Métodos de Otimização e Máquinas de Vetores Suporte

Qualificação de Trabalho de Conclusão de Curso

Paula Cristina Rohr Ertel*

Orientador: Luiz Rafael dos Santos

Universidade Federal de Santa Catarina - Campus Blumenau

18 de Novembro de 2019

1 Introdução às Máquinas de Vetores Suporte

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 [7], 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.

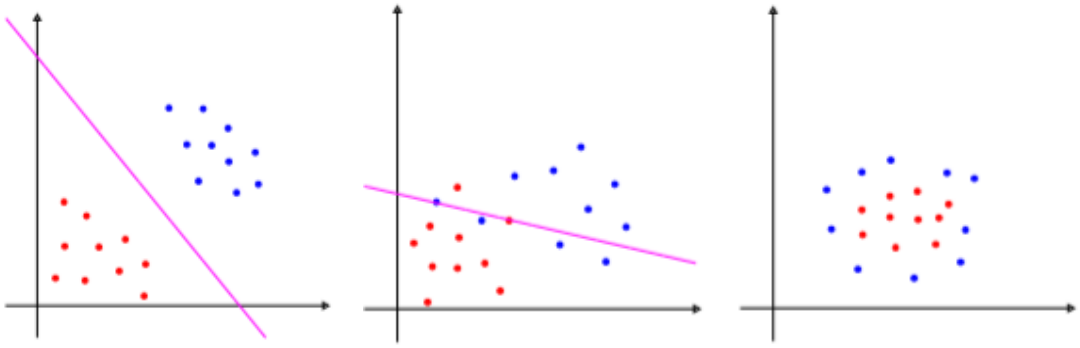
A aprendizagem supervisionada é composta por uma etapa denominada fase de treinamento, na qual é dado um conjunto de treinamento formado por vários dados de entrada e saída que funcionam como exemplos, a partir dos quais a máquina detecta padrões e cria um modelo para deduzir a saída de novos dados. Após essa fase novas entradas são testadas, denominadas conjunto de teste, no intuito de analisar se a máquina está gerando as saídas corretas. Algumas técnicas para aprendizagem de máquina supervisionada são as Máquinas de Vetores Suporte, Regressão Linear, Regressão Logística e Redes Neurais. Enquanto que a *Singular Value Decomposition* (SVD), Clusterização e

*Acadêmica do curso de Licenciatura em Matemática/UFSC-Blumenau

Análise de Componentes Principais [7] são exemplos de técnicas para a aprendizagem não supervisionada.

As Máquinas de Vetores Suporte (SVM, do inglês *Support Vector Machine*), conforme mencionado por Krulikovski [7], são indicadas 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. Segundo Krulikovski [7], 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 são o reconhecimento facial, leitura de placas automotivas e detecção de spam.

Agora, vamos formular matematicamente o problema de classificação utilizando as Máquinas de Vetores Suporte. Para tanto, 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 [7]

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 $\mathcal{H}(w, b) = \{x \in \mathbb{R}^n \mid w^T x + b = 0\}$.

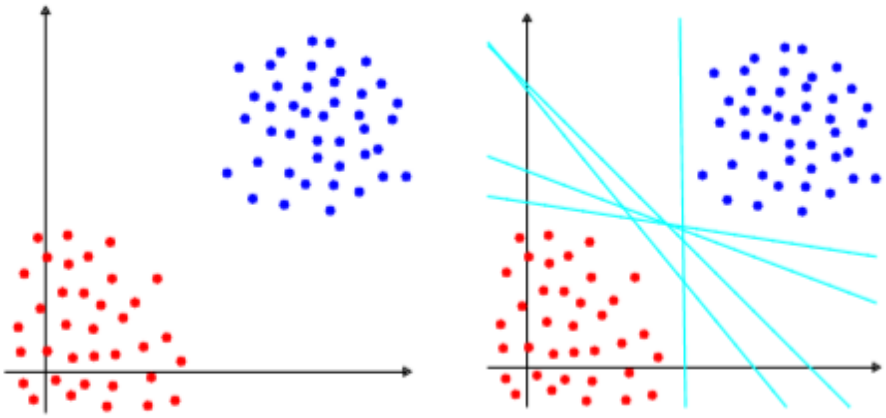
O hiperplano $\mathcal{H}(w, b)$ divide o espaço $\mathbb{R}^n$ em dois semiespaços, dados por

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

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.

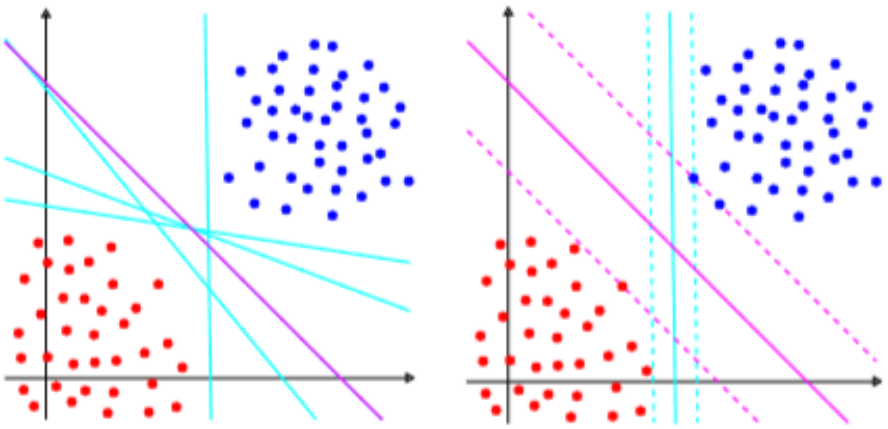
Definição 2. Os conjuntos $\mathcal{X}^+, \mathcal{X}^- \subset \mathbb{R}^n$ são ditos linearmente separáveis quando existem $w \in \mathbb{R}^n$ e $b \in \mathbb{R}$ tais que $w^T x + b > 0$ para todo $x \in \mathcal{X}^+$ e $w^T x + b < 0$ para todo $x \in \mathcal{X}^-$. O hiperplano $\mathcal{H}(w,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



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

Figura 2: Conjunto de Dados e Hiperplanos.
Fonte: Krulikovski [7]



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

Figura 3: Hiperplano Ótimo.
Fonte: Krulikovski [7]

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

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

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

□

A partir do Lema 1 temos que $\mathcal{H}^+ := \{x \in \mathbb{R}^n \mid w^T x + b = 1\}$ e $\mathcal{H}^- := \{x \in \mathbb{R}^n \mid w^T x + b = -1\}$ 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

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

Resolvendo para λ e como $w^T\bar{z} = -b$, 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 a $\text{proj}_{\mathcal{H}}(\bar{x})$ satisfaz a menor distância, isto é,

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

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

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

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

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 2, 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* $\text{dist}(\mathcal{H}^+, \mathcal{H}^-) = \dfrac{2}{\|w\|}$.

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

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

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

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

Substituindo (5) em (6) obtemos

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

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

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

concluindo que

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

□

1.1 Formulação Matemática do Problema de Classificação

Encontrar o hiperplano que melhor separa os dados implica maximizar a largura da margem, isto é, maximizar $\text{dist}(\mathcal{H}^+, \mathcal{H}^-) = \dfrac{2}{\|w\|}$. Isso equivale a minimizar seu inverso $\dfrac{1}{2}\|w\|$ ou ainda minimizar $\dfrac{1}{2}\|w\|^2$. De fato, seja $w^* = \arg\max \dfrac{2}{\|w\|}$. Então, para todo $w \in \mathbb{R}^n$,

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

implica

$$\|w\| \geq \|w^*\|. \tag{7}$$

Logo, $w^* = \arg\min \|w\|$. Além disso, como $\|\cdot\|$ é não negativa, elevando ao quadrado ambos os lados da desigualdade (7) temos que $\|w\|^2 \geq \|w^*\|^2$ implica

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

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

$$\begin{aligned} \min_{w,b} \quad & \frac{1}{2}\|w\|^2 \\ \text{s.a.} \quad & y_i(w^T x^i + b) \geq 1, \quad i = 1, \ldots, m, \end{aligned} \tag{8}$$

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

O problema (8) 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, $Y = \text{diag}(y_i)$, $X = \text{diag}(x^i)$, $y^T = [y_1 \ \ldots \ y_m]$, $w \in \mathbb{R}^n$ e $b \in \mathbb{R}$.

2 Objetivos

Este trabalho tem os seguintes objetivos:

- Resumir a teoria de otimização com e sem restrições.
- Estudar os problemas de otimização que surgem do Aprendizado de Máquina.
- Desenvolver um estudo teórico, do ponto de vista matemático, das Máquinas de Vetores Suporte.
- Explorar a linguagem de programação `Julia` com a implementação de métodos de otimização.
- Estudar a técnica de Máquinas de Vetores Suporte aplicada ao problema de classificação.
- Realizar uma implementação computacional da técnica de SVM aplicada a um problema de classificação utilizando `Julia`.

3 Metodologia e Resultados Esperados

O desenvolvimento da pesquisa será composto por dois momentos distintos, porém relacionados. O primeiro diz respeito ao estudo dos aspectos teórico-matemáticos dos métodos de otimização relacionados com a Aprendizagem de Máquina, em particular relacionados à técnica de Máquinas de Vetores Suporte. O segundo se refere a implementação computacional dos métodos de otimização e testes em bibliotecas de problemas de Aprendizagem de Máquina.

A análise matemática da pesquisa será feita através do estudo das ferramentas usuais da área de Métodos Computacionais de Otimização, tais como Análise Numérica e Otimização Linear: convergência de algoritmos, condições para convergência, entre outros. Até o momento realizou-se uma revisão dos principais aspectos de Álgebra Linear e do Cálculo de várias variáveis relacionados ao assunto, assim como proposto por Deisenroth, Faisal e Ong [2], e desenvolveu-se um estudo das condições de otimalidade para problemas de otimização irrestrita baseado em Ribeiro e Karas [8].

Para dar continuidade ao desenvolvimento da pesquisa será necessário estudar as condições de otimalidade para problemas com restrições, haja vista que, como visto, o problema (8) é um problema de programação quadrática convexa com restrições lineares. Em vista disso, pretende-se utilizar como referência Friedlander [3], Izmailov e Solodov [5, 6] e Ribeiro e Karas [8] para estudar a teoria de otimização com restrições, programação quadrática e dualidade.

Para uma abordagem completa acerca das técnicas de otimização relacionadas ao problema de Aprendizagem de Máquina será utilizado Witten, Frank e Hall [9], e o estudo específico acerca dos aspectos teóricos-matemáticos da técnica de Máquinas de Vetores Suporte será desenvolvido a partir da dissertação de Krulikovski [7].

Por fim, pretende-se realizar a implementação computacional, a qual consiste em traduzir os métodos escolhidos e suas variantes propostos para uma linguagem de programação e o teste dos mesmos na biblioteca de problemas CUTEst [4] e outras bibliotecas com problemas relacionados à Aprendizagem de Máquina. Para tanto, neste projeto será utilizada a linguagem de programação `Julia` [1].

Referências

[1] Jeff Bezanson et al. "Julia: A Fresh Approach to Numerical Computing". Em: *SIAM Rev.* 59.1 (fev. de 2017), pp. 65–98.

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

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

[4] Nicholas I M Gould, Dominique Orban e Phillippe L Toint. "CUTEst: a constrained and unconstrained testing environment with safe threads for mathematical optimization". Em: *Comput. Optim. Appl.* 60.3 (2015), pp. 545–557.

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

[6] Alexey Izmailov e Mikhail Solodov. *Otimização. Métodos Computacionais*. 3ª ed. Vol. II. Rio de Janeiro: IMPA, 2014.

[7] 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.

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

[9] Ian H Witten, Eibe Frank e Mark A Hall, ed. *Data Mining: Practical Machine Learning Tools and Techniques*. 3ª ed. Boston: Morgan Kaufmann (Elsevier), 2011.