajar con la función, – logaritmo de la razón de verosimilitudes, y de esta forma la regla de decisión, para dos clases, es que

$$H(\mathbf{x}) = -L(\mathbf{x}) = -\ln P(\mathbf{x}/C_1) + \ln P(\mathbf{x}/C_2)$$

supere el umbral dado por  $\ln \frac{P(C_2)}{P(C_1)}$ 

Al término H(x) se le llama la función discriminante. Si las probabilidades a priori de pertenencia a las dos clases son iguales, esto es

 $P(C_1) = P(C_2)$ ; entonces  $\ln \frac{P(C_2)}{P(C_1)} = 0$ 

Las reglas de decisión son ahora

Si 
$$-\ln P(\mathbf{x}/C_1) + \ln P(\mathbf{x}/C_2) > 0$$
 Entonces  $\mathbf{x} \in C_1$ 

Si 
$$-\ln P(\mathbf{x}/C_1) + \ln P(\mathbf{x}/C_2) < 0$$
 Entonces  $\mathbf{x} \in C_2$ 

A estas reglas de decisión se les llama el contraste Bayes de mínimo error



#### Clasificadores lineales o cuasi-lineales



- En la práctica, cuando la frontera de decisión óptima no es lineal los resultados obtenidos con clasificadores lineales no son satisfactorios.
- En este tema se verán métodos para dividir el espacio de características en regiones de decisión cuya frontera no es lineal.
- Se presentarán dos tipos de clasificadores:
- Clasificador polinomial.
- Máquina de vectores soporte.

#### Clasificador Polinomial I

¿Cómo transformar el clasificador lineal para obtener fronteras de decisión no lineales?

- La forma del clasificador lineal es:

$$g(\mathbf{x}) = w_0 + \mathbf{w}^{\mathsf{T}} \mathbf{x} = w_0 + w_1 x_1 + w_2 x_2 + \dots + w_d x_d$$

-Si introducimos los términos de grado 2:

$$g(\mathbf{x}) = w_0 + w_1 x_1 + w_2 x_2 + \dots + w_d x_d + w_{11} x_1^2 + w_{12} x_1 x_2 + \dots + w_{1d} x_1 x_d + w_{2d} x_2 x_d + \dots + w_{dd} x_2^2 + \dots$$

Este tipo de función es una función discriminante cuadrática.

Podemos seguir con el grado 3:

$$g(\mathbf{x}) = w_0 + w_1 x_1 + w_2 x_2 + \dots + w_d x_d$$

$$+ w_{11} x_1^2 + w_{12} x_1 x_2 + \dots + w_{1d} x_1 x_d + w_{2d} x_2 x_d + \dots + w_{dd} x_2^2 + \dots + w_{111} x_1^3 + w_{112} x_1^2 x_2 + \dots$$

y seguir hasta un grado arbitrario, lo que nos lleva a tener un altísimo numero de coeficientes



#### Clasificador Polinomial II



## • Las funciones discriminantes polinomiales anteriores tienen una forma común:

$$g(\mathbf{x}) = w_0 + w_1 \phi_1(\mathbf{x}) + w_2 \phi_2(\mathbf{x}) + ... + w_d \phi_d(\mathbf{x})$$

#### • Ejemplo:

#### Si la función g es:

$$g(\mathbf{x}) = w_0 + w_1 x_1 + w_2 x_2 + w_{11} x_1^2 + w_{12} x_1 x_2 + w_{21} x_2 x_1 + w_{22} x_2^2$$

#### **Entonces definiendo:**

$$\phi_1(\mathbf{x}) = x_1^2, \ \phi_2(\mathbf{x}) = x_1 x_2, \ \phi_3(\mathbf{x}) = x_2 x_1, \ \phi_4(\mathbf{x}) = x_2^2, \ \phi_5(\mathbf{x}) = x_1, \ \phi_4(\mathbf{x}) = x_2$$

#### **Podemos escribir:**

$$g(\mathbf{x}) = w_0 + w_{11}\phi_1(\mathbf{x}) + w_{12}\phi_2(\mathbf{x}) + w_{21}\phi_3(\mathbf{x}) + w_{22}\phi_4(\mathbf{x}) + w_1\phi_5(\mathbf{x}) + w_2\phi_6(\mathbf{x})$$



## Función Discriminante Lineal Generalizada (FDLG)



Llamaremos Función Discriminante Lineal Generalizada, FDLG, a toda función discriminante con la forma:

$$g(\mathbf{x}) = w_0 \phi_0(\mathbf{x}) + w_1 \phi_1(\mathbf{x}) + w_2 \phi_2(\mathbf{x}) + \dots + w_M \phi_M(\mathbf{x})$$
$$g(\mathbf{x}) = \sum_{i=0}^{M} w_i \phi_i(\mathbf{x}), \text{ donde } \phi_0(\mathbf{x}) = 1$$

- Las funciones  $\phi$  pueden ser polinomiales o de otro tipo:
- Gausianas, Splines, Sigmoides, producto de potencias, etc...
- La idea de descomponer una función compleja como suma de otras más simples es una idea recurrente en Matemáticas:
- Series de Taylor (1715).
- Series de Fourier (1822).
- Series de Wavelets "ondas". (1986)
- De hecho, también se usa con las ventanas de Parzen:

$$\hat{p}(\mathbf{x}) = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^{n} \partial(\mathbf{x} - \mathbf{x_i})$$



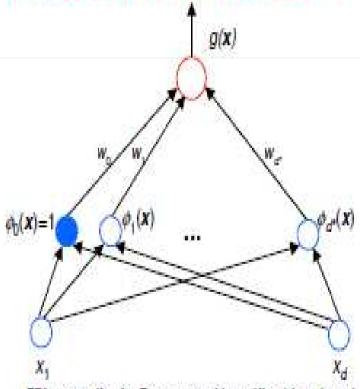
## FDLG: Notación y Representación Gráfica



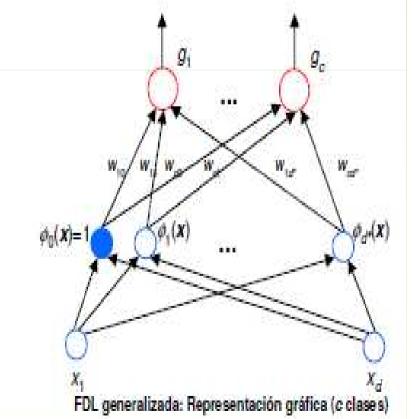
## Entonces una notación matricial se puede definir en la forma

$$g(\mathbf{x}) = \mathbf{w}^{T} \phi(\mathbf{x}), \text{ donde } \mathbf{w}^{T} = (\mathbf{w}_{0}, \mathbf{w}_{1}, \mathbf{w}_{2}, ..., \mathbf{w}_{M}),$$
$$\mathbf{y} \phi(\mathbf{x}) = (\phi_{0}(\mathbf{x}), \phi_{1}(\mathbf{x}), \phi_{2}(\mathbf{x}), ..., \phi_{M}(\mathbf{x}))^{T}$$

## Representación gráfica:



FDL generalizada: Representación gráfica (dos clases)



#### **FDLG: Entrenamiento**

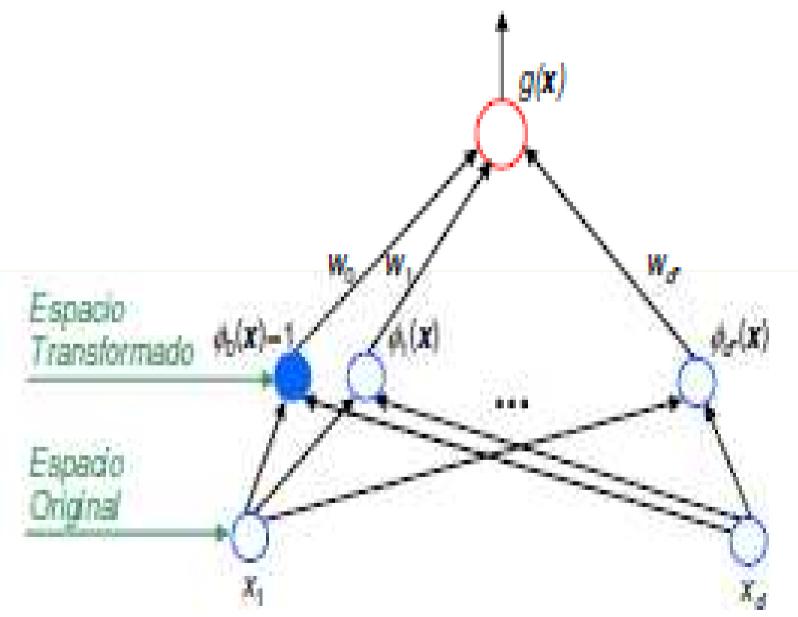


- Una observación crucial:
- Las funciones  $\phi$  transforman el espacio original de variables independientes en un nuevo espacio de características.
- En este nuevo espacio el problema es determinar una función discriminante lineal.
- Por tanto, el esquema de aprendizaje es:
- Paso 1: Transformar los datos de entrada con las funciones  $\phi$  , a un espacio de características
- Paso 2: Aplicar a los datos transformados alguno de los métodos del Análisis Discriminante Lineal



## **FDLG: Entrenamiento**



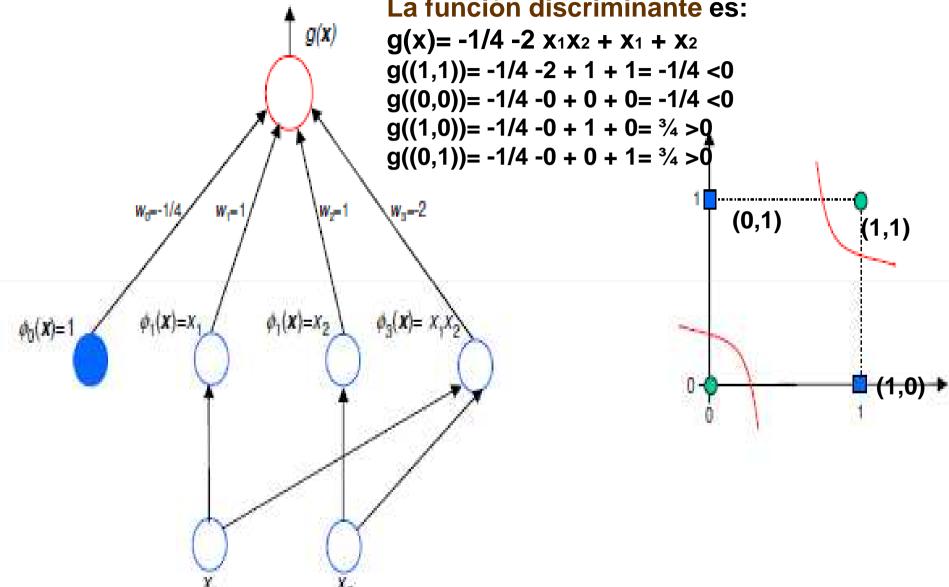




## Ejemplo de un clasificador cuadrático para el problema XOR







El Problema del XOR: Solución cuadrática



## Ejemplo de un clasificador cuadrático para el problema XOR



#### Observación:

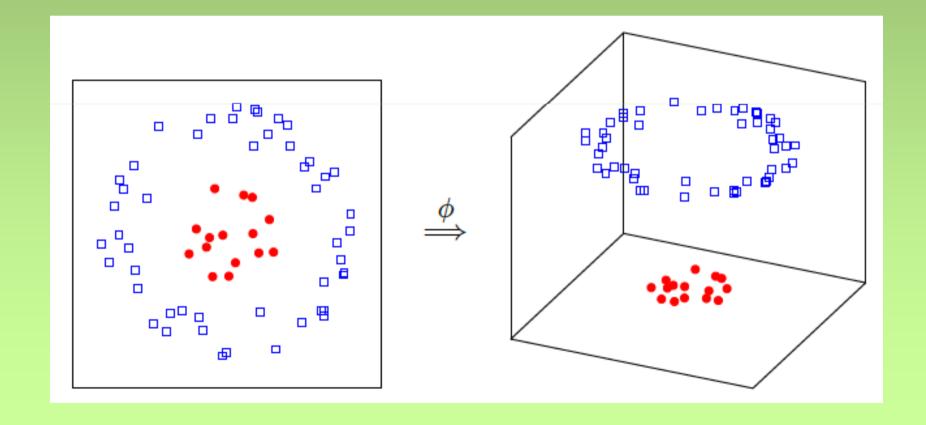
- El problema del XOR se resuelve porque hemos pasado del espacio de variables de entrada de dimensión 2, definido por  $x=(x_1, x_2)$  a un espacio transformado de dimensión 4 definido por  $f(x)=(1, x_1, x_2, x_1x_2)$  donde el problema sí es linealmente separable.
- Puede probarse que el aumento de la dimensión del espacio de entrada hace más fácil lograr la separabilidad lineal de los datos. Es el teorema de Cover



## **Separabilidad Lineal**



## Un ejemplo de lo que puede pasar al hacer una transformación a una dimensión superior





### Separabilidad Lineal: Teorema de Cover



### **Teorema de Cover**

La probabilidad de que dos clases sean linealmente separables se aproxima a 1 cuando la dimensión del espacio de características d tiende a infinito y el número de muestras N crece delimitado por 2(d+1). Si d=1.000.000 N=2.000.000.

- La aproximación tiene por tanto múltiples ventajas:
- Aumentando el número de características es más probable que las clases sean linealmente separables (esto puede hacerse para clasificadores polinomiales incrementando el grado del polinomio)
- Se utilizan los algoritmos de entrenamiento lineales para determinar los pesos de los modelos.





Las máquinas de vectores soporte, SVM, es uno de los métodos de aprendizaje supervisado más populares.

SVM es para clasificación binaria.

Es decir, 2 clases, como maligno vs benigno.

SVM se generaliza a múltiples clases.

Al igual que el análisis discriminante lineal y muchas otras técnicas.





"Las SVM son un raro ejemplo de una metodología en la que se encuentran la intuición geométrica, las matemáticas elegantes, las garantías teóricas y los algoritmos prácticos"

"En las SVM se tiene algo que decir sobre cada aspecto de la ...geometría, las matemáticas, el estudio teórico y los algoritmos"







- 1.- Hiperplano separador
- 2.- Maximizar el "margen"

  Maximizar la separación mínima entre clases
- 3.-Trabajar en un espacio de mayor dimensión Más "espacio", por lo que es más fácil de separar
- 4.- El truco de kernel

  Esto está íntimamente relacionado con el punto 3
- 5.-Tanto el punto 1 como 2 son bastante intuitivos



Las SVM pueden aplicarse a cualquier conjunto de entrenamiento

Hay que tener en cuenta que SVM produce un clasificador .....
no solo una función de puntuación

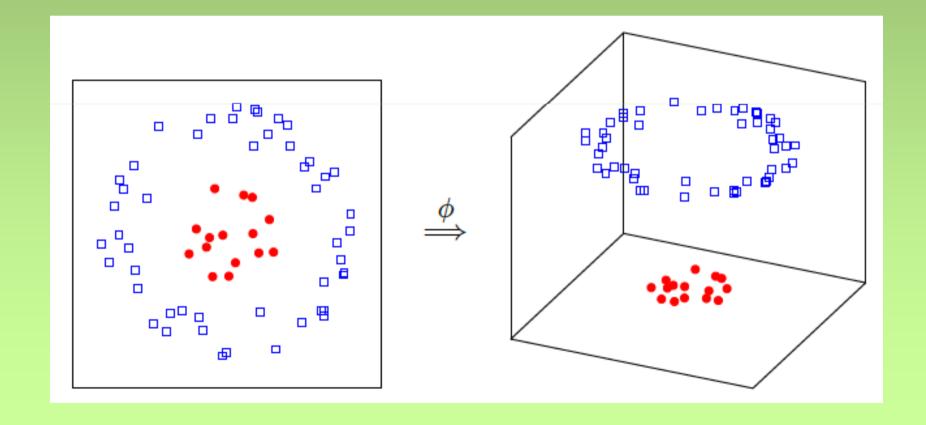
Con Regresión Logística, por ejemplo
Primero entrenamos a un modelo ......
luego generamos puntuaciones y establecemos un umbral

**SVM** da directamente la clasificación Salta el paso intermedio





## Un ejemplo de lo que puede pasar al hacer una transformación a una dimensión superior





### MARCO TEÓRICO metodología SVM



# Frontera de decisión y margen de los modelos de las máquinas de vectores soporte, SVM

**CASO:** Clases linealmente separables

- $\square$  Muestras de entrenamiento  $\{(\mathbf{x_i}, y_i)\}_{i=1}^N$
- $\Box$  Dos clases  $y_i = +1$ ,  $y_i = -1$
- □ Función de decisión

$$\mathbf{w}\mathbf{x} + \mathbf{w}_0 = 0$$
  
 $\mathbf{w}\mathbf{x}_i + \mathbf{w}_0 >= 0$  para  $\mathbf{y}_i = +1$   
 $\mathbf{w}\mathbf{x}_i + \mathbf{w}_0 < 0$  para  $\mathbf{y}_i = -1$ 

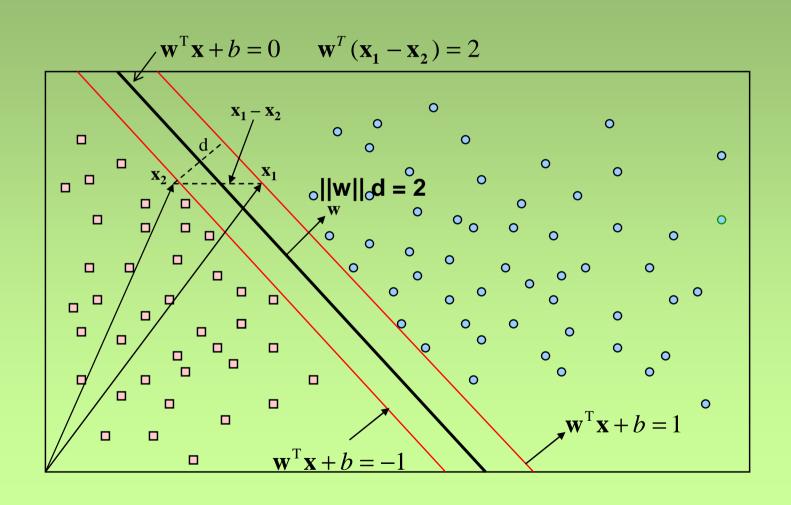
El entrenamiento busca estimar los parámetros o pesos w, w<sub>0</sub>



## MARCO TEÓRICO



## Frontera de decisión y margen de los modelos SVM





### **MARCO TEÓRICO**

## Modelo de Vectores Soporte, SVM



□ De la gráfica anterior tenemos:

$$\begin{cases} \mathbf{w}\mathbf{x_1} + w_0 = 1 \\ \mathbf{w}\mathbf{x_2} + w_0 = -1 \end{cases}$$
, luego restando, tenemos  $\mathbf{w}(\mathbf{x_1} - \mathbf{x_2}) = 2$ 

 □ A partir de esta ecuación podemos determinar un valor d, de forma tal que ||w|| d = 2,

**luego** 
$$d = 2 / ||w||$$

Donde d es el margen de separación a maximizar

 Entonces la función de optimización (minimizar en este caso) es una función monótona en w:

$$f(w) = ||w||^2 / 2$$

Esta optimización es un problema de programación cuadrática PQ (Bertsekas 1995)



### Un ejemplo inicial unidimensional

La función discriminante lineal es wx + w0 = 0 y los subespacios son

$$\mathbf{wxi} + \mathbf{w0} > 0$$
 para  $\mathbf{yi} = +1$   
 $\mathbf{wxi} + \mathbf{w0} < 0$  para  $\mathbf{yi} = -1$ 

**Clasificación unidimensional:** g(x)=wx+w<sub>0</sub>

#### – Conjunto de entrenamiento:

$$y_1=1$$
  $y_2=1$   $y_3=-1$   $y_4=-1$   
 $x_1=-1$   $x_2=0$   $x=1$   $x_3=2$   $x_4=5$ 

#### **Condiciones de separabilidad lineal:**

$$+1 (wx1 + w0) > 0:$$
  $-1 w + w0 > 0;$   $w0 > w$ 

$$+1 (wx2 + w0) > 0: 0w+w0 > 0 w0 > 0$$

$$-1(wx3 + w0) > 0$$
:  $2w+w0 < 0$ ;  $w0 < -2w$ 

$$-1(wx4 + w0) > 0$$
:  $5w+w0 < 0$ ;  $w0 < -5w$ 



## Representación Gráfica del Ejemplo Inicial



 $-w+w_0=0$ 

 $W_0=0$ 



Conjunto de entrenamiento

$$(x_1=-1, y_1=1) (x_2=0, y_2=1)^{-1}$$

pertenecen a C<sub>1</sub>;

pertenecen a C<sub>2</sub>

Condiciones de separabilidad lineal:

$$+(wx1 + w0) > 0: -w+w0 > 0;$$

$$+(wx2 + w0) > 0$$
:

$$(wx3 + w0) < 0$$
:  $2w+w0 < 0$ ;

$$(wx4 + w0) < 0$$
:  $5w+w0 < 0$ ;

W<sub>0</sub>



## SVM: (CL). Formulación Inicial



#### En el caso de separabilidad lineal:

- La distancia de un punto  $\mathbf{X_i}$  a la frontera lineal dada por es:  $g(\mathbf{x}) = \mathbf{w^T} \mathbf{x} + \mathbf{w_0} = 0$ 

$$d(\mathbf{x_i}, g(\mathbf{x})) = \frac{y_i(\mathbf{w^T}\mathbf{x}_i + \mathbf{w}_0)}{\sqrt{\mathbf{w^T}\mathbf{w}}}$$

Esto es así porque la distancia de un punto P(x1,x2) a una recta de ecuación r≡Ax1+Bx2+C=0, es

$$d(P,r) = \frac{Ax_1 + Bx_2 + C}{\sqrt{A^2 + B^2}}$$

• Por tanto para calcular el margen debemos calcular la menor distancia de los puntos del conjunto de entrenamiento a la frontera, siendo yi, +1 o -1

$$\operatorname{margen}(\mathbf{w}, \mathbf{w}_0) = \min_{i=1...n} \frac{y_i(\mathbf{w}^{\mathsf{T}} \mathbf{x}_i + \mathbf{w}_0)}{\sqrt{\mathbf{w}^{\mathsf{T}} \mathbf{w}}}$$



## **SVM: (CL).Formulación Inicial**



Los valores de w y w representaran la frontera lineal que separe los puntos del conjunto de entrenamiento pertenecientes a las dos clases de patrones,  $y_i=1$  e  $y_i=-1$ 

$$y_i(\mathbf{w}^{\mathsf{T}}\mathbf{x}_i + \mathbf{w}_0) > 0, i = 1...n$$

Nos interesa que estén lo más alejadas posible; por lo tanto se obtiene un problema de optimización max min con restricciones:

$$\max_{\mathbf{w}, w_0} \min_{i=1...n} \frac{y_i(\mathbf{w}^T \mathbf{x}_i + \mathbf{w}_0)}{\sqrt{\mathbf{w}^T \mathbf{w}}}$$
s.a.  $y_i(\mathbf{w}^T \mathbf{x}_i + \mathbf{w}_0) > 0, \quad i = 1,...,n$ 

## MVS:(CL). Normalización (1)



## Problemas para buscar la frontera óptima:

- Una frontera lineal no tiene una representación única.
- Si se tiene  $g(\mathbf{x}) = \mathbf{w}^T \mathbf{x} + \mathbf{w}_0 = 0$  y se multiplica a ambos miembros de la ecuación por una constante no nula, la ecuación no cambia.
- Es decir, la frontera lineal representada por  $g(\mathbf{x}) = \mathbf{w}^{T}\mathbf{x} + \mathbf{w}_{0} = 0$  es equivalente a

 $\lambda (\mathbf{w}^{\mathsf{T}}\mathbf{x} + \mathbf{w}_0) = 0, \ \lambda \neq 0$ 

 Esto hace que el problema de optimización sea complicado de resolver.

#### Solución:

– Elegir de todas las representaciones de una frontera lineal dada, aquella para la que el menor valor de  $|\mathbf{g}(\mathbf{x}_i)| = \mathbf{y}_i(\mathbf{w}^T\mathbf{x}_i + \mathbf{w}_0)$  sea igual a 1.

### Normalización

$$\mathbf{g}(\mathbf{x}) = \mathbf{w}^{\mathsf{T}} \mathbf{x} + \mathbf{w}_{0} = 1$$

$$|g(\mathbf{x}_i)| = \mathbf{y}_i(\mathbf{w}^{\mathsf{T}}\mathbf{x}_i + \mathbf{w}_0)$$

$$\min g(\mathbf{x_i}) = 1$$

$$g(\mathbf{x}) = \mathbf{w}^{\mathsf{T}} \mathbf{x} + \mathbf{w}_0 =$$

Las restricciones  $y_i(\mathbf{\hat{w}}^T\mathbf{x}_i + \mathbf{w}_0) \ge 0$ , pasan a  $y_i(\mathbf{w}^T\mathbf{x}_i + \mathbf{w}_0) \ge 1$ 

$$\geq 0$$
, pasan a  $y_i(\mathbf{w}^T\mathbf{x}_i + \mathbf{w}_0) \geq 1$ 

puesto que el menor valor que toma  $y_i(\mathbf{w}^T\mathbf{x}_i + \mathbf{w}_0)$  es 1



## SVM: (CL). Normalización (2)



- El margen se calcula de forma simple como:

$$\operatorname{margen}(\mathbf{w}, w_0) = \min_{x_i \in H} \frac{y_i(\mathbf{w}^{\mathsf{T}} \mathbf{x}_i + \mathbf{w}_0)}{\sqrt{\mathbf{w}^{\mathsf{T}} \mathbf{w}}} = \frac{1}{\sqrt{\mathbf{w}^{\mathsf{T}} \mathbf{w}}}$$

Las restricciones  $y_i(\mathbf{w}^T\mathbf{x}_i + \mathbf{w}_0) \ge 0$ , pasan a  $y_i(\mathbf{w}^T\mathbf{x}_i + \mathbf{w}_0) \ge 1$  puesto que el menor valor que toma  $y_i(\mathbf{w}^T\mathbf{x}_i + \mathbf{w}_0)$  es 1

Para maximizar el margen, esto es  $\frac{1}{\sqrt{w^T w}}$ , hay que maximizar el cociente, o lo que es lo mismo minimizar el denominador o una función monótona del mismo, por lo tanto ahora el problema max min con restricciones es de la forma

$$\min_{\mathbf{w}} \frac{1}{2} \mathbf{w}^{\mathsf{T}} \mathbf{w},$$
s.a.  $y_i (\mathbf{w}^{\mathsf{T}} \mathbf{x}_i + \mathbf{w}_0) \ge 1, \quad i = 1...n$ 

Este un problema de programación cuadrática, tiene un único óptimo y puede resolverse con complejidad computacional polinomial.



## Normalización del Ejemplo Inicial

W<sub>0</sub>





Conjunto de entrenamiento:

(x1=-1, y1=1) (x2=0, y2=1) de C1;

(x3=2, y3=-1) (x4=5, y4=-1) de C2

(-1,3/2) x

wo=0 w

 $-w+w_0=0$ 

- Normalización: Ejemplo
- La frontera determinada por  $g(x)=wx+w_0=0$  con  $(w,w_0)=(-1,3/2)$ , esto es, -x+3/2=0 o lo que es igual -2x+3=0 cumple las restricciones de separación lineal, (ver gráfica, está en la zona factible). Para normalizarla, el menor valor de  $|g(x)|=y_i(wx_i+w_0)$  debe ser igual a 1.

## Normalización del Ejemplo Inicial

- Calculamos los valores de la función discriminante -x+3/2=0 de los puntos del conjunto de entrenamiento, para  $(w,w_0)=(-1,3/2)$  y para los puntos de entrenamiento  $(x_1=-1,y_1=1)$   $(x_2=0,y_2=1)(x_3=2,y_3=-1)$   $(x_4=5,y_4=-1)$   $y_1$   $(wx_1+w_0)=1((-1)(-1)+3/2)=5/2$ ;  $y_2$   $(wx_2+w_0)=1((-1)0+3/2)=3/2$ ;  $y_3$   $(wx_3+w_0)=-1((-1)2+3/2)=1/2$ ;  $y_4$   $(wx_4+w_0)=-1((-1)5+3/2)=7/2$  El menor valor es 1/2 y ocurre para x3= 2.

– Entonces dividiendo por 1/2 el par  $(w,w_0)=(-1,3/2)$  obtenemos el nuevo vector  $(w,w_0)=(-2,3)$  que define exactamente la misma frontera que antes, esto es -2x+3=0 pero ahora:

$$\begin{array}{ll} y_1 \text{ (wx}_1+w_0\text{ )=2+3=5;} & y_2 \text{ (wx}_2+w_0\text{ )=0+3=3;} \\ y_3 \text{ (wx}_3+w_0\text{ )=-(-4+3)=1;} & y_4 \text{ (wx}_4+w_0\text{ )=-(-10+3)=7;} \\ \text{Además ahora, siempre es} & y_i \text{ (wx}_i^{}+w_0^{}) \geq 1 \end{array}$$

## **Gráfica Ejemplo Inicial**



$$g(x)=-2x+3$$
  
 $g(x)=-x+3/2$   $g(x)$  normalizada

g(x) sin normalizar

$$(w,w_0)=(-1,3/2)$$

margen(
$$\mathbf{w}, w_0$$
) =  $\frac{1}{\sqrt{\mathbf{w}^T \mathbf{w}}} = \frac{1}{\sqrt{(-2)(-2)}} = \frac{1}{2}$ 

$$y_{1}=1$$
  $y_{2}=1$   $y_{3}=-1$   $y_{4}=-1$ 

$$x_1=-1$$
  $x_2=0$   $x_3=2$   $x_4=5$ 

Frontera: 
$$-2x+3=0$$

 $(w,w_0)=(-2,3)$ 



#### Ejemplo Inicial: Solución normalizada



Clasificación unidimensional: g(x)=-2x+3

– Conjunto de entrenamiento:

#### Condiciones de separabilidad lineal NO normalizadas:

```
+ (wx1 + w0) > 0: -w+w0 > 0; w0 > w

+ (wx2 + w0) > 0: w0 > 0

(wx3 + w0) < 0: 2w+w0 < 0; w0 < -2w

(wx4 + w0) < 0: 5w+w0 < 0; w0 < -5w
```

#### Condiciones de separabilidad lineal normalizadas:

```
+(wx1+w0)>=1: -w+w0>=1; w0>=w+1, -w+w0\geq 1

+(wx2+w0)>=1: w0>=1; w0>=1; w0>=1; w0>=-2w-1, -2w-w0\geq 1

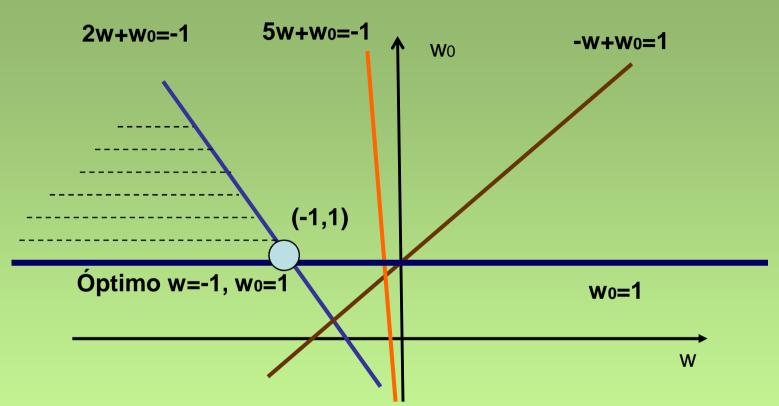
(wx4+w0)<=-1: 5w+w0<=-1; w0<=-5w-1, -5w-w0\geq 1
```



### Ejemplo Inicial: Solución normalizada



#### Región rayada: Separabilidad lineal normalizada



función a maximizar  $\frac{1}{\sqrt{\mathbf{w}^T \mathbf{w}}}$  o lo que es igual

$$\min \operatorname{minimizar} \ \frac{1}{2} \mathbf{w}^{\mathsf{T}} \mathbf{w} = \frac{1}{2} w^2$$



#### Un Ejemplo Inicial: Solución



#### Clasificador unidimensional

Función a minimizar: 
$$\frac{1}{2}\mathbf{w}^{\mathrm{T}}\mathbf{w} = \frac{1}{2}w^{2}$$

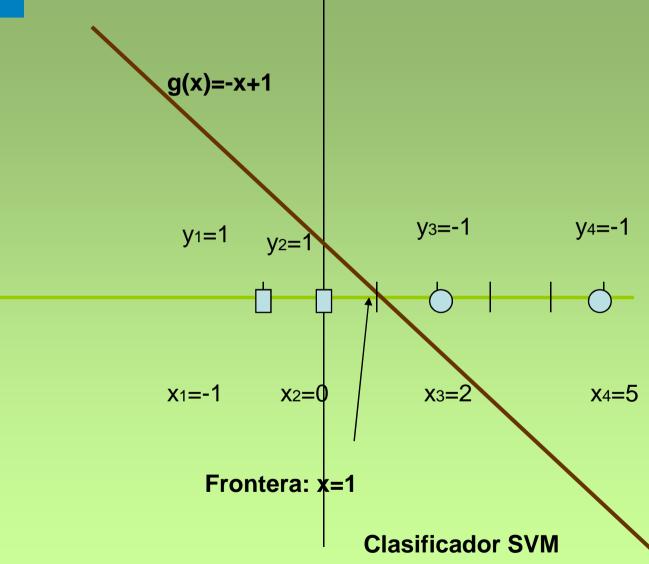
#### Valor óptimo:

- El menor valor que puede tomar  $\frac{1}{2}w^2$  en la región sombreada se obtiene con w=-1 w=-1.
- Por tanto el clasificador SVM es: g(x)=-x+1 y la frontera g(x)=0 se obtiene para x=1



# **Un Ejemplo Inicial: Frontera**







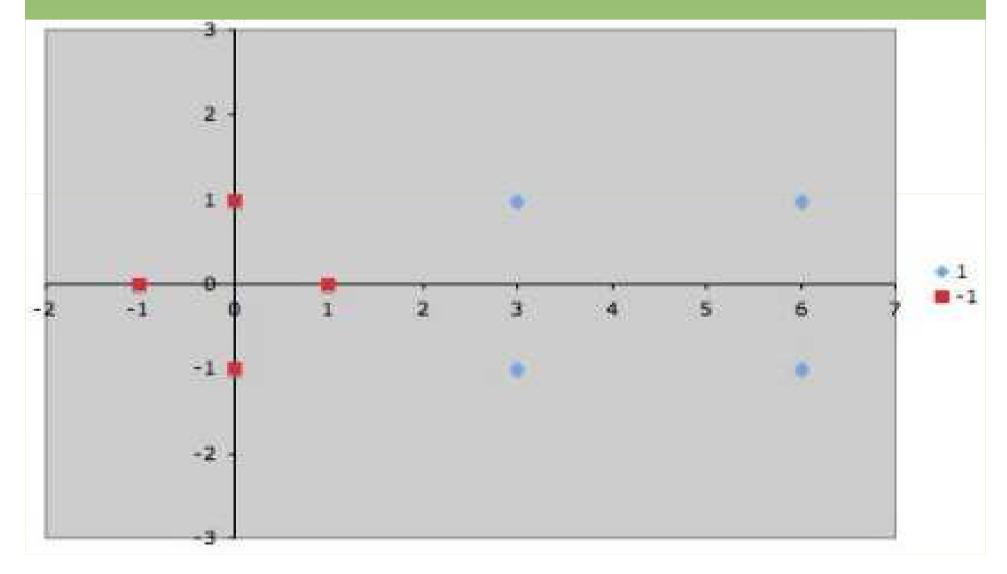
#### **Vectores soporte**



- -Son los patrones correspondientes a los puntos que están sobre el margen. Estos patrones se llaman vectores soporte.
- En la práctica son pocos los elementos que están sobre el margen. Así, son los que determinan los márgenes de la función discriminante lineal

### Nuevo ejemplo linealmente separable

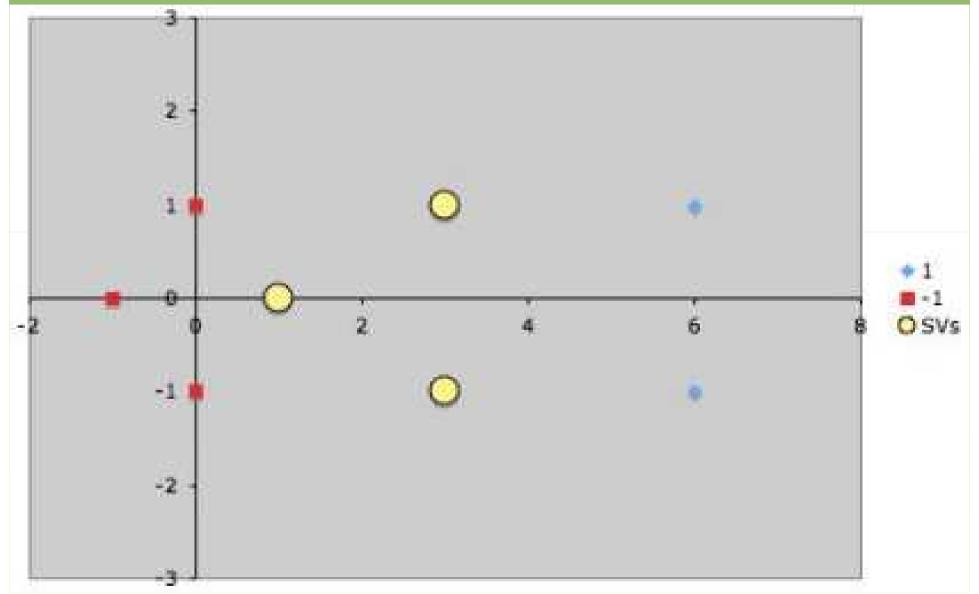
Clase negativa (-1, 0; -1) (0, -1; -1) (0, 1; -1) (1, 0; -1) Clase positiva (3, -1; +1) (3, 1; +1) (6, -1; +1) (6, 1; +1)



# **Ejemplo: Vectores soporte**

Clase negativa (-1, 0; -1) (0, -1; -1) (0, 1; -1) (1, 0; -1)

Clase positiva (3, -1; +1) (3, 1; +1) (6, -1; +1) (6, 1; +1)





Clase positiva (3, -1, +1) (3, 1, +1) (6, -1, +1) (6, 1, +1)  $H_1: \mathbf{W} \cdot \mathbf{X} + W_0 = 1$  Clase negativa (-1, 0, -1) (0, -1, -1) (0, 1, -1) (1, 0, -1)  $H_2: \mathbf{W} \cdot \mathbf{X} + W_0 = -1$ 

$$W_1X_1 + W_2X_2 + W_0 = -1$$
  
 $1W_1 + 0W_2 + W_0 = -1$  (1, 0)  $\Rightarrow$  -1  
 $\Rightarrow W_0 = -1 - W_1$  (3, -1)  $\Rightarrow$  +1 Vectores soporte  
 $W_1X_1 + W_2X_2 + W_0 = 1$ 

$$3w_1 - 1w_2 + w_0 = 1$$
 (2)

$$\rightarrow$$
  $w_2 = 3w_1 - 1 - w_1 - 1$ 

$$\rightarrow$$
  $W_2 = 2W_1 - 2$ 

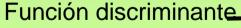
$$3w_1 + 1w_2 + w_0 = 1$$
 (3)

$$\rightarrow$$
 3w<sub>1</sub> + 2w<sub>1</sub> -2 -1 -w<sub>1</sub> = 1

$$\rightarrow$$
 W<sub>1</sub> = 1

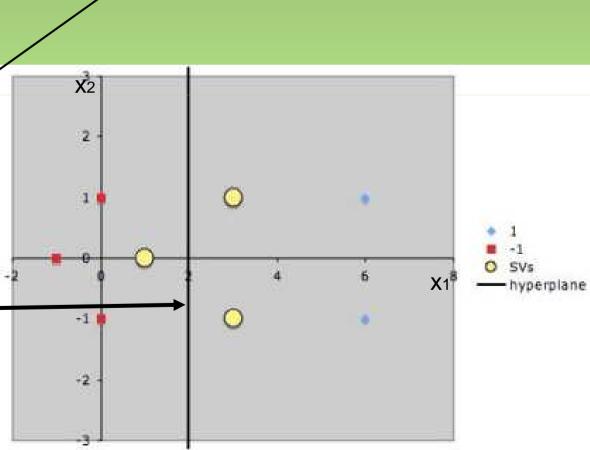
$$\rightarrow$$
 w<sub>0</sub> = -2

$$\rightarrow$$
  $W_2 = 0$ 



$$(1,0) \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \end{pmatrix} - 2 = 0$$

Recta: 
$$x_1 = 2$$





#### **DUALIDAD EN PROGRAMACION LINEAL**



#### **Relaciones primal-dual**

Asociado a cada problema lineal existe otro problema de programación lineal denominado *problema dual, que posee* importantes propiedades y relaciones notables con respecto al problema lineal original, problema que para diferencia del dual se denomina entonces como *problema primal*.

Las relaciones las podemos enumerar como siguen:

- a) El problema dual tiene tantas variables como restricciones tiene el problema primal.
- b) El problema dual tiene tantas restricciones como variables tiene el problema primal
- c) Los coeficientes de la función objetivo del problema *dual* son los términos independientes de las restricciones del problema *primal*.

### **DUALIDAD EN PROGRAMACION LINEAL**

- d) Los términos independientes de las restricciones del problema dual son los coeficientes de la función objetivo del problema primal.
- e) La matriz de coeficientes técnicos del problema dual es la traspuesta de la matriz de coeficientes técnicos del problema primal.
- f) El sentido de las desigualdades de las restricciones del problema dual y el signo de las variables del mismo problema, dependen de la forma que tenga el signo de las variables del problema primal y del sentido de las restricciones del mismo problema.
- g) Si el problema primal es un problema de maximización, el problema dual es un problema de minimización.
- h) El problema dual de un problema dual es el problema primal original

#### TABLA DE TUKER

MAXIMIZACIÓN			MINIMIZACIÓN
RESTRICCIONES	≤	2	VARIABLES
	2	<b>≤</b>	
	=	><	
VARIABLES	2	2	RESTRICCIONES
	≤	≤	
	><	=	

Los problemas duales simétricos son los que se obtienen de un problema primal en forma canónica y 'normalizada', es decir, cuando llevan asociadas desigualdades de la forma mayor o igual en los problemas de minimización, y desigualdades menor o igual para los problemas de maximización



#### **Optimización lineal con restricciones lineales**



## Si el problema primal es:

$$Max Z(\mathbf{x}) = \mathbf{c}^T \mathbf{x}$$

$$s.a.$$

$$A\mathbf{x} \le \mathbf{b}$$

$$\mathbf{x} \ge \mathbf{0}$$

**Ejemplo.** Dado el modelo lineal max 
$$z = 2x1 - x2 + 3x3$$
 sujeto a 
$$x1 - x2 + x3 \le 2$$
$$3x1 - x2 + 2x3 \le 1$$
$$x1, x2, x3 \ge 0$$

3 variables, dos restricciones

#### El problema dual (dual simétrico) es:

Min 
$$G(\lambda) = \lambda^{T} \mathbf{b}$$
 min  $G = 2\lambda 1 + \lambda 2$   
sujeto a
$$\lambda 1 + 3\lambda 2 \ge 2$$

$$-\lambda 1 - \lambda 2 \ge -1$$

$$\lambda 1 + 2\lambda 2 \ge 3$$

$$\lambda \ge \mathbf{0}$$
Dos variables, tres restricciones



# ¿ Porqué se plantea el programa dual?.



a) Por una parte permite resolver problemas lineales donde el numero de restricciones es mayor que el numero de variables.

Gracias a los teoremas que no expondremos (ver apuntes adicionales) la solución de uno de los problemas (primal o dual) nos proporciona de forma automática la solución del otro problema.

b) Otra de las ventajas de la dualidad, es la posibilidad de resolver gráficamente algunos problemas.





#### Consideremos el siguiente problema lineal

Min 
$$Z(x) = 2 x_1 + 3 x_2 + 5 x_3 + 2 x_4 + 3 x_5$$

$$x_1 + x_2 + 2 x_3 + x_4 + 3 x_5 \ge 4$$

$$2 x_1 - x_2 + 3 x_3 + x_4 + x_5 \ge 3$$

Los términos independientes de las restricciones del problema dual son los coeficientes de la función objetivo del problema primal.

$$x_1 \ge 0$$
,  $x_2 \ge 0$ ,  $x_3 \ge 0$ ,  $x_4 \ge 0$ ,  $x_5 \ge 0$ 

Dado que se trata de un programa lineal en forma canónica, ello nos proporciona un dual en forma simétrica como el siguiente:

Max 
$$G(\lambda) = 4 \lambda_1 + 3 \lambda_2$$

s.a:

$$\lambda_1 + 2 \lambda_2 \leq 2$$

$$\lambda_1 - \lambda_2 \leq 3$$

$$2 \lambda_1 + 3 \lambda_2 \leq 5$$

$$\lambda_1 + \lambda_2 \leq 2$$

$$3 \lambda_1 + \lambda_2 \leq 3$$

$$\lambda_1 \geq 0$$
,  $\lambda_2 \geq 0$ 

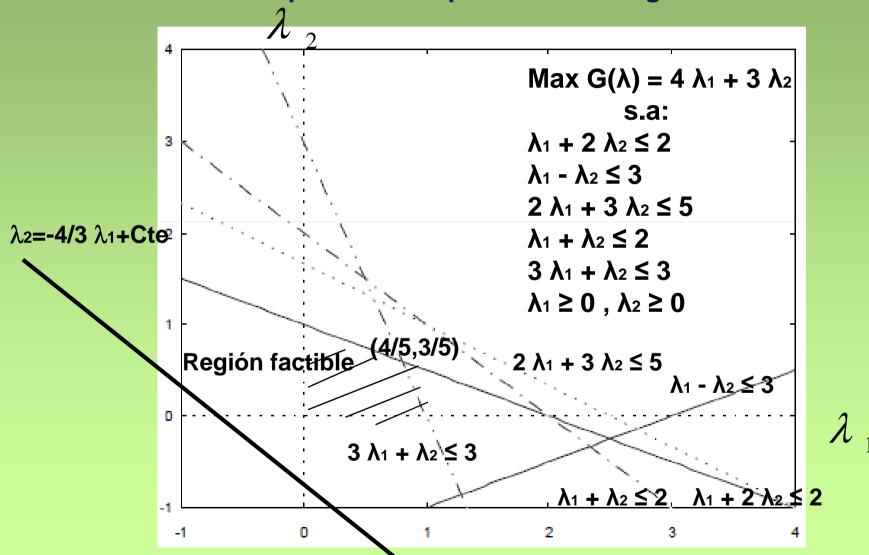
El problema dual tiene tantas variables como restricciones tiene el problema primal.

El problema dual tiene tantas restricciones como variables tiene el problema primal Los coeficientes de la función objetivo del problema dual son los términos independientes de las restricciones del problema primal.





Este problema solo tiene dos variables y cinco restricciones por tanto se puede resolver gráficamente:





# El vértice solución es el punto (4/5,3/5) con un valor de la función objetivo de

$$G(\lambda) = 4 \lambda_1 + 3 \lambda_2 = 16/5 + 9/5 = 5$$

Si lo resolvemos por el primal, para minimizar Z(x) hacemos

$$x_2$$
,  $x_3$  y  $x_4$  =0, luego  
 $x_1 + 3x_5 = 4$   
 $2x_1 + x_5 = 3$ 

La solución de este sistema es:  $x_1 = 1$  y  $x_5 = 1$ , lo cual nos proporciona un valor de la función objetivo de

$$Z(x) = 2x_1+3x_2+5x_3+2x_4+3x_5=2+3+0+0+0=5$$

idéntico a la solución del dual



# Condiciones de Kuhn-Tucker en los problemas lineales (primales y duales).

Consideremos el siguiente problema de optimización lineal, que denominaremos PRIMAL:

$$Max \ Z(\mathbf{x}) = \mathbf{c}^T \mathbf{x}$$

s.a.

$$Ax \leq b$$

$$x \ge 0$$

La función lagrangiana a optimizar de este problema será:

$$L(\mathbf{x}, \lambda) = \mathbf{c}^T \mathbf{x} + \lambda (\mathbf{b} - \mathbf{A} \mathbf{x})$$

**Donde** 

$$\lambda = (\lambda_1, \lambda_2, ..., \lambda_m)$$

representa el vector de los multiplicadores de Lagrange asociados a las m restricciones

#### **Condiciones de Kuhn-Tucker)**



Las condiciones de optimalidad de este problema

$$L(\mathbf{x}, \lambda) = \mathbf{c}^T \mathbf{x} + \lambda (\mathbf{b} - \mathbf{A} \mathbf{x})$$

respecto de las variables, son:

$$\frac{\partial L}{\partial \mathbf{x}} = \mathbf{c} - \lambda \mathbf{A} \le \mathbf{0}$$
 o  $\mathbf{x} \frac{\partial L}{\partial \mathbf{x}} = \mathbf{x} (\mathbf{c} - \lambda \mathbf{A}) = \mathbf{0}$ , para  $\mathbf{x} \ge \mathbf{0}$ 

Respecto a los multiplicadores, son

$$\frac{\partial L}{\partial \lambda} = \mathbf{b} - \mathbf{A}\mathbf{x} \ge \mathbf{0} \quad \text{o} \quad \lambda \frac{\partial L}{\partial \lambda} = \lambda(\mathbf{b} - \mathbf{A}\mathbf{x}) = \mathbf{0}, \text{ para } \lambda \ge \mathbf{0}$$

Como puede observarse, ambas condiciones de optimalidad son las mismas para los dos problemas. Por lo tanto, asociado a todo problema de programación lineal existe otro problema de programación lineal denominado programa dual que tiene importantes relaciones con el problema original denominado programa primal





 Si un problema de programación lineal tiene la forma

$$\min_{\mathbf{x} \geq \mathbf{0}} \left\{ \mathbf{c}^{\mathsf{T}} \mathbf{x} \mid \mathbf{A} \mathbf{x} \geq b \right\}$$

□ La inferencia dual es

$$\max_{P \in \mathcal{P}} \left\{ v \mid \mathbf{A} \mathbf{x} \ge b \underset{P}{\longrightarrow} \left( \mathbf{c}^T \mathbf{x} \ge v \right) \right\}$$

■ La familia P de pruebas consta de la dominancia por sustituciones (combinaciones lineales no negativas).



□ Def 1.- Para un u ≥ 0,uAx ≥ ub es una sustitución de Ax ≥ b.

- □ Def 2.-  $uAx \ge ub$  es una dominancia de  $cx \ge v$  si  $uAx \ge ub$  implica que  $cx \ge v$  (para  $x \ge 0$ ).
  - Esto es,  $uA \le c$  y  $ub \ge v$ .
- □ Esto es un método de inferencia completa.
  - Debido al Lema de Farkas.





#### □ Así, la inferencia dual

$$\operatorname{Max}_{P \in \mathcal{P}} \left\{ v \mid \mathbf{Ax} \ge b \underset{P}{\rightarrow} (\mathbf{cx} \ge v) \right\}$$

#### se convierte en

$$\operatorname{Max}_{u\geq 0} \left\{ v \mid \mathbf{uA} \leq c, \mathbf{ub} \geq v \right\}$$

0

$$\operatorname{Max}_{u\geq 0} \left\{ ub \, \middle| \, \mathbf{uA} \leq c \right\}$$

cuando  $Ax \ge b$ ,  $x \ge 0$  es factible

 Este es el modelo clásico dual de programación lineal.



Puesto que la familia de pruebas es completa, tenemos una dualidad fuerte:

$$\operatorname{Max}_{\mathbf{u} \geq \mathbf{0}} \left\{ \mathbf{u} b \mid \mathbf{u} \mathbf{A} \leq \mathbf{c} \right\} = \operatorname{Min}_{\mathbf{x} \geq \mathbf{0}} \left\{ \mathbf{c} \mathbf{x} \mid \mathbf{A} \mathbf{x} \geq \mathbf{b} \right\}$$

Excepto cuando  $uA \le c$ ,  $u \ge 0$  y  $Ax \ge b$ ,  $x \ge 0$  son ambas no factibles.

En este caso, la dualidad es simétrica

- El dual del dual es el primal.
- De esta forma el dual pertenece a la clase NP y el primal a la co-NP.



#### **Inferencia Dual**



□ A veces se verifica una dualidad fuerte, esto es:

Máximo valor del problema dual

Mínimo valor del problema primal

Si P es una familia de pruebas completa

**Dualidad fuerte** 

$$\max_{P \in \mathcal{P}} \left\{ v \mid C \underset{P}{\rightarrow} (f(\mathbf{x}) \ge v) \right\}$$



# Programación Lineal: Inferencia Dual, ejemplo



### □ Primal:

## **Dual:**

Min 
$$4x_1 + 7x_2$$

$$2x_1 + 3x_2 \ge 6$$
  $(u_1)$ 

$$2x_1 + x_2 \ge 4$$
  $(u_2)$ 

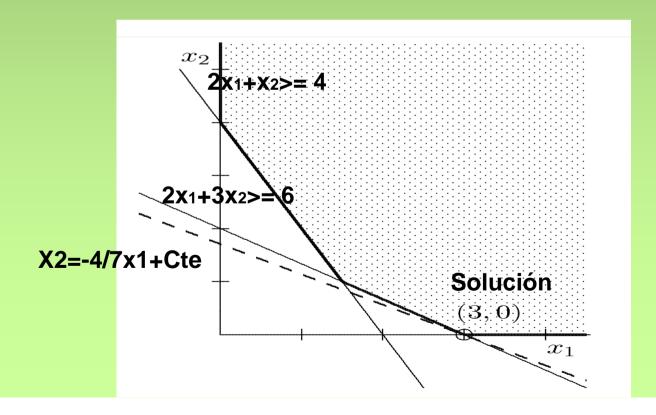
$$X_1, X_2 \ge 0$$

Max 
$$6u_1 + 4u_2$$

$$2u_1 + 2u_2 \le 4$$
  $(x_1)$ 

$$3u_1 + u_2 \le 7$$
  $(x_2)$ 

$$u_1, u_2 \ge 0$$





# Programación Lineal: Inferencia Dual (una solución)

Dual:



## □ Primal:

Min 
$$4x_1 + 7x_2 = 12$$
  
 $2x_1 + 3x_2 \ge 6$   $(u_1 = 2)$ 

$$2x_1 + x_2 \ge 4$$
  $(u_2 = 0)$ 

$$X_1, X_2 \geq 0$$

#### Solución

Sustitución: 
$$2x_1 + 3x_2 \ge 6$$
  
Multiplicamos la inecuación 1 por  $2x_1 + x_2 \ge 4$   
 $2x_1 + x_2 \ge 4$   
 $2x_1 + x_2 \ge 4$ 

$$2x_1 + 3x_2 \ge 6 \quad (2)$$

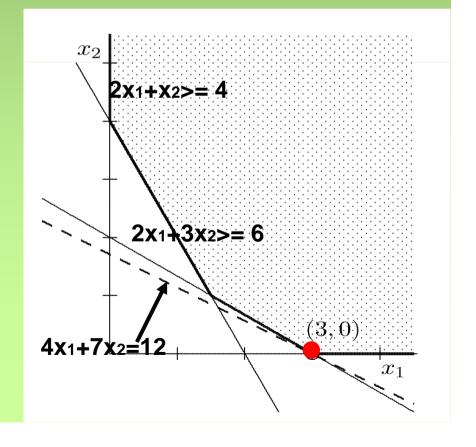
$$2x_1 + x_2 \ge 4$$

$$4x_1 + 7x_2 \ge 12$$

Max 
$$6u_1 + 4u_2 = 12$$

$$2u_1 + 2u_2 \le 4$$
  $(x_1 = 3)$ 

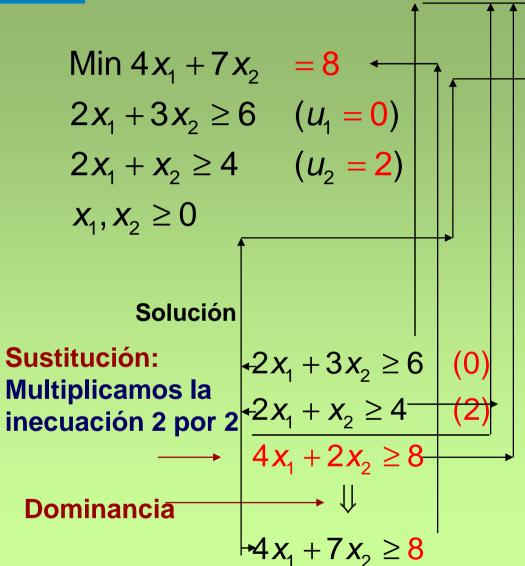
$$3u_1 + u_2 \le 7$$
  $(x_2 = 0)$   
 $u_1, u_2 \ge 0$ 



#### Programación Lineal: Inferencia Dual (otra posible solución, que no es factible) **Dual:**



□ Primal:



Max 
$$6u_1 + 4u_2 = 8$$

$$-2u_1 + 2u_2 \le 4 \qquad (x_1 = 2)$$

$$3u_1 + u_2 \le 7 \qquad (x_2 = 0)$$

$$u_1, u_2 \ge 0$$

Pero la solución (2,0) no verifica la inecuación primera, pues 4 no es ≥ 6, luego no es solución factible

# MVS:(CL).Resolución Práctica (1)



Para resolver el problema primal {

$$\begin{cases}
\min_{\mathbf{w}} \frac{1}{2} \mathbf{w}^{\mathsf{T}} \mathbf{w} \\
s.a. \ y_{i} (\mathbf{w}^{\mathsf{T}} \mathbf{x}_{i} + \mathbf{w}_{0}) \ge 1, \quad i = 1...n
\end{cases}$$

Se halla el problema dual asociado a maximizar

la función Lagrangiana siguiente

$$\max \sum_{i=1}^{n} \alpha_i - \frac{1}{2} \sum_{i,j=1}^{n} \alpha_i \alpha_j y_i y_j (\mathbf{x}_i^T \mathbf{x}_j) = \max \sum_{i=1}^{n} \alpha_i - \frac{1}{2} \boldsymbol{\alpha}^T \mathbf{Q} \boldsymbol{\alpha}, \quad \text{con } Q_{ij} = y_i y_j \mathbf{x}_i^T \mathbf{x}_j$$

s.a. 
$$\sum_{i=1}^{n} \alpha_{i} y_{i} = 0$$
,  $\alpha_{i} \geq 0$ ,  $i=1,...,n$ 

Una vez resuelto el problema dual

Si la solución óptima es  $\hat{\mathbf{a}} = (\hat{\alpha}_1, \hat{\alpha}_2, ..., \hat{\alpha}_n)$ , el valor óptimo de  $\mathbf{w}$  es

$$\hat{\mathbf{w}} = \sum_{i=1} \hat{\alpha}_i y_i \mathbf{x}_i$$

El valor óptimo de w<sub>0</sub> se obtiene como:

$$\hat{w}_{\mathbf{0}} = \pm 1 - \hat{\mathbf{w}}^{\mathsf{T}} \mathbf{x}_{i}, \quad \text{con } \mathbf{x}_{i} \in \omega_{1} \ y \ \hat{\alpha}_{i} > 0$$



# MVS:(CL).Resolución Práctica (2)



#### **Vectores soporte**

- En la solución óptima del problema dual los únicos valores no nulos  $\hat{\mathbf{\alpha}} = (\hat{\alpha}_1, \hat{\alpha}_2, ..., \hat{\alpha}_n)$  son los correspondientes a las muestras sobre el margen. Estas muestras se llaman vectores soporte.
- En la práctica son pocos los elementos que están sobre el margen. Por tanto la mayoría de los  $\alpha_i$  son nulos.
- Llamaremos Sop a los índices correspondientes a los vectores soporte. Entonces:



#### MVS:(CL).Resolución Práctica (2)



Así, una vez resuelto el problema dual, el valor óptimo de w es:

$$\hat{\mathbf{w}} = \sum_{i=1} \hat{\alpha}_i y_i \mathbf{x_i} = \sum_{i \in Sop} \hat{\alpha}_i y_i \mathbf{x_i}$$

mientras que el valor óptimo del término independiente wo es:

$$\hat{w}_{0} = \pm 1 - \sum_{j \in Sop} \hat{\alpha}_{j} y_{j}(\mathbf{x}_{j}^{T} \mathbf{x}_{i}), \quad \text{con } \mathbf{x}_{i} \in \omega_{1} \ y \ \hat{\boldsymbol{\alpha}}_{i} > 0$$

Por lo que la función discriminante lineal es:

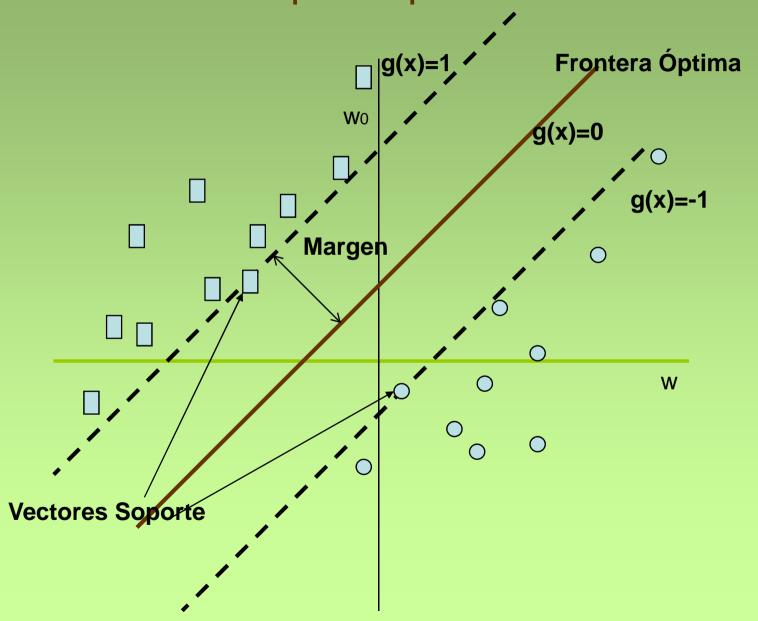
$$\mathbf{g}(\mathbf{x}_{j}) = \hat{\mathbf{w}}^{\mathsf{T}} \mathbf{x}_{j} + \hat{\mathbf{w}}_{0} = \left(\sum_{i \in Sop} \hat{\alpha}_{i} y_{i} \mathbf{x}_{i}\right)^{\mathsf{T}} \mathbf{x}_{j} + \hat{w}_{0} = \sum_{i \in Sop} \hat{\alpha}_{i} y_{i} (\mathbf{x}_{i}^{\mathsf{T}} \mathbf{x}_{j}) + \hat{w}_{0}$$



# **Vectores Soporte**



#### **Vectores Soporte: Representación**



#### **SVM: Resolución Práctica**

En la formulación del problema dual los elementos del conjunto de entrenamiento solo intervienen a través de sus productos escalares  $(\mathbf{x}_i^T \mathbf{x}_i)$ tanto en la función a optimizar

$$\max_{\alpha} \sum_{i=1}^{\infty} \alpha_i - \frac{1}{2} \sum_{i,j=1}^{\infty} \alpha_i \alpha_j y_i y_j (\mathbf{x}_i^T \mathbf{x}_j)$$

$$s.a. \sum_{i=1}^{\infty} \alpha_i y_i = 0, \quad \alpha_i \ge 0, \quad i=1,...,n$$

Como para calcular el valor de wo

$$\hat{w}_{\mathbf{0}} = \pm 1 - \sum_{j \in Sop} \hat{\alpha}_{j} y_{j} (\mathbf{x}_{j}^{\mathsf{T}} \mathbf{x}_{i}), \quad \text{con } \mathbf{x}_{i} \in \omega_{1} \ y \ \hat{\boldsymbol{\alpha}}_{i} > 0$$

Siendo w el conjunto de los vectores soporte pertenecientes o a la clase positiva o a la clase negativa

Para calcular la clase a la que pertenece un nuevo vector x, calculamos la función  $g(\mathbf{x}) = \sum_{i \in Sop} \hat{\alpha}_i y_i(\mathbf{x_i^T}\mathbf{x}) + \hat{w}_0$ 

si su valor es mayor que 0 pertenece a la clase positiva, en otro caso a la negativa

# Un Ejemplo Inicial: Solución Dual con vectores soporte



Soporte Clasificación unidimensional: g(x)=wx+w<sub>0</sub>

Conjunto de entrenamiento, OJO estamos en un espacio de dimensión 1
 Los puntos (-1) (0) son de C1; los puntos (2) (5) son de C2

$$\min_{\mathbf{w}} \frac{1}{2} \mathbf{w}^{\mathsf{T}} \mathbf{w} \\
s.a. \ y_{i}(\mathbf{w}^{\mathsf{T}} \mathbf{x}_{i} + \mathbf{w}_{0}) \ge 1, \quad i = 1...n$$

$$-2w - w_{0} \ge 1 \\
-5w - w_{0} \ge 1$$
Primal
$$-5w - w_{0} \ge 1$$

Vectores soporte (0) + y (2) -

$$\max_{\alpha \in Sop} \sum_{i=1} \alpha_i - \frac{1}{2} \sum_{i,j=1} \alpha_i \alpha_j y_i y_j (\mathbf{x}_i^T \mathbf{x}_j)$$

$$s.a. \sum_{i=1} \alpha_i y_i = 0, \quad \alpha_i \geq 0, \text{ i=1,...,n}$$

$$L(\alpha_1, \alpha_2, \lambda) = \alpha_1 + \alpha_2 - \frac{1}{2} \left( 0\alpha_1^2 - 0\alpha_1 \alpha_2 - 0\alpha_2 \alpha_1 + 4\alpha_2^2 \right) - \lambda(\alpha_1 - \alpha_2)$$



# Un Ejemplo Inicial: Solución Dual con vectores soporte



Conjunto de entrenamiento: (-1), (0) de C1; (2), (5) de C2. Vectores soporte (0) para la clase positiva y (2) para la negativa. Así  $x_1=0$ ,  $x_2=2$ ,  $y_1=1$  e  $y_2=-1$ 

$$\max_{\alpha \in Sop} \sum_{i=1}^{n} \alpha_{i} - \frac{1}{2} \sum_{i,j=1}^{n} \alpha_{i} \alpha_{j} y_{i} y_{j} (\mathbf{x}_{i}^{T} \mathbf{x}_{j})$$

$$s.a. \sum_{i=1}^{n} \alpha_{i} y_{i} = 0, \quad \alpha_{i} \geq 0, \quad i=1,...,n$$

$$\max \alpha_1 + \alpha_2 - \frac{1}{2} (0\alpha_1^2 - 0\alpha_1\alpha_2 - 0\alpha_2\alpha_1 + 4\alpha_2^2)$$

s.a. 
$$\alpha_1 - \alpha_2 = 0$$
,  $\alpha_1 \ge 0$ ,  $\alpha_2 \ge 0$ 

$$L = \alpha_1 + \alpha_2 - 2(\alpha_2^2) - \lambda(\alpha_1 - \alpha_2)$$



# Un ejemplo inicial: Solución Dual con vectores soporte



#### Derivando con respecto a los $\alpha_i$ y $\lambda$ tenemos

1) 
$$\frac{\partial L}{\partial \alpha_1} = 1 - \lambda = 0$$
 2)  $\frac{\partial L}{\partial \alpha_2} = 1 - 4\alpha_2 + \lambda = 0$  3)  $\frac{\partial L}{\partial \lambda} = -\alpha_1 + \alpha_2 = 0$   
Solución  $\equiv \lambda = 1, \ \alpha_1 = 1/2, \ \alpha_2 = 1/2,$ 

Solución óptima:

$$\hat{\alpha} = (1/2, 1/2)$$

• Vector óptimo:

$$\hat{\mathbf{w}} = \sum_{i \in Sop} \hat{\alpha}_i y_i \mathbf{x}_i = (1/2) \times 1 \times 0 + (1/2) \times (-1) \times 2 = -1,$$

• Constante óptima:  $\hat{\mathbf{W}}_0 = 1 - \hat{\mathbf{W}} \mathbf{x}_1 = 1 - (-1) \times 0 = 1$ 

O también

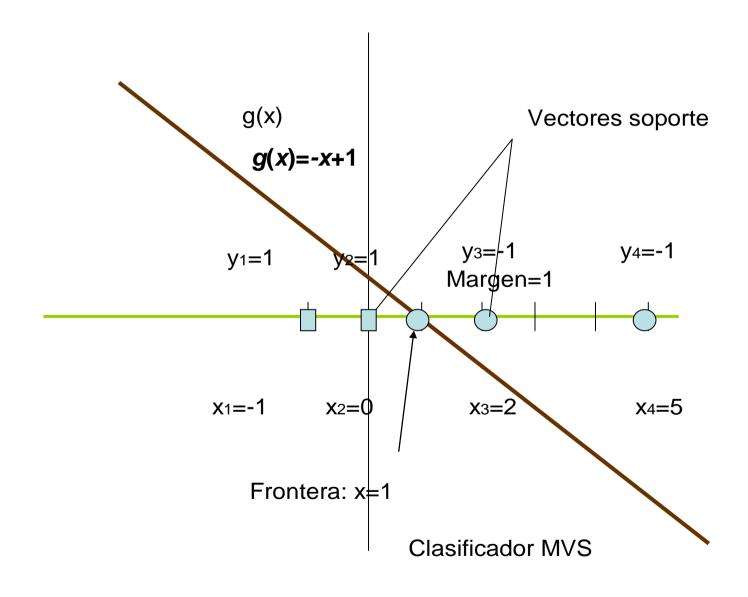
$$\hat{\mathbf{w}}_0 = -1 - \hat{w}x_2 = -1 - (-1) \times 2 = 1$$

- Clasificador:
- Por tanto el clasificador SVM es g(x)=-x+1 y la frontera g(x)=0 es x=1



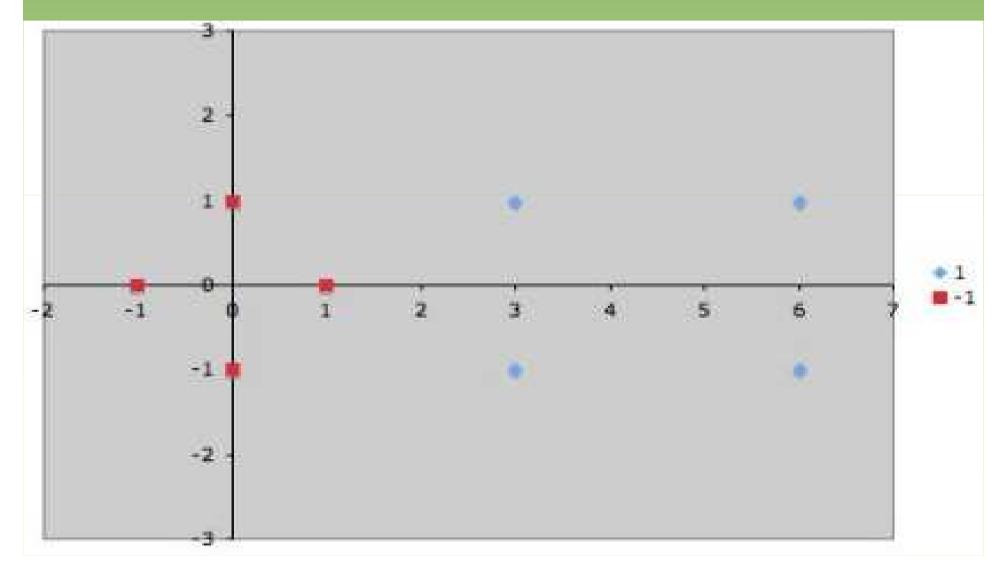
# Un Ejemplo Inicial: Solución Dual con vectores soporte





### Nuevo ejemplo linealmente separable

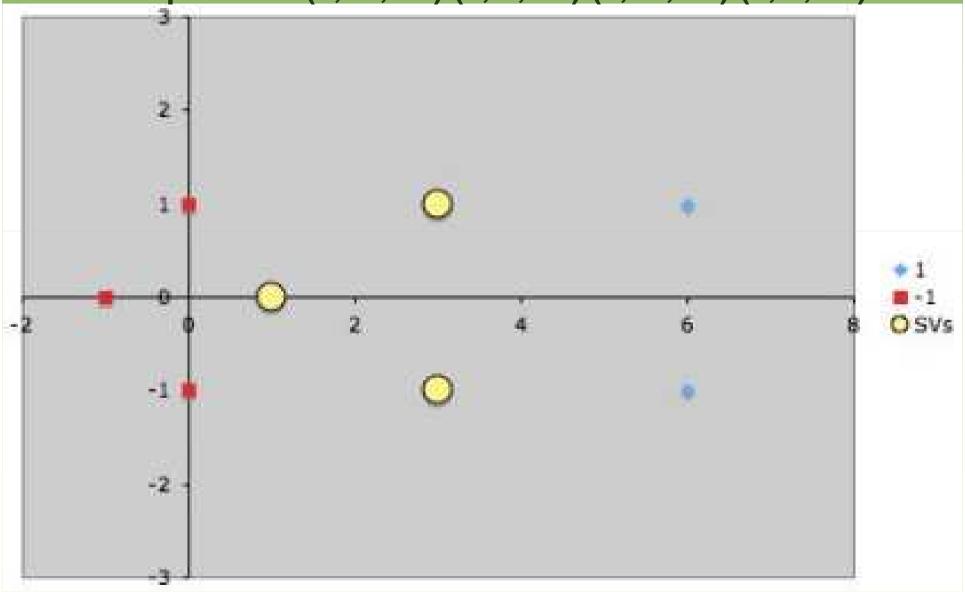
Clase negativa (-1, 0, -1) (0, -1, -1) (0, 1, -1) (1, 0, -1) Clase positiva (3, -1, +1) (3, 1, +1) (6, -1, +1) (6, 1, +1)



### **Ejemplo: Vectores soporte**



Clase positiva (3, -1, +1)(3, 1, +1)(6, -1, +1)(6, 1, +1)





Clase positiva (3, -1, +1) (3, 1, +1) (6, -1, +1) (6, 1, +1)  $H_1: \mathbf{W} \cdot \mathbf{X} + W_0 = 1$  Clase negativa (-1, 0, -1) (0, -1, -1) (0, 1, -1) (1, 0, -1)  $H_2: \mathbf{W} \cdot \mathbf{X} + W_0 = -1$ 

$$W_1X_1 + W_2X_2 + W_0 = -1$$
  
 $1W_1 + 0W_2 + W_0 = -1$  (1, 0)  $\Rightarrow$  -1  
 $\Rightarrow W_0 = -1 - W_1$  (3, -1)  $\Rightarrow$  +1 Vectores soporte  
 $W_1X_1 + W_2X_2 + W_0 = 1$ 

$$3w_1 - 1w_2 + w_0 = 1$$
 (2)

$$\rightarrow$$
  $w_2 = 3w_1 - 1 - w_1 - 1$ 

$$\rightarrow$$
  $W_2 = 2W_1 - 2$ 

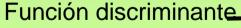
$$3w_1 + 1w_2 + w_0 = 1$$
 (3)

$$\rightarrow$$
 3w<sub>1</sub> + 2w<sub>1</sub> -2 -1 -w<sub>1</sub> = 1

$$\rightarrow$$
 W<sub>1</sub> = 1

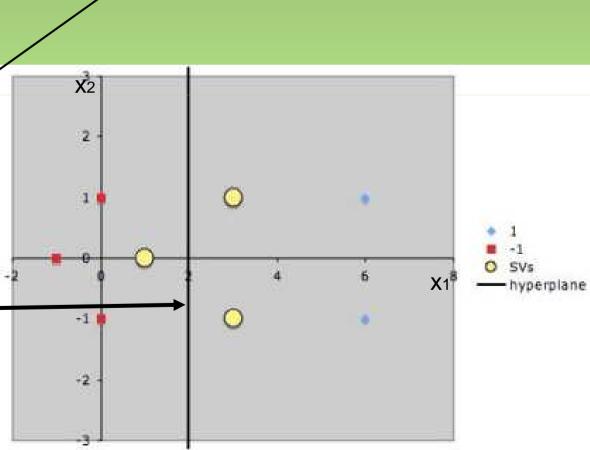
$$\rightarrow$$
 w<sub>0</sub> = -2

$$\rightarrow$$
  $W_2 = 0$ 



$$(1,0) \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \end{pmatrix} - 2 = 0$$

Recta: 
$$x_1 = 2$$







#### **Vectores soporte**

$$\max_{\alpha \in Sop} \sum_{i=1}^{n} \alpha_{i} - \frac{1}{2} \sum_{i,j=1}^{n} \alpha_{i} \alpha_{j} y_{i} y_{j} (\mathbf{x}_{i}^{T} \mathbf{x}_{j})$$

$$s.a. \sum_{i=1}^{n} \alpha_{i} y_{i} = 0, \quad \alpha_{i} \geq 0, \text{ i=1,...,n}$$

$$\mathbf{x}_{1}=(x_{11},x_{12})=(1,0) \rightarrow y_{1}=-1$$
  
 $\mathbf{x}_{2}=(x_{21},x_{22})=(3,-1) \rightarrow y_{2}=+1$   
 $\mathbf{x}_{3}=(x_{31},x_{32})=(3,1) \rightarrow y_{3}=+1$ 

$$\max \alpha_{1} + \alpha_{2} + \alpha_{3} - \frac{1}{2} \begin{bmatrix} \alpha_{1}^{2}(\boldsymbol{x}_{1}^{\mathsf{T}} \boldsymbol{.} \boldsymbol{x}_{1}) - \alpha_{1} \alpha_{2}(\boldsymbol{x}_{1}^{\mathsf{T}} \boldsymbol{.} \boldsymbol{x}_{2}) - \alpha_{1} \alpha_{3}(\boldsymbol{x}_{1}^{\mathsf{T}} \boldsymbol{.} \boldsymbol{x}_{3}) - \alpha_{2} \alpha_{1}(\boldsymbol{x}_{2}^{\mathsf{T}} \boldsymbol{.} \boldsymbol{x}_{1}) + \alpha_{2}^{2}(\boldsymbol{x}_{2}^{\mathsf{T}} \boldsymbol{.} \boldsymbol{x}_{2}) + \alpha_{2} \alpha_{3}(\boldsymbol{x}_{2}^{\mathsf{T}} \boldsymbol{.} \boldsymbol{x}_{3}) + \\ -\alpha_{3} \alpha_{1}(\boldsymbol{x}_{3}^{\mathsf{T}} \boldsymbol{.} \boldsymbol{x}_{1}) + \alpha_{3} \alpha_{2}(\boldsymbol{x}_{3}^{\mathsf{T}} \boldsymbol{.} \boldsymbol{x}_{2}) + \alpha_{3}^{2}(\boldsymbol{x}_{3}^{\mathsf{T}} \boldsymbol{.} \boldsymbol{x}_{3}) \end{bmatrix}$$

s.a. 
$$-\alpha_1 + \alpha_2 + \alpha_3 = 0$$
,  $\alpha_1 \ge 0$ ,  $\alpha_2 \ge 0$ ,  $\alpha_3 \ge 0$ 

Operando y simplificando utilizando los multiplicadores de Lagrange para la restricción de igualdad, dado que al ser maximización las restricciones de que los  $\alpha_i$  sean positivos se cumplen

por lo que ahora la función a optimizar (maximizar) es

$$F(\alpha_1, \alpha_2, \alpha_3, \lambda; \mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \mathbf{x}_3) =$$

$$=\alpha_{1}+\alpha_{2}+\alpha_{3}-\frac{1}{2}\begin{bmatrix}\alpha_{1}^{2}(\mathbf{x_{1}^{T}.x_{1}})-\alpha_{1}\alpha_{2}(\mathbf{x_{1}^{T}.x_{2}})-\alpha_{1}\alpha_{3}(\mathbf{x_{1}^{T}.x_{3}})-\alpha_{2}\alpha_{1}(\mathbf{x_{2}^{T}.x_{1}})+\alpha_{2}^{2}(\mathbf{x_{2}^{T}.x_{2}})+\alpha_{2}\alpha_{3}(\mathbf{x_{2}^{T}.x_{3}})+\alpha_{2}\alpha_{3}(\mathbf{x_{2}^{T}.x_{3}})+\alpha_{3}\alpha_{2}(\mathbf{x_{3}^{T}.x_{2}})+\alpha_{3}^{2}(\mathbf{x_{3}^{T}.x_{3}})\end{bmatrix}$$

$$-\lambda(-\alpha_1+\alpha_2+\alpha_3)$$





#### Derivando con respecto a los $\alpha_i$ y $\lambda$ tenemos

$$\frac{\partial F}{\partial \alpha_1} = 1 - \frac{1}{2} \left( 2\alpha_1(\mathbf{x}_1^T \cdot \mathbf{x}_1) - \alpha_2(\mathbf{x}_1^T \cdot \mathbf{x}_2) - \alpha_3(\mathbf{x}_1^T \cdot \mathbf{x}_3) - \alpha_2(\mathbf{x}_2^T \cdot \mathbf{x}_1) - \alpha_3(\mathbf{x}_3^T \cdot \mathbf{x}_1) \right) - \lambda = 0$$

esto es

$$1 - \alpha_1 + 3\alpha_2 + 3\alpha_3 - \lambda = 0$$

$$\frac{\partial F}{\partial \alpha_2} = 1 - \frac{1}{2} \left( -\alpha_1(\mathbf{x}_1^T \cdot \mathbf{x}_2) - \alpha_1(\mathbf{x}_2^T \cdot \mathbf{x}_1) + 2\alpha_2(\mathbf{x}_2^T \cdot \mathbf{x}_2) + \alpha_3(\mathbf{x}_2^T \cdot \mathbf{x}_3) + \alpha_3(\mathbf{x}_3^T \cdot \mathbf{x}_2) \right) + \lambda = 0$$

esto es

$$1+3\alpha_1-10\alpha_2-8\alpha_3+\lambda=0$$

$$\frac{\partial F}{\partial \alpha_3} = 1 - \frac{1}{2} \left( -\alpha_1(\mathbf{x}_1^\mathsf{T}.\mathbf{x}_3) + \alpha_2(\mathbf{x}_2^\mathsf{T}.\mathbf{x}_3) - \alpha_1(\mathbf{x}_3^\mathsf{T}.\mathbf{x}_1) + \alpha_2(\mathbf{x}_3^\mathsf{T}.\mathbf{x}_2) + 2\alpha_3(\mathbf{x}_3^\mathsf{T}.\mathbf{x}_3) \right) - \lambda = 0$$

esto es

$$1+3\alpha_1-8\alpha_2-10\alpha_3+\lambda=0$$

$$\frac{\partial F}{\partial \lambda} = \alpha_1 - \alpha_2 - \alpha_3 = 0$$



De la última ecuación tenemos  $\alpha_1 = \alpha_2 + \alpha_3$  y sustituyendo en las otras tres ecuaciones, planteamos un sistema de ecuaciones en

$$\begin{array}{ll} \alpha_2 \,, \; \alpha_3 \, \, \mathbf{y} \, \, \lambda \\ \begin{cases} 1 + 2\alpha_2 + 2\alpha_3 + \lambda = 0 \\ 1 - 7\alpha_2 - 5\alpha_3 - \lambda = 0 \\ 1 - 5\alpha_2 - 7\alpha_3 - \lambda = 0 \end{cases} \end{array}$$

Cuya solución es  $\alpha_1 = 1/2 \; ; \; \alpha_2 = 1/4 ; \; \alpha_3 = 1/4$ 

**Vector óptimo:** 
$$\hat{\mathbf{w}} = \sum_{i \in Sop} \hat{\alpha}_i y_i \mathbf{x_i} = \frac{1}{2} (-1) \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} + \frac{1}{4} (1) \begin{pmatrix} 3 \\ -1 \end{pmatrix} + \frac{1}{4} (1) \begin{pmatrix} 3 \\ 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$$

#### **Constante óptima:**

$$\hat{\mathbf{w}}_{0} = 1 - \sum_{j \in Sop} \hat{\alpha}_{j} y_{j} (\mathbf{x}_{j}^{T} \mathbf{x}_{i}), \quad \text{con } \mathbf{x}_{i} \in \omega_{1} y \quad \hat{\alpha}_{i} > 0$$

siendo  $\omega_1$  el conjunto de los vectores soporte pertenecientes a la clase positiva

$$\hat{\mathbf{w}}_0 = -1 - (\mathbf{x}_i^T \hat{\mathbf{w}}) = -1 - (1,0) \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = -2$$
, o también

$$\hat{\mathbf{w}}_0 = 1 - (\mathbf{x}_i^T \hat{\mathbf{w}}) = 1 - (3,1) \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = -2$$
, o también

$$\hat{\mathbf{w}}_0 = 1 - (\mathbf{x}_i^T \hat{\mathbf{w}}) = 1 - (3, -1) \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = -2,$$

#### **Vectores soporte**

$$(1, 0) \rightarrow -1$$

$$(3, -1) \rightarrow +1$$

$$(3, 1) \to +1$$



#### **Función discriminante**

H:  $(1, 0) \cdot x - 2 = 0$ ; H:  $x_1 - 2 = 0$ 

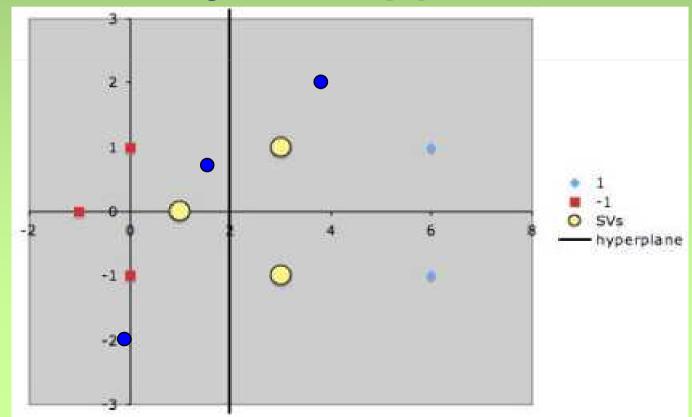
#### Datos del conjunto de test

(4, 2, 1), (1.5, 0.5, -1), (0, -2, -1)

4-2 = 2se asigna a la clase [+1], exito

1.5-2 = -0.5se asigna a la clase [-1], exito

0-2 = -2se asigna a la clase [-1], exito





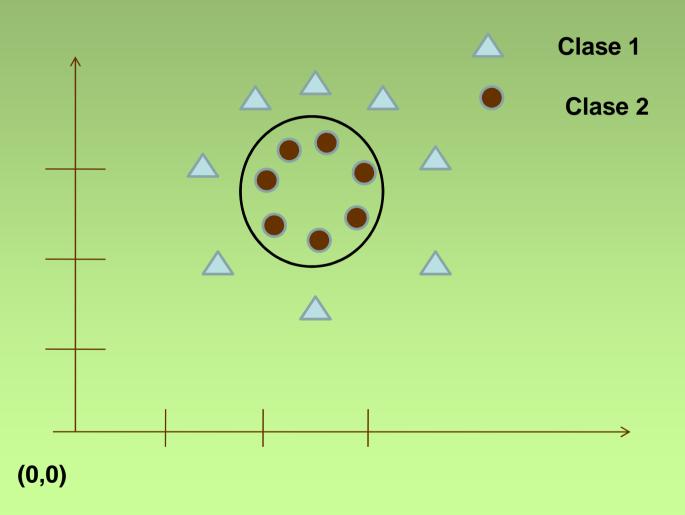
## Como funciona para datos linealmente no separables?



- □ Transformación de un espacio de variables de entrada de dimensión D a un espacio de características de dimensión HD siendo HD > D
- □ Los vectores de entrada se transforman de forma no lineal
- Después de la transformación el nuevo espacio de características debe de ser linealmente separable





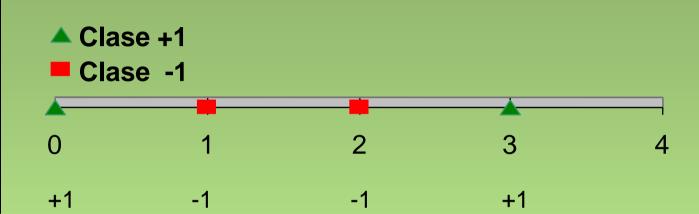






### Como separar las dos clases mediante un punto

X <sub>1</sub>	Clase
0	+1
1	-1
2	-1
3	+1



SVM utiliza una función no lineal sobre los atributos del espacio inicial de variables

$$\Phi(x_1) = (x_1, x_1^2)$$

Esta función pasa de un espacio unidimensional a otro bidimensional

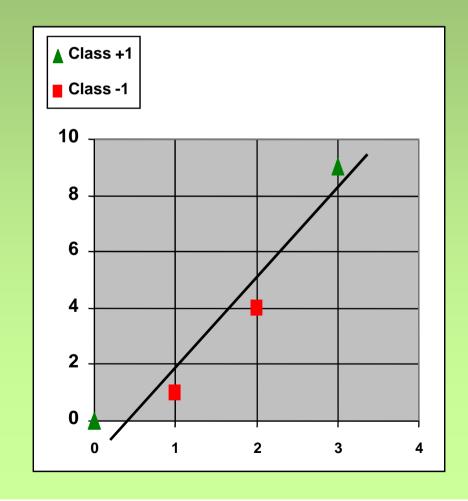




$$\Phi(x_1) = (x_1, x_1^2)$$

# Esta función pasa a un problema bidimensional, donde los datos son separables

<b>X</b> <sub>1</sub>	X <sub>1</sub> <sup>2</sup>	Class	
0	0	+1	
1	1	-1	
2	4	-1	
3	9	9 +1	







#### Los cuatro son vectores soporte

□ 
$$\mathbf{w} \cdot \mathbf{x} + \mathbf{w}_0 = +1$$
 (para la clase positiva)  
 $\mathbf{w}_1 \mathbf{x}_1 + \mathbf{w}_2 \mathbf{x}_2 + \mathbf{w}_0 = +1$   
1)  $0 \mathbf{w}_1 + 0 \mathbf{w}_2 + \mathbf{w}_0 = +1$   
2)  $3 \mathbf{w}_1 + 9 \mathbf{w}_2 + \mathbf{w}_0 = +1$   
1 1 -1  
2 3 9 +1

 $\square$  **w**·**x** + w<sub>0</sub> = -1 (para la clase negativa)

 $W_1X_1 + W_2X_2 + W_0 = -1$ 

sustituyendo wo en las dos ecuaciones

3) 
$$1W_1 + 1W_2 + W_0 = -1$$

$$\rightarrow$$
  $W_1 = -2 - W_2$ 

4) 
$$2w_1 + 4w_2 + w_0 = -1$$

$$\rightarrow$$
 -4 -2w<sub>2</sub> + 4w<sub>2</sub> + 1 = -1

de donde  $w_2 = 1$  y  $w_1 = -3$ , valores

que verifican la ecuación 2)

□ Función discriminante

$$wT.x + w_0 = 0$$
  
 $w_1x_1 + w_2x_2 + w_0 = 0$   $\Rightarrow -3x_1 + x_2 + 1 = 0$ , o lo que es lo mismo  $x_2 = 3x_1 - 1$ 





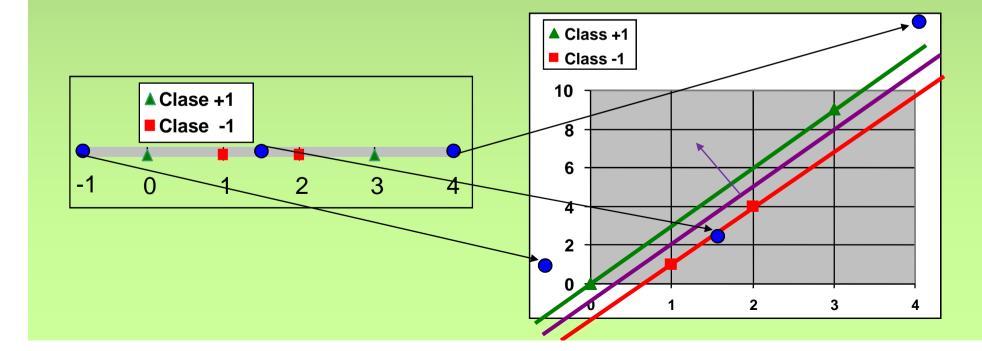
H: 
$$-3x_1 + x_2 + 1 = 0$$

Datos de test (1,5), (-1), (4)

(1,5) se transforma en (1,5, 2,25) como -3(1,5) + 2,25 + 1 = -1,15 pertenece a la clase [-1]

(-1) se transforma en (-1,1); como -3(-1) + 1 + 1 = 5 pertenece a la clase [+1]

(4) se transforma en (4,16); como -3(4) + 16 + 1 = 5 pertenece a la clase [+1]

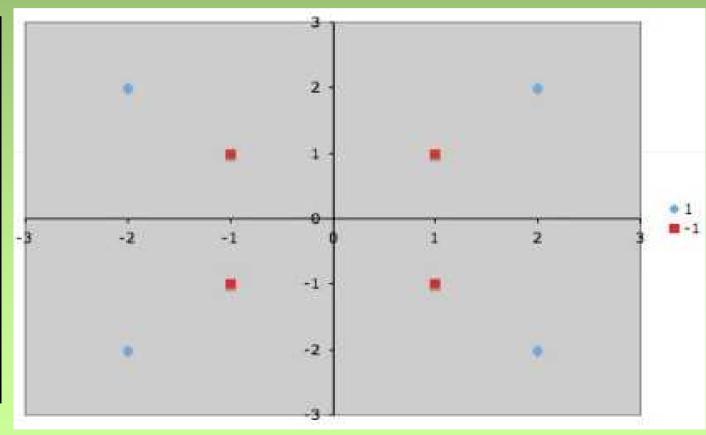


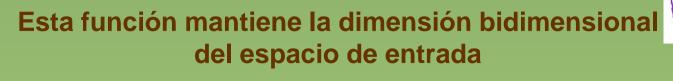




# Como separar estas dos clases mediante una función lineal?

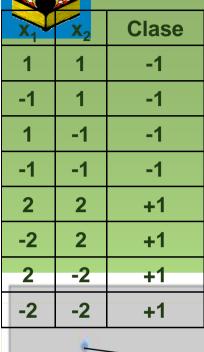
<b>X</b> <sub>1</sub>	<b>X</b> <sub>2</sub>	Clase
1	1	-1
-1	1	-1
1	-1	-1
-1	-1	-1
2	2	+1
-2	2	+1
2	-2	+1
-2	-2	+1

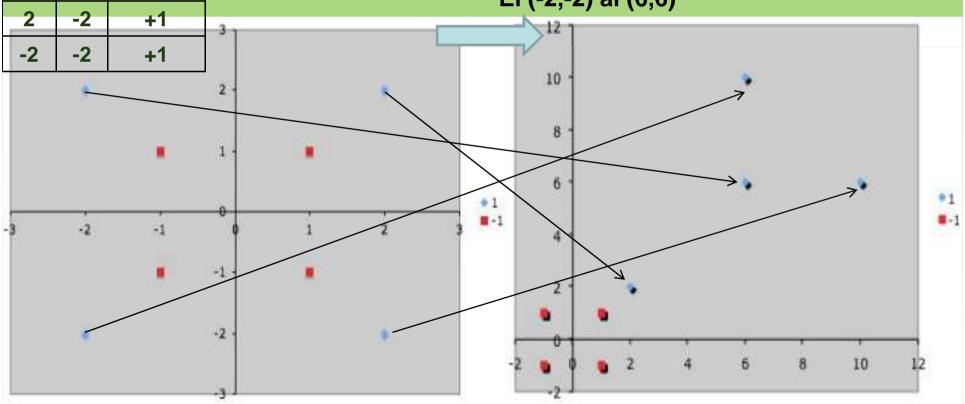




$$\Phi(x_1, x_2) = \begin{cases} (4 - x_2 + |x_1 - x_2|, 4 - x_1 + |x_1 - x_2|) & \text{si } \sqrt{x_1^2 + x_2^2} > 2\\ (x_1, x_2) & \text{en otro caso} \end{cases}$$

El (2,2) Pasa al (2,2). El (-2,2) al (6,10). El (2,-2) al (10,6). El (-2,-2) al (6,6)









### Vectores Soporte en el espacio de características

 $X_2$ 

Clase

+1

$$H_0$$
: **w.x** +  $W_0$  = 1

$$H_1$$
: **w.x** + w<sub>0</sub> = -1

$$W_1X_1 + W_2X_2 + W_0 = -1$$

1) 
$$1w_1 + 1w_2 + w_0 = 41$$

$$\rightarrow$$
 W<sub>1</sub> = -1 - W<sub>0</sub> -W<sub>2</sub>

$$W_1X_1 + W_2X_2 + w_0 = 1$$

2) 
$$2(-1 - w_0 - w_2) + 2w_2 + w_0 = 1$$

$$-2 -2 w_0 -2w_2 +2w_2 + w_0 = 1$$

$$\rightarrow$$
 w<sub>0</sub> = -3

Solución w<sub>1</sub>+w<sub>2</sub>=2

#### Una posible solución

$$W_1 = W_2 = 1$$

H: 
$$(1,1)T \cdot (x_1,x_2) -3 = 0$$

$$x_1 + x_2 - 3 = 0$$
; Ecuación de la recta,  $x_2 = -x_1 + 3$ 



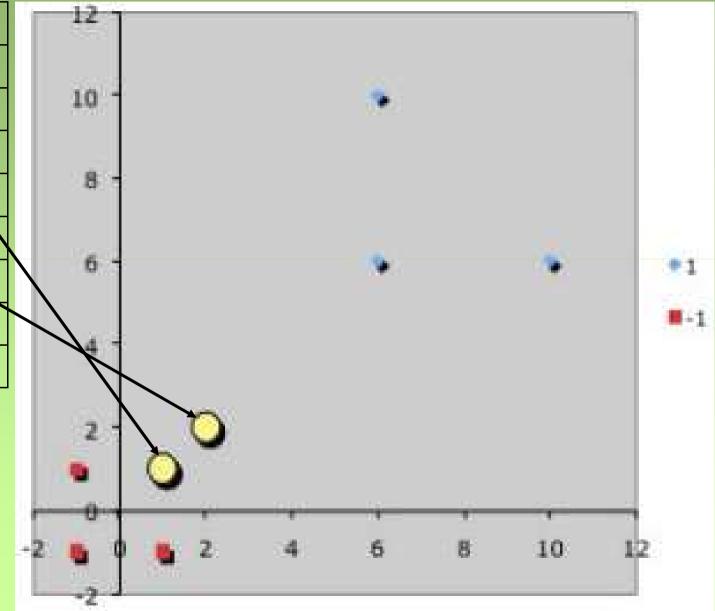
10





### **Vectores Soporte**

<b>X</b> <sub>1</sub>	X <sub>2</sub>	Clase
1	1	-1
-1	1	-1
1	-1	-1
-1	-1	-1
2	2 .	+1
6	6	J#
10	6	+1
6	10	+1



$$\max_{\alpha} \sum_{i=1}^{n} \alpha_i - \frac{1}{2} \sum_{i,j=1}^{n} \alpha_i \alpha_j y_i y_j (\Phi(s_i)^T \cdot \Phi(s_j)) \\ s.a. \sum_{i=1}^{n} \alpha_i y_i = 0, \ \alpha_i \ge 0, \ i=1,...,n \end{cases} \Rightarrow \Phi(s_1)^T = (1,1), \ y_1 = -1 \text{ Vectores soporte en el } \\ \Phi(s_2)^T = (2,2), \ y_1 = 1 \text{ espacio transformado}$$

$$\max \alpha_{1} + \alpha_{2} - \frac{1}{2} \left( \alpha_{1}^{2} (\Phi(s_{1})^{T} \cdot \Phi(s_{1})) - \alpha_{1} \alpha_{2} (\Phi(s_{1})^{T} \cdot \Phi(s_{2})) - \alpha_{2} \alpha_{1} (\Phi(s_{2})^{T} \cdot \Phi(s_{1})) + \alpha_{2}^{2} (\Phi(s_{2})^{T} \cdot \Phi(s_{2})) \right)$$

$$L(\alpha_{1},\alpha_{2},\lambda) = \alpha_{1} + \alpha_{2} - \frac{1}{2} (\alpha_{1}^{2}(2) - \alpha_{1}\alpha_{2}(4) - \alpha_{2}\alpha_{1}(4) + \alpha_{2}^{2}(8)) - \lambda(-\alpha_{1} + \alpha_{2})$$

$$\Phi((x_1, x_2)^T) = \{(2, 2)^T, (10, 6)^T, (6, 6)^T, (6, 10)^T\} \text{ Clase +, } y_i = 1$$

$$\Phi((x_1, x_2)^T) = \{(1, 1)^T, (1, -1)^T, (-1, -1)^T, (-1, 1)^T\} \text{ Clase -, } y_i = -1$$

#### Derivando con respecto a los $\alpha_i$ y $\lambda$ tenemos

$$\begin{cases} 1 - 2\alpha_1 + 4\alpha_2 + \lambda = 0 \\ 1 + 4\alpha_1 - 8\alpha_2 - \lambda = 0 \end{cases} \quad \lambda = -3; \ \alpha_1 = 1; \ \alpha_2 = 1$$

$$\alpha_1 - \alpha_2 = 0$$



#### Nuevo Ejemplo: Resolución mediante el dual



#### **Vector óptimo:**

$$\hat{\mathbf{w}} = \sum_{i \in Sop} \hat{\alpha}_i y_i \Phi(s_i) = 1(-1) \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix} + 1(1) \begin{pmatrix} 2 \\ 2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix} \qquad \Phi(s_1)^T = (1,1), \quad y_1 = -1$$

$$\Phi(s_2)^T = (2,2), \quad y_1 = 1$$

#### **Constante óptima:**

$$\hat{\mathbf{w}}_{0} = \pm 1 - \sum_{j \in Sop} \hat{\alpha}_{j} y_{j} (\Phi(s_{j})^{T} \Phi(s_{i})), \quad \text{con } s_{i} \in \omega_{1} y \quad \hat{\alpha}_{i} > 0$$

$$\hat{\mathbf{w}}_{0} = -1 - (\Phi(s_{1})^{T} \hat{\mathbf{w}}) = -1 - (1,1) \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix} = -3, \text{ o también}$$

$$\hat{\mathbf{w}}_{0} = 1 - (\Phi(s_{2})^{T} \hat{\mathbf{w}}) = 1 - (2,2) \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix} = -3,$$

#### La función discriminante lineal es

H:  $(1,1)\cdot(x1,x2)T-3=0$ , y la ecuación de la recta es

$$x1 + x2 - 3 = 0$$
,  $x2 = -x1 + 3$ 

#### Capacidad de Generalización

Pasamos ahora a ver como podemos usar el modelo SVM para clasificar datos del conjunto de generalización, dado un patrón x, la clasificación f(x) se obtiene mediante la ecuación

$$f(\mathbf{x}) = sign\left(\sum_{i=1}^{2} \alpha_i y_i (\Phi(\mathbf{s_i}) \cdot \Phi(\mathbf{x})) - 3\right), \text{ donde sign}(\mathbf{z}) \text{ devuelve el signo de z, (1)}$$

Por ejemplo si queremos clasificar el patrón de características (4, 5, +1) usando la función de transformación dada por la ecuación (1), tenemos

$$f((4,5)^T) = sign(1 \times (-1) \times (\Phi(1,1).\Phi(4,5)^T)) + 1 \times 1 \times (\Phi(2,2).\Phi(4,5)^T) - 3) =$$
  
=  $sign(-(1,1).(0,1)^T + (2,2).(0,1)^T - 3) = sign(-2),$   
donde sign devuelve el signo de -2

Y entonces deberíamos clasificar al patrón (4,5) como negativo. Si observamos el espacio de características de entrada vemos que es una clasificación errónea, pues el (4,5) tiene etiqueta +1



#### Capacidad de Generalización

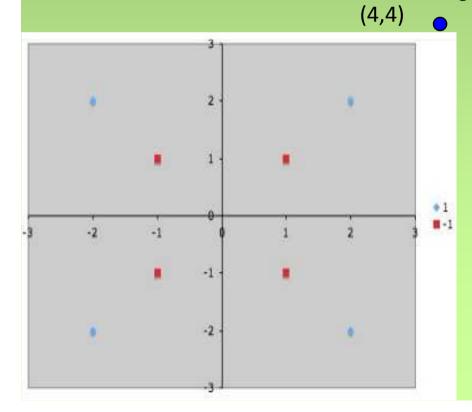


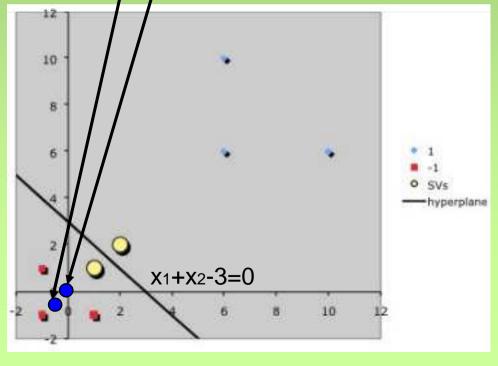
$$\Phi(x_1, x_2) = \begin{cases} (4 - x_2 + |x_1 - x_2|, 4 - x_1 + |x_1 - x_2|) & \text{si } \sqrt{x_1^2 + x_2^2} > 2 \\ (x_1, x_2) & \text{en otro caso} \end{cases}$$

Esta función separa realmente al espacio original de forma lineal?

Dato de test (5,5, +1)  $\Phi(5,5) = (-1, -1)$  Error de clasificación! Dato de test (4,4, +1)  $\Phi(4,4) = (0,0)$  Error de clasificación!

(5,5)





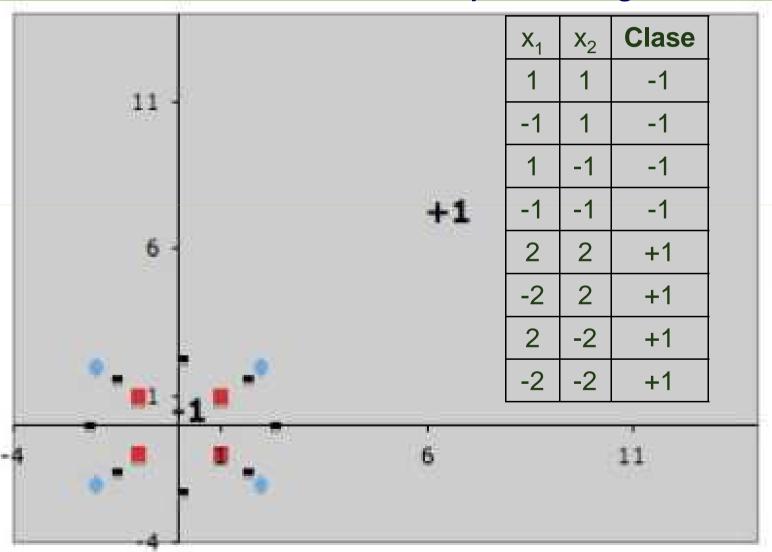




-hyperplane

$$\Phi(x_1, x_2) = [x_1, x_2, ((x_1^2 + x_2^2) - 5)/3]$$

#### Con esta transformación la capacidad de generalización aumenta







$$\Phi(x_1, x_2) = [x_1, x_2, ((x_1^2 + x_2^2) - 5)/3]$$

#### Con esta transformación la capacidad de generalización aumenta

#### **Todos son vectores soporte**

<b>X</b> <sub>1</sub>	X <sub>2</sub>	$x_3 = ((x_1^2 + x_2^2) - 5) / 3$	Clase
1	1	-1	-1
-1	1	-1	-1
1	-1	-1	-1
-1	-1	-1	-1
2	2	1	+1
-2	2	1	+1
2	-2	1	+1
-2	-2	1	+1



#### **Vectores Soporte**



+1

+1

+1

+1

-2

-2

$$H_0$$
: **w.x** + w<sub>0</sub> = 1  
 $H_1$ : **w.x** + w<sub>0</sub> = -1

$$W_1X_1 + W_2X_2 + W_3X_3 + W_0 = -1$$
  
 $1W_1 + 1W_2 - 1W_3 + W_0 = -1$   
 $-1W_1 + 1W_2 - 1W_3 + W_0 = -1$   
 $2W_2 - 2W_3 + 2W_0 = -2$ 

$$1w_1 - 1w_2 - 1w_3 + w_0 = -1$$
  
-1w<sub>1</sub> - 1w<sub>2</sub> -1w<sub>3</sub> + w<sub>0</sub> = -1 -2w<sub>2</sub> -2w<sub>3</sub> + 2w<sub>0</sub> = -2

$2W_1X_1 + 2W_2X_2 + W_3X_3 + W_0 = 1$	
$-2w_1x_1 + 2w_2x_2 + w_3x_3 + w_0 = 1$	$4w_2 + 2w_3 + 2w_0 = 2$
$2w_1x_1 - 2w_2x_2 + w_3x_3 + w_0 - 1$	

$$2w_1x_1 - 2w_2x_2 + w_3x_3 + w_0 = 1$$

$$-2w_1x_1 - 2w_2x_2 + w_3x_3 + w_0 = 1$$
  $-4w_2 + 2w_3 + 2w_0 = 2$ 

$$-4w_2 + 2w_3 + 2w_0 = 2$$

#### Sustituyendo y despejando tenemos w<sub>0</sub>=0, w<sub>3</sub>=1, w<sub>2</sub>=0 y w<sub>1</sub>=0

$$(0,0,1)$$
 $\begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{pmatrix} + 0 = 0;$   $x_3 = 0$  es la función discriminante y los

hiperplanos separadores son  $x_3 = 1$  y  $x_3 = -1$ 





$$\Phi(x_1, x_2) = [x_1, x_2, ((x_1^2 + x_2^2) - 5)/3]$$

X3 = 0; Ecuación del plano

¿Esta función separa realmente al espacio original de forma lineal?

Dato de test (5, 5, +1)  $\Phi(5,5) = (5, 5, 45/3)$ , al ser 45/3 positivo la clase es +1 Acierto

Dato de test (4, 4, +1)  $\Phi(4,4) = (4, 4, 27/3)$  al ser 27/3 positivo la clase es +1 Acierto

Dato de test (0,5, 0,5, -1)  $\Phi(0.5,0.5) = (0.5, 0.5, -4.5/3)$  al ser -4.5/3 negativo la clase es -1 Acierto

$$x_3 = ((x_1^2 + x_2^2) - 5) / 3$$

<b>X</b> <sub>1</sub>	<b>X</b> <sub>2</sub>		Clase
5	5	45/3	1
4	4	27/3	1
0,5	0,5	-4.5/3	-1





# **SVMs Lineales, Caso no separable**

#### **SVM:** Caso no Separable (1)

- En el caso no separable no es posible clasificar sin errores todos
  el conjunto de entrenamiento mediante un clasificador lineal.
- Ya no será posible cumplir todas las condiciones

- Por tanto será 
$$y_i(\mathbf{w}^T\mathbf{x}_i + \mathbf{w}_0) \ge 1 - \xi_i, \quad i = 1...n, \text{ con } \xi_i \ge 0$$

- Entonces:
- Si  $\xi_i = 0$  el patrón está en la zona de su clase.
- Si  $0 \le \xi_i \le 1$  la muestra se mete en la zona del margen.
- Si  $\xi_i > 1$  se mete en la zona de la otra clase.
- Ahora tenemos dos criterios u objetivos:
- Obtener la frontera de mayor margen.
- Que esta frontera tenga pocas "equivocaciones" (es decir que  $\xi_i$  sea lo más cercana a 0).
- Lo que se hace es combinar los dos criterios u objetivos.



#### **SVM:** Caso no Separable (2)



En este caso (w, w<sub>0</sub>) no satisface la restricción

$$y_i(\mathbf{w}^T\mathbf{x}_i + \mathbf{w}_0) \ge 1, \quad i = 1...n,$$

Por lo que decimos que la solución no es factible. En 1995 (Cortes y Vapnik) introducen variables artificiales  $\xi$ i, i = 1, . . . , n en las restricciones

$$\min_{\mathbf{w}} \frac{1}{2} \mathbf{w}^{\mathsf{T}} \mathbf{w} + C \sum_{i=1}^{n} \xi_{i}$$
s.a.  $y_{i} (\mathbf{w}^{\mathsf{T}} \mathbf{x}_{i} + \mathbf{w}_{0}) \ge 1 - \xi_{i}, \quad i = 1...n, \text{ con } \xi_{i} \ge 0$  (3)

Es decir, las restricciones (3) permiten que los datos de entrenamiento puedan no estar en el lado correcto del hiperplano de separación  $\mathbf{w}^{\mathrm{T}}\mathbf{x}+\mathbf{w}_{0}=0$ 

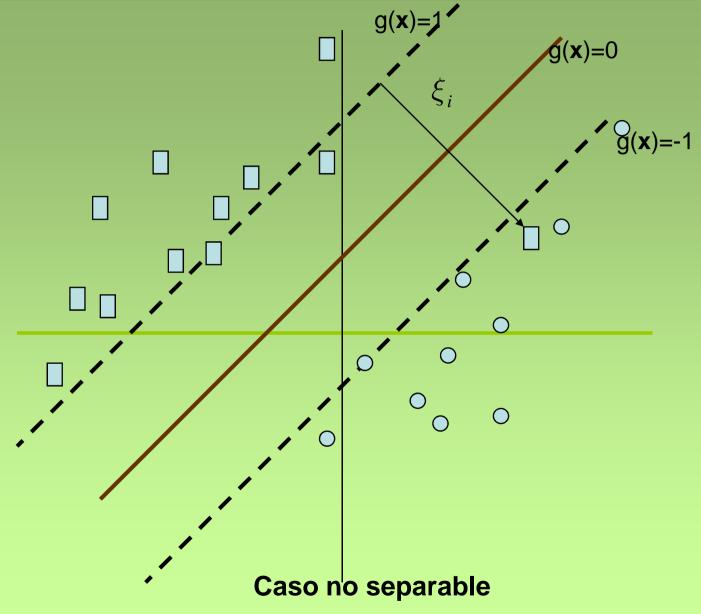
Esta situación ocurre cuando  $\xi_i > 1$  . Un ejemplo se muestra en la siguiente figura

El nuevo problema es siempre factible para todo par (w, w<sub>0</sub>), dado que el valor  $\xi_i = \max(0, 1 - y_i(\mathbf{w}^T\mathbf{x} + \mathbf{w}_0)), i=1,...,n$  permite que (w, w<sub>0</sub>), sea una solución factible



## **SVM: Caso no Separable (4)**





#### **SVM: Caso no Separable (5)**



#### Combinación de criterios u optimización multiobjetivo:

$$\min_{\mathbf{w}} \frac{1}{2} \mathbf{w}^{\mathsf{T}} \mathbf{w} + C \sum_{i=1}^{n} \xi_{i}$$
s.a.  $y_{i} (\mathbf{w}^{\mathsf{T}} \mathbf{x}_{i} + \mathbf{w}_{0}) \geq 1 - \xi_{i}, \quad i = 1...n, \text{ con } \xi_{i} \geq 0$ 

- El primer término de la suma a optimizar busca el mayor margen, el segundo el menor número de errores. La importancia de cada uno se expresa a través de la constante *C* que esta definida por el usuario y se define como un parámetro de penalización. Si pasamos al dual
- Problema dual:  $\max_{\alpha} \sum_{i=1}^{n} \alpha_{i} \frac{1}{2} \sum_{i,j=1}^{n} \alpha_{i} \alpha_{j} y_{i} y_{j} (\mathbf{x}_{i}^{T} \mathbf{x}_{j})$  $s.a. \sum_{i=1}^{n} \alpha_{i} y_{i} = 0, \quad C \geq \alpha_{i} \geq 0, \quad i=1,...,n$
- Vector óptimo:  $\hat{\mathbf{w}} = \sum_{i \in Sop} \hat{\alpha}_i y_i \mathbf{X_i}$



#### **SVM:** Caso no Separable (6)

#### Parámetro C en SVM lineal



El parámetro C en (SVM lineal):

Establece el peso de la suma de las variables de holgura.

Sirve como un parámetro de regularización.

Controla el número de vectores soporte.

Si C es grande se penaliza mucho los errores, por lo que el algoritmo tiende a hacer el margen más pequeño.

Si C es pequeño se penaliza poco los errores, por lo que el algoritmo tiende a hacer el margen mayor.

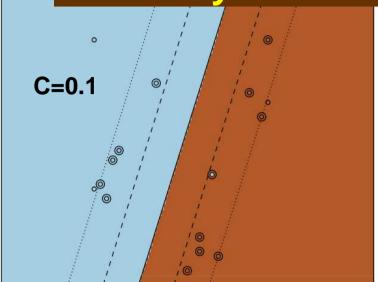
С	Penalización por Error	Nº de puntos considerados	Margen	Sesgo	Varianza
Pequeño	Baja	Alto	Alto	Alto	Grande
Grande	Alta	Alto	Bajo	Bajo	Pequeña

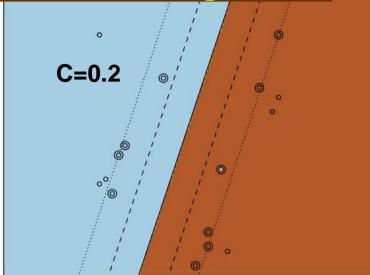


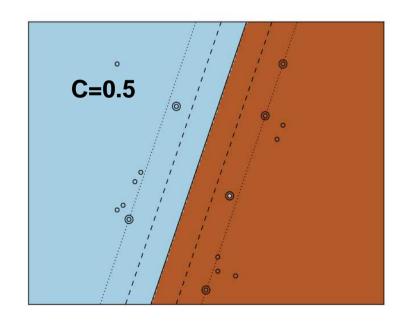
## PARAMETRO C EN SVM LINEAL (1)

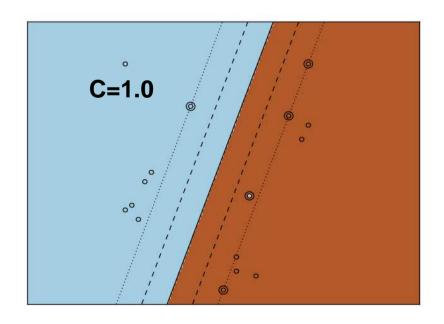


A mayor valor de C menor margen







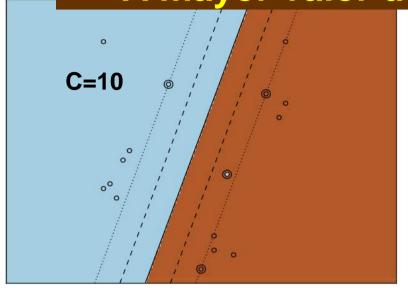


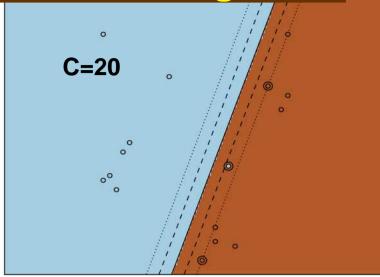


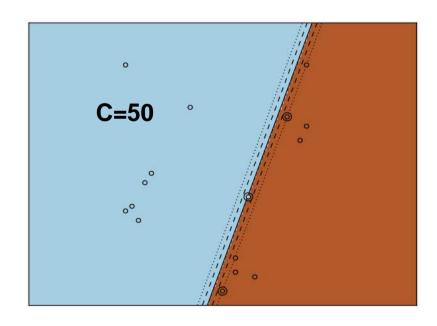
## PARAMETRO C EN SVM LINEAL (2)

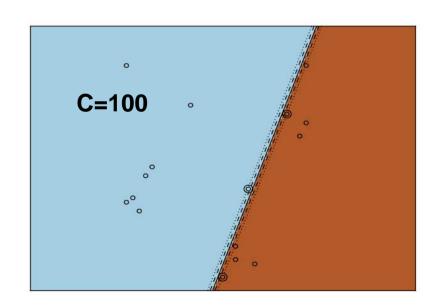


A mayor valor de C menor margen













# **SVMs No Lineales**Truco del Kernel

#### **Teorema de Cover:**

Las SVM ofrecen un método elegante y eficaz de resolver problemas de clasificación lineal

Pero, son estos problemas interesantes o frecuentes?

#### **Teorema de Cover:**

si N > d + 1, el número de problemas de tamaño N linealmente separables es

$$2\sum_{i=0}^{d} {N-1 \choose i} \le 2(d+1) {N-1 \choose d} \le 2\frac{d+1}{d!} N^{d}$$

Siendo N el tamaño muestral y d la dimensión del espacio de entrada. Como el número total de problemas de dos clases es 2N, si N » d, la inmensa mayoría de los problemas NO van a ser linealmente separables

#### **Problema**



- Como escoger una función Φ(x) tal que el espacio de características transformado sea eficiente para clasificación sin un costo computacional demasiado alto?
- □ Truco del Kernel
- □ Funciones de Núcleo (kernel)
  - Polinomial
  - Gaussiana
  - Sigmoidal
  - Siempre aumentan el número de dimensiones del espacio de entrada



# Maquina de Vectores Soporte, SVM, NO lineal (1) Con una metodología SVM lineal solo pueden obtenerse fronteras lineales

- La forma de obtener una metodología SVM para fronteras no lineales se basa en la misma idea que las Funciones Discriminantes Generalizadas.
- Esta consiste en transformar los datos de entrada mediante un conjunto de funciones no lineales

$$\phi(\mathbf{x}) = (\phi_0(\mathbf{x}), \phi_1(\mathbf{x}), \phi_2(\mathbf{x}), ..., \phi_M(\mathbf{x}))^T$$

y luego aplicar la metodología SVM lineal.

• Tras esta transformación se tiene (por ej. para el caso hard-linealmente separable):



## Maquina de Vectores Soporte, SVM, NO lineal (2)



#### – Problema dual:

$$\max_{\alpha} \sum_{i=1}^{\infty} \alpha_i - \frac{1}{2} \sum_{i,j=1}^{\infty} \alpha_i \alpha_j y_i y_j (\Phi(\mathbf{x}_i)^T \cdot \Phi(\mathbf{x}_j))$$
s.a. 
$$\sum_{i=1}^{\infty} \alpha_i y_i = 0, \quad \alpha_i \ge 0, \quad i=1,...,n$$

## w óptimo:

$$\hat{\mathbf{w}} = \sum_{i \in Sop} \hat{\alpha}_i y_i \Phi(\mathbf{x}_i),$$

donde  $\Phi(\mathbf{x}_i)$  son los vectores soporte en el espacio transformado

## w₀ óptimo:

$$\hat{\mathbf{w}}_0 = 1 - \hat{\mathbf{w}} \Phi(\mathbf{x}_i)$$
, con  $\mathbf{x}_i \in \omega_1$  y  $\hat{\alpha}_i > 0$  solo un vector soporte positivo

## Clasificador óptimo:

$$g(\mathbf{x}) = \hat{\mathbf{w}}^{\mathsf{T}} \Phi(\mathbf{x}) + \hat{w}_0$$



#### El truco del kernel (1)



#### **Problema:**

- Ya vimos que uno de los problemas de trabajar con funciones  $\phi(\mathbf{x}) = (\phi_0(\mathbf{x}), \phi_1(\mathbf{x}), \phi_2(\mathbf{x}), ..., \phi_M(\mathbf{x}))^T$  no lineales consiste en que generalmente el número de ellas, M, es muy grande.
- El coste computacional de calcular los productos escalares  $\Phi(\mathbf{x}_i)^T.\Phi(\mathbf{x}_i)$  es también muy grande.

#### Observación:

– En determinadas circunstancias es posible evaluar los productos escalares  $\Phi(\mathbf{x}_i)^T.\Phi(\mathbf{x}_j)$  sin calcular las funciones transformadas.

## El Truco del kernel (2) : Ejemplos



#### ruco del núcleo:

- El truco del núcleo consiste en calcular

$$\Phi(\mathbf{x}_i)^T \cdot \Phi(\mathbf{x}_i)$$

mediante alguna función de las muestras originales  $k(x_i,x_j)$ . A esta función se le llama función núcleo o *kernel*.

## Ejemplo 1.-

Si consideramos  $\Phi(\mathbf{x}) = \Phi(x_1, x_2) = (x_1^2, \sqrt{2}x_1x_2, x_2^2)$ , se tiene que

$$\Phi(\mathbf{x})^{T}.\Phi(\mathbf{x}') = (x_{1}^{2}, \sqrt{2}x_{1}x_{2}, x_{2}^{2})^{T}.(x_{1}^{2}, \sqrt{2}x_{1}x_{2}, x_{2}^{2}) =$$

$$= x_{1}^{2}x_{1}^{2} + 2x_{1}x_{2}x_{1}^{2}x_{2}^{2} + x_{2}^{2}x_{2}^{2} =$$

$$= (x_{1}x_{1}^{2} + x_{2}x_{2}^{2})^{2} = (\mathbf{x}^{T}.\mathbf{x}')^{2} = k(\mathbf{x}, \mathbf{x}')$$



#### El Truco del kernel (3) : Ejemplos



## Ejemplo 2.-

Si, 
$$x=(x_1, x_2)$$
 y  $x'=(x'_1, x'_2)$ 

Si definimos 
$$\Phi(\mathbf{x}) = (1, \sqrt{2}x_1, \sqrt{2}x_2, x_1^2, \sqrt{2}x_1x_2, x_2^2)$$
, se tiene que

$$\Phi(\mathbf{x})^{T}.\Phi(\mathbf{x}') = (1, \sqrt{2}x_{1}, \sqrt{2}x_{2}, x_{1}^{2}, \sqrt{2}x_{1}x_{2}, x_{2}^{2}) \begin{pmatrix} 1 \\ \sqrt{2}x_{1}^{2} \\ \sqrt{2}x_{2}^{2} \\ x_{1}^{2} \end{pmatrix} = (1 + 2x_{1}x_{1}^{2} + 2x_{2}x_{2}^{2} + x_{1}^{2}x_{1}^{2} + 2x_{1}x_{2}x_{1}^{2}x_{2}^{2} + x_{2}^{2}x_{2}^{2}) = (1 + 2x_{1}x_{1}^{2} + 2x_{2}x_{2}^{2} + x_{1}^{2}x_{1}^{2} + 2x_{1}x_{2}x_{1}^{2}x_{2}^{2} + x_{2}^{2}x_{2}^{2}) = (1 + 2x_{1}x_{1}^{2} + 2x_{1}x_{2}^{2} + x_{1}^{2}x_{1}^{2} + x_{2}^{2}x_{2}^{2}) = (1 + 2x_{1}x_{1}^{2} + 2x_{1}x_{2}^{2} + x_{1}^{2}x_{1}^{2} + x_{2}^{2}x_{2}^{2}) = (1 + 2x_{1}x_{1}^{2} + 2x_{1}x_{2}^{2} + x_{1}^{2}x_{1}^{2} + x_{2}^{2}x_{2}^{2}) = (1 + 2x_{1}x_{1}^{2} + 2x_{1}x_{2}^{2} + x_{1}^{2}x_{1}^{2} + x_{2}^{2}x_{2}^{2}) = (1 + 2x_{1}x_{1}^{2} + x_{2}^{2} + x_{1}^{2}x_{1}^{2} + x_{2}^{2}x_{2}^{2}) = (1 + 2x_{1}x_{1}^{2} + x_{2}^{2} + x_{1}^{2}x_{1}^{2} + x_{2}^{2}x_{1}^{2} + x_{2}^{2}x_{2}^{2}) = (1 + 2x_{1}x_{1}^{2} + x_{2}^{2} + x_{1}^{2}x_{1}^{2} + x_{2}^{2}x_{1}^{2} + x_{2}^{2}x_{2}^{2} + x_{1}^{2}x_{1}^{2} + x_{2}^{2}x_{1}^{2} + x_{2}^{2}x_{2}^{2} + x_{1}^{2}x_{1}^{2} + x_{2}^{2}x_{1}^{2} + x_{2}^{2}x_{$$

$$= (1 + 2x_1x_1' + 2x_2x_2' + x_1^2x_1'^2 + 2x_1x_2x_1'x_2' + x_2^2x_2'^2) =$$

$$= (1 + x_1x_1' + x_2x_2')^2 = (1 + \mathbf{x}^T \cdot \mathbf{x}')^2 = k(\mathbf{x}, \mathbf{x}')$$

## El Truco del kernel (4)



- Por ejemplo para el caso linealmente separable en el espacio de características:
- Problema dual:

$$\max_{\alpha} \sum_{i=1} \alpha_i - \frac{1}{2} \sum_{i,j=1} \alpha_i \alpha_j y_i y_j k(\mathbf{x_i}, \mathbf{x_j})$$

s.a. 
$$\sum_{i=1}^{n} \alpha_i y_i = 0$$
,  $\alpha_i \ge 0$ ,  $i=1,...,n$ 

- w óptimo:

$$\mathbf{w} = \sum_{i \in \text{Sop}} \hat{\alpha}_i y_i K(\mathbf{x}_i, \mathbf{x})$$

- wo óptimo:  $\hat{\mathbf{w}}_0 = 1 - \sum_{i \in Sop} \hat{\alpha}_i y_i k(\mathbf{x_i}, \mathbf{x_j}), \text{ con } \mathbf{x_i} \in \omega_1 \text{ y } \hat{\alpha}_i > 0$ 

solo un vector soporte positivo

– Clasificador óptimo:

$$g(\mathbf{x}) = \sum_{i \in Sop} \hat{\alpha}_i y_i k(\mathbf{x}_i, \mathbf{x}) + \hat{w}_0,$$



#### **Teorema de Mercer**



□ Si el núcleo K(x,z) es definido positivo, hay una aplicación no lineal  $\Phi(x)$  de los patrones originales en un espacio de Hilbert (de dimensión posiblemente infinita) tal que para cada  $x, x_0$ ,

$$\Phi(\mathbf{x}) \; \Phi(\mathbf{x}_0) = K(\mathbf{x}, \, \mathbf{x}_0)$$

□ Consecuencia: truco del núcleo (kernel trick) no hace falta conocer  $\Phi(\mathbf{x})$ ,  $\Phi(\mathbf{x}_0)$  para calcular  $\Phi(\mathbf{x})$ . $\Phi(\mathbf{x}_0)$ 



#### **Teorema de Mercer**

- □ El principal requerimiento para definir una función de tipo *kernel* (nucleo) es que exista su correspondiente transformación, tal que la función *kernel*, calculada para un par de vectores, sea equivalente a su producto escalar en el espacio transformado.
- □ Algunas funciones *kernel* para clasificación son:

$$k(\mathbf{x}, \mathbf{x}_j) = (\mathbf{x}^T \mathbf{x}_j + 1)^p$$

$$k(\mathbf{x}, \mathbf{x}_j) = e^{-\frac{\|\mathbf{x} - \mathbf{x}_j\|^2}{2\sigma^2}}$$

$$k(\mathbf{x}, \mathbf{x}_j) = \tanh(c\mathbf{x}^T\mathbf{x}_j - d)$$

## El Truco del kernel (5)

La función núcleo *k(x,y*) mide la similitud entre las muestras *x* e *y*.

- No toda función k(x,y) puede ser utilizada como función núcleo. Debe satisfacer la denominada condición de Mercer.
- Algunas funciones núcleo:

- Lineal: 
$$k(\mathbf{x}, \mathbf{y}) = \mathbf{x}^{\mathsf{T}} \mathbf{y}$$

- Polinomial: 
$$k(\mathbf{x}, \mathbf{y}) = (\lambda(\mathbf{x}^T\mathbf{y}) + \theta)^p, p = 1, 2, ...$$

- Tangente hiperbólica:  $k(\mathbf{x}, \mathbf{y}) = \tanh(\lambda(\mathbf{x}^T\mathbf{y}) - \theta)$ 

## El Truco del kernel (6)

- Función de base radial: Núcleo con características de dimensión infinita

$$K(\mathbf{x}, \mathbf{y}) = \exp\left(-\frac{\|\mathbf{x} - \mathbf{y}\|^2}{2\sigma^2}\right) = \exp(-\lambda(\mathbf{x} - \mathbf{y})^T \cdot (\mathbf{x} - \mathbf{y})), \ \lambda > 0$$

- Observación:
- La forma final del clasificador lineal:

$$g(\mathbf{x}) = \sum_{i \in Sop} \hat{\mathbf{\alpha}}_i y_i k(\mathbf{x}_i, \mathbf{x}) + \hat{w}_0,$$

indica que el clasificador g(x) está siendo aproximado por las funciones  $k(x_i, x)$  correspondientes a los vectores soporte.

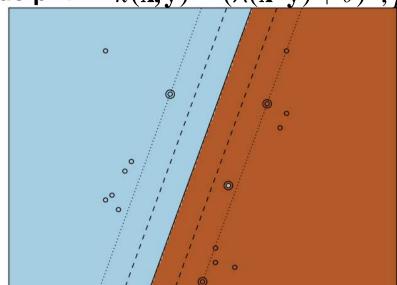


# *kernel* polinómico, θ=1

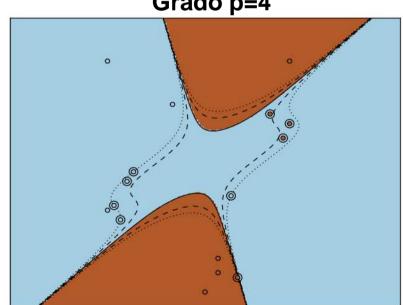


 $k(\mathbf{x}, \mathbf{y}) = (\lambda(\mathbf{x}^{\mathsf{T}}\mathbf{y}) + \theta)^{p}, p = 1, 2, \dots$ Grado p=1

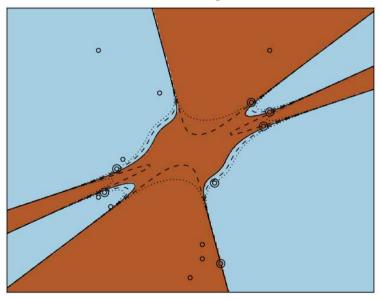
Grado p=2



Grado p=4



Grado p=6

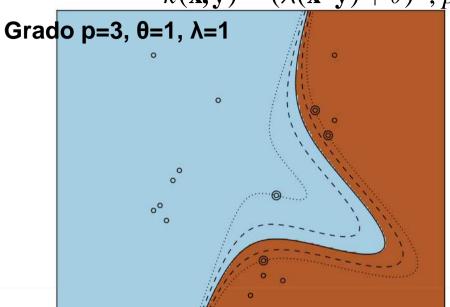


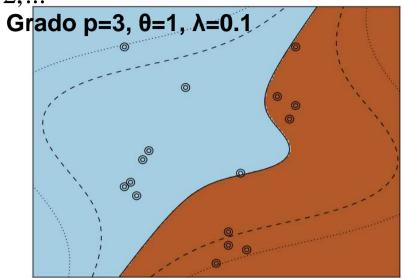


# *kernel* polinómico, θ=1

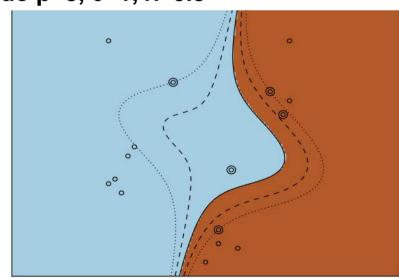


$$k(\mathbf{x}, \mathbf{y}) = (\lambda(\mathbf{x}^{\mathsf{T}}\mathbf{y}) + \theta)^{p}, p = 1, 2, \dots$$

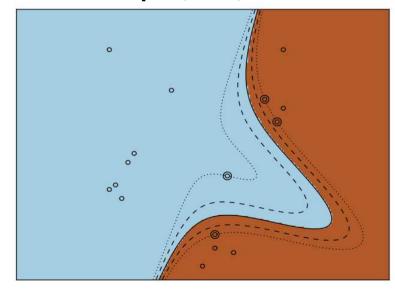




Grado p=3,  $\theta$ =1,  $\lambda$ =0.5



Grado p=3,  $\theta$ =1,  $\lambda$ =2



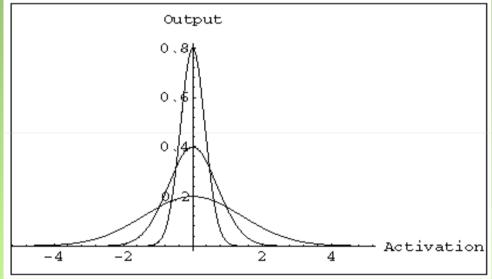


#### kernel RBF



## Función de base radial: Núcleo con características de dimensión infinita

$$K(\mathbf{x}, \mathbf{y}) = \exp\left(-\frac{\|\mathbf{x} - \mathbf{y}\|^2}{2\sigma^2}\right) = \exp(-\lambda(\mathbf{x} - \mathbf{y})^T \cdot (\mathbf{x} - \mathbf{y})), \ \lambda > 0$$



Cada punto del conjunto de entrenamiento crea su campana de Gauss. La forma completa es la suma de las campanas de Gauss.

Es de la clase de "todos los vecinos más cercanos".

С	Superficie de decisión	Modelo	Sesgo	Varianza
Pequeño	Alisada	Sencillo	Alto	Grande
Grande	Picuda	Complejo	Bajo	Pequeña

Valor de Lambda λ	Puntos afectados
Bajo, sigma alto	Pueden estar lejos de los ejemplos de entrenamiento
Alto, sigma bajo	Deben estar cerca de los ejemplos de entrenamiento

Un valor de lambda alto hace una menor varianza

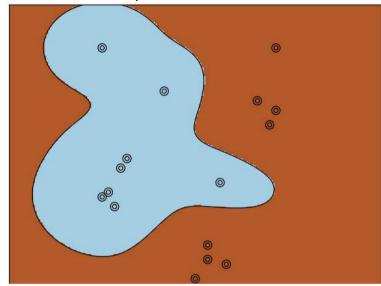
$$K(\mathbf{x}, \mathbf{y}) = \exp\left(-\frac{\|\mathbf{x} - \mathbf{y}\|^2}{2\sigma^2}\right) = \exp(-\lambda(\mathbf{x} - \mathbf{y})^T \cdot (\mathbf{x} - \mathbf{y})), \ \lambda > 0$$

- •La elección de lambda es crítica para el rendimiento de SVM.
- •El consejo para la elección de estos dos parámetros C y lambda es hacer una búsqueda de tipo malla por validación cruzada
- •Hacer pruebas en espacios exponenciales
- Utilizar un rango amplio

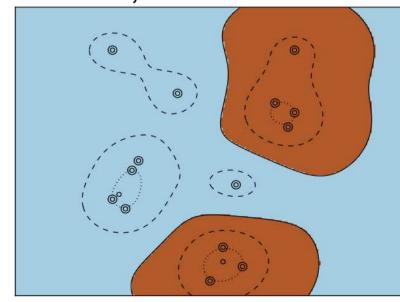




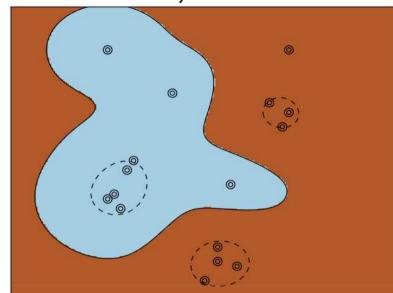
C=0.05, λ=2



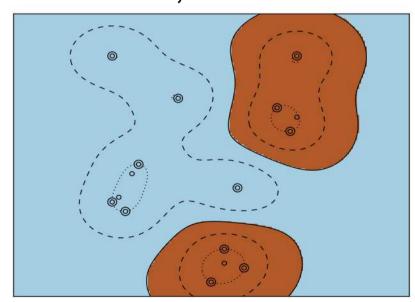
C=0.6, λ=2



C=0.2, λ=2



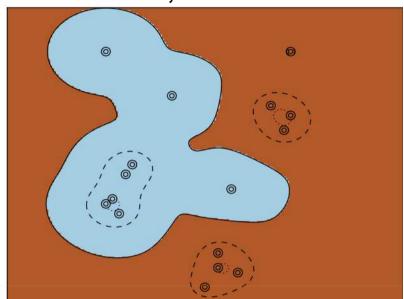
C=2, λ=2



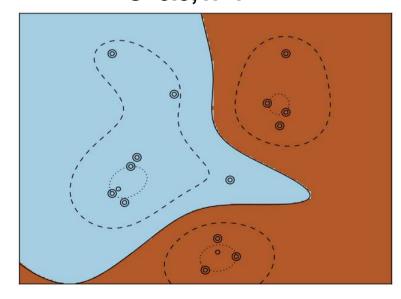




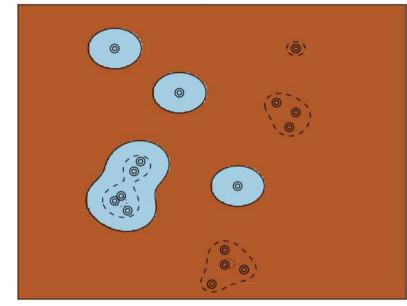
C=0.5, λ=5



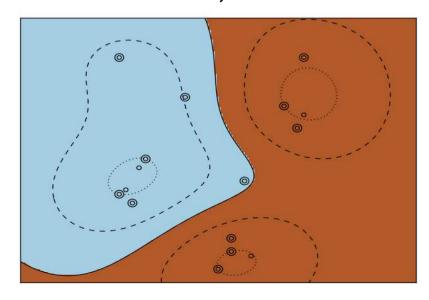
C=0.5, λ=1



C=0.5, λ=10



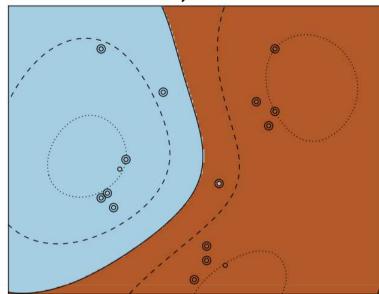
C=0.5, λ=0.5



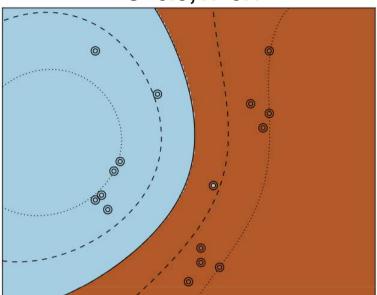




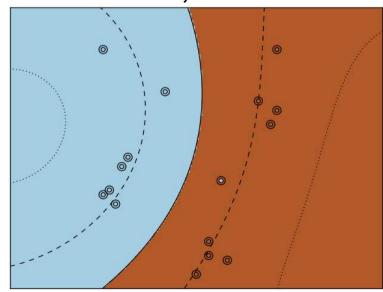
C=0.5, λ=0.2



C=0.5, λ=0.1



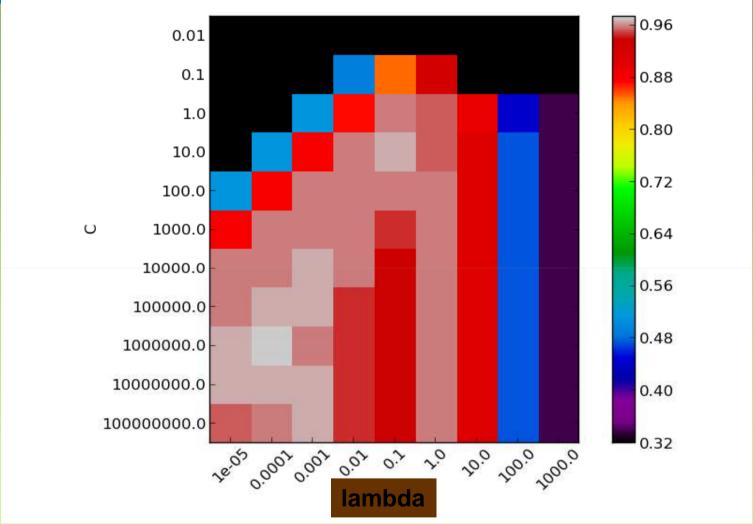
C=0.5, λ=0.05







#### Mapa de validación cruzada



http://scikit-learn.org/stable/auto\_examples/svm/plot\_rbf\_parameters.html



#### **SVM:** Aspectos Prácticos



• A la hora de clasificar es conveniente seguir esta guía:

#### - Escalar:

- › Es recomendable escalar todas las características al rango [-1,1] o [0,1]
- De esta forma se evita que una característica domine a las demás y se evitan dificultades numéricas

#### - Selección del modelo

En general se suele utilizar la función de base radial como una primera elección. La razón fundamental es que la función núcleo tiene un único parámetro y además el proceso de optimización tiene menos dificultades numéricas



## **SVM: Aspectos Prácticos**



- Selección del modelo
- La selección de los parámetros de las funciones núcleo y el parámetro C del caso no lineal se hace mediante una validación cruzada.
- > En el caso de funciones de base radial se suele seleccionar los conjuntos de prueba:

$$C \in \{10^{-3}, 10^{-2}, \dots, 10^{3}\}\ \text{y}\ \lambda \in \{10^{-3}, 10^{-2}, \dots, 10^{3}\}$$



#### **SVM: Clasificación Multiclase**



- Clasificación multiclase:
- Se construye una SVM por clase.
- > El problema a resolver es el de esa clase contra el resto.
- Se elige la clase a partir del máximo valor de los clasificadores

Dos implementaciones en scikit-learn:

SVC: uno-contra-uno, OAO

n(n-1)/2 clasificadores construídos

SVCLineal: uno-contra-el-resto, OAA

n clasificadores entrenados y construidos

## **Ejemplo NO lineal (1): XOR**

El problema del XOR resuelto con una SVM no lineal (sin núcleo).

- Cjto. entrenamiento: función XOR  $x_1$ =(0,1),  $x_2$ =(1,0) ambos pertenecen a  $C_1$   $x_3$ =(0,0), $x_4$ =(1,1), ambos pertenecen a  $C_2$
- Signos deseados: y<sub>1</sub>=1, y<sub>2</sub>=1, y<sub>3</sub>=-1, y<sub>4</sub>=-1
- Funciones  $\phi: \phi(\mathbf{x}) = (x_1^2, x_2^2, \sqrt{2}x_1x_2, \sqrt{2}x_1, \sqrt{2}x_2, 1)$
- › Puntos transformados

$$(0,1) \rightarrow (0,1,0,0,\sqrt{2},1);$$
  $(1,0) \rightarrow (1,0,0,\sqrt{2},0,1)$   $(0,0) \rightarrow (0,0,0,0,0,1);$   $(1,1) \rightarrow (1,1,\sqrt{2},\sqrt{2},\sqrt{2},1)$ 

) Productos Escalares  $\Phi(\mathbf{x}_i)^T \cdot \Phi(\mathbf{x}_j)$ 

$$(\Phi(\mathbf{x}_1)^T.\Phi(\mathbf{x}_1)) = (0,1,0,0,\sqrt{2},1)^T(0,1,0,0,\sqrt{2},1) = 4$$
$$(\Phi(\mathbf{x}_1)^T.\Phi(\mathbf{x}_2)) = (0,1,0,0,\sqrt{2},1)^T(1,0,0,\sqrt{2},0,1) = 1$$

•••••

$$(\Phi(\mathbf{x}_4)^T.\Phi(\mathbf{x}_4)) = (1,1,\sqrt{2},\sqrt{2},\sqrt{2},1)^T(1,1,\sqrt{2},\sqrt{2},\sqrt{2},1) = 9$$



## **Ejemplo NO lineal (2): XOR**



$$(\Phi(\mathbf{x}_1)^T.\Phi(\mathbf{x}_1)) = (0,1,0,0,\sqrt{2},1)^T(0,1,0,0,\sqrt{2},1) = 4$$

$$(\Phi(\mathbf{x}_1)^T.\Phi(\mathbf{x}_2)) = (0,1,0,0,\sqrt{2},1)^T(1,0,0,\sqrt{2},0,1) = 1$$

••••

$$(\Phi(\mathbf{x}_4)^T.\Phi(\mathbf{x}_4)) = (1,1,\sqrt{2},\sqrt{2},\sqrt{2},1)^T(1,1,\sqrt{2},\sqrt{2},\sqrt{2},1) = 9$$

#### El problema es ahora:

$$\max_{\alpha} \sum_{i=1}^{\infty} \alpha_{i} - \frac{1}{2} \sum_{i,j=1}^{\infty} \alpha_{i} \alpha_{j} y_{i} y_{j} (\phi(\mathbf{x}_{i})^{T}.\phi(\mathbf{x}_{j}))$$

$$s.a. \sum_{i=1}^{\infty} \alpha_{i} y_{i} = 0, \quad \alpha_{i} \geq 0, \quad i=1,...,n$$

$$\max \alpha_{1} + \alpha_{2} + \alpha_{3} + \alpha_{4} - \underbrace{\frac{1}{2} \begin{pmatrix} 4\alpha_{1}^{2} + \alpha_{1}\alpha_{2} - \alpha_{1}\alpha_{3} - 4\alpha_{1}\alpha_{4} + \\ \alpha_{1}\alpha_{2} + 4\alpha_{2}^{2} - \alpha_{2}\alpha_{3} - 4\alpha_{2}\alpha_{4} - \\ \alpha_{3}\alpha_{1} - \alpha_{3}\alpha_{2} + \alpha_{3}^{2} + \alpha_{3}\alpha_{4} - \\ 4\alpha_{4}\alpha_{1} - 4\alpha_{4}\alpha_{2} + \alpha_{4}\alpha_{3} + 9\alpha_{4}^{2} \end{pmatrix}}$$

s.a. 
$$\alpha_1 + \alpha_2 - \alpha_3 - \alpha_4 = 0$$
,  $\alpha_1 \ge 0$ ,  $\alpha_2 \ge 0$ ,  $\alpha_3 \ge 0$ ,  $\alpha_4 \ge 0$ 

## Ejemplo no lineal (2): XOR



$$\max_{\alpha} \sum_{i=1}^{\infty} \alpha_{i} - \frac{1}{2} \sum_{i,j=1}^{\infty} \alpha_{i} \alpha_{j} y_{i} y_{j} (\phi(\mathbf{x}_{i})^{T}.\phi(\mathbf{x}_{j}))$$

$$s.a. \sum_{i=1}^{\infty} \alpha_{i} y_{i} = 0, \quad \alpha_{i} \geq 0, i=1,...,n$$

$$\begin{split} L(\alpha_{1},\alpha_{2},\alpha_{3},\alpha_{4},\lambda) &= \alpha_{1} + \alpha_{2} + \alpha_{3} + \alpha_{4} - \frac{1}{2}(4\alpha_{1}^{2} + \alpha_{1}\alpha_{2} - \alpha_{1}\alpha_{3} - 4\alpha_{1}\alpha_{4} + \alpha_{1}\alpha_{2} + 4\alpha_{2}^{2} - \alpha_{2}\alpha_{3} - 4\alpha_{2}\alpha_{4} - \alpha_{3}\alpha_{1} - \alpha_{3}\alpha_{2} + \alpha_{3}^{2} + \alpha_{3}\alpha_{4} \\ &- 4\alpha_{4}\alpha_{1} - 4\alpha_{4}\alpha_{2} + \alpha_{4}\alpha_{3} + 9\alpha_{4}^{2}) - \lambda(\alpha_{1} + \alpha_{2} - \alpha_{3} - \alpha_{4}) \end{split}$$

Las cinco ecuaciones se obtienen derivando la función lagrangiana

$$\begin{aligned} 1 - 4\alpha_1 - \alpha_2 - \alpha_3 + 4\alpha_4 - \lambda &= 0 \\ 1 - \alpha_1 - 4\alpha_2 + \alpha_3 + 4\alpha_4 - \lambda &= 0 \\ 1 + \alpha_1 + \alpha_2 - \alpha_3 - \alpha_4 + \lambda &= 0 \\ 1 + 4\alpha_1 + 4\alpha_2 - \alpha_3 - 9\alpha_4 + \lambda &= 0 \\ \alpha_1 + \alpha_2 &= \alpha_3 + \alpha_4 \end{aligned}$$

**Solución:**  $\hat{\alpha} = (8/3, 8/3, 10/3, 6/3)$ 



## Ejemplo no lineal (3): XOR



#### – w óptimo:

$$\hat{\mathbf{w}} = \sum_{i \in Sop} \hat{\mathbf{\alpha}}_i y_i \Phi(\mathbf{x}_i)$$

$$\hat{\mathbf{w}} = (8/3)(0,1,0,0,\sqrt{2},1) + (8/3)(1,0,0,\sqrt{2},0,1)$$

$$-(10/3)(0,0,0,0,0,1) - 2(1,1,\sqrt{2},\sqrt{2},\sqrt{2},1) =$$

$$=(2/3, 2/3, -2\sqrt{2}, (2/3)\sqrt{2}, (2/3)\sqrt{2}, 0)$$

#### - Constante wo óptima:

$$\hat{\mathbf{w}}_0 = 1 - \hat{\mathbf{w}} \Phi(\mathbf{x}_i), \text{ con } \mathbf{x}_i \in \omega_1 \text{ y } \hat{\alpha}_i > 0$$

$$\hat{\mathbf{w}}_0 = 1 - (2/3, 2/3, -2\sqrt{2}, (2/3)\sqrt{2}, (2/3)\sqrt{2}, 0)^{\mathrm{T}}(0, 1, 0, 0, \sqrt{2}, 1) = -1$$

#### - Clasificador óptimo:

$$\mathbf{g}(\mathbf{x}) = \hat{w}^T \Phi(\mathbf{x}) + \hat{w}_0$$

$$g(\mathbf{x}) = (2/3, 2/3, -2\sqrt{2}, (2/3)\sqrt{2}, (2/3)\sqrt{2}, 0)^{T} (x_{1}^{2}, x_{2}^{2}, \sqrt{2}x_{1}x_{2}, \sqrt{2}x_{1}, \sqrt{2}x_{2}, 1) - 1 =$$

$$= 2/3x_{1}^{2} + 2/3x_{2}^{2} - 4x_{1}x_{2} + 2/3x_{1} + 2/3x_{2} - 1$$

## Ejemplo no lineal (4): XOR

### problema del XOR resuelto con una MVS no lineal (con núcleo).

- Cjto. entrenamiento: función XOR  $x_1 = (0,1)$ ,  $x_2 = (1,0)$  ambos pertenecen a  $C_1$ 

$$x_3 = (0,0), x_4 = (1,1),$$
 ambos pertenecen a  $C_2$ 

- Signos deseados: y₁=1, y₂=1, y₃=-1, y₄=-1
- Funciones

$$\phi: \phi(\mathbf{x}) = (x_1^2, x_2^2, \sqrt{2}x_1x_2, \sqrt{2}x_1, \sqrt{2}x_2, 1)$$

-Productos escalares

$$\Phi(\mathbf{x}_{i})^{T}.\Phi(\mathbf{x}_{j}) = (1 + \mathbf{x}_{i}^{T}\mathbf{x}_{j})^{2} = k(\mathbf{x}_{i}, \mathbf{x}_{j}) =$$

$$= (1 + 2x_{1}x_{1}^{'} + 2x_{2}x_{2}^{'} + x_{1}^{2}x_{1}^{'2} + 2x_{1}x_{2}x_{1}^{'}x_{2}^{'} + x_{2}^{2}x_{2}^{'2})$$

-La función de núcleo es entonces

$$k(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_1) = ((0,1)^T (0,1) + 1)^2 = 4$$

$$k(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2) = ((0,1)^T (1,0) + 1)^2 = 1$$

$$k(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_3) = ((0,1)^T (0,0) + 1)^2 = 1$$

$$k(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_4) = ((0,1)^T (1,1) + 1)^2 = 4$$

$$k(\mathbf{x}_4\mathbf{x}_4)) = ((1,1)^T(1,1)+1)^2 = 9$$



Ejemplo no lineal (5): XOR
$$\max_{\alpha} \sum_{i=1}^{n} \alpha_{i} - \frac{1}{2} \sum_{i,j=1}^{n} \alpha_{i} \alpha_{j} y_{i} y_{j} k(\mathbf{x}_{i} \mathbf{x}_{j})$$

$$s.a. \sum_{i=1}^{n} \alpha_{i} y_{i} = 0, \quad \alpha_{i} \geq 0, \text{ i=1,...,n}$$



s.a. 
$$\sum_{i=1}^{n} \alpha_i y_i = 0$$
,  $\alpha_i \ge 0$ ,  $i=1,...,n$ 

## El problema es ahora:

$$\max \alpha_1 + \alpha_2 + \alpha_3 + \alpha_4 -$$

El problema es ahora: 
$$\max \alpha_1 + \alpha_2 + \alpha_3 + \alpha_4 - \frac{1}{2} \begin{bmatrix} 4\alpha_1^2 + \alpha_1\alpha_2 - \alpha_1\alpha_3 - 4\alpha_1\alpha_4 + \\ \alpha_1\alpha_2 + 4\alpha_2^2 - \alpha_2\alpha_3 - 4\alpha_2\alpha_4 - \\ \alpha_3\alpha_1 - \alpha_3\alpha_2 + \alpha_3^2 + \alpha_3\alpha_4 - \\ 4\alpha_4\alpha_1 - 4\alpha_4\alpha_2 + \alpha_4\alpha_3 + 9\alpha_4^2 \end{bmatrix}$$

s.a. 
$$\alpha_1 + \alpha_2 - \alpha_3 - \alpha_4 = 0$$
,  $\alpha_1 \ge 0$ ,  $\alpha_2 \ge 0$ ,  $\alpha_3 \ge 0$ ,  $\alpha_4 \ge 0$ 

Las cinco ecuaciones son

$$1-4\alpha_1 - \alpha_2 - \alpha_3 + 4\alpha_4 - \lambda = 0$$

$$1 - \alpha_1 - 4\alpha_2 + \alpha_3 + 4\alpha_4 - \lambda = 0$$

$$1 + \alpha_1 + \alpha_2 - \alpha_3 - \alpha_4 + \lambda = 0$$

$$1 + 4\alpha_1 + 4\alpha_2 - \alpha_3 - 9\alpha_4 + \lambda = 0$$

$$\alpha_1 + \alpha_2 = \alpha_3 + \alpha_4$$

Con la misma solución:

$$\hat{\alpha} = (8/3, 8/3, 10/3, 6/3)$$

## Ejemplo no lineal (6): XOR

$$\mathbf{k}(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_1) = ((0,1)^T (0,1) + 1)^2 = 4$$

$$k(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2) = ((0,1)^T (1,0) + 1)^2 = 1$$

$$k(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_3) = ((0,1)^T (0,0) + 1)^2 = 1$$

$$k(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_4) = ((0,1)^T (1,1) + 1)^2 = 4$$

$$k(\mathbf{x}_{4}\mathbf{x}_{4}) = ((1,1)^{T}(1,1) + 1)^{2} = 9$$

$$k(\mathbf{x}_{1}, \mathbf{x}_{2}) = ((0,1)^{T} (1,0) + 1)^{2} = 1 k(\mathbf{x}_{1}, \mathbf{x}_{3}) = ((0,1)^{T} (0,0) + 1)^{2} = 1 k(\mathbf{x}_{1}, \mathbf{x}_{3}) = ((0,1)^{T} (1,1) + 1)^{2} = 4$$

$$\hat{\mathbf{w}}_{0} = 1 - (8/3, 8/3, -10/3, -6/3) \begin{vmatrix} 1 \\ 1 \\ 4 \end{vmatrix} = -1$$

hemos utilizado un sólo vector soporte en el espacio transformado el  $(0,1,0,0,\sqrt{2},1)$ 

#### – Constante w₀ óptima:

$$\hat{\mathbf{w}}_0 = 1 - \sum_{i \in Sop} \hat{\mathbf{\alpha}}_i y_i k(\mathbf{x}_i, \mathbf{x}_j) , \operatorname{con} \mathbf{x}_i \in \omega_1 \ \mathbf{y} \ \hat{\alpha}_i > 0$$

#### - Clasificador óptimo:

$$g(\mathbf{x}) = \sum_{i \in Sop} \hat{\mathbf{\alpha}}_i y_i k(\mathbf{x}_i, \mathbf{x}) + \hat{w}_0$$

$$g(\mathbf{x}) = (8/3)(x_2+1)^2 + (8/3)((x_1+1)^2 - (10/3) - (6/3)(x_1 + x_2 + 1)^2 - 1 =$$

$$= (2/3)(x_1 - 1/2)^2 + (x_2 - 1/2)^2 - 6(x_1 - 1/2)(x_2 - 1/2) - 1/2$$



## Ejemplo no lineal (7): XOR



#### - Clasificador óptimo:

$$g(\mathbf{x}) = \sum_{i \in Sop} \hat{\mathbf{a}}_i y_i k(\mathbf{x}_i, \mathbf{x}'_j) + \hat{w}_0$$

$$k(\mathbf{x}_{i}, \mathbf{x}'_{j}) = (1 + \mathbf{x}_{i}^{T} \mathbf{x}'_{j})^{2} = (1 + 2x_{1}x_{1}^{'} + 2x_{2}x_{2}^{'} + x_{1}^{2}x_{1}^{'2} + 2x_{1}x_{2}x_{1}^{'}x_{2}^{'} + x_{2}^{2}x_{2}^{'2})$$

$$k((0,1), \mathbf{x'}_{j}) = (1 + (0,1) \begin{pmatrix} x'_{1} \\ x'_{2} \end{pmatrix})^{2} = (1 + x'_{2})^{2}$$

$$k((1,0), \mathbf{x'}_{j}) = (1+(1,0)\begin{pmatrix} x'_{1} \\ x'_{2} \end{pmatrix})^{2} = (1+x'_{1})^{2}$$

$$k((0,0), \mathbf{x'}_{j}) = (1 + (0,0) \begin{pmatrix} x'_{1} \\ x'_{2} \end{pmatrix})^{2} = 1$$

$$k((1,1), \mathbf{x'}_{j}) = (1+(1,1)\begin{pmatrix} x'_{1} \\ x'_{2} \end{pmatrix})^{2} = (1+x'_{1}+x'_{2})^{2}$$

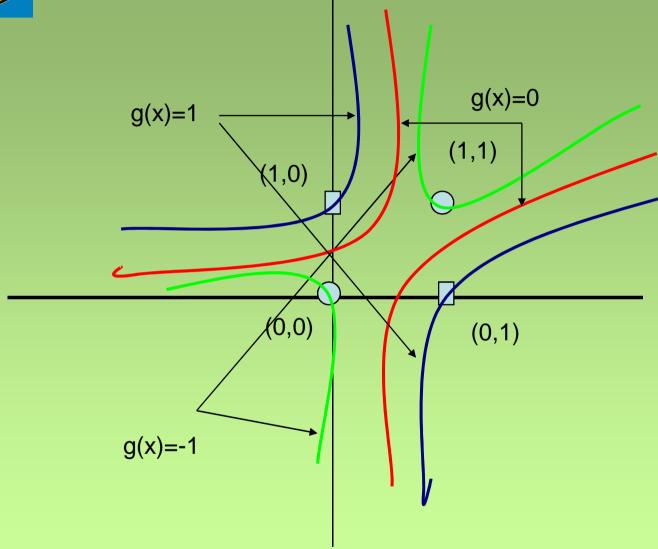
$$g(\mathbf{x}) = (8/3)(x_2'+1)^2 + (8/3)((x_1'+1)^2 - (10/3) - (6/3)(x_1'+x_2'+1)^2 - 1 =$$

$$= (2/3)(x_1'-1/2)^2 + (x_2'-1/2)^2 - 6(x_1'-1/2)(x_2'-1/2) - 1/2$$



## Ejemplo no lineal (7): XOR





Frontera de decisión de la metodología No lineal SVM



#### Resumen: hard-margen en SVM lineal



## □ Hard-margen en SVM lineal

#### **Primal**

$$\min_{\mathbf{w}, w_0} \frac{\langle \mathbf{w}, \mathbf{w} \rangle}{2}$$

s.a. 
$$y_i(\langle \mathbf{w}, \mathbf{x}_i \rangle + w_0) \ge 1, i \in \{1, 2, ..., n\}$$

$$\max_{\boldsymbol{\alpha}, \lambda} L(\boldsymbol{\alpha}, \lambda) = \sum_{i \in S} \alpha_i - \frac{1}{2} \sum_{i, j \in S} \alpha_i \alpha_j y_i y_j \left\langle \mathbf{x}_i, \mathbf{x}_j \right\rangle - \lambda \left( \sum_{i \in S} \alpha_i y_i \right)$$

s.a. 
$$\lambda \ge 0$$
,  $\alpha_i \ge 0$ ,  $i = 1,...,n$ 

$$\mathbf{w} = \sum_{i \in Sop} \alpha_i y_i \mathbf{x}_i \quad \hat{w}_0 = 1 - \sum_{j \in Sop} \hat{\alpha}_j y_j (\mathbf{x}_j^T \mathbf{x}_i), \quad \text{con } \mathbf{x}_i \in \omega_1 \ y \ \hat{\boldsymbol{\alpha}}_i > 0$$



#### Resumen: soft-margen en SVM lineal



## □ Soft-margen en SVM lineal

#### **Primal**

$$\min_{\mathbf{w}, w_0} \frac{\langle \mathbf{w}, \mathbf{w} \rangle}{2} + C \sum_{i=1}^{n} \varepsilon_i$$
s.a.  $y_i (\langle \mathbf{w}, \mathbf{x}_i \rangle + w_0) \ge 1 - \varepsilon_i, i \in \{1, 2, ..., n\}$ 

$$\max_{\mathbf{a},\lambda} L(\mathbf{a},\lambda) = \sum_{i \in S} \alpha_i - \frac{1}{2} \sum_{i,j \in S} \alpha_i \alpha_j y_i y_j \left\langle \mathbf{x}_i, \mathbf{x}_j \right\rangle - \lambda \left( \sum_{i \in S} \alpha_i y_i \right)$$
s.a.  $\lambda \ge 0$ ,  $C \ge \alpha_i \ge 0$ ,  $i = 1, ..., n$ 

$$\mathbf{w} = \sum_{i \in Sop} \alpha_i y_i \mathbf{x}_i \ \hat{w}_0 = 1 - \sum_{j \in Sop} \hat{\alpha}_j y_j (\mathbf{x}_j^T \mathbf{x}_i), \quad \text{con } \mathbf{x}_i \in \omega_1 y \ \hat{\mathbf{a}}_i > 0$$



## Resumen: hard-margen SVM no-lineal



- Hard-margen SVM no-lineal
- □ En general se trabaja en el dual

#### **Primal**

$$\min_{\mathbf{w}, w_0} \frac{\langle \mathbf{w}, \mathbf{w} \rangle}{2}$$

s.a. 
$$y_i(\langle \mathbf{w}, \Phi(\mathbf{x}_i) \rangle + w_0) \ge 1, i \in \{1, 2, ..., n\}$$

$$\max_{\boldsymbol{\alpha}, \lambda} L(\boldsymbol{\alpha}, \lambda) = \sum_{i \in Sop} \alpha_i - \frac{1}{2} \sum_{i, j \in Sop} \alpha_i \alpha_j y_i y_j \, \mathbf{k}(\mathbf{x}_i, \mathbf{x}_j) - \lambda \left( \sum_{i \in Sop} \alpha_i y_i \right)$$

s.a. 
$$\lambda \ge 0$$
,  $\alpha_i \ge 0$ ,  $i = 1, ..., n$ 

$$g(\mathbf{x}) = \left(\sum_{i \in \text{Sop}} \alpha_i y_i K(\mathbf{x}_i, \mathbf{x})\right) + w_0 \quad \hat{\mathbf{w}}_0 = 1 - \sum_{i \in \text{Sop}} \hat{\alpha}_i y_i k(\mathbf{x}_i, \mathbf{x}_j), \text{ con } \mathbf{x}_i \in \omega_1 \text{ y } \hat{\alpha}_i > 0$$



#### Resumen: soft-margen SVM no-lineal



- □ Soft-margen SVM no-lineal
- □ En general se trabaja en el dual

#### **Primal**

$$\min_{\mathbf{w}, w_0} \frac{\langle \mathbf{w}, \mathbf{w} \rangle}{2} + C \sum_{i=1}^n \varepsilon_i$$

s.a. 
$$y_i (\langle \mathbf{w}, \Phi(\mathbf{x}_i) \rangle + w_0) \ge 1 - \varepsilon_i, i \in \{1, 2, ..., n\}$$

$$\max_{\mathbf{\alpha}, \lambda} L(\mathbf{\alpha}, \lambda) = \sum_{i \in Sop} \alpha_i - \frac{1}{2} \sum_{i, j \in Sop} \alpha_i \alpha_j y_i y_j \, \mathbf{k}(\mathbf{x}_i, \mathbf{x}_j) - \lambda \left( \sum_{i \in Sop} \alpha_i y_i \right)$$

s.a. 
$$\lambda \ge 0$$
,  $C \ge \alpha_i \ge 0$ ,  $i = 1,...,n$ 

$$g(\mathbf{x}) = \left(\sum_{i \in \text{Sop}} \alpha_i y_i K(\mathbf{x}_i, \mathbf{x})\right) + w_0 \qquad \hat{\mathbf{w}}_0 = 1 - \sum_{i \in \text{Sop}} \hat{\alpha}_i y_i k(\mathbf{x}_i, \mathbf{x}_j), \text{ con } \mathbf{x}_i \in \omega_1 \text{ y } \hat{\alpha}_i > 0$$

#### **SVM:** Resumen



#### Los clasificadores no lineales:

- Permiten trabajar con fronteras de decisión no lineales
- Los clasificadores presentados en este tema se basan en:
- 1. Realizar transformaciones no lineales de las características.
- 2. Aplicar a los datos transformados un clasificador lineal
- Un primer problema:
- Si el número de transformaciones es muy grande el clasificador sufre de sobreajuste.
- Solución:
- Clasificador cuadrático: Regularización
- SVM: Máximo margen.
- Un segundo problema:
- ¿Cuál debe ser la transformación no lineal de los datos?
- Una Solución:
- Elegir una de las conocidas (polinomial, funciones de base radial, etc)

## Selección de parámetros: Resumen



Siempre hay que fijar un valor para C

Si  $C \ll 1$ , el ajuste en la muestra puede ser malo

Si  $C\gg 1$ , hay un riesgo de sobreajuste en la muestra; también malo!!

También hay que escoger  $\sigma$  si además se usa un núcleo Gaussiano

$$K(\mathbf{x}, \mathbf{x'}) = \exp\left(-\frac{\|\mathbf{x} - \mathbf{x'}\|^2}{2\sigma^2}\right)$$

Si  $\sigma \gg 1$ , se tienen gaussianas muy extendidas, que no diferencian entre datos.

Si  $\sigma \ll 1$  , las Gaussianas aproximan deltas de Dirac, y hay un riesgo de sobreajuste en la muestra de entrenamiento



## Selección de parámetros: Resumen II



Posibles enfoques para obtener  $C, \sigma$ :

- i) Fijar conjuntos de validación
- ii) Generar diferentes modelos y evaluarlos sobre dichos conjuntos

Opción 1: búsqueda en rejilla sobre rectángulo

$$[C_{\min}, C_{\max}] \times [\sigma_{\min}, \sigma_{\max}]$$

Opción 2: búsqueda evolutiva a partir de  $C_0,\ \sigma_0$  iniciales

Alternativa: Usar técnicas analíticas

#### CONCLUSIONES



- Las SVMs son una de las metodologías más eficaces en clasificación y modelización.
- Ofrecen una teoría sólida y elegante con métodos de construcción eficaces, buen software de acceso público (LivSVM)
- -Juntan ideas diversas e importantes: márgenes en clasificación, optimización Lagrangiana, espacios de **Hilbert reproductores**
- No están exentas de problemas:
- -. Explotación costosa en test:

$$F(\mathbf{x}; w^*) = \sum_{\{\alpha_p^* > 0\}} \alpha_p^* y_p \ \mathbf{k}(\mathbf{x}_p, \mathbf{x})$$

$$\Rightarrow \text{coste } \left|\left\{\alpha_p^*>0\right\}\right| = \Theta(N) \text{ en general}$$
 -. Construcción imposible si N muy grande

- -. Entrenamiento esencialmente por lotes, en modo batch

#### **AREA DE INVESTIGACIÓN**

## Área de gran actividad investigadora

Métodos de entrenamiento que produzcan modelos con parsimonia (sparsity)

Si d=1, trabajo con núcleo lineal: K(x,x0) = xT.x0

**Ejemplos: Microarrays de ADN,** 

Recuperación de información en la web

#### Recomendación:

Cuando N es enorme: usar núcleos lineales (si se puede), trabajar en el primal (por ejemplo, mediante descenso por gradiente), aprovechar la tecnología (máquinas multinúcleos, paralelización)

#### Referencias

#### Referencias

- -N. Cristianini and J. Shawe-Taylor. An Introduction to Support Vector Machines. Cambridge University Press, 2000.
- -B. Schölkopf and A. J. Smola. Learning with Kernels. MIT Press, 2002
- -Ch. Burges. A Tutorial on Support Vector Machines for Pattern Recognition. Data Mining and Knowledge Discovery 2 (1998), 121–167
- C. Bishop, Pattern Recognition and Machine Learning, Springer,

Berwick, An idiot's guide to support vector machines

- E. Kim, Everything you wanted to know about the kernel trick (but were too afraid to ask)
- M. Law, A simple introduction to support vector machines
- W.S. Noble, What is a support vector machine?, Nature Biotechnology, 24(12):1565-1567, 2006



## Referencias: Multiplicadores de Lagrange



- □ C. Bishop, Pattern Recognition and Machine Learning, Springer, 2006. Appendix E. Lagrange Multipliers (p. 707-710).
- □ D. Klein, <u>Lagrange multipliers without permanent</u> <u>scarring</u>
- □ Wikipedia, <u>Lagrange multiplier</u>



# MODELOS COMPUTACIONALES: CUARTO CURSO DEL GRADO DE ING. INFORMÁTICA EN COMPUTACION



# Introducción a las Máquinas de Vectores Soporte, SVM

#### **GRACIAS POR SU ATENCIÓN**

César Hervás-Martínez Pedro A. Gutiérrez Peña

Grupo de Investigación AYRNA

Departamento de Informática y Análisis
Numérico
Universidad de Córdoba
Campus de Rabanales. Edificio Einstein.
Email: chervas@uco.es
pagutierrez@uco.es

2021-2022