Análise Teórica de Máquinas de Vetores Suporte

Aluna: Paula Cristina Rohr Ertel
Orientador: Luiz Rafael dos Santos
Universidade Federal de Santa Catarina - Campus Blumenau

18 de Novembro de 2019

1 Introdução à SVM

A Aprendizagem de Máquina (do inglês *Machine Learning*) é o estudo do uso de técnicas computacionais para automaticamente detectar padrões em dados e usá-los para fazer predições e tomar decisões. De acordo com Krulikovski [5], existem dois tipos de Aprendizagem de Máquina, a aprendizagem supervisionada, em que a partir de um conjunto de dados de entrada e saída a máquina constrói um modelo que deduz a saída para novas entradas, e a não supervisionada, na qual a máquina cria sua própria solução. Algumas técnicas para aprendizagem de máquina supervisionada são as SVM, Regressão Linear, Regressão Logística e Redes Neurais, enquanto que a *Singular Value Decomposition* (SVD), Clusterização e Análise de Componentes Principais [5] são exemplos de técnicas para a aprendizagem não supervisionada.

As Máquinas de Vetores Suporte (SVM, do inglês *Support Vector Machine*), em especial, é uma técnica de aprendizagem supervisionada que, conforme mencionado por Krulikovski [5], é indicada nos casos em que ocorrem dados de dimensões elevadas e com altos níveis de ruídos, além de apresentar uma boa capacidade de generalização. Esta técnica pode ser aplicada tanto para problemas de regressão como de classificação. Ademais, a aprendizagem supervisionada é composta por uma etapa denominada fase de treinamento, na qual é dado um conjunto de treinamento formado por vários dados

de entrada e saída que funcionam como exemplos, a partir dos quais a máquina detecta padrões e cria um modelo para deduzir a saída de novos dados. Após essa fase novas entradas são testadas, denominadas conjunto de teste, no intuito de analisar se a máquina está gerando as saídas corretas.

1.1 Objetivos

O objetivo geral deste trabalho será desenvolver um estudo teórico das Máquinas de Vetores Suporte. Segundo Krulikovski [5], essa técnica foi desenvolvida por Vladimir Vapnik, Bernhard Boser, Isabelle Guyon e Corrina Cortes, com base na Teoria de Aprendizagem Estatística. Algumas aplicações de SVM em problemas práticos, citadas por Krulikovski [5], são o reconhecimento facial, leitura de placas automotivas e detecção de spam.

Em muitas situações queremos que o nosso algoritmo de aprendizado de máquina preveja uma dentre várias saídas possíveis. Um exemplo, como apresentado por Deisenroth, Faisal e Ong [1], é o telescópio, o qual identifica se um objeto no céu noturno é uma galáxia, uma estrela ou um planeta. Dessa forma, nosso objetivo específico será estudar a SVM para o problema de classificação, abordando inicialmente o problema de classificação binária, isto é, quando o conjunto de valores possíveis que a classe de saída pode atingir é binário. Para tanto, neste trabalho denotaremos o conjunto de saída por $\{1, -1\}$. Entretanto, quaisquer dois valores distintos poderiam ser utilizados, como $\{0, 1\}$, $\{True, False\}$, $\{red, blue\}$.

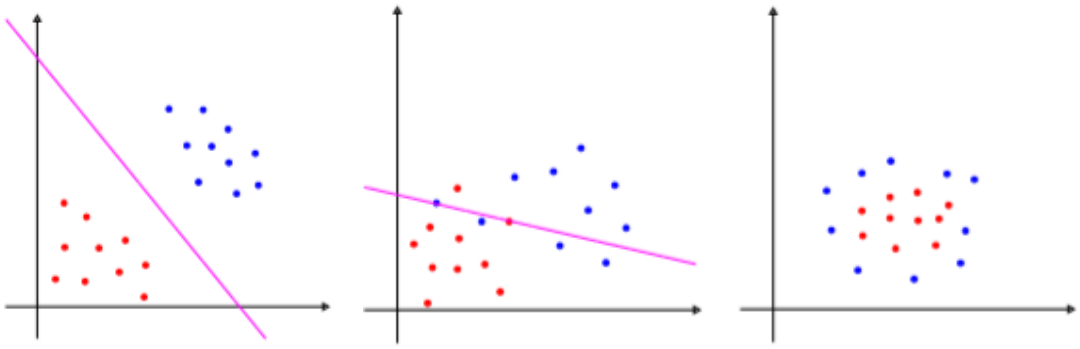
1.2 Referencial Teórico

Primeiramente, fez-se necessário estudar os aspectos teóricos-matemáticos dos Métodos de Otimização relacionados ao aprendizado de máquina, mais especificamente os associados as Máquinas de Vetores Suporte. Para tanto, assim como proposto por Deisenroth, Faisal e Ong [1], realizou-se uma revisão dos principais conceitos de Álgebra Linear e do Cálculo de Várias Variáveis relacionados ao assunto. Por conseguinte, desenvolveu-se um estudo teórico das condições de otimalidade para problemas de otimização sem restrições baseando-se em Ribeiro e Karas [6]. Para dar continuidade ao desenvolvimento desse projeto de TCC será necessário estudar as condições de otimalidade para problemas com restrições, haja vista que um dos problemas que se pretende resolver trata-se um problema de programação quadrática convexa com restrições lineares. Em vista disso, pretende-se utilizar Friedlander [2], Izmailov e Solodov [3] e Izmailov

e Solodov [4] para estudar a teoria de otimização com restrições, progamação quadrática e dualidade. O estudo específico acerca dos aspectos teóricos-matemáticos da técnica de Máquinas de Vetores Suporte será desenvolvido a partir de Krulikovski [5].

1.3 Máquinas de Vetores Suporte - Margem Rígida

Considere um conjunto de dados, pertencentes a duas classes distintas, conforme Figura 1.



(a) Linear. (b) Flexível. (c) Não Linear.

Figura 1: Dados lineares, com margem flexível e não lineares.
Fonte: Krulikovski [5]

Observe que na Figura 1a os dados podem ser classificados corretamente através de uma reta. Já na Figura 1b é possível encontrar uma reta que separa alguns poucos dados, porém incorretamente. E na Figura 1c não é possível classificar os dados como nos casos anteriores. Nestes exemplos temos representados os três casos de SVM: o linear com margem rígida, o linear com margem flexível e o não linear, respectivamente.

A modelagem do problema de classificação, utilizando a técnica de SVM, consiste em encontrar um hiperplano ótimo que melhor separe os dados de entrada x^i em duas saídas y_i através de uma função de decisão. Matematicamente, mostraremos que trata-se um problema de programação quadrática convexa com restrições lineares, que pode ser formulado como

$$\begin{aligned} \min_{w,b} \quad & f(w,b) \\ \text{s.a.} \quad & g(w,b) \leq 0, \end{aligned}$$

com $w \in \mathbb{R}^n$ e $b \in \mathbb{R}$, em que $f : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}$ é uma função quadrática e $g : \mathbb{R}^{n+1} \to \mathbb{R}^m$ é linear. Note também que f e g são continuamente diferenciáveis.

Para formular matematicamente o problema de classificação, considere os conjuntos

de entrada $\mathcal{X} = \{x^1, \ldots, x^m\} \subset \mathbb{R}^n$ e de treinamento $\mathcal{Y} = \{(x^1, y_1), \ldots, (x^m, y_m) \mid x^i \in \mathcal{X} \, e \, y_i \in \{-1, 1\}\}$, com a partição

$$\mathcal{X}^+ = \{x^i \in \mathcal{X} \mid y_i = 1\} \quad e \quad \mathcal{X}^- = \{x^i \in \mathcal{X} \mid y_i = -1\},$$

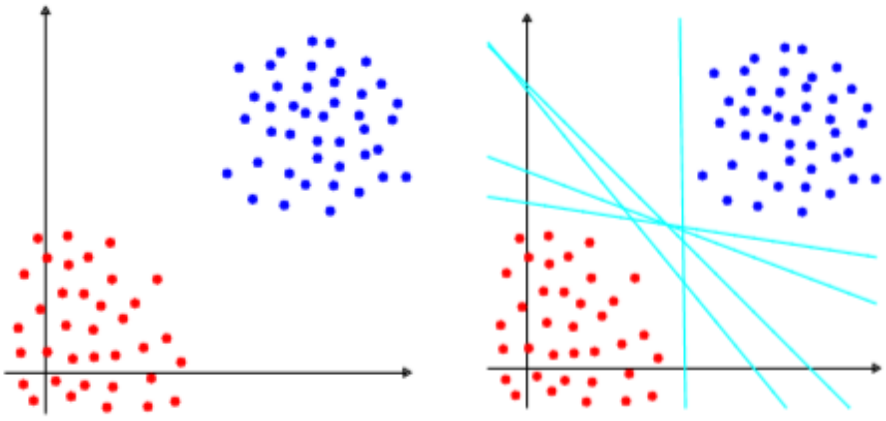
dos conjuntos formados pelos atributos pertencentes às classes positiva e negativa, respectivamente.

Definição 1. Considere um vetor não nulo $w \in \mathbb{R}^n$ e um escalar $b \in \mathbb{R}$. Um hiperplano com vetor normal w e constante b é um conjunto da forma $\mathcal{H}(w, b) = \{x \in \mathbb{R}^n \mid w^T x + b = 0\}$.

O hiperplano $\mathcal{H}(w, b)$ divide o espaço $\mathbb{R}^n$ em dois semiespaços, dados por

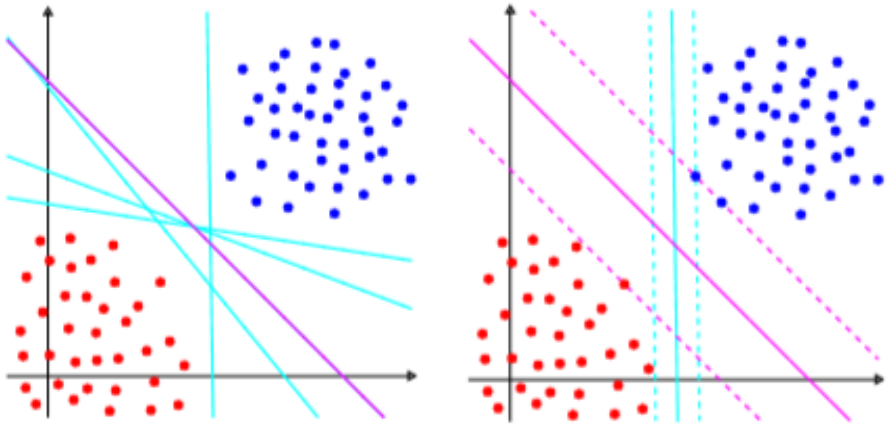
$$\mathcal{S}^+ = \{x \in \mathbb{R}^n \mid w^T x + b \geq 0\} \quad e \quad \mathcal{S}^- = \{x \in \mathbb{R}^n \mid w^T x + b \leq 0\}.$$

Considere dois conjuntos de dados de treinamento representados no $\mathbb{R}^2$ como na Figura 2a, em que os pontos em azul representam a classe positiva, e os pontos em vermelho a classe negativa. Perceba na Figura 2b que todos os hiperplanos representados separam corretamente os dados, porém nosso objetivo será encontrar o hiperplano que melhor separa esses dados, o qual está representado na Figura 3a pela cor violeta. Logo, desejamos encontrar o hiperplano que possibilita a maior faixa que não contém nenhum dado, pois caso a faixa seja muito estreita pequenas perturbações no hiperplano ou no conjunto de dados podem resultar uma classificação incorreta.



(a) Dados de treinamento. (b) Hiperplanos separadores.

Figura 2: Conjunto de Dados e Hiperplanos.
Fonte: Krulikovski [5]



(a) Hiperplano ótimo. (b) Máxima margem.

Figura 3: Hiperplano Ótimo.
Fonte: Krulikovski [5]

Definição 2. Dizemos que os conjuntos $\mathcal{X}^+, \mathcal{X}^- \subset \mathbb{R}^n$ são linearmente separáveis quando existem $w \in \mathbb{R}^n$ e $b \in \mathbb{R}$ tais que $w^T x + b > 0$ para todo $x \in \mathcal{X}^+$ e $w^T x + b < 0$ para todo $x \in \mathcal{X}^-$. O hiperplano $\mathcal{H}(w, b)$ é chamado hiperplano separador dos conjuntos $\mathcal{X}^+$ e $\mathcal{X}^-$.

Lema 1. *Suponha que os conjuntos $\mathcal{X}^+, \mathcal{X}^- \subset \mathbb{R}^n$ são finitos e linearmente separáveis, com hiperplano separador $\mathcal{H}(w, b)$. Então, existem $\overline{w} \in \mathbb{R}^n$ e $\overline{b} \in \mathbb{R}$ tais que $\mathcal{H}(w, b)$ pode ser descrito por*

$$\bar{w}^T x + \bar{b} = 0,$$

satisfazendo

$$\bar{w}^T x + \bar{b} \geq 1, \text{ para todo } x \in \mathcal{X}^+, \tag{1}$$

$$\bar{w}^T x + \bar{b} \leq -1, \text{ para todo } x \in \mathcal{X}^-. \tag{2}$$

Demonstração. Pela Definição 2, temos que existem $w \in \mathbb{R}^n$ e $b \in \mathbb{R}$ tais que

$$w^T x + b > 0, \text{ para todo } x \in \mathcal{X}^+,$$
$$w^T x + b < 0, \text{ para todo } x \in \mathcal{X}^-.$$

Como $\mathcal{X}^+ \cup \mathcal{X}^-$ é um conjunto finito, podemos definir

$$\gamma := \min_{x \in \mathcal{X}^+ \cup \mathcal{X}^-} |w^T x + b| > 0.$$

Portanto, para todo $x \in \mathcal{X}^+ \cup \mathcal{X}^-$, $\gamma \leq |w^T x + b|$ e consequentemente, $\dfrac{|w^T x + b|}{\gamma} \geq 1$. Assim, para $x \in \mathcal{X}^+$ temos

$$\frac{w^T x + b}{\gamma} = \frac{|w^T x + b|}{\gamma} \geq 1,$$

e para $x \in \mathcal{X}^-$, temos

$$-\frac{w^T x + b}{\gamma} = \frac{|w^T x + b|}{\gamma} \leq 1.$$

Logo, definindo $\bar{w} := \dfrac{w}{\gamma}$ e $\bar{b} := \dfrac{b}{\gamma}$, obtemos as desigualdades (1) e (2).

□

A partir deste Lema temos que $\mathcal{H}^+ := \{x \in \mathbb{R}^n \mid w^T x + b \geq 1\}$ e $\mathcal{H}^- := \{x \in \mathbb{R}^n \mid w^T x + b \leq -1\}$ são os hiperplanos que definem a faixa que separa os conjuntos $\mathcal{X}^+$ e $\mathcal{X}^-$.

Proposição 1. *A projeção ortogonal de um vetor $\bar{x} \in \mathbb{R}^n$ sobre um hiperplano afim $\mathcal{H}(w, b)$, é dada por*

$$\text{proj}_{\mathcal{H}}(\bar{x}) = \bar{x} - \frac{w^T \bar{x} + b}{w^T w} w.$$

Além disso, a $\text{proj}_{\mathcal{H}}(\bar{x})$ satisfaz a menor distância.

Demonstração. Sejam $w \in \mathbb{R}^n$ o vetor normal ao hiperplano $\mathcal{H}(w, b)$, $\bar{z} \in \mathcal{H}(w, b)$ e x^* a projeção ortogonal de $\bar{x}$ sobre $\mathcal{H}(w, b)$. Assim, temos que

$$w^T (x^* - \bar{z}) = 0 \tag{3}$$

e

$$\bar{x} - x^* = \lambda w \Longrightarrow x^* = \bar{x} - \lambda w. \tag{4}$$

Substituindo (4) em (3), obtemos

$$\begin{aligned} 0 &= w^T (\bar{x} - \lambda w - \bar{z}) \\ &= w^T \bar{x} - \lambda w^T w - w^T \bar{z}. \end{aligned}$$

Resolvendo para λ, temos

$$\lambda = \frac{w^T \bar{x} - w^T \bar{z}}{w^T w} = \frac{w^T \bar{x} - b}{w^T w}.$$

Portanto,

$$x^* = \bar{x} - \frac{w^T\bar{x} - b}{w^T w}w.$$

Ademais, vamos provar que

$$\|\bar{x} - x^*\|_2 \leq \|\bar{x} - x\|_2,$$

para todo $x \in \mathcal{H}(w, b)$.

De fato, tomando $u = \bar{x} - x^*$ e $v = x^* - x$ observe que

$$\begin{aligned} u^T v &= (\bar{x} - (\bar{x} + \lambda w)^T(x^* - x) \\ &= -\lambda w^T(x^* - x) \\ &= \lambda(-w^T x^* + w^T x) \\ &= \lambda(b - b) \\ &= 0. \end{aligned}$$

Assim, temos

$$\|u + v\|^2 = \|u\|^2 + 2u^T v + \|v\|^2 = \|u\|^2 + \|v\|^2,$$

ou seja,

$$\|\bar{x} - x\|^2 = \|\bar{x} - x^*\|^2 + \|x^* - x\|^2.$$

□

Utilizando a Proposição 1 podemos demonstrar o Lema seguinte, o qual estabelece a largura da faixa entre os hiperplanos separadores $\mathcal{H}^+$ e $\mathcal{H}^-$.

Lema 2. *A distância entre os hiperplanos $\mathcal{H}^+$ e $\mathcal{H}^-$ é dada por $d = \dfrac{2}{\|w\|}$.*

Demonstração. Considere um ponto arbitrário $\bar{x} \in \mathcal{H}^+$ e seja $x^* \in \mathcal{H}^-$ a projeção ortogonal de $\bar{x}$ sobre $\mathcal{H}^-$. Usando a Proposição 1, temos

$$x^* = \text{proj}_{\mathcal{H}^-}(\bar{x}) = \bar{x} - \frac{w^T\bar{x} + b + 1}{\|w\|^2}w. \tag{5}$$

Além disso, a distância entre dois conjuntos é definida por

$$d(\mathcal{H}^+, \mathcal{H}^-) := \inf\{\|x^+ - x^-\|, \text{ com } x^+ \in \mathcal{H}^+ \text{ e } x^- \in \mathcal{H}^-\},$$

e como a $\text{proj}_{\mathcal{H}^-}(\bar{x})$ satisfaz a menor distância entre $\bar{x}$ e $\mathcal{H}^-$, e $\mathcal{H}^+$ é paralelo a $\mathcal{H}^-$, temos que

$$d(\mathcal{H}^+, \mathcal{H}^-) = \|\bar{x} - x^*\|. \tag{6}$$

Substituindo (6) em (5) obtemos

$$\begin{aligned} d(\mathcal{H}^+, \mathcal{H}^-) &= \|\bar{x} - x^*\| \\ &= \|\bar{x} - \bar{x} + \frac{w^T\bar{x} + b + 1}{\|w\|^2} w\| \\ &= \frac{|w^T\bar{x} + b + 1|}{\|w\|^2}\|w\| \\ &= \frac{|w^T\bar{x} + b + 1|}{\|w\|}, \end{aligned}$$

e como $\bar{x} \in \mathcal{H}^+$, $w^T\bar{x} + b = 1$ implica

$$w^T\bar{x} = 1 - b,$$

concluindo que

$$\begin{aligned} d(\mathcal{H}^+, \mathcal{H}^-) &= \frac{|1 - b + b + 1|}{\|w\|} \\ &= \frac{2}{\|w\|}. \end{aligned}$$

□

1.4 Formulação do Problema de Classificação

Portanto, encontrar o hiperplano que melhor separa os dados implica maximizar a largura da margem, isto é, maximizar $d = \frac{2}{\|w\|}$. Isso equivale a minimizar seu inverso $\frac{1}{2}\|w\|$ ou ainda minimizar $\frac{1}{2}\|w\|^2$. De fato, seja $w^* = \arg\max \frac{2}{\|w\|}$. Então, para todo $w \in \mathbb{R}^n$,

$$\frac{2}{\|w^*\|} \geq \frac{2}{\|w\|}$$

implica

$$\|w\| \geq \|w^*\|.$$

Logo, $w^* = \arg\min \|w\|$.

Além disso, como $\|.\|$ é não negativa, temos que

$$\|w\| \geq \|w^*\| \Longrightarrow \|w\|^2 \geq \|w^*\|^2 \Longrightarrow \frac{1}{2}\|w\|^2 \geq \frac{1}{2}\|w^*\|^2.$$

Portanto,

$$\arg\max \frac{2}{\|w\|} = \arg\min \frac{1}{2}\|w\|^2.$$

Ademais, como a faixa deve separar os dados das duas classes, as seguintes restrições devem ser satisfeitas

$$\begin{aligned} w^T x + b &\geq 1, \text{ para todo } x \in \mathcal{X}^+, \\ w^T x + b &\leq -1, \text{ para todo } x \in \mathcal{X}^-. \end{aligned}$$

Considerando que $\mathcal{X}^+ = \{x^i \in \mathcal{X} \mid y_i = 1\}$ e $\mathcal{X}^- = \{x^i \in \mathcal{X} \mid y_i = -1\}$, podemos reescrever as restrições acima de uma forma mais compacta

$$y_i(w^T x^i + b) \geq 1, \quad i = 1, \ldots, m.$$

Portanto, o problema de encontrar o hiperplano ótimo pode ser formulado da seguinte maneira

$$\begin{aligned} \min_{w,b} \quad & \frac{1}{2}\|w\|^2 \\ \text{s.a.} \quad & y_i(w^T x^i + b) \geq 1, \quad i = 1, \ldots, m, \end{aligned} \tag{7}$$

em que $w \in \mathbb{R}^n$ e $b \in \mathbb{R}$.

O problema (7) possui função objetivo

$$f(w, b) = \frac{1}{2}\|w\|^2$$

convexa, e restrições lineares

$$g_i(w, b) = 1 - y_i(w^T x^i + b) \leq 0, \quad i = 1, \ldots, m,$$

em que a função $g : \mathbb{R}^{n+1} \to \mathbb{R}^m$ pode ser escrita da forma

$$g(w, b) = e - (YX^T w + by) \leq 0,$$

com e sendo o vetor cujas m componentes são todas iguais a 1, $Y = \text{diag}(y_i)$, $X =$

$\text{diag}(x^i)$, $y^T = [y_i \ \ldots \ y_m]$, $w \in \mathbb{R}^n$ e $b \in \mathbb{R}$.

2 Projetos Futuros

Portanto, o problema de classificação utilizando a técnica de SVM trata-se de um problema de programação quadrática convexa com restrições lineares. Para dar continuidade ao projeto será necessário estudar a teoria de otimização com restrições e a teoria de dualidade, em particular a relacionada ao problema de programação quadrática com restrições lineares. Por fim, pretendemos realizar uma pequena implementação computacional da técnica de Máquinas de Vetores Suporte a um problema de classificação. Para tanto, utilizaremos a linguagem de programação `Julia`, sobre a qual também será preciso estudar e se aperfeiçoar.

Referências

[1] Peter Deisenroth, A. Aldo Faisal e Cheng Soon Ong. *Mathematics for Machine Learning*. Boston: Cambridge University Press, 2019.

[2] Ana Friedlander. *Elementos de Programação Não-Linear*. Unicamp, 1994.

[3] Alexey Izmailov e Mikhail Solodov. *Otimização. Condições de Otimalidade. Elementos de Análise Convexa e de Dualidade*. 3ª. Vol. I. IMPA, 2014.

[4] Alexey Izmailov e Mikhail Solodov. *Otimização. Métodos Computacionais*. 3ª. Vol. II. IMPA, 2014.

[5] Evelin Heringer Manoel Krulikovski. "Análise Teórica de Máquinas de Vetores Suporte e Aplicação a Classificação de Caracteres". Dissertação de Mestrado em Matemática. Universidade Federal do Paraná, 2017.

[6] Ademir A. Ribeiro e Elizabeth W. Karas. *Otimização Contínua: Aspectos teóricos e computacionais*. Cengage Learning, 2013.