"Para o prazer e para ser feliz, é que é preciso a gente saber tudo, formar alma, na consciência; para penar, não se carece."

(Guimarães Rosa in Grande Sertão: Veredas, 1956)

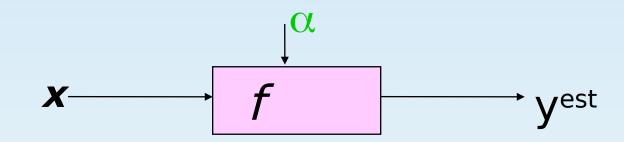


## Introdução à Inteligência Artificial

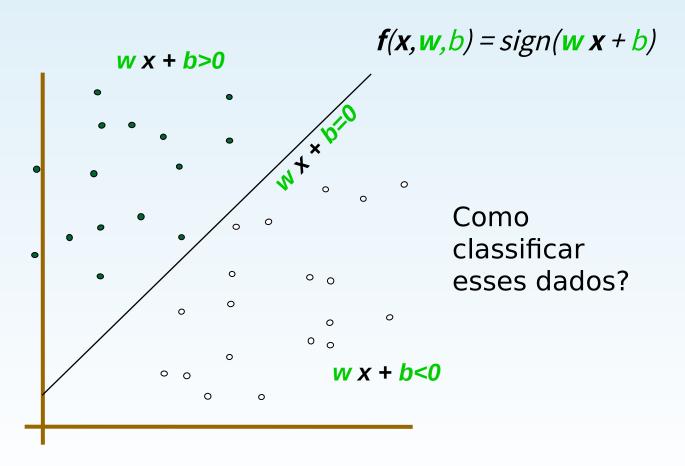
#### Roteiro da aula:

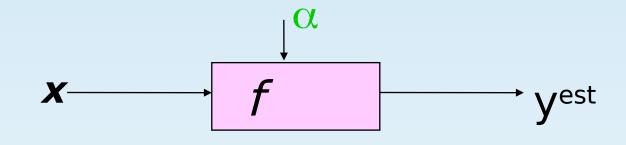
 Máquinas de Vetores de Suporte (SVM)

Máquinas de Vetores de Suporte. Material baseado, com ilustrações, no Cap. 9 de "Introduction to Statistical Learning", James, Witten, Hastie & Tibshirani, Springer, 2017.

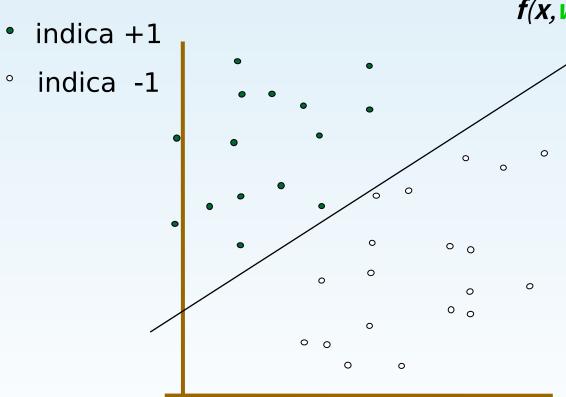


- indica +1
- ° indica -1

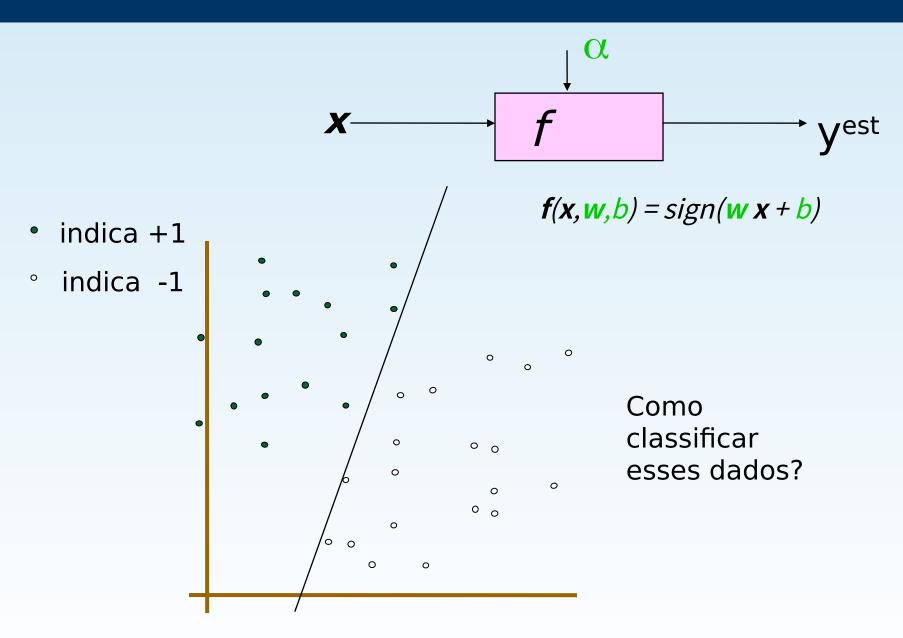


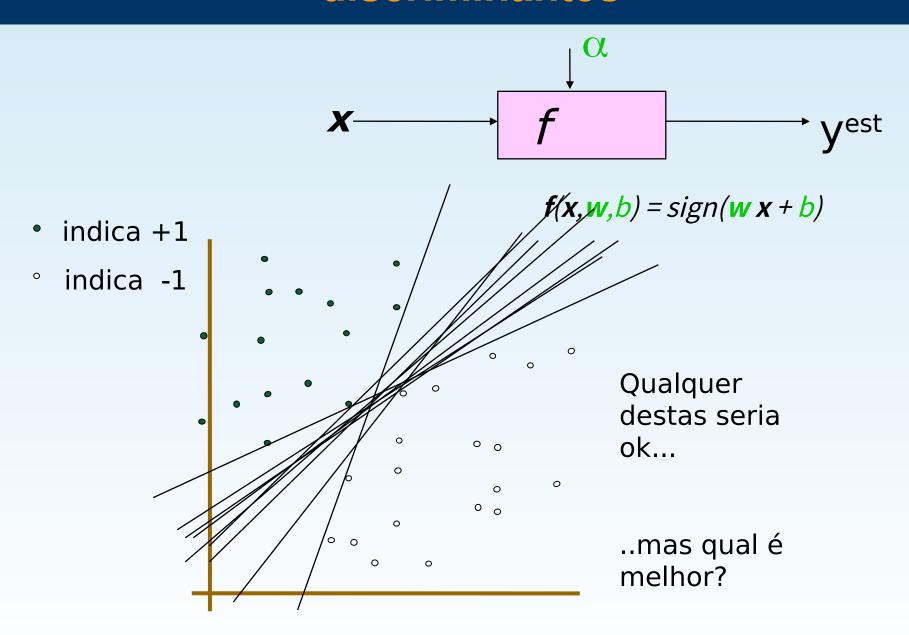


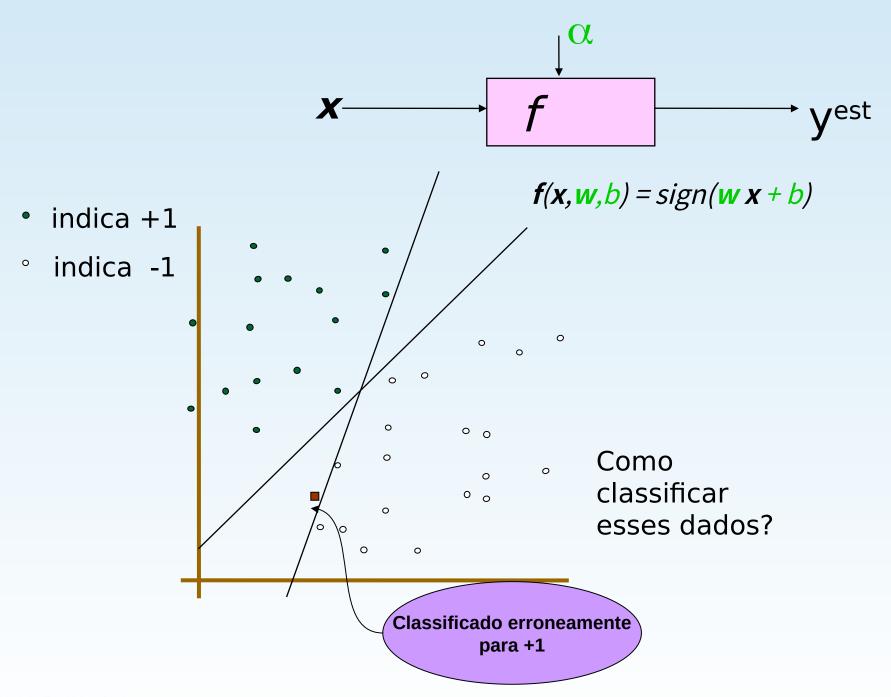
 $f(x, \mathbf{w}, b) = sign(\mathbf{w} x + b)$ 

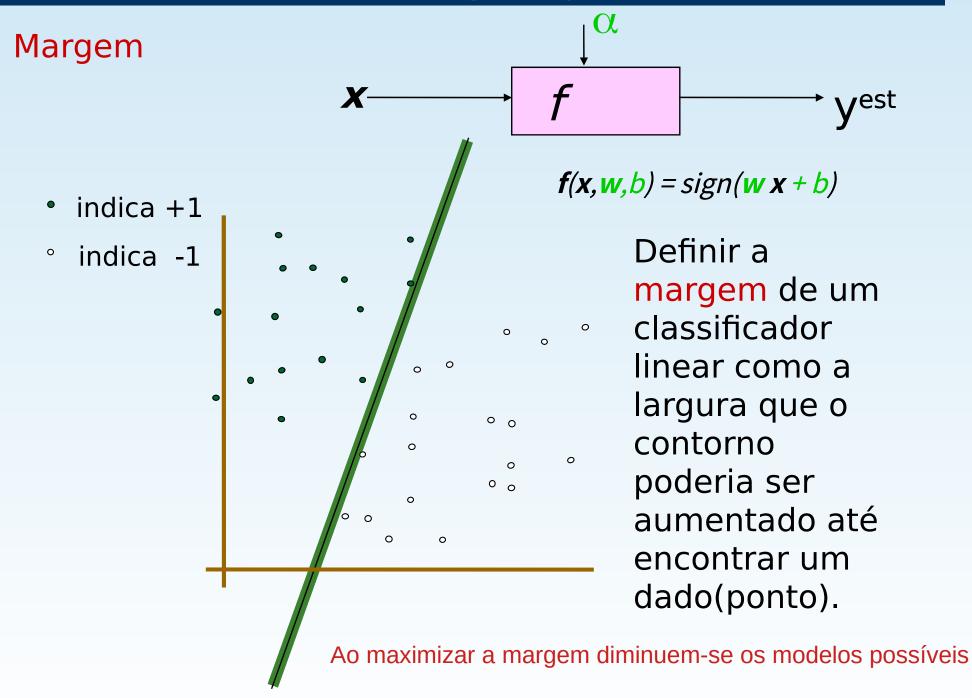


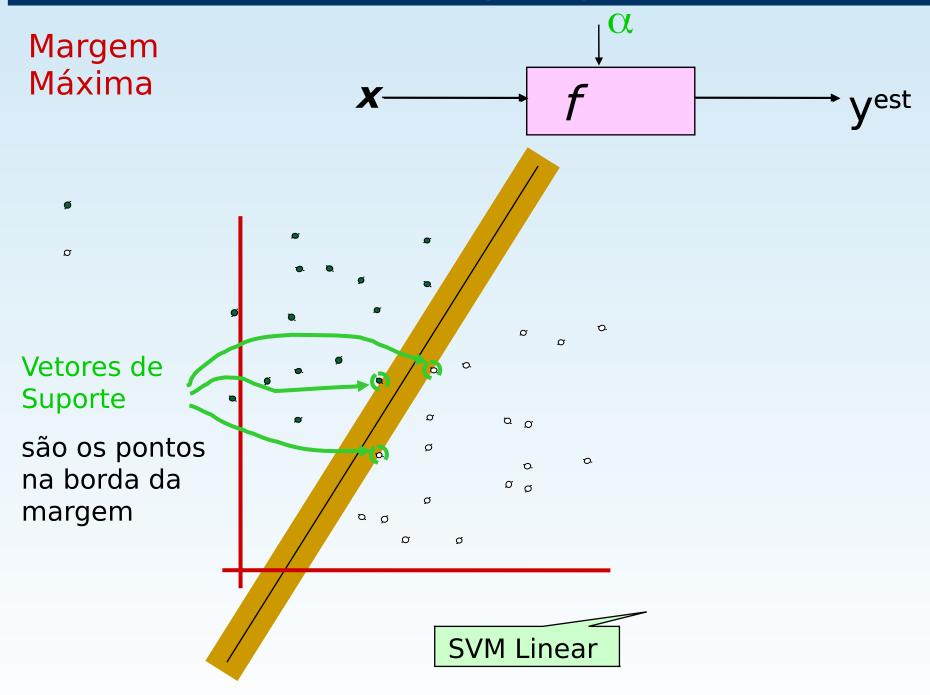
Como classificar esses dados?

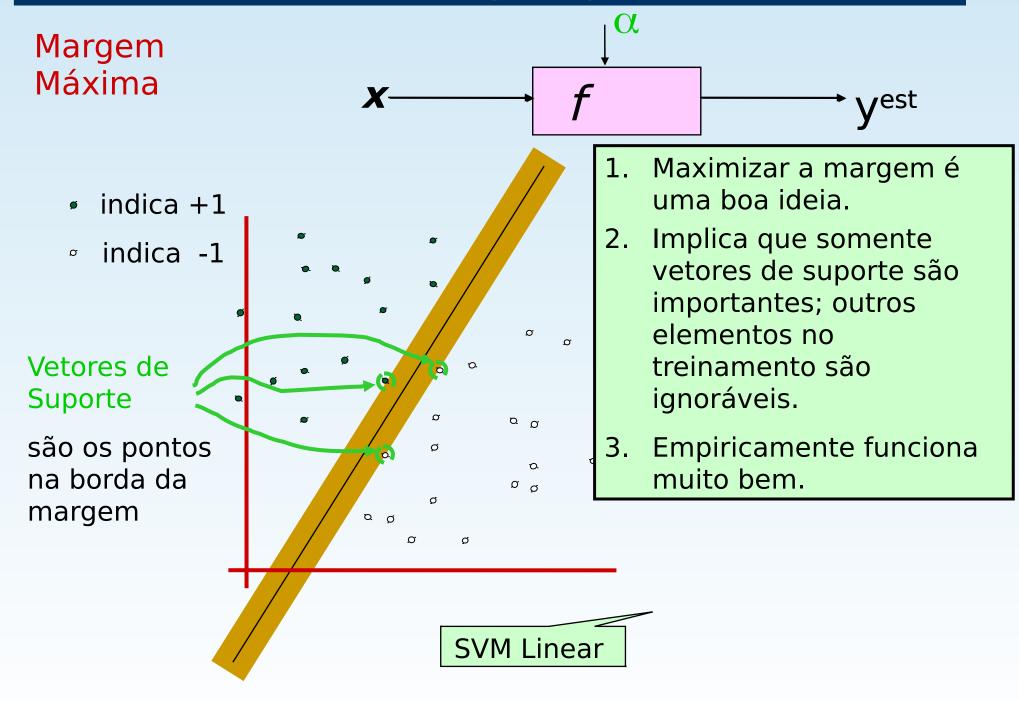












#### **SVM Linear algoritmo**

Meta: 1) Corretamente classificar todos os dados de treinamento

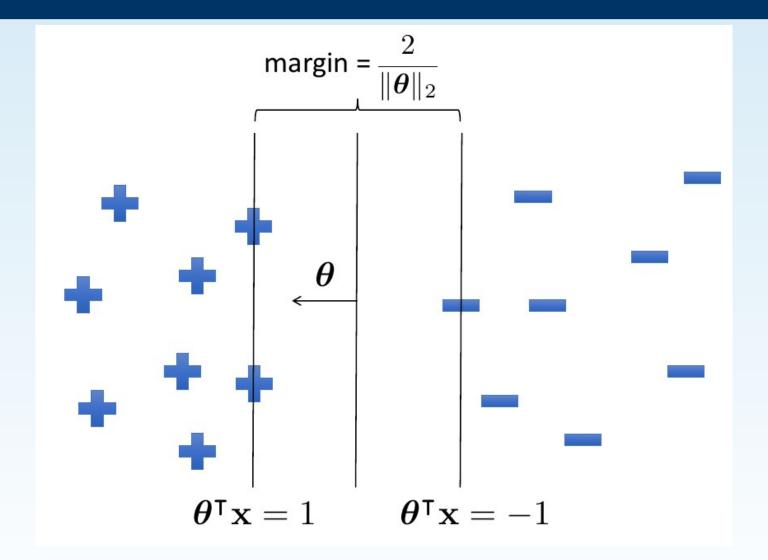
$$wx_i + b \ge 1$$
 if  $y_i = +1$   
 $wx_i + b \le 1$  if  $y_i = -1$   
 $y_i(wx_i + b) \ge 1$  for all i

2) Maximizar a Margem 
$$M = \frac{2}{|w|}$$
 mesmo que minimizar  $\frac{1}{2} w^t w$ 

- Podemos formular um Problema de Otimização Quadrática e resolver para w e b
- Minimizar  $\Phi(w) = \frac{1}{2} w^t w$

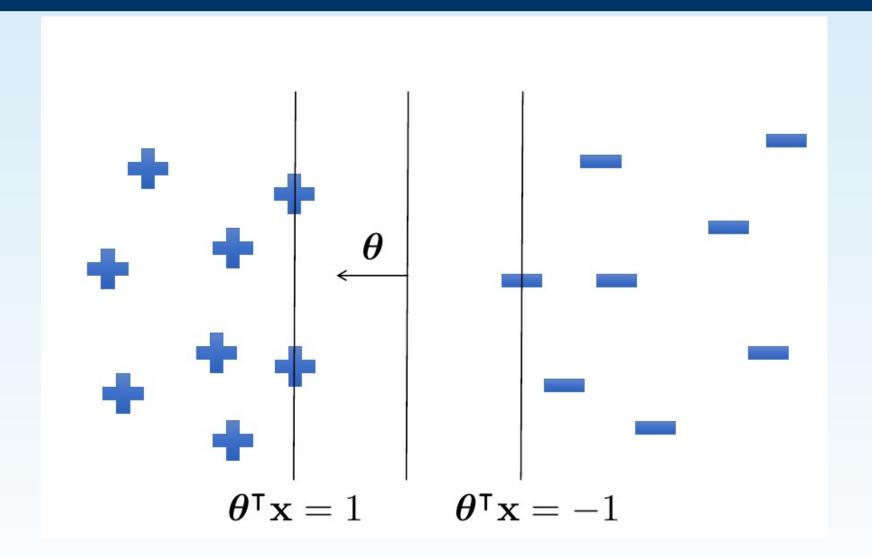
sujeito a 
$$y_i(wx_i + b) \ge 1$$
  $\forall i$ 

## Hiperplano Margem Máxima



imagem/slide: E.Eaton

## Vetores de Suporte



imagem/slide: E.Eaton

## Hiperplano Separador

find w and  $W_0$  such that

$$\mathbf{w}^T \mathbf{x}^t + \mathbf{W}_0 \ge +1 \text{ for } \mathbf{r}^t = +1$$

$${\bf w}^T {\bf x}^t + {\bf W}_0 \le +1 \text{ for } {\bf r}^t = -1$$

which can be rewritten as

$$r^t (\mathbf{w}^T \mathbf{x}^t + \mathbf{W}_0) \ge +1$$

#### (Cortes and Vapnik, 1995; Vapnik, 1995)

Lecture Notes for E Alpaydın 2010 Introduction to Machine Learning 2e © The MIT Press (V1.0)

## Margem

- Distância do discriminante às instâncias mais próximas em ambos os lados
- Distância de x para o hiperplano é

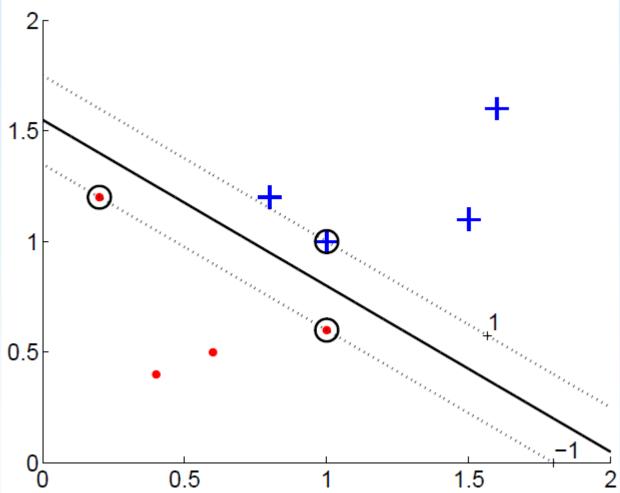
$$\frac{\left|\mathbf{w}^{T}\mathbf{x}^{t} + \mathbf{W}_{0}\right|}{\|\mathbf{w}\|}$$

- Requer-se  $\frac{r^t(\mathbf{w}^T\mathbf{x}^t + \mathbf{w}_0)}{\|\mathbf{w}\|} \ge \rho, \forall t$
- Para uma solução única, fixar  $\rho || \mathbf{w} || = 1$ , e para margem máxima

$$\min \frac{1}{2} \|\mathbf{w}\|^2$$
 subject to  $r^t (\mathbf{w}^T \mathbf{x}^t + \mathbf{w}_0) \ge +1, \forall t$ 

Lecture Notes for E Alpaydın 2010 Introduction to Machine Learning 2e © The MIT Press (V1.0)

Margem



$$\min \frac{1}{2} \|\mathbf{w}\|^2$$
 subject to  $r^t (\mathbf{w}^T \mathbf{x}^t + \mathbf{w}_0) \ge +1, \forall t$ 

$$\mathcal{L}_{p} = \frac{1}{2} \|\mathbf{w}\|^{2} - \sum_{t=1}^{N} \alpha^{t} \left[ r^{t} \left( \mathbf{w}^{T} \mathbf{x}^{t} + \mathbf{w}_{0} \right) - 1 \right]$$

$$= \frac{1}{2} \|\mathbf{w}\|^2 - \sum_{t=1}^{N} \alpha^t r^t (\mathbf{w}^T \mathbf{x}^t + \mathbf{w}_0) + \sum_{t=1}^{N} \alpha^t$$

$$\frac{\partial \mathcal{L}_p}{\partial \mathbf{w}} = 0 \Rightarrow \mathbf{w} = \sum_{t=1}^N \alpha^t r^t \mathbf{x}^t$$

$$\frac{\partial \mathcal{L}_{p}}{\partial W_{0}} = 0 \Rightarrow \sum_{t=1}^{N} \alpha^{t} r^{t} = 0$$

Lecture Notes for E Alpaydın 2010 Introduction to Machine Learning 2e © The MIT Press (V1.0)

$$L_{d} = \frac{1}{2} (\mathbf{w}^{T} \mathbf{w}) - \mathbf{w}^{T} \sum_{t} \alpha^{t} r^{t} \mathbf{x}^{t} - W_{0} \sum_{t} \alpha^{t} r^{t} + \sum_{t} \alpha^{t}$$

$$= -\frac{1}{2} (\mathbf{w}^{T} \mathbf{w}) + \sum_{t} \alpha^{t}$$

$$= -\frac{1}{2} \sum_{t} \sum_{s} \alpha^{t} \alpha^{s} r^{t} r^{s} (\mathbf{x}^{t})^{T} \mathbf{x}^{s} + \sum_{t} \alpha^{t}$$
subject to  $\sum_{t} \alpha^{t} r^{t} = 0$  and  $\alpha^{t} \ge 0$ ,  $\forall t$ 

Muitos  $\alpha^t$  são 0 e somente um pequeno número tem  $\alpha^t > 0$ ; eles são os vetores de suporte

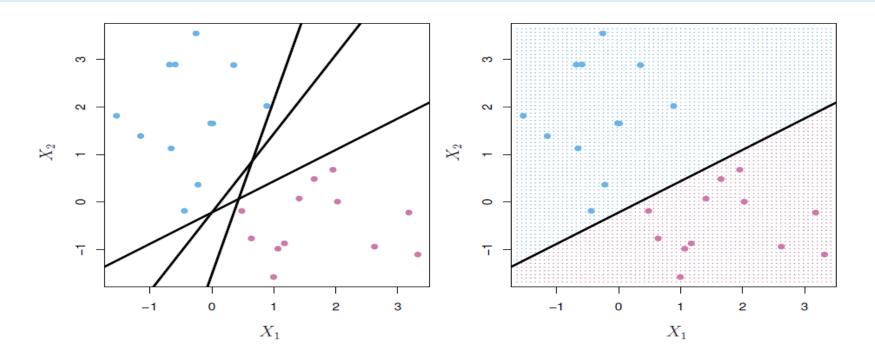
Lecture Notes for E Alpaydın 2010 Introduction to Machine Learning 2e © The MIT Press (V1.0)

■ Imagine uma situação onde tem-se um problema de classificação com duas classes e dois preditores X1 e X2.

- Imagine uma situação onde tem-se um problema de classificação com duas classes e dois preditores X1 e X2.
- Suponha que as duas classes são "separáveis linearmente" i.e. pode-se desenhar uma reta onde todos os pontos de um lado pertencem à primeira classe, e pontos do outro lado à segunda classe.

- Imagine uma situação onde tem-se um problema de classificação com duas classes e dois preditores X1 e X2.
- Suponha que as duas classes são "separáveis linearmente" i.e. pode-se desenhar uma reta onde todos os pontos de um lado pertencem à primeira classe, e pontos do outro lado à segunda classe.
- Então uma abordagem direta é encontrar uma linha reta que forneça a maior separação entre as classes i.e. os pontos estão o mais distante da linha quanto possível.

- Imagine uma situação onde tem-se um problema de classificação com duas classes e dois preditores X1 e X2.
- Suponha que as duas classes são "separáveis linearmente" i.e. pode-se desenhar uma reta onde todos os pontos de um lado pertencem à primeira classe, e pontos do outro lado à segunda classe.
- Então uma abordagem direta é encontrar uma linha reta que forneça a maior separação entre as classes i.e. os pontos estão o mais distante da linha quanto possível.
- Esta é a ideia básica de um classificador vetor de suporte.

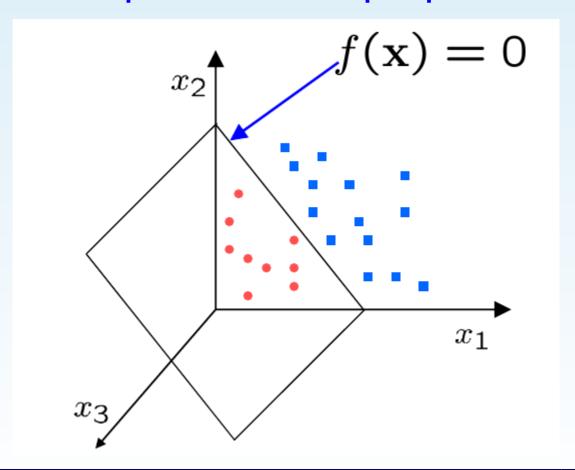


- If  $f(X) = \beta_0 + \beta_1 X_1 + \cdots + \beta_p X_p$ , then f(X) > 0 for points on one side of the hyperplane, and f(X) < 0 for points on the other.
- If we code the colored points as  $Y_i = +1$  for blue, say, and  $Y_i = -1$  for mauve, then if  $Y_i \cdot f(X_i) > 0$  for all i, f(X) = 0 defines a separating hyperplane.

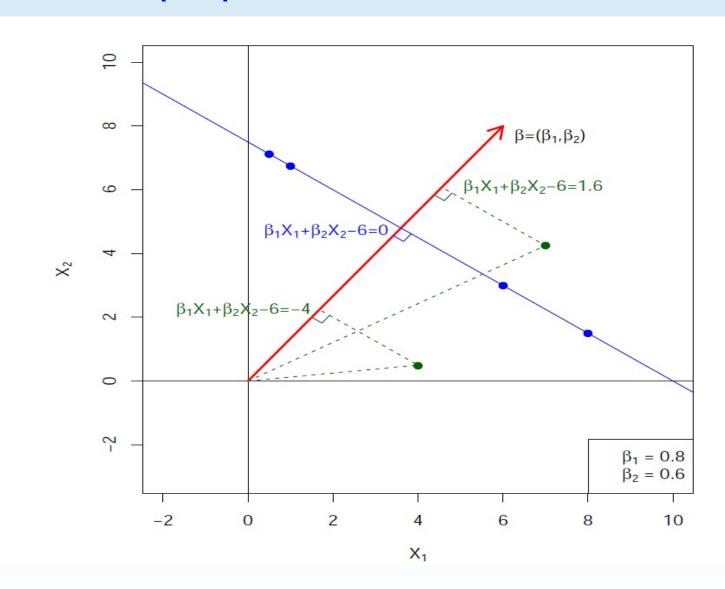
#### Equação de um Hiperplano

$$\beta_0 + \beta_1 X_1 + \beta_2 X_2 + \ldots + \beta_p X_p = 0$$

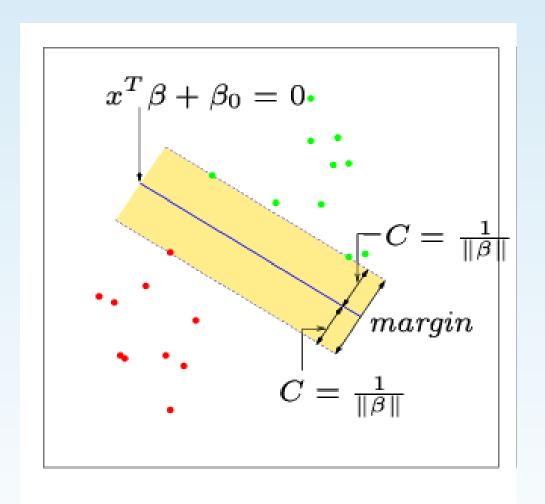
#### Exemplo de um Hiperplano



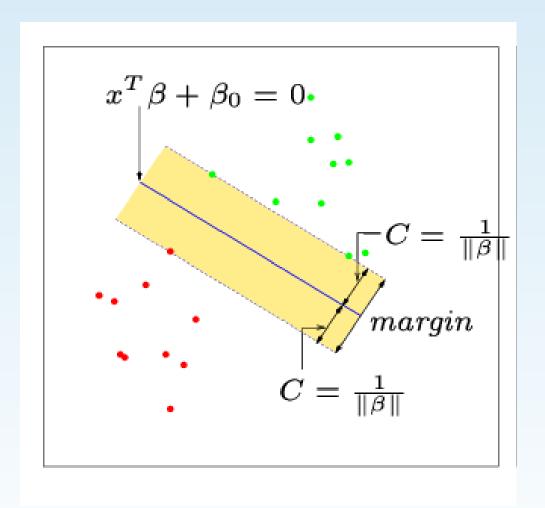
### Hiperplano em 2 dimensões



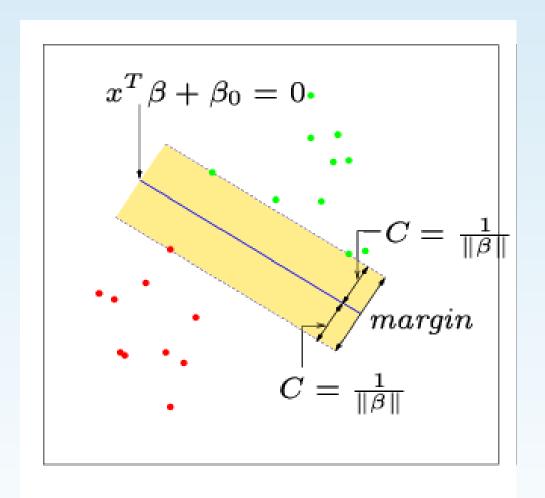
C é a distância perpendicular mínima entre cada ponto e a reta separadora.



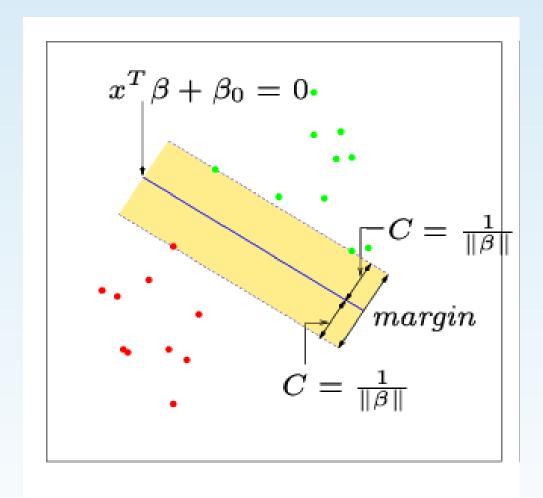
- C é a distância perpendicular mínima entre cada ponto e a reta separadora.
- Encontramos a reta que maximiza C.



- C é a distância perpendicular mínima entre cada ponto e a reta separadora.
- Encontramos a reta que maximiza C.
- Essa reta é chamada de "hiperplano separador ótimo".



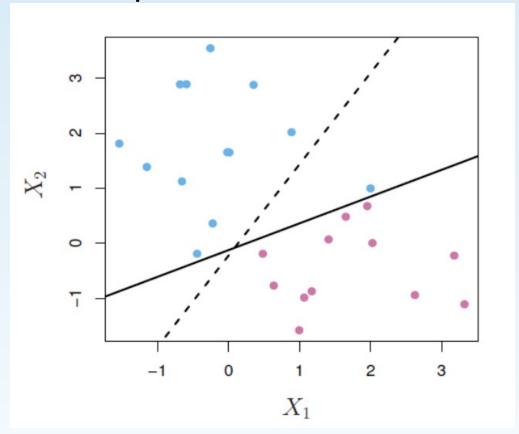
- C é a distância perpendicular mínima entre cada ponto e a reta separadora.
- Encontramos a reta que maximiza C.
- Essa reta é chamada de "hiperplano separador ótimo"
- A classificação de um ponto depende de qual lado da reta ele fica.

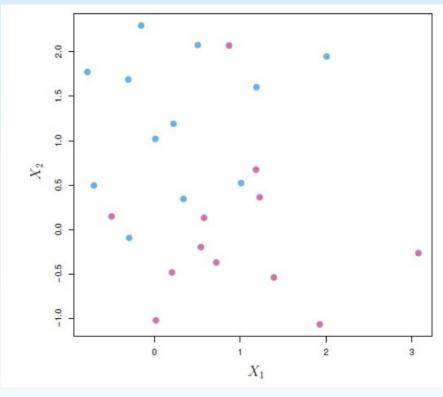


maximize 
$$M$$

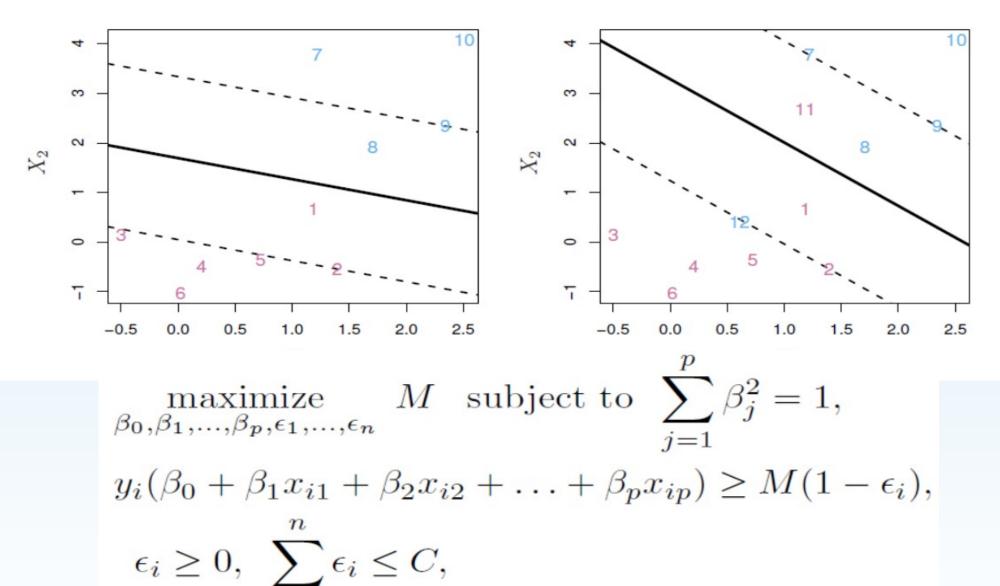
$$\beta_0, \beta_1, \dots, \beta_p$$
subject to  $\sum_{j=1}^p \beta_j^2 = 1$ ,
$$y_i(\beta_0 + \beta_1 x_{i1} + \dots + \beta_p x_{ip}) \ge M$$
for all  $i = 1, \dots, N$ .

Mas, os dados podem ser ruidosos, ou não haver separabilidade entre classes

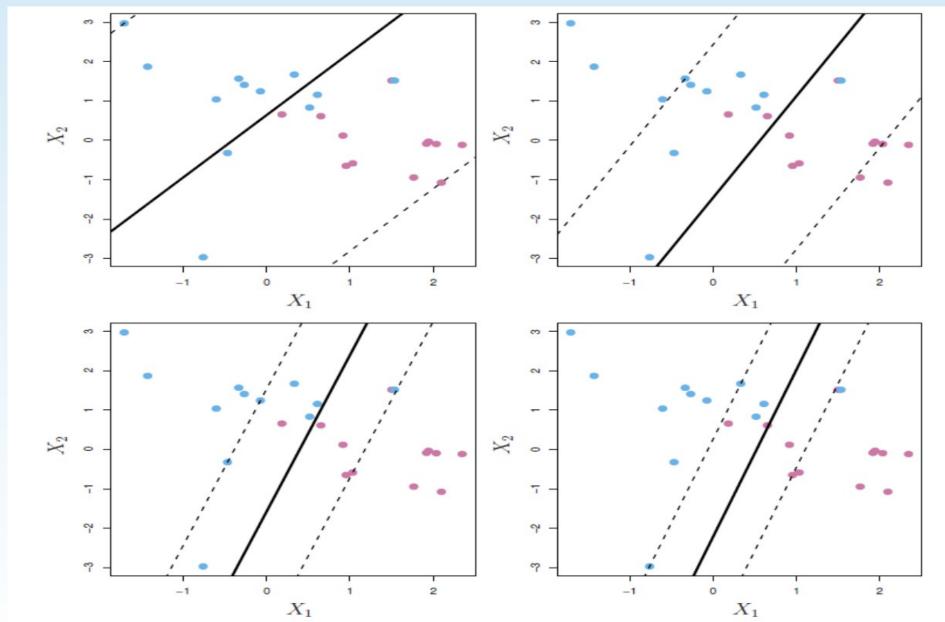




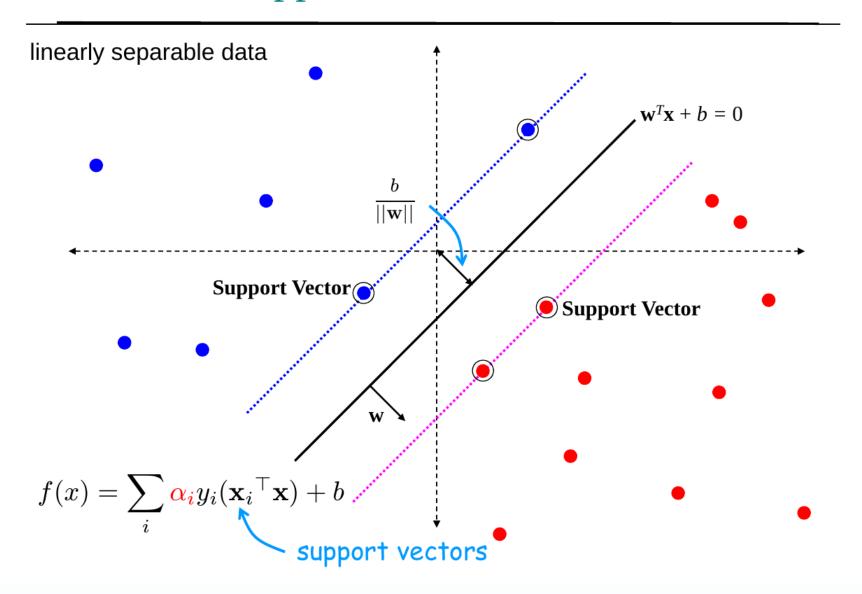
Usar C como regularizador, parâmetro de equilíbrio encontrando vetores de suporte ao hiperplano



Usar C como regularizador, parâmetro de equilíbrio encontrando vetores de suporte ao hiperplano



#### Support Vector Machine



#### Classes sem separação exata

■ Na prática não é usualmente possível encontrar um hiperplano que separa perfeitamente duas classes.

#### **SVM**

#### Classes sem separação exata

- Na prática não é usualmente possível encontrar um hiperplano que separa perfeitamente duas classes.
- Haverá pelo menos alguns pontos no lado errado da reta.

#### **SVM**

#### Classes sem separação exata

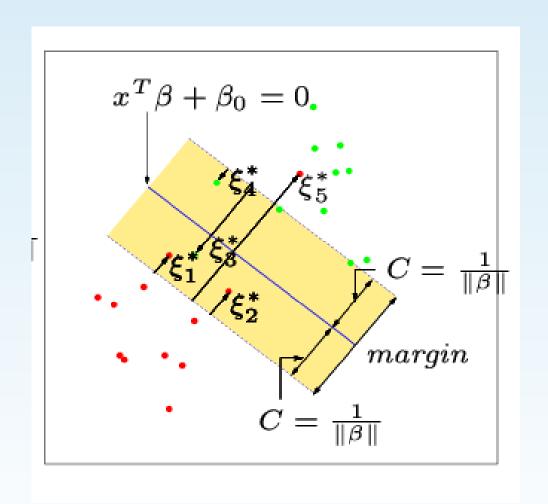
- Na prática não é usualmente possível encontrar um hiperplano que separa perfeitamente duas classes.
- Haverá pelo menos alguns pontos no lado errado da reta.
- Nessa situação tentamos encontrar um plano que dá a melhor separação entre os pontos que são corretamente classificados sujeitos a pontos do lado errado em pequena quantidade.

## **SVM (Flexibilizar Margem)**

Variáveis que permitam folga  $\xi$ i podem ser adicionados para permitir algumas classificações errôneas, difíceis ou ruídos.

 Seja ξ\*i representando a quantia que o i-ésimo ponto está no lado errado da margem (a reta espaçada).

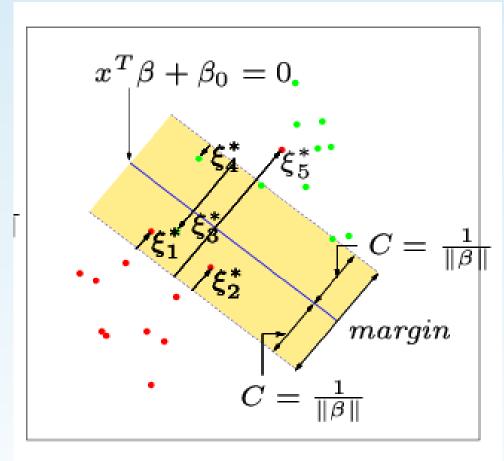
$$\begin{aligned} & \min_{\boldsymbol{\theta}} \frac{1}{2} \sum_{j=1}^{d} \theta_{j}^{2} + C \sum_{i} \xi_{i} \\ & \text{s.t. } y_{i} \left( \boldsymbol{\theta}^{\mathsf{T}} \boldsymbol{x}_{i} \right) \geq 1 - \xi_{i} \quad \forall i \end{aligned}$$



## **SVM (Flexibilizar Margem)**

- Seja ξ\*i representando a quantia que o i-ésimo ponto está no lado errado da margem (a reta espaçada).
- Então queremos maximizar C sujeito a

$$\frac{1}{C}\sum_{i=1}^{n}\xi_{i}^{*} \leq \text{Constant}$$

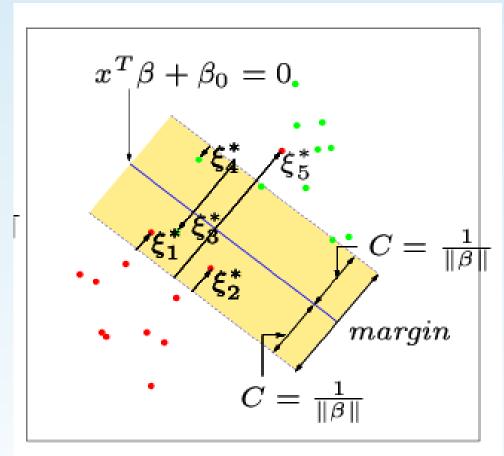


## **SVM (Flexibilizar Margem)**

- Seja ξ\*i representando a quantia que o i-ésimo ponto está no lado errado da margem (a reta espaçada).
- Então queremos maximizar C sujeito a

$$\frac{1}{C} \sum_{i=1}^{n} \xi_{i}^{*} \leq \text{Constant}$$

A constante é um parâmetro de ajuste que escolhemos.



#### Margem Rígida vs. Flexível

Rígida:

```
Encontrar w e b tais que  \Phi(\mathbf{w}) = \frac{1}{2} \mathbf{w}^{\mathrm{T}} \mathbf{w} \text{ é minimizada e para todos } \{(\mathbf{x_i}, y_i)\}  y_i(\mathbf{w}^{\mathrm{T}} \mathbf{x_i} + \mathbf{b}) \ge 1
```

Flexível (incorporando variáveis de folga):

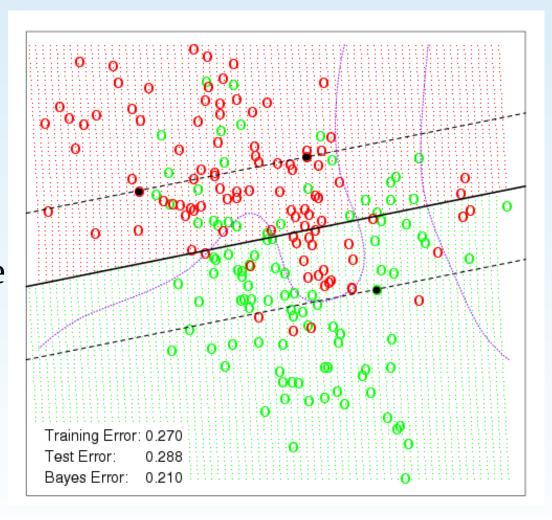
```
Encontrar \mathbf{w} \in \mathbf{b} tais que \mathbf{\Phi}(\mathbf{w}) = \frac{1}{2} \mathbf{w}^{\mathrm{T}} \mathbf{w} + C \sum_{i} \quad \text{é minimizada e para todos } \{(\mathbf{x}_{i}, y_{i})\}y_{i} (\mathbf{w}^{\mathrm{T}} \mathbf{x}_{i} + b) \geq 1 - \xi_{i} \quad \text{e} \quad \xi_{i} \geq 0 \text{ para todos } i
```

Parâmetro C pode ser visto como uma forma de controlar sobreajuste.

#### **SVM**

#### Exemplo com constante pequena

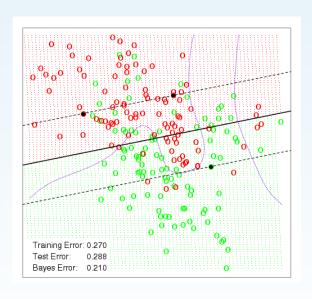
- A distância entre as retas representa a margem ou 2C.
- As curvas púrpuras representam os contornos de decisão de Bayes

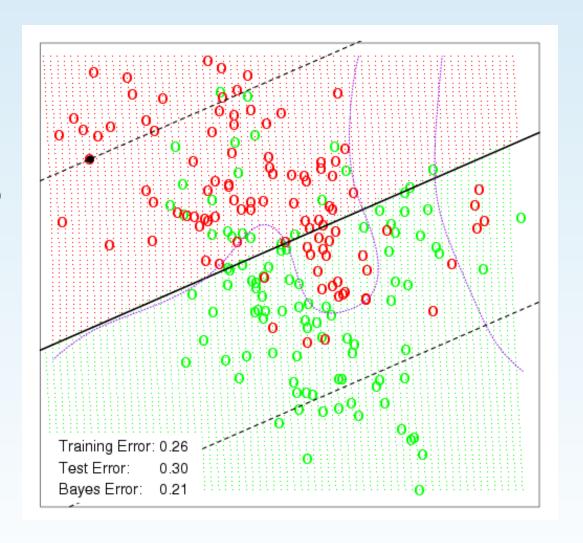


#### **SVM**

#### Exemplo constante maior

- Usando uma constante maior permite uma margem mais larga e cria um classificador diferente.
- Note, contudo, que o contorno de decisão mantém-se linear.

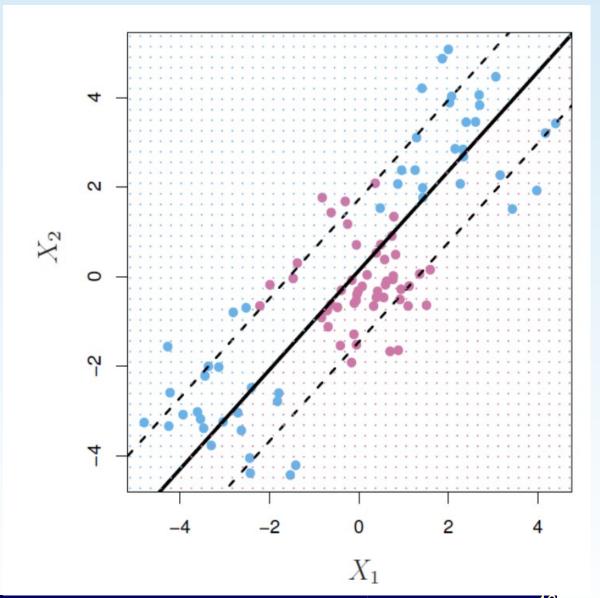




# Classificador por "Máquina de Vetor de Suporte"

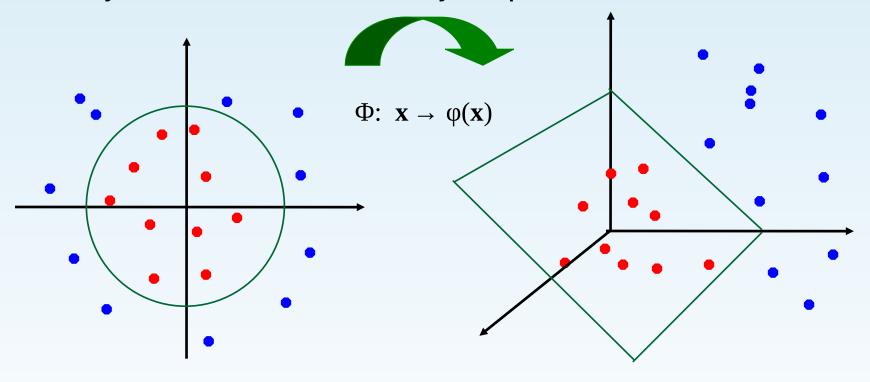
# Classificador por "Máquina de Vetor de Suporte"

- As vezes, independente da escolha de C, uma separação linear não existirá.
- O que fazer?



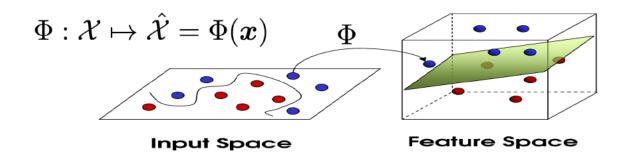
#### **SVM Não-linear**

Ideia geral: o espaço de entrada original pode ser mapeado para algum espaço de atributos de maior dimensão onde o conjunto de treinamento seja separável:



#### **SVM Não-linear**

#### Mapping into a New Feature Space



- For example, with  $x \in \mathbb{R}^2$ , let  $\Phi([x_{i1}, x_{i2}]) = [x_{i1}, x_{i2}, x_{i1}x_{i2}, x_{i1}^2, x_{i2}^2]$
- Rather than run SVM on  $x_i$ , run it on  $\Phi(x_i)$ 
  - o Finds a non-linear separator in the input space

This is just a basis expansion

What if  $\Phi(x_i)$  is really big?

Use kernels to compute it implicitly!

imagem/slide: E.Eaton

# Classificador por "Máquina de Vetor de Suporte"

O classificador de vetor de suporte permite, contudo, somente contorno linear de decisão.

## Classificador por "Máquina de Vetor de Suporte"

- O classificador de vetor de suporte permite, contudo, somente contorno linear de decisão.
- Pode-se estender regressão linear para regressão nãolinear usando funções de base b<sub>i</sub>(X<sub>i</sub>) i.e.

$$Y_i = \beta_0 + \beta_1 b_1(X_i) + \beta_2 b_2(X_i) + \dots + \beta_p b_p(X_i) + \varepsilon_i$$

#### "Kernel trick"

- O classificador linear suporta-se no produto interno entre vetores  $K(x_i,x_j)=x_i^Tx_j$
- Se todo ponto de dados é transformado em um espaço de maior dimensão via alguma transformação  $\Phi$ :  $x \to \varphi(x)$ , o produto interno torna-se:

$$K(\mathbf{x}_i,\mathbf{x}_j) = \varphi(\mathbf{x}_i)^{\mathrm{T}}\varphi(\mathbf{x}_j)$$

- Uma função de kernel é alguma função que corresponda ao produto interno em algum espaço de atributos expandido.
- Exemplo:

vetores bidimensionais  $x=[x_1 \ x_2]$ ; Seja  $K(x_i,x_i)=(1+x_i^Tx_i)^2$ 

Necessário mostrar que  $K(x_i,x_i) = \varphi(x_i)^T \varphi(x_i)$ :

$$K(\mathbf{x}_{i}, \mathbf{x}_{j}) = (1 + \mathbf{x}_{i}^{\mathsf{T}} \mathbf{x}_{j})^{2},$$

$$= 1 + x_{i1}^{2} x_{j1}^{2} + 2 x_{i1} x_{j1} x_{i2} x_{j2} + x_{i2}^{2} x_{j2}^{2} + 2 x_{i1} x_{j1} + 2 x_{i2} x_{j2}$$

$$= [1 \ x_{i1}^{2} \sqrt{2} \ x_{i1} x_{i2} \ x_{i2}^{2} \sqrt{2} x_{i1} \sqrt{2} x_{i2}]^{\mathsf{T}} [1 \ x_{j1}^{2} \sqrt{2} \ x_{j1} x_{j2} \ x_{j2}^{2} \sqrt{2} x_{j1} \sqrt{2} x_{j2}]$$

$$= \varphi(\mathbf{x}_{i})^{\mathsf{T}} \varphi(\mathbf{x}_{i}), \quad \text{onde } \varphi(\mathbf{x}) = [1 \ x_{1}^{2} \sqrt{2} \ x_{1} x_{2} \ x_{2}^{2} \sqrt{2} x_{1} \sqrt{2} x_{2}]$$

## Classificador por "Máquina de Vetor de Suporte": Expansão de Atributos

- Aumentar o espaço de atributos (características) incluindo transformações:  $X_1^2, X_1^3, X_1X_2, X_1X_2^2, \dots$
- Indo de um espaço com p dimensões a M > p
- Ajustar um classificador SVM no espaço aumentado
- Isso resultará em contornos não-lineares de decisão no espaço original
- Exemplo:  $(X_1, X_2, X_1^2, X_2^2, X_1X_2)$

$$\beta_0 + \beta_1 X_1 + \beta_2 X_2 + \beta_3 X_1^2 + \beta_4 X_2^2 + \beta_5 X_1 X_2 = 0$$

#### Abordagem básica SVM não-linear

- Conceitualmente, fazemos uma abordagem similar com o classificador vetor de suporte.
- O classificador vetor de suporte encontra o hiperplano ótimo no espaço gerado por  $X_1, X_2, ..., X_n$ .

### Abordagem básica SVM não-linear

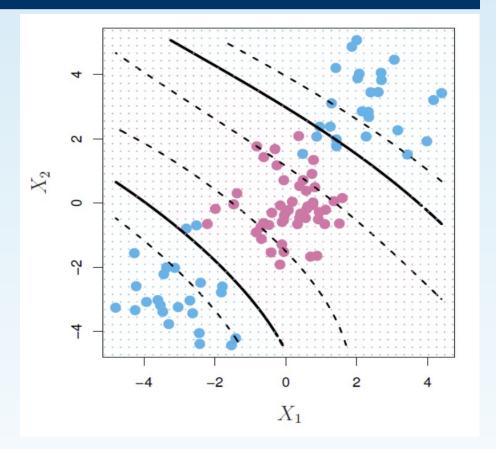
- Conceitualmente, fazemos uma abordagem similar com o classificador vetor de suporte.
- O classificador vetor de suporte encontra o hiperplano ótimo no espaço gerado por  $X_1, X_2, ..., X_D$ .
- Podemos criar transformações (ou uma base)  $b_1(x)$ ,  $b_2(x)$ , ...,  $b_M(x)$  e encontrar o hiperplano ótimo no espaço gerado por  $b_1(X)$ ,  $b_2(X)$ , ...,  $b_M(X)$ .

### Abordagem básica SVM não-linear

- Conceitualmente, fazemos uma abordagem similar com o classificador vetor de suporte.
- O classificador vetor de suporte encontra o hiperplano ótimo no espaço gerado por  $X_1, X_2, ..., X_D$ .
- Podemos criar transformações (ou uma base)  $b_1(x)$ ,  $b_2(x)$ , ...,  $b_M(x)$  e encontrar o hiperplano óptimo no espaço gerado por  $b_1(\mathbf{X})$ ,  $b_2(\mathbf{X})$ , ...,  $b_M(\mathbf{X})$ .
- Essa abordagem produz um plano linear no espaço transformado mas um contorno de decisão não-linear no espaço original.
- Isso é chamado de Classificador por Máquina de Vetor de Suporte.

## **Exemplo**

#### Polinômios cúbicos



$$\beta_0 + \beta_1 X_1 + \beta_2 X_2 + \beta_3 X_1^2 + \beta_4 X_2^2 + \beta_5 X_1 X_2 + \beta_6 X_1^3 + \beta_7 X_2^3 + \beta_8 X_1 X_2^2 + \beta_9 X_1^2 X_2 = 0$$

#### Mas, na prática

- Conceitualmente a abordagem básica é como SVM funciona realmente, mas não escolhemos  $b_1(x)$ ,  $b_2(x)$ , ...,  $b_M(x)$ .
- Ao invés, escolhemos algo chamado de função Kernel (ou radial) que toma o lugar da base.
- Funções comuns "kernel" incluem
  - Linear
  - Polinomial
  - Base Radial
  - Sigmóide

### Mas, na prática

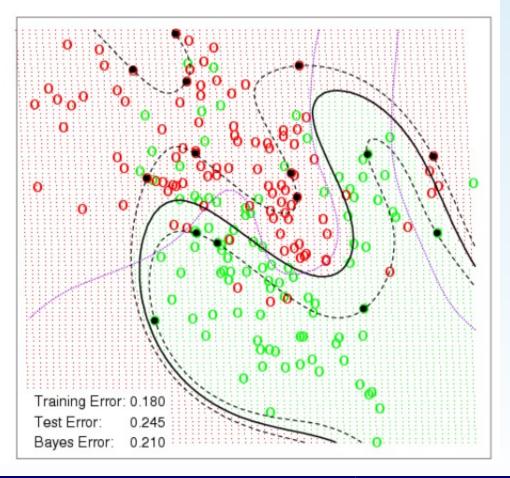
- Ao invés, escolhemos algo chamado de função Kernel (ou radial) que toma o lugar da base.
- Funções comuns "kernel" incluem
  - Linear  $K(\mathbf{x}_i, \mathbf{x}_j) = \mathbf{x}_i^T \mathbf{x}_j$
  - Polinomial  $K(\mathbf{x_i}, \mathbf{x_j}) = (1 + \mathbf{x_i}^T \mathbf{x_j})^p$
  - Base Radial  $K(\mathbf{x_i}, \mathbf{x_j}) = \exp(-\frac{\|\mathbf{x_i} \mathbf{x_j}\|^2}{2\sigma^2})$
  - Sigmóide  $K(\mathbf{x_i}, \mathbf{x_j}) = \tanh(\beta_0 \mathbf{x_i}^T \mathbf{x_j} + \beta_1)$

### **Exemplo**

#### Exemplo com kernel polinomial

SVM - Degree-4 Polynomial in Feature Space

- Usando um kernel polinomial permitimos ao SVM produzir um contorno de decisão não-linear.
- Note que a taxa de erro de teste é bem menor.

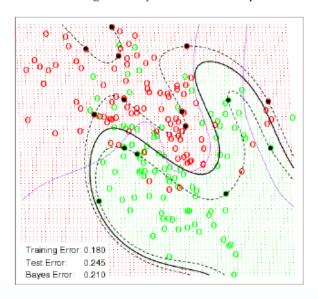


## **Exemplo**

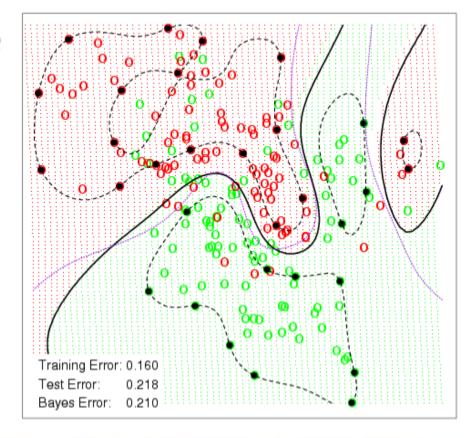
#### Exemplo, base radial

Usando um Kernel de Base Radial consegue-se uma taxa de erro ainda menor.

SVM - Degree-4 Polynomial in Feature Space



SVM - Radial Kernel in Feature Space



#### **SVM para mais de 2 classes?**

OVA One versus All. Fit K different 2-class SVM classifiers  $\hat{f}_k(x)$ , k = 1, ..., K; each class versus the rest. Classify  $x^*$  to the class for which  $\hat{f}_k(x^*)$  is largest.

#### SVM para mais de 2 classes?

OVA One versus All. Fit K different 2-class SVM classifiers  $\hat{f}_k(x)$ , k = 1, ..., K; each class versus the rest. Classify  $x^*$  to the class for which  $\hat{f}_k(x^*)$  is largest.

OVO One versus One. Fit all  $\binom{K}{2}$  pairwise classifiers  $\hat{f}_{k\ell}(x)$ . Classify  $x^*$  to the class that wins the most pairwise competitions.

#### Application: Pedestrian detection in Computer Vision

Objective: detect (localize) standing humans in an image

cf face detection with a sliding window classifier



- reduces object detection to binary classification
- does an image window contain a person or not?

Method: the HOG detector

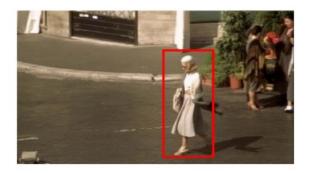
#### Training data and features

Positive data – 1208 positive window examples

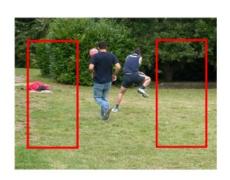


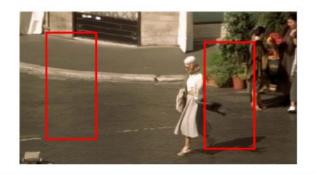






Negative data – 1218 negative window examples (initially)





(Dalal & Triggs, 2005)

Feature: histogram of oriented gradients (HOG)

image

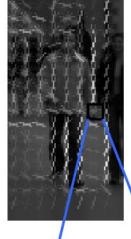




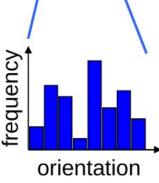
dominant direction



HOG



- tile window into 8 x 8 pixel cells
- each cell represented by HOG



Feature vector dimension =  $16 \times 8$  (for tiling)  $\times 8$  (orientations) = 1024

(Dalal & Triggs, 2005)



















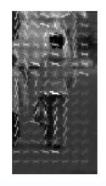


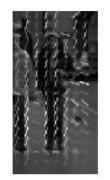


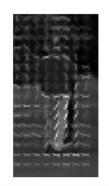












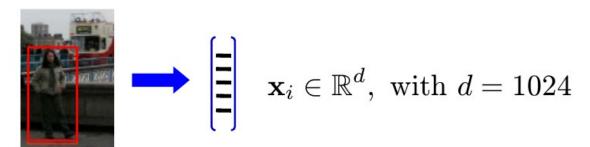


(Dalal & Triggs, 2005) 66

## Algorithm

#### Training (Learning)

Represent each example window by a HOG feature vector



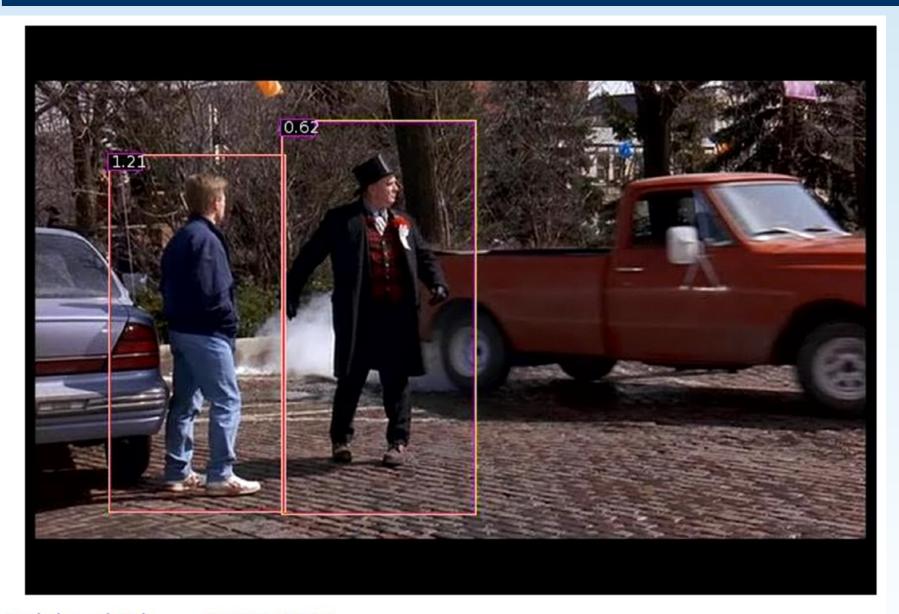
Train a SVM classifier

#### Testing (Detection)

Sliding window classifier

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

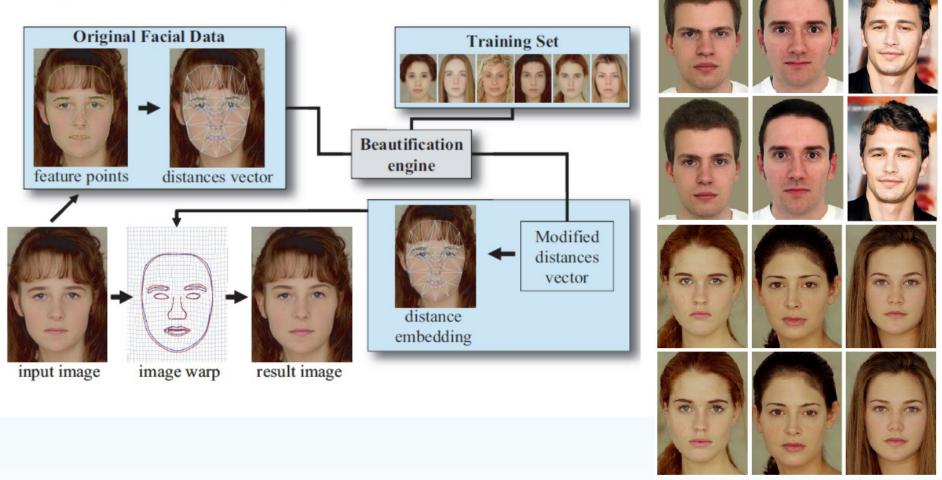
(Dalal & Triggs, 2005)



Dalal and Triggs, CVPR 2005

**Application: Automatic Photo Retouching** 

[Leyvand et al., 2008]



#### Sugestão de Leitura

 Ler o Capítulo 9 do livro "James, Witten, Hastie & Tibshirani, Introduction to Statistical Learning with applications in R, Springer, 2017."

 Capítulo 19 do livro do Russell & Norvig, Artificial Intelligence: a modern approach, 4th ed., Pearson, 2020.

## Referências Bibliográficas

- Alpaydin, E. Introduction to Machine Learning. MIT Press, 2010.
- Bishop, C. Pattern Recognition and Machine Learning. Springer, 2006.
- James, G.; Witten, D.; Hastie, T. & Tibshirani, R. *An Introduction to Statistical Learning with applications in R,* Springer, 2017.
- Mitchell, T. Machine Learning. McGraw Hill, 1997.