Máquinas de Vetor Suporte

EST0133 - Introdução à Modelagem de Big Data

Marcus Nunes https://introbigdata.org/ https://marcusnunes.me/

Universidade Federal do Rio Grande do Norte

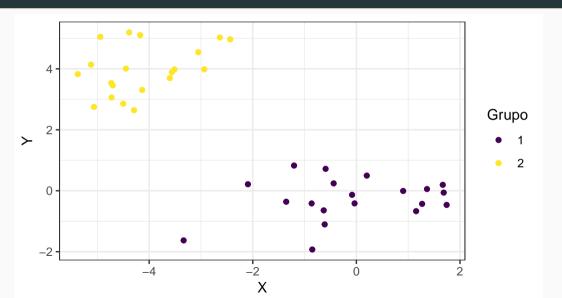


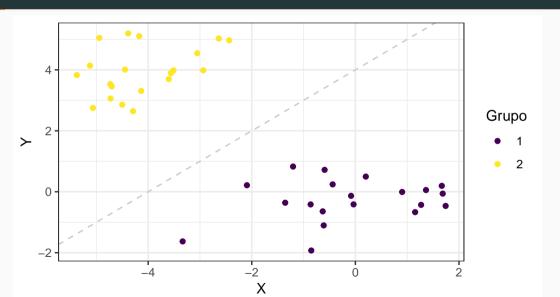
Introdução

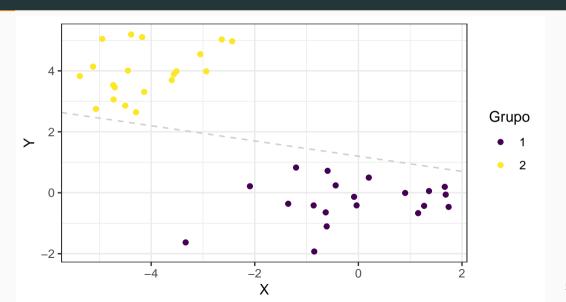
- · Também conhecida por Support Vector Machines (SVM)
- É outra técnica utilizada para classificação de dados, que também pode ser usada para regressão
- Trata-se do aprimoramento de um antigo algoritmo chamado perceptron
- · Os dados não necessitam ser linearmente separáveis



- \cdot Considere uma tarefa de classificação binária em \mathbb{R}^2
- Se pudermos criar uma reta que separe as duas classes, então dizemos que o conjunto é linearmente separável





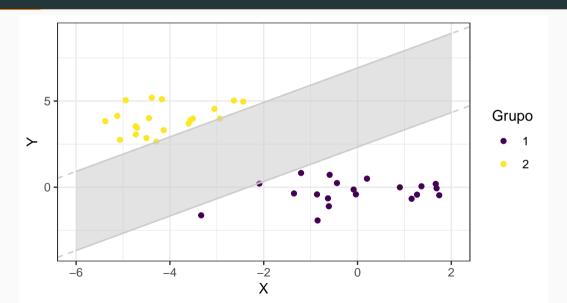


- Em um espaço de dimensão k, precisamos encontrar o subespaço de dimensão k-1 que separa as duas classes
- Ou seja, a ideia é utilizar hiperplanos para separar o conjunto de dados
- · Um hiperplano é um conjunto L tal que

$$L = \{X : f(x) = W'x - b = 0\}$$

- Se k = 2 (um plano), o hiperplano é uma reta (k = 1)
- · O hiperplano que separa duas classes pode não ser único

- Encontre dois hiperplanos que separem as duas classes
- · Maximize a separação mínima entre os dois hiperplanos
- · A distância entre os hiperplanos é chamada de margem
- · Maximizar a margem minimiza o risco de erro de classificação



 Como um hiperplano L pode ser expresso como o produto interno entre um vetor de coeficientes w e um vetor de características x, temos

$$\mathbf{w}'\mathbf{x} = 0$$

· Assim, a distância deste hiperplano a um vetor ${\it x}$ é dada por

$$\frac{w'x}{\|w\|}$$

em que $\|\mathbf{w}\|$ é o comprimento do vetor \mathbf{w}

9

- Vamos assumir que possuímos um conjunto de treinamento (x_i, y_i) com n observações
- · A classificação é determinada pelo resultado de w'x + b
- Se w'x + b > 0, então x pertence à classe 1
- · Caso contrário, x pertence à classe 2

- Se um ponto é classificado corretamente pelo hiperplano, então $y_i(\mathbf{w}'\mathbf{x} + b) > 0$
- A distância de um ponto classificado corretamente para o hiperplano é dada por

$$\frac{y_i(\mathbf{w}'\mathbf{x}+b)}{\|\mathbf{w}\|}$$

 Precisamos encontrar o vetor w e o coeficiente b tais que a margem é maximizada para todos os pontos do conjunto de treinamento, ou seja,

$$\arg\max_{\mathbf{w},b} \left\{ \frac{1}{\|\mathbf{w}\|} \min_{i} [y_i(\mathbf{w}'\mathbf{x} + b)] \right\}$$

- Este é um problema de otimização difícil, pois envolve maximizar uma minimização
- · Felizmente, é possível simplificá-lo

· Aplique uma transformação $\phi(\cdot)$ nos dados tal que

$$y_i(\mathbf{w}'\phi(\mathbf{x}_i)+b)=1$$

Todos os pontos classificados corretamente v\u00e3o satisfazer

$$y_i(\mathbf{w}'\phi(\mathbf{x}_i)+b)\geq 1$$

· Esta é a chamada representação canônica do hiperplano de decisão

· Agora as margens se tornam

$$\frac{y_i(\mathbf{w}'\phi(\mathbf{x}_i)+b)}{\|\mathbf{w}\|}=\frac{1}{\|\mathbf{w}\|}$$

- O objetivo agora se torna encontrar w e b tais que a margem é maximizada sujeita ao conjunto de treinamento utilizado no ajuste do modelo
- Assim, maximizar a margem é equivalente a minimizar a norma de ${\it w}$

• Encontre **w** tal que

$$\min \frac{1}{2} \|\mathbf{w}\|^2$$

sujeito a

$$y_i(\mathbf{w}'\phi(\mathbf{x}_i)+b)\geq 1$$

- Se duas classes são linearmente separáveis, o algoritmo converge para a solução em um número finito de passos
- Entretanto, existem alguns problemas com este algoritmo:
 - Quando os dados são linearmente separáveis, há muitas soluções, que são dependentes das condições iniciais
 - · O número de passos pode ser muito grande
 - Quando os dados não são linearmente separáveis, o algoritmo pode não convergir

- · Se duas classes são linearmente separáveis, então
 - O hiperplano de separação ótimo separa os dados em duas classes e maximiza a distância ao ponto mais próximo em cada classe
 - · Os vetores suporte são os pontos nas margens do hiperplano
 - · A solução é única e funciona muito bem na prática



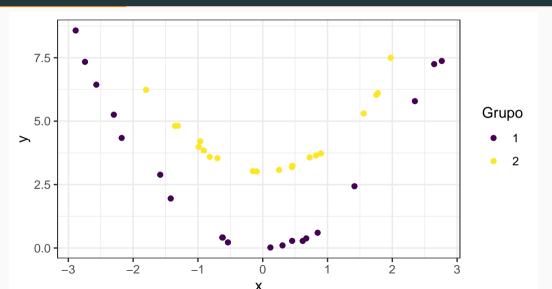
- Kernel é a função utilizada para separar dados que não sejam linearmente separáveis
- O kernel aplica uma transformação nos dados originais, levando um espaço euclideano para um espaço não-linear

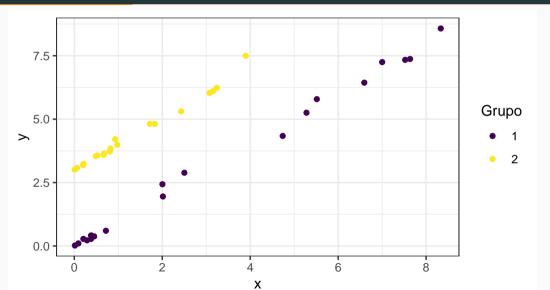
- Sejam \mathbf{x}_1 e \mathbf{x}_2 vetores no espaço \mathbb{R}^k original e sejam α_i e b escalares
- · Queremos encontrar a função

$$f(\mathbf{x}) = b + \sum_{i=1}^{n} \alpha_i K(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2)$$

• A função $K(\cdot, \cdot)$ é chamada de kernel

- O pacote tidymodels consegue trabalhar com kernels de outros pacotes, como o kernlab, a fim de realizar estas transformações
- Sejam \mathbf{x}_1 e \mathbf{x}_2 vetores de \mathbb{R}^k , γ e σ parâmetros de escala, c uma constante e d um inteiro positivo. Assim, os kernels mais comuns são
 - Linear: $\mathbf{x}'_1 \cdot \mathbf{x}_2$
 - Polinomial: $(\mathbf{x}'_1 \cdot \mathbf{x}_2 + c)^d$
 - Radial: $\exp(-\sigma ||\mathbf{x}_1 \mathbf{x}_2||^2)$
 - Sigmoide: $tanh(\gamma x_1' \cdot x_2 + c)$, em que $tanh(x) = \frac{e^x e^{-x}}{e^x + e^{-x}}$





- · Não estamos limitados a apenas estes tipos de kernel
- · Entretanto, os kernels linear e radial são os mais utilizados na prática



- Vamos analisar o conjunto de dados Ionosphere, do pacote mlbench
- São dados provenientes de medidas realizadas com radares, a fim de detectar estruturas na ionosfera

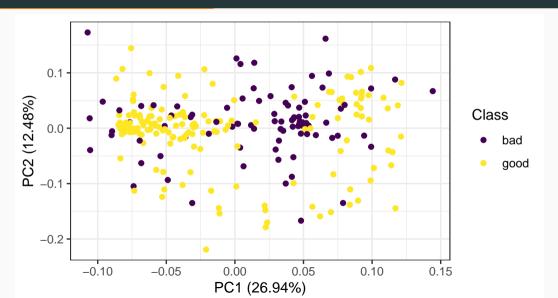
```
pacotes
> library(tidymodels)
> theme set(theme bw())
> library(ggfortify)
> library(onehot)
> library(janitor)
>
   dados
>
> data("Ionosphere", package = "mlbench")
```

```
> # criacao de variaveis dummy
>
> ionosphere <-
   Ionosphere %>%
   select(!where(is.numeric)) %>%
   select(-V2. -Class) %>%
   onehot() %>%
   predict(Ionosphere) %>%
   as.data.frame() %>%
    select(V1 0 = V1=0, V1 1 = V1=1)
```

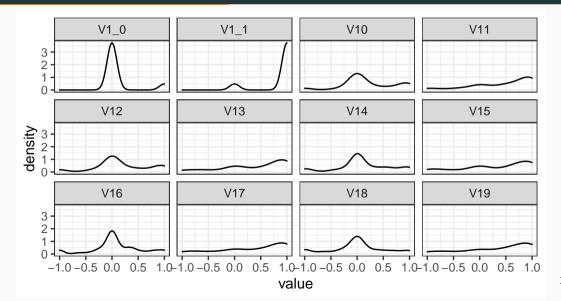
- > ionosphere <-
- + Ionosphere %>%
- + select(-V1, -V2) %>%
- + bind_cols(ionosphere) %>%
- + relocate(Class)

```
> # treino/teste
> ionosphere %>%
   group_by(Class) %>%
   count()
## # A tibble: 2 x 2
## # Groups: Class [2]
   Class
##
  <fct> <int>
##
## 1 bad
             126
## 2 good
            225
```

```
> # criar os conjuntos de dados de treino e teste
>
> ionosphere treino <- training(ionosphere split)</pre>
> nrow(ionosphere treino)/nrow(ionosphere)
## [1] 0.7037037
> ionosphere teste <- testing(ionosphere split)</pre>
> nrow(ionosphere_teste)/nrow(ionosphere)
## [1] 0.2962963
```

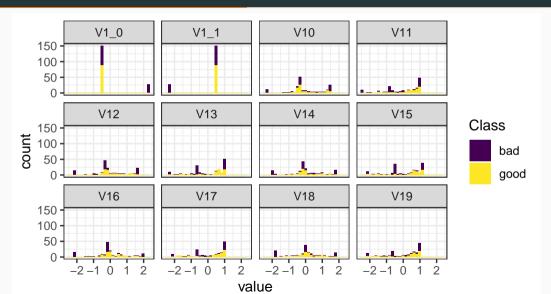


```
> ionosphere_treino %>%
+    pivot_longer(-Class) %>%
+    ggplot(aes(x = value)) +
+    geom_density() +
+    facet_wrap(~ name)
```



```
> # pre-processamento
> ionosphere rec <-
   recipe(Class ~ ..
           data = ionosphere treino) %>%
+
   # remover observacoes de modo que todos os niveis de Class
    # figuem com o mesmo numero de observações
    themis::step downsample(Class) %>%
   # center/scale
    step center(-Class) %>%
    step scale(-Class) %>%
   # funcao para aplicar a transformacao aos dados
   prep()
```

```
> # aplicar a transformacao aos dados
>
> ionosphere treino t <- juice(ionosphere rec)</pre>
>
> # verificar o resultado do processamento de dados
>
> ionosphere treino t %>%
    pivot longer(-Class) %>%
    filter(str detect(name, "V1")) %>%
   ggplot(., aes(fill = Class)) +
   geom histogram(aes(value)) +
   facet wrap(~ name) +
    scale fill viridis d()
```



```
> # workflow
>
> ionosphere_svm_poly_tune_wflow <-
+ workflow() %>%
+ add_model(ionosphere_svm_poly_tune) %>%
+ add_formula(Class ~ .)
```

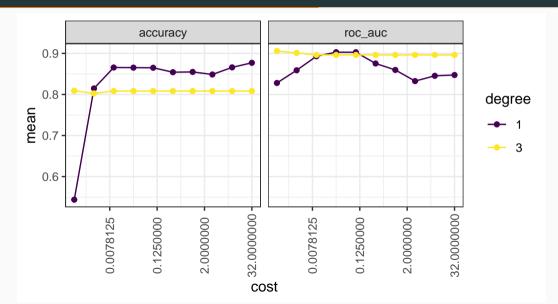
```
> # definicao da validacao cruzada
>
> set.seed(6472)
>
> ionosphere_treino_cv <- vfold_cv(ionosphere_treino_t, v = 10)</pre>
```

```
> # avaliacao do modelo
>
> ionosphere_svm_poly_fit_tune <-
+ ionosphere_svm_poly_tune_wflow %>%
+ tune_grid(
+ resamples = ionosphere_treino_cv,
+ grid = ionosphere_svm_poly_grid
+ )
```

resultados

```
>
> collect metrics(ionosphere svm polv fit tune)
  # A tibble: 40 x 8
##
                                 .estimator
                                                       n std err
##
          cost degree .metric
                                              mean
##
         <fdb>
                 <dbl> <chr>
                                 <chr>
                                             <dbl> <int>
                                                            <dbl>
##
    1 0.000977
                     1 accuracy binary
                                             0.544
                                                           0.0506
                                                       10
                                 binary
##
    2 0.000977
                     1 roc auc
                                             0.828
                                                       10
                                                           0.0368
##
    3 0.00310
                     1 accuracy binary
                                             0.815
                                                       10
                                                           0.0187
    4 0.00310
                                 binary
                                             0.859
                                                           0.0385
##
                     1 roc auc
                                                       10
                                             0.866
##
    5 0.00984
                     1 accuracy binary
                                                       10
                                                           0.0167
##
    6 0.00984
                     1 roc auc
                                 binarv
                                             0.893
                                                       10
                                                           0.0359
    7 0.0312
                     1 accuracy binary
                                             0.865
                                                       10
                                                           0.0170
##
##
    8 0.0312
                     1 roc auc
                                 binary
                                             0.903
                                                       10
                                                           0.0319
```

```
> ionosphere svm poly fit tune %>%
   collect metrics() %>%
   mutate(degree = factor(degree)) %>%
   ggplot(., aes(x = cost, y = mean, colour = degree)) +
   geom line() +
   geom point() +
   facet grid(~ .metric) +
+
   scale x continuous(trans = "log2") +
   theme(axis.text.x = element_text(angle = 90, vjust = 0.5)) +
   scale colour viridis d()
```



> # melhores modelos

```
>
> ionosphere svm polv fit tune %>%
   show best("accuracy")
## # A tibble: 5 x 8
##
        cost degree .metric
                            .estimator
                                                 n std err
                                        mean
##
       <dbl> <dbl> <chr>
                             <chr>
                                        <dbl> <int>
                                                     <dbl>
## 1 32
                  1 accuracy binary
                                       0.877
                                                10
                                                    0.0229
## 2 10.1
                  1 accuracy binary
                                       0.866
                                                10
                                                    0.0235
## 3
                  1 accuracy binary
                                       0.866
                                                    0.0167
     0.00984
                                                10
## 4
     0.0312
                  1 accuracy binary
                                       0.865
                                                10
                                                    0.0170
## 5
     0.0992
                  1 accuracy binary
                                       0.865
                                                10
                                                    0.0125
## # ... with 1 more variable: .config <chr>
```

```
> ionosphere svm poly fit tune %>%
    show best("roc auc")
## # A tibble: 5 x 8
##
         cost degree .metric .estimator
                                          mean
                                                   n std err
##
        < fdb>
               <dhl> <chr>
                              <chr>>
                                         <dbl> <int>
                                                        <dbl>
                   3 roc_auc binarv
##
  1 0.000977
                                         0.906
                                                   10
                                                       0.0155
                   1 roc auc binarv
##
  2 0.0312
                                         0.903
                                                   10
                                                       0.0319
                   1 roc auc binary
## 3 0.0992
                                         0.903
                                                   10
                                                       0.0307
                   3 roc auc binarv
## 4 0.00310
                                         0.901
                                                   10
                                                       0.0232
## 5 0.00984
                   3 roc auc binary
                                         0.896
                                                   10
                                                       0.0267
## # ... with 1 more variable: .config <chr>
```

```
> # melhor modelo
 ionosphere svm poly best <-
    ionosphere_svm_poly_fit_tune %>%
    select best("accuracy")
>
 ionosphere svm poly final <-</pre>
    ionosphere svm poly tune wflow %>%
    finalize workflow(ionosphere svm poly best)
>
 ionosphere svm poly final <- fit(ionosphere svm poly final,</pre>
                                     ionosphere_treino_t)
+
```

##

```
> ionosphere svm polv final
## == Workflow [trained] =======================
## Preprocessor: Formula
## Model: svm poly()
##
## -- Preprocessor ----
## Class ~ .
##
## -- Model ------
## Support Vector Machine object of class "ksvm"
##
## SV type: C-svc (classification)
##
   parameter : cost C = 32
```

```
> # resultados no conjunto de teste
>
> resultado_poly <-
+ ionosphere_teste_t %>%
+ bind_cols(predict(ionosphere_svm_poly_final, ionosphere_teste_t) %>
+ rename(predicao_svm_poly = .pred_class))
```

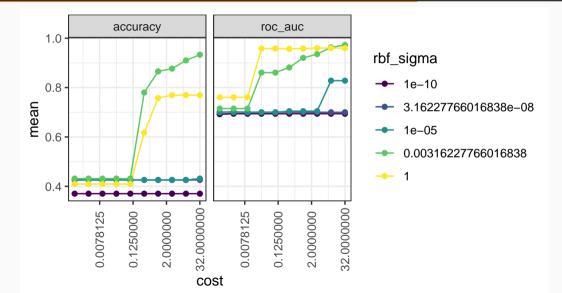
```
> metrics(resultado polv.
          truth = Class.
         estimate = predicao svm poly,
         options = "roc")
## # A tibble: 2 x 3
##
     .metric .estimator .estimate
##
    <chr> <chr>
                             <dbl>
## 1 accuracy binary
                             0.798
## 2 kap
              binary
                             0.551
```

```
> # workflow
>
> ionosphere_svm_rbf_tune_wflow <-
+ workflow() %>%
+ add_model(ionosphere_svm_rbf_tune) %>%
+ add_formula(Class ~ .)
```

```
> # avaliacao do modelo
>
> ionosphere_svm_rbf_fit_tune <-
+ ionosphere_svm_rbf_tune_wflow %>%
+ tune_grid(
+ resamples = ionosphere_treino_cv,
+ grid = ionosphere_svm_rbf_grid
+ )
```

```
> # resultados
>
> collect metrics(ionosphere svm rbf fit tune)
## # A tibble: 100 x 8
          cost rbf sigma .metric .estimator
                                                         n std err
##
                                               mean
##
         <dbl>
                    <dbl> <chr>
                                  <chr>
                                              <dbl> <int>
                                                             <dbl>
##
    1 0.000977
                1.00e-10 accura~ binarv
                                              0.370
                                                            0.0316
                                                        10
##
    2 0.000977
                1.00e-10 roc auc binary
                                              0.692
                                                        10
                                                            0.0916
##
    3 0.00310
                1.00e-10 accura~ binary
                                              0.370
                                                        10
                                                            0.0316
                1.00e-10 roc auc binary
                                              0.694
                                                            0.0917
##
    4 0.00310
                                                        10
                                                            0.0316
##
    5 0.00984
                1.00e-10 accura~ binarv
                                              0.370
                                                        10
##
    6 0.00984
                1.00e-10 roc auc binary
                                              0.694
                                                        10
                                                            0.0918
    7 0.0312
                1.00e-10 accura~ binarv
                                              0.370
                                                        10
                                                            0.0316
##
                1.00e-10 roc auc binary
##
    8 0.0312
                                              0.694
                                                        10
                                                            0.0918
```

```
> ionosphere svm rbf fit tune %>%
   collect metrics() %>%
   mutate(rbf sigma = factor(rbf sigma)) %>%
   ggplot(., aes(x = cost, y = mean, colour = rbf_sigma)) +
   geom line() +
   geom point() +
   facet grid(~ .metric) +
+
   scale x continuous(trans = "log2") +
   theme(axis.text.x = element_text(angle = 90, vjust = 0.5)) +
   scale colour viridis d()
```



```
> # melhores modelos
>
> ionosphere svm rbf fit tune %>%
   show best("accuracy")
## # A tibble: 5 x 8
##
      cost rbf sigma .metric .estimator
                                          mean
                                                   n std err
##
     <dbl>
               <dbl> <chr>
                              <chr>
                                         <dbl> <int>
                                                       <dbl>
             0.00316 accuracy binary
## 1 32
                                         0.933
                                                  10
                                                      0.0216
## 2 10.1
             0.00316 accuracy binary
                                         0.910
                                                  10
                                                      0.0189
                                         0.877
                                                      0.0160
## 3
    3.17
             0.00316 accuracy binary
                                                  10
## 4
             0.00316 accuracy binary
                                         0.866
                                                  10
                                                      0.0187
## 5
     0.315
             0.00316 accuracy binary
                                         0.780
                                                  10
                                                      0.0295
## # ... with 1 more variable: .config <chr>
```

```
> ionosphere svm rbf fit tune %>%
    show best("roc auc")
## # A tibble: 5 x 8
##
      cost rbf sigma .metric .estimator
                                         mean
                                                   n std err
##
     <1dh>>
               <dhl> <chr>
                             <chr>>
                                         <dbl> <int>
                                                       <dbl>
             0.00316 roc auc binarv
## 1 32
                                        0.972
                                                  10
                                                      0.0109
##
  2 10.1
             0.00316 roc auc binary
                                         0.963
                                                  10
                                                      0.0125
                     roc auc binary
## 3 3.17
                                        0.960
                                                  10
                                                      0.0208
                     roc auc binarv
## 4 10.1
                                         0.960
                                                  10
                                                      0.0208
## 5 32
                     roc auc binary
                                         0.960
                                                  10
                                                      0.0208
## # ... with 1 more variable: .config <chr>
```

```
> # melhor modelo
 ionosphere svm rbf best <-
    ionosphere svm rbf_fit_tune %>%
   select best("accuracy")
>
 ionosphere svm rbf final <-
   ionosphere svm rbf tune wflow %>%
   finalize_workflow(ionosphere_svm_rbf_best)
>
 ionosphere svm rbf final <- fit(ionosphere svm rbf final,</pre>
                                   ionosphere_treino_t)
+
```

##

```
> ionosphere svm rbf final
## == Workflow [trained] =======================
## Preprocessor: Formula
## Model: svm rbf()
##
## -- Preprocessor ----
## Class ~ .
##
## -- Model -----
## Support Vector Machine object of class "ksvm"
##
## SV type: C-svc (classification)
##
   parameter : cost C = 32
```

```
> # resultados no conjunto de teste
>
> resultado_rbf <-
+ ionosphere_teste_t %>%
+ bind_cols(predict(ionosphere_svm_rbf_final, ionosphere_teste_t) %>%
+ rename(predicao_svm_rbf = .pred_class))
```

```
> metrics(resultado rbf.
         truth = Class,
         estimate = predicao svm rbf,
         options = "roc")
## # A tibble: 2 x 3
##
     .metric .estimator .estimate
##
    <chr> <chr>
                             <dbl>
## 1 accuracy binary
                             0.904
## 2 kap
              binary
                             0.785
```

```
> # comparacao polinomial e radial
> metrics(resultado polv.
          truth = Class.
          estimate = predicao svm poly.
          options = "roc")
## # A tibble: 2 x 3
     .metric .estimator .estimate
##
##
     <chr> <chr>
                             < [db>
## 1 accuracy binary
                             0.798
## 2 kap
              binarv
                             0.551
```

```
> metrics(resultado rbf.
         truth = Class,
         estimate = predicao svm rbf,
         options = "roc")
## # A tibble: 2 x 3
##
     .metric .estimator .estimate
##
    <chr> <chr>
                             <dbl>
## 1 accuracy binary
                             0.904
## 2 kap
              binary
                             0.785
```



70

```
> conf_mat(resultado_rbf,
+ truth = Class,
+ estimate = predicao_svm_rbf)

## Truth
## Prediction bad good
## bad 30 3
## good 7 64
```

```
> conf_mat(resultado_rbf,
+ truth = Class,
+ estimate = predicao_svm_rbf) %>%
+ autoplot(type = "heatmap")
```



75

- 1. O arquivo **credito.csv** contém registros de transações com cartões de crédito classificadas como legítimas ou fraudes. São 31 variáveis:
 - Time: tempo (em segundos) decorrido entre a transação e o início da coleta dos dados
 - V1-V28: registros anonimizados sobre as transações
 - · Amount: valor da transação
 - Class: classificação da transação como legítima (true) ou fraude (fraud)

Estamos interessados em identificar uma transação como legítima ou como fraude. Para isso, importe esse conjunto de dados no R.

- 2. Faça uma análise exploratória nos dados, identificando possíveis variáveis problemáticas e tratando-as corretamente.
- 3. Encontre o modelo de máquina de vetor suporte que melhor classifica a variável resposta, utilizando pelo menos dois kernels diferentes.

- 4. O conjunto de dados **Sacramento**, dentro do pacote **caret**, possui dados a respeito de 932 residências da região metropolitana de Sacramento, capital da Califórnia. São 8 variáveis preditoras:
 - · city: cidade da região metropolitana
 - · zip: CEP da residência
 - · beds: número de quartos
 - · baths: número de banheiros
 - · sqft: área da casa, em pés quadrados
 - type: tipo da residência, podendo ser Condo (casa em um condomínio), Multi_Family (apartamento em um prédio ou condomínio) ou Residential (casa)
 - · latitude: latitude da residência
 - · longitude: longitude da residência

- 4. (Cont.) Carregue este conjunto de dados na memória do R através do comando data(Sacramento, package = "caret"). Crie um novo objeto chamado residencias, apenas com as colunas price, type, sqft, baths e beds. Considere price como variável resposta.
- 5. Crie boxplots comparando o preço dos imóveis de acordo com o tipo de residência. Parece que há alguma influência do tipo de imóvel em seu preço?
- 6. Utilize a função **GGally::ggpairs** para verificar as correlações entre as variáveis quantitativas deste conjunto de dados. Argumente se há correlação entre as variáveis preditoras.

- 7. Com o mesmo gráfico da questão anterior, avalie a relação de **price** versus cada uma das variáveis quantitativas. Que tipo(s) de relação(ões) podemos perceber?
- 8. Queremos prever a variável **price** destes imóveis. Para isto, ajuste dois modelos SVM a esses dados, utilizando os kernels linear e radial.
- 9. Encontre o modelo melhor ajustado. Justifique a sua escolha.

Máquinas de Vetor Suporte

EST0133 - Introdução à Modelagem de Big Data

Marcus Nunes https://introbigdata.org/ https://marcusnunes.me/

Universidade Federal do Rio Grande do Norte