

Fundamentos de Aprendizagem de Máquina

Hélio Pio

Programação das Aulas

Tópico 1: Introdução a Inteligência Artificial

Tópico 2: Agentes Inteligentes

Tópico 3: Fundamentos de Aprendizagem de Máquina

Tópico 4: Redes Neurais Artificiais

Tópico 5: Atividade em Aula – Primeira Avaliação

Tópico 6: Representação da Incerteza e Lógica Fuzzy

Tópico 7: Redes Bayesianas

Tópico 8: Support Vector Machines

Tópico 9: Atividade em Aula – Segunda Avaliação

Tópico 10: Resolução de Problemas por Meio de Busca e Otimização

Tópico 11: Técnicas de Ensemble

Tópico 12: Atividade em Aula – Terceira Avaliação

O que é *Support
Vector Machine*?

Support Vector Machine

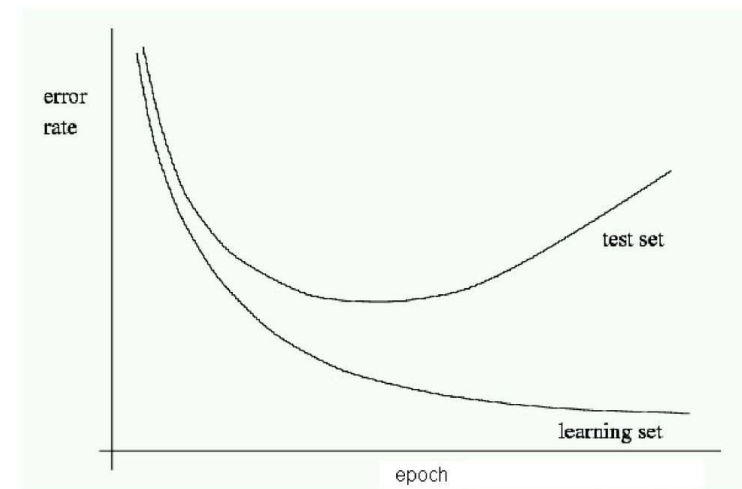
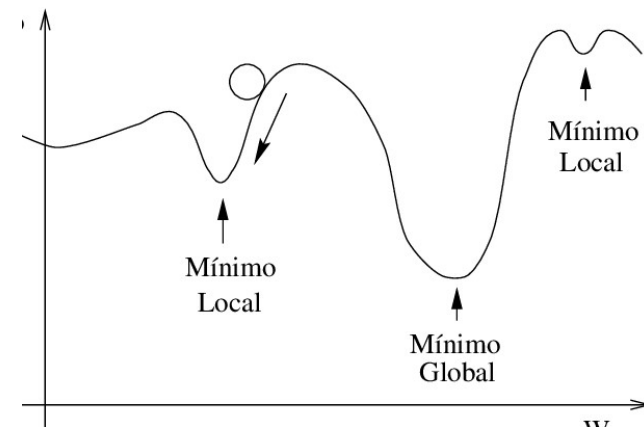
O que é *Support Vector Machine*?



Support Vector Machine

Problemas típicos de RNA

- Mínimo Local x Mínimo Global
 - Menor valor alcançado por uma função em uma vizinhança específica.
 - Menor valor absoluto da função em todo o seu domínio.
- Sobre-ajuste x Capacidade de Generalização.
- “Maldição da Dimensionalidade”: Dimensão muito grande dos dados de entrada degrada o aprendizado de máquina.



Support Vector Machine

Problemas típicos de RNA

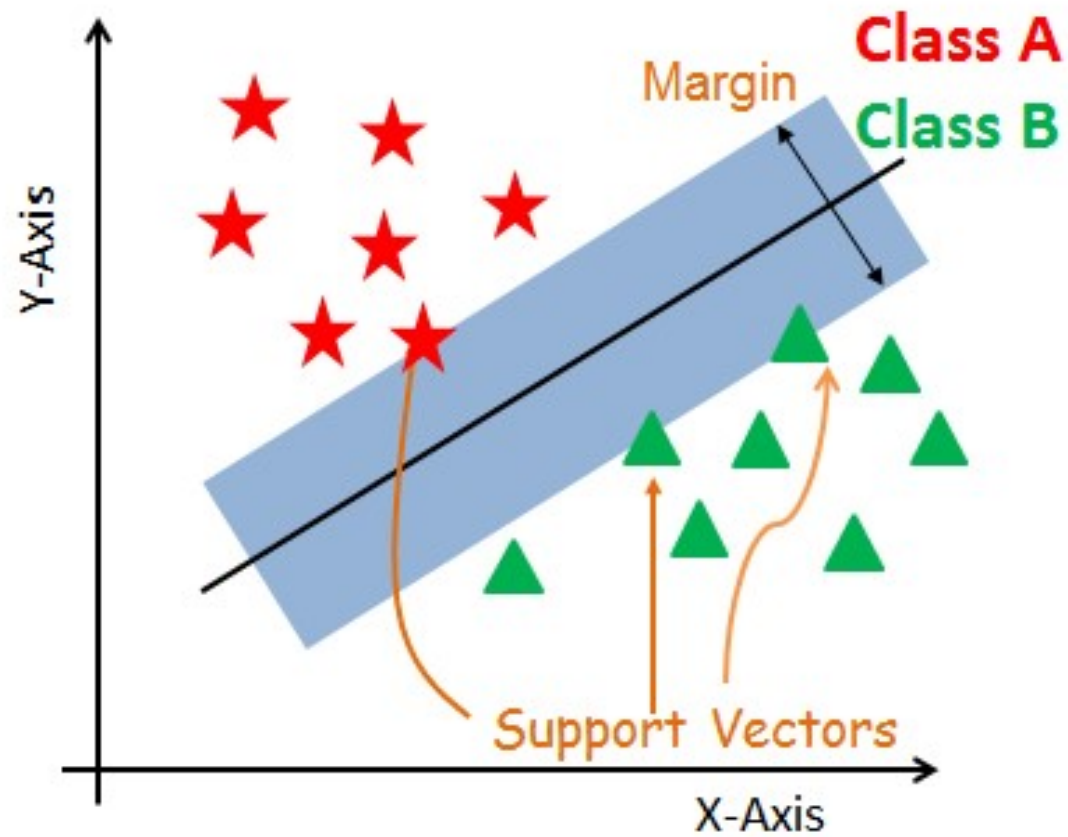
- Soluções possíveis:
 - Reduzir a Dimensionalidade: PCA, NLPCA
 - Aumentar a Dimensionalidade: SVM

AUMENTAR A DIMENSIONALIDADE ??

ISSO NÃO VAI AGRAVAR O PROBLEMA??

Support Vector Machine

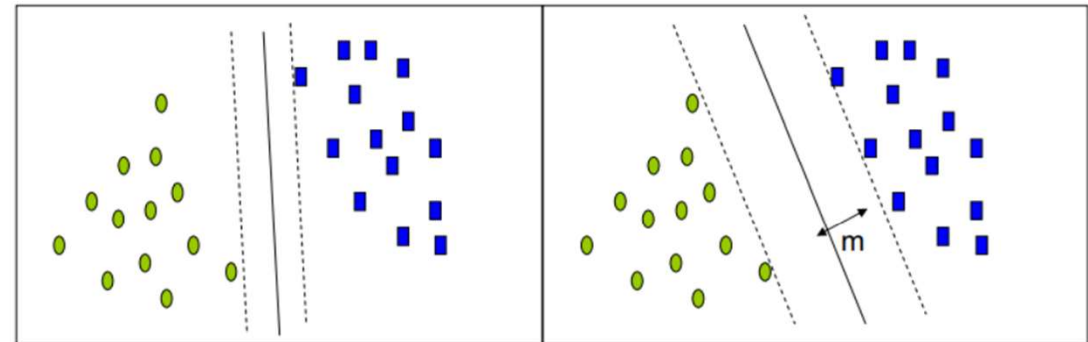
Solução: SVM



Support Vector Machine

Dados separados linearmente.

- Seja $D(x_1, y_1), \dots, (x_d, y_d)$, onde X é o conjunto de tuplas de treinamento associadas à classe y .
- Existem infinitas linhas (hiperplanos) separando duas classes. O alvo é achar o melhor hiperplano que minimize o erro da classificação.
- SVM busca o hiperplano com a maior margem (*maximum marginal hyperplane* – MMH).



Support Vector Machine

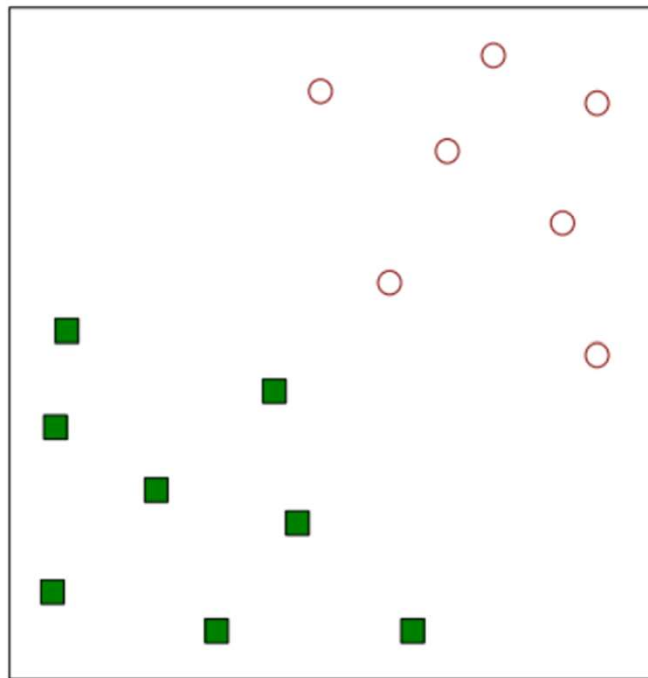
Dados separados linearmente.

- O SVM usa um mapeamento não linear para transformar os dados originais (treinamento) em um espaço de dimensão superior, onde é mais fácil encontrar um hiperplano de separação entre as classes.
- Na nova dimensão, SVM busca um hiperplano que realize uma separação linear ótima entre as classes.
- SVM sempre separa duas classes por meio de um hiperplano com a maior distância entre as classes.
- SVM encontra o hiperplano usando vetores suportes (tuplas especiais no treinamento) e margens definidas pelos vetores suportes.

Support Vector Machine

Dados separados linearmente.

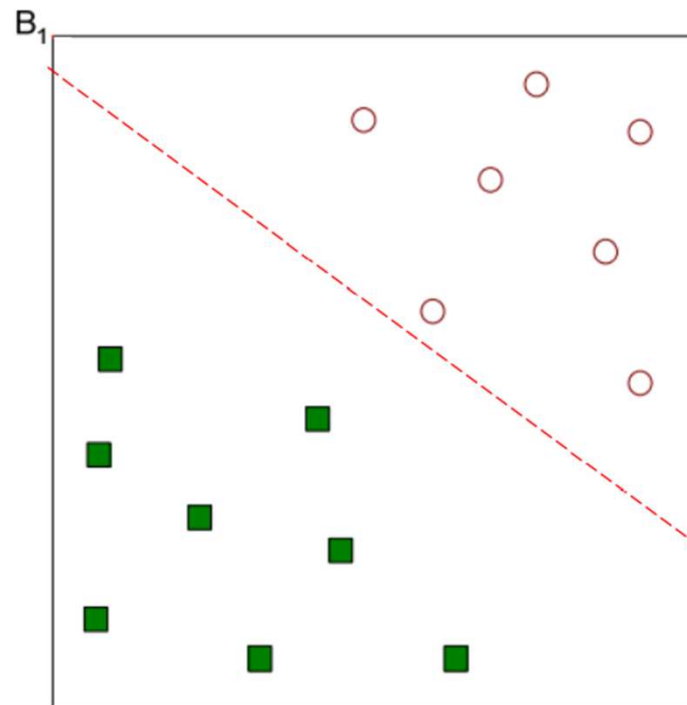
- Encontrar um hiperplano linear (limite de decisão) capaz de separar os dados.



Support Vector Machine

Dados separados linearmente.

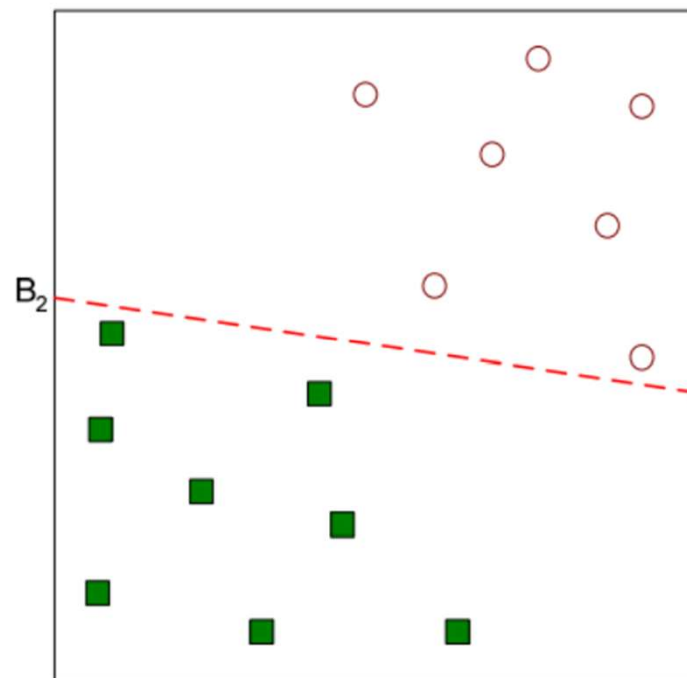
- Uma possível solução.



Support Vector Machine

Dados separados linearmente.

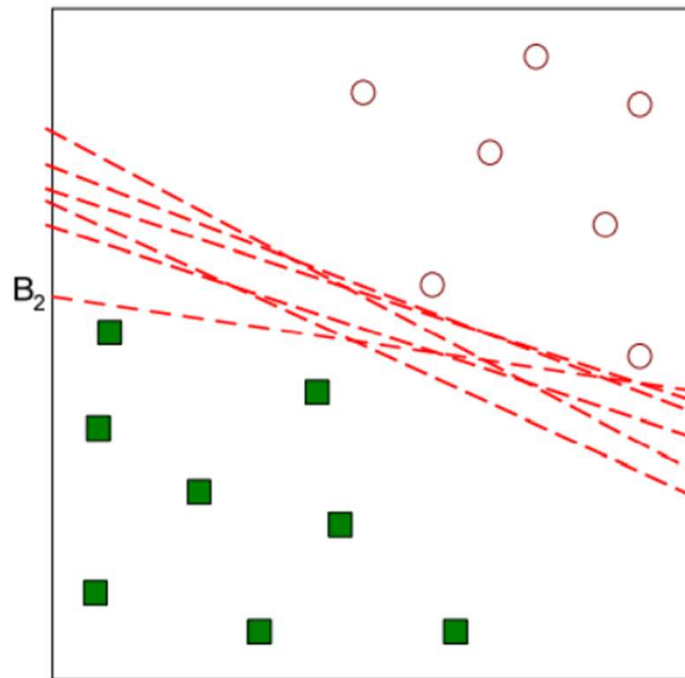
- Outra possível solução.



Support Vector Machine

Dados separados linearmente.

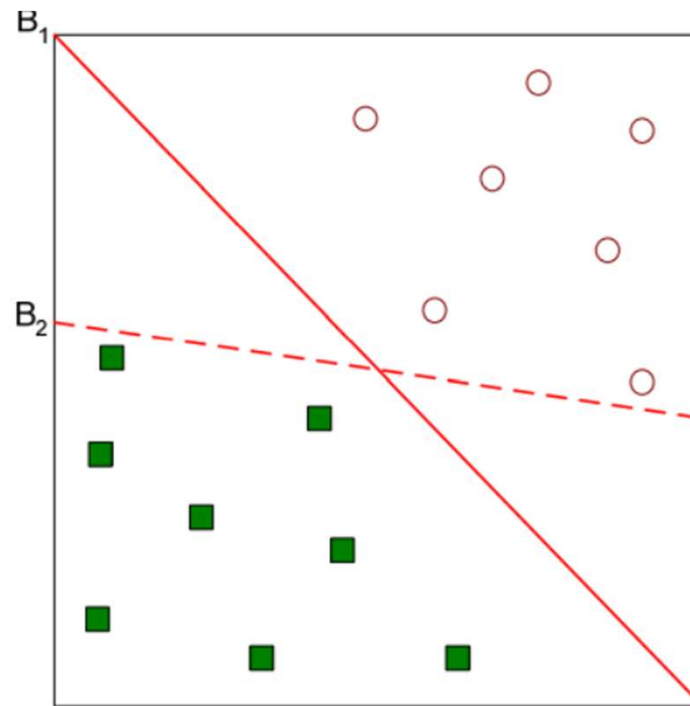
- Outras possíveis soluções.



Support Vector Machine

Dados separados linearmente.

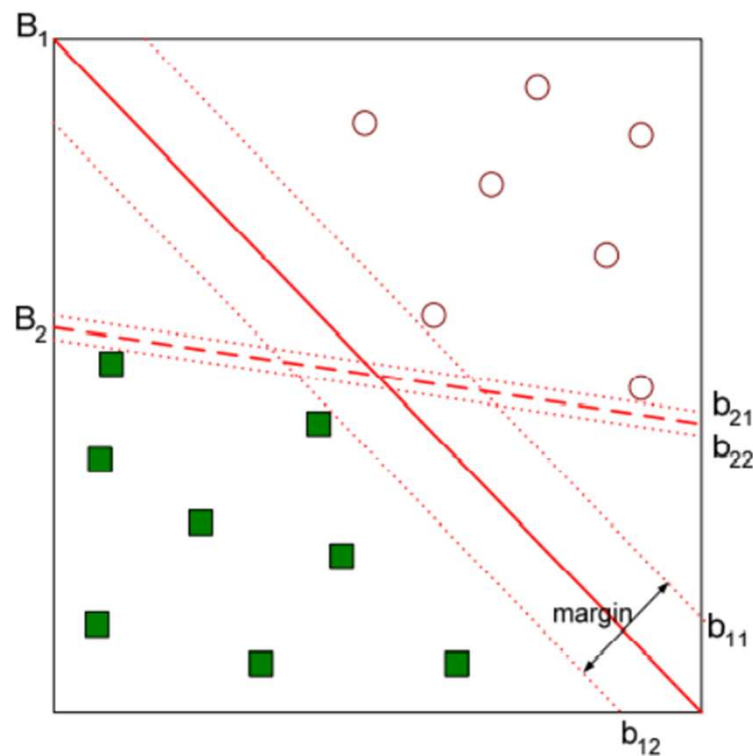
- Qual é o melhor hiperplano? B1 ou B2?



Support Vector Machine

Dados separados linearmente.

- Encontrar o hiperplano que maximize a margem.



Support Vector Machine

Dados separados linearmente.

Algoritmo Determinação do hiperplano ótimo para conjuntos linearmente separáveis (Vert, 2001).

1: Para cada conjunto de treinamento linearmente separável $S = \{(\mathbf{x}_1, y_1), \dots, (\mathbf{x}_n, y_n)\}$

2: Seja $\alpha^* = (\alpha_1^*, \dots, \alpha_n^*)$ a solução do seguinte problema de otimização com restrições:

3: Maximizar: $\sum_{i=1}^n \alpha_i - \frac{1}{2} \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^n y_i y_j \alpha_i \alpha_j \mathbf{x}_i \cdot \mathbf{x}_j$

4: Sob as restrições: $\begin{cases} \sum_{i=1}^n y_i \alpha_i = 0 \\ \alpha_i \geq 0, i = 1, \dots, n \end{cases}$

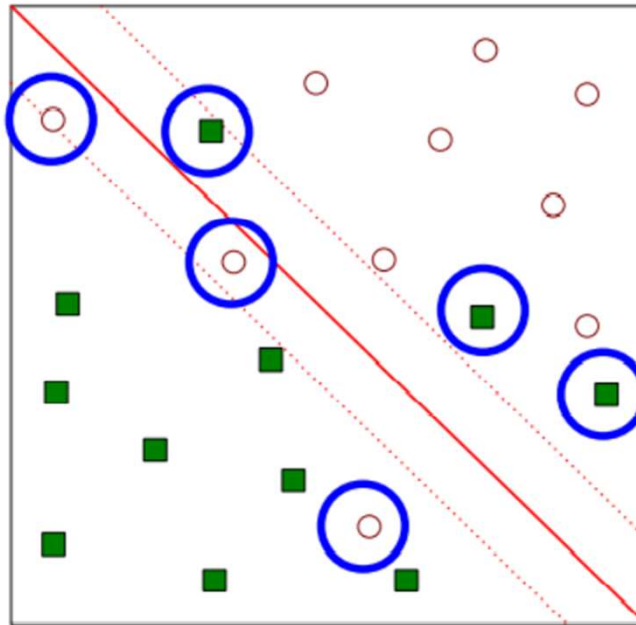
5: O par (\mathbf{w}^*, b^*) apresentado a seguir define o hiperplano ótimo.

6: $\mathbf{w}^* = \sum_{i=1}^n \alpha_i^* y_i \mathbf{x}_i$

7: $b^* = -1/2 \left[\max_{\{i|y_i=-1\}} (\mathbf{w}^* \cdot \mathbf{x}_i) + \min_{\{i|y_i=+1\}} (\mathbf{w}^* \cdot \mathbf{x}_i) \right]$

Support Vector Machine

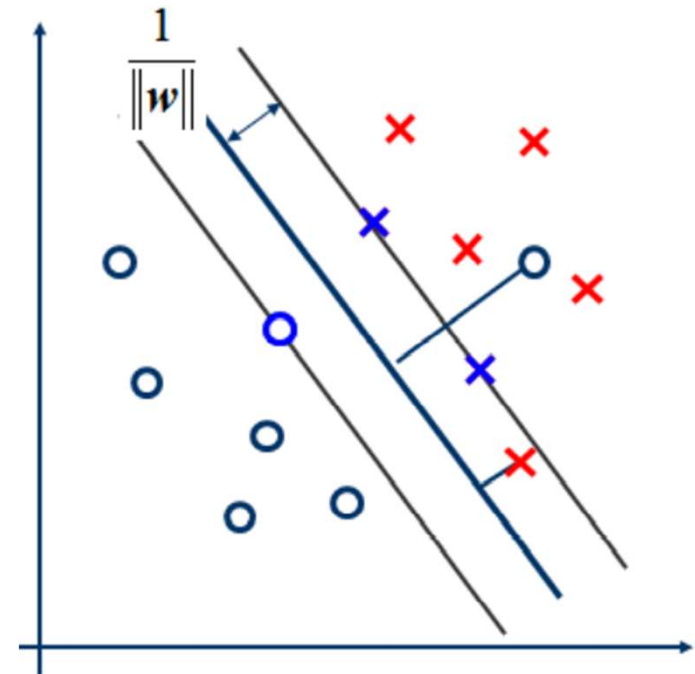
E se o problema não for linearmente separável?



Support Vector Machine

E se o problema não for linearmente separável?

- O coeficiente de penalidade 'C' no SVM controla a importância de evitar erros de classificação no treinamento. Valores maiores enfatizam a classificação correta, enquanto menores permitem mais erros.
- O erro de classificação ' ϵ ' é a diferença entre a saída prevista e a classe verdadeira do dado, e o SVM busca minimizar essa soma para encontrar o hiperplano de separação ótima.



Support Vector Machine

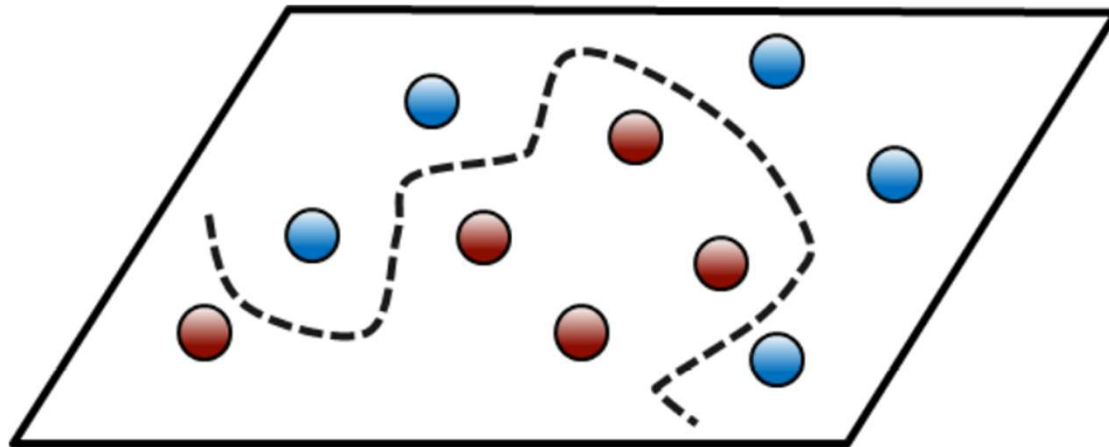
E se o problema não for linearmente separável?

Algoritmo Determinação do hiperplano ótimo para conjuntos de treinamento gerais (Vert, 2001).

- 1: Para cada conjunto de treinamento $S = \{(\mathbf{x}_1, y_1), \dots, (\mathbf{x}_n, y_n)\}$
 - 2: Seja $\alpha^* = (\alpha_1^*, \dots, \alpha_n^*)$ a solução do seguinte problema de otimização com restrições:
 - 3: Maximizar: $\sum_{i=1}^n \alpha_i - \frac{1}{2} \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^n y_i y_j \alpha_i \alpha_j \mathbf{x}_i \cdot \mathbf{x}_j$
 - 4: Sob as restrições:
$$\begin{cases} \sum_{i=1}^n y_i \alpha_i = 0 \\ 0 \leq \alpha_i \leq C, i = 1, \dots, n \end{cases}$$
 - 5: O par (\mathbf{w}^*, b^*) apresentado a seguir define o hiperplano ótimo.
 - 6: $\mathbf{w}^* = \sum_{i=1}^n \alpha_i^* y_i \mathbf{x}_i$
 - 7: $b^* = -1/2 \left[\max_{\{i|y_i=-1\}} (\mathbf{w}^* \cdot \mathbf{x}_i) + \min_{\{i|y_i=+1\}} (\mathbf{w}^* \cdot \mathbf{x}_i) \right]$
-

Support Vector Machine

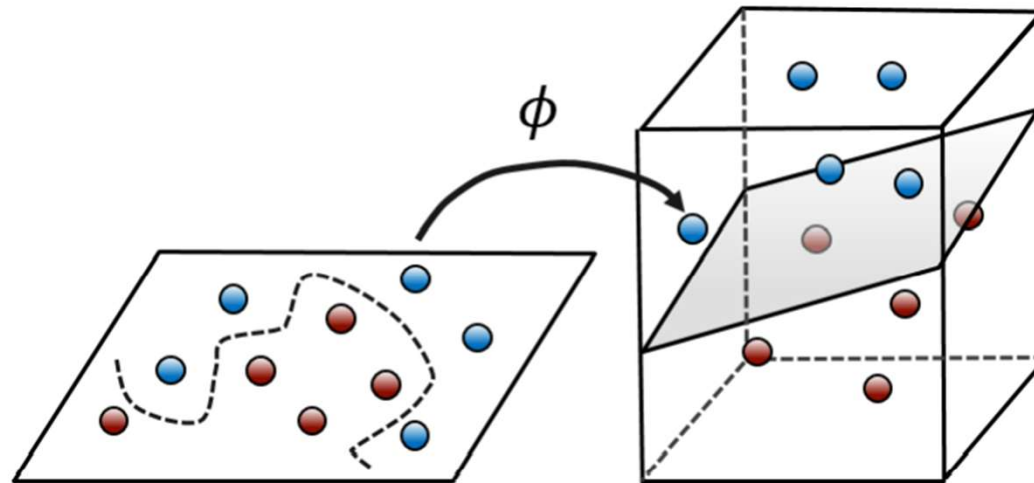
E se o limite de decisão não for linear?



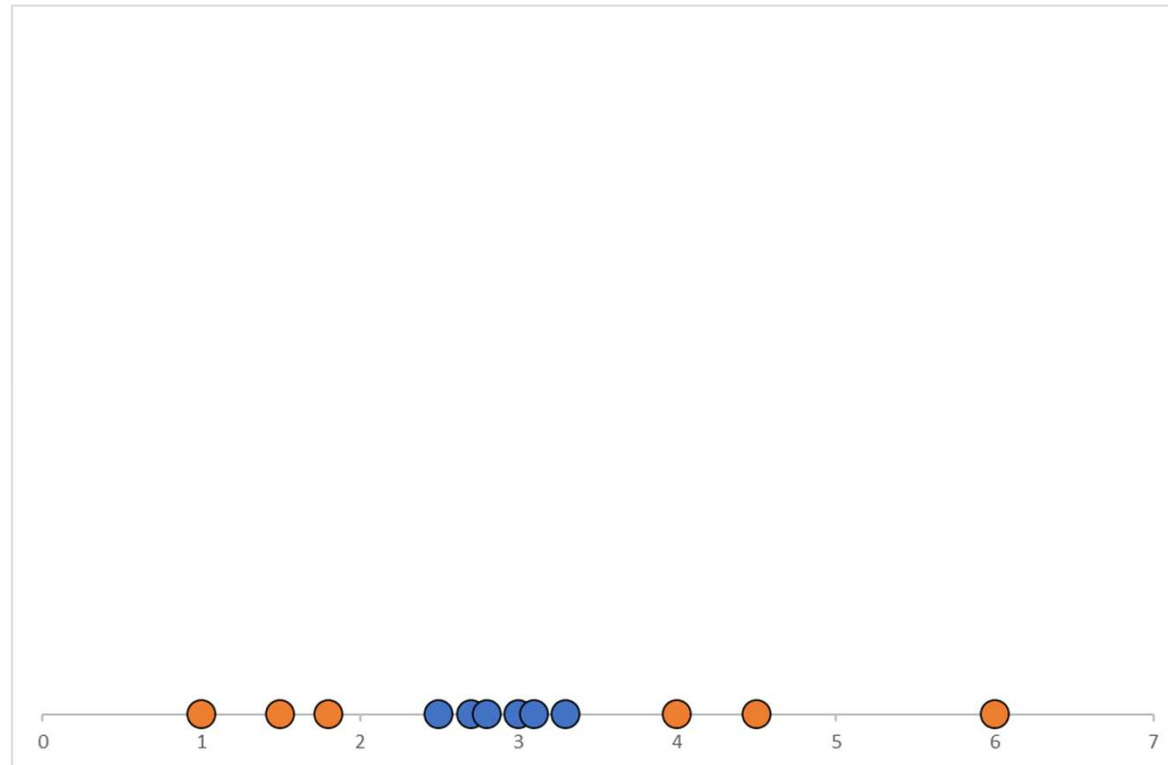
Support Vector Machine

E se o limite de decisão não for linear?

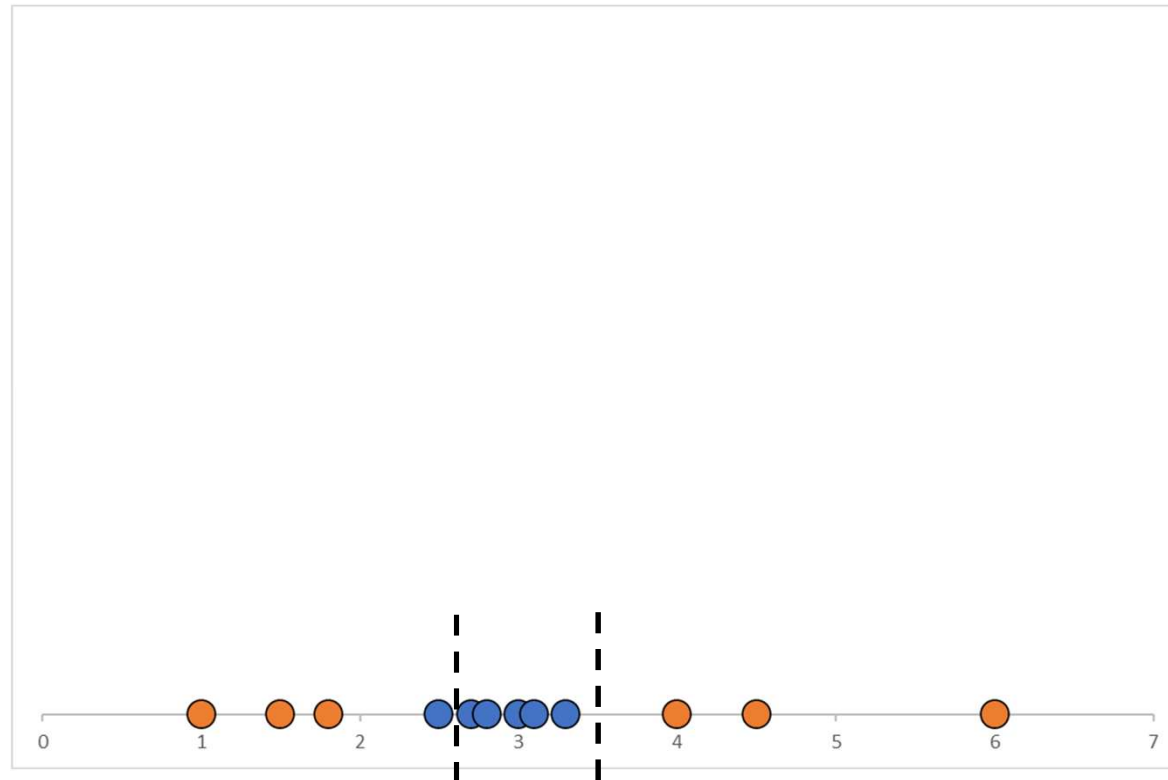
- Transformar os dados originais (treinamento) para uma dimensão maior.



Support Vector Machine

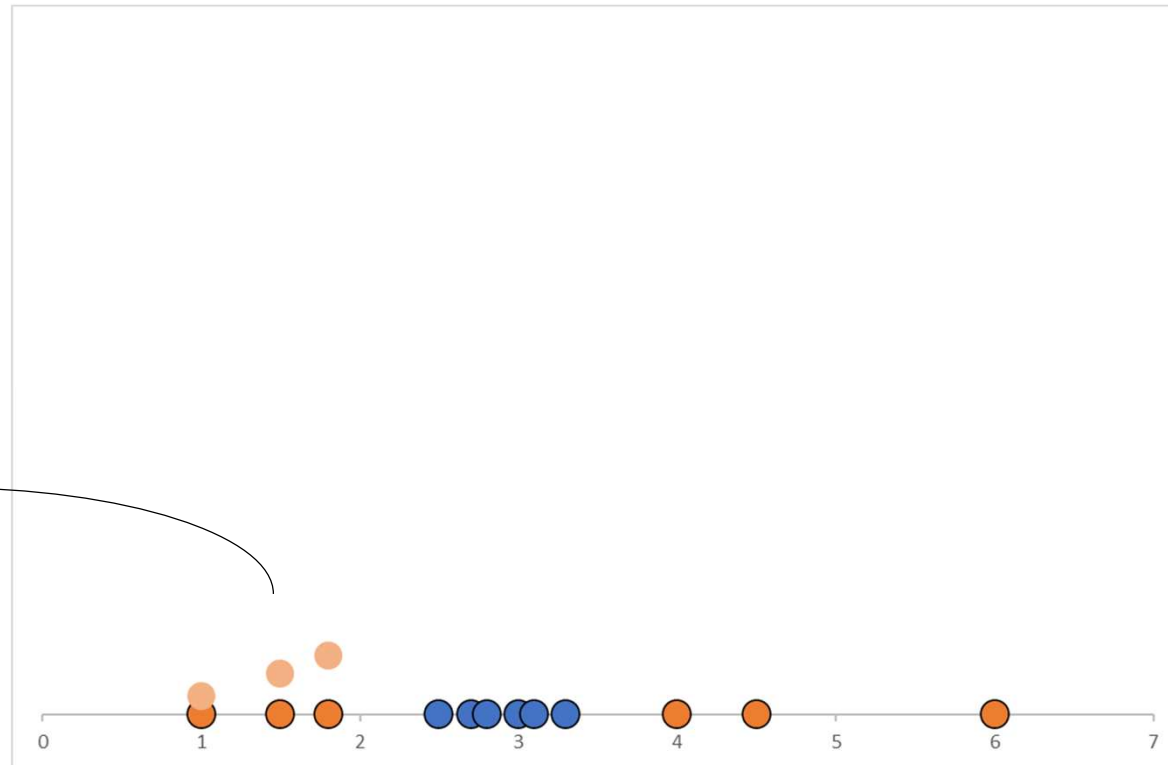


Support Vector Machine

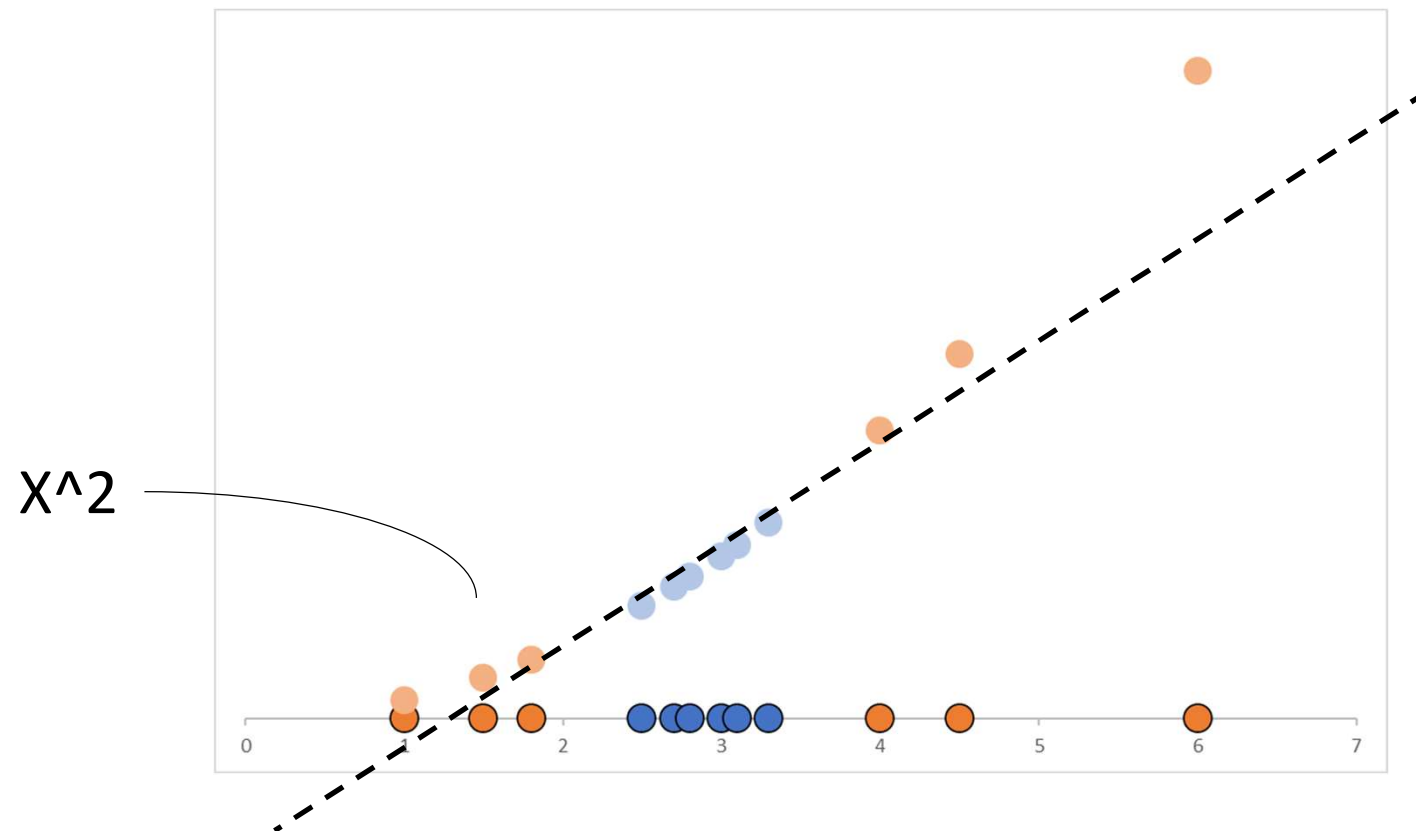


Support Vector Machine

X^2



Support Vector Machine



Support Vector Machine

E se o limite de decisão não for linear?

- Função Kernel

- Kernel polinomial pode ser escrito como:

- $K(X_i, X_j) = (X_i \cdot X_j + 1)^p$

- Kernel gaussiano pode ser escrito como:

- $K(X_i, X_j) = e^{-\frac{1}{2\sigma^2}(X_i - X_j)^2}$

- Kernel RBF pode ser escrito como:

- $K(X_i, X_j) = e^{-\gamma(X_i - X_j)^2}$

- Kernel sigmoid pode ser escrito como:

- $K(X_i, X_j) = \tanh(\eta X_i \cdot X_j + v)$

Support Vector Machine

E se o limite de decisão não for linear?

- Função Kernel

Algoritmo Determinação do hiperplano ótimo no espaço de características (Vert, 2001).

1: Para qualquer conjunto de treinamento $\Phi(S) = \{(\Phi(\mathbf{x}_1), y_1), \dots, (\Phi(\mathbf{x}_n), y_n)\}$

2: Seja $\alpha^* = (\alpha_1^*, \dots, \alpha_n^*)$ a solução do seguinte problema de otimização com restrições:

3: Maximizar: $\sum_{i=1}^n \alpha_i - \frac{1}{2} \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^n y_i y_j \alpha_i \alpha_j \Phi(\mathbf{x}_i) \cdot \Phi(\mathbf{x}_j)$

4: Sob as restrições:
$$\begin{cases} \sum_{i=1}^n y_i \alpha_i = 0 \\ 0 \leq \alpha_i \leq C, \quad i = 1, \dots, n \end{cases}$$

5: O par (\mathbf{w}^*, b^*) apresentado a seguir define o hiperplano ótimo.

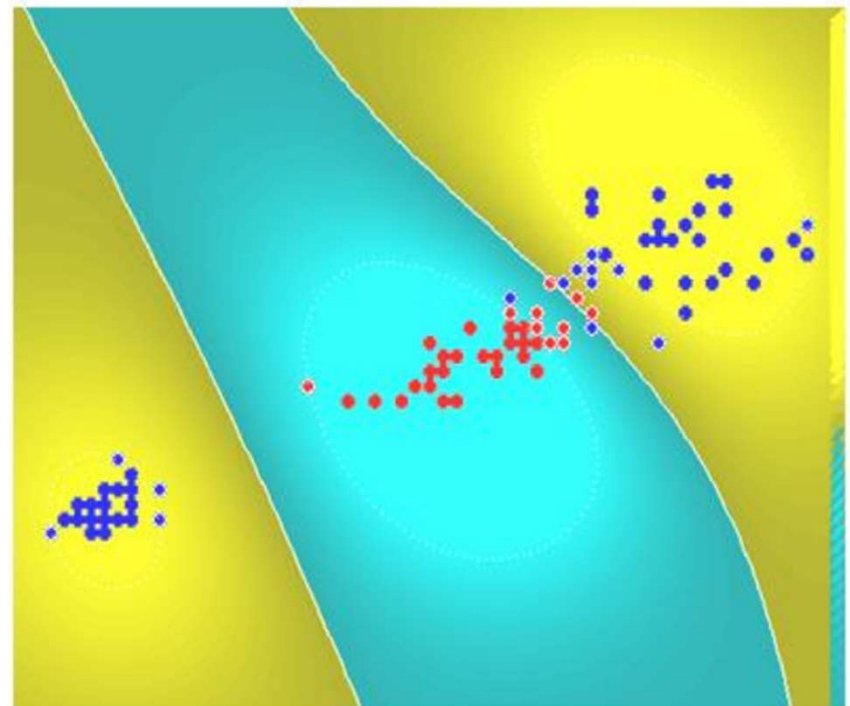
6: $\mathbf{w}^* \leftarrow \sum_{i=1}^n \alpha_i^* y_i \Phi(\mathbf{x}_i)$

7: $b^* \leftarrow -\frac{1}{2} \left[\min_{\{i|y_i=+1\}} (\mathbf{w}^* \cdot \Phi(\mathbf{x}_i)) + \max_{\{i|y_i=-1\}} (\mathbf{w}^* \cdot \Phi(\mathbf{x}_i)) \right]$

Support Vector Machine

Resultados:

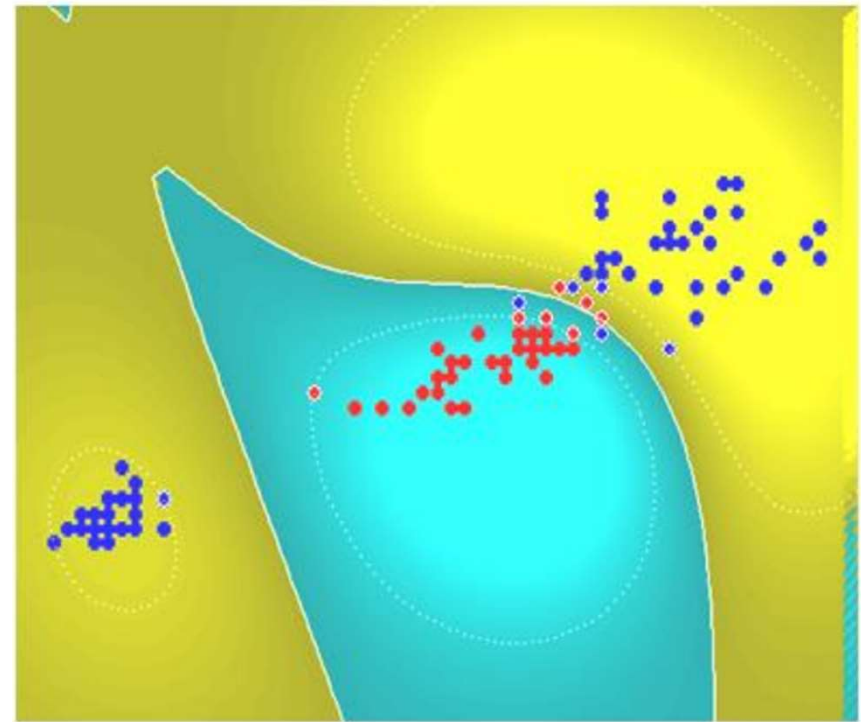
- Datos Iris
 - Kernel RBF, $s = 1$
 - $C = 1$



Support Vector Machine

Resultados:

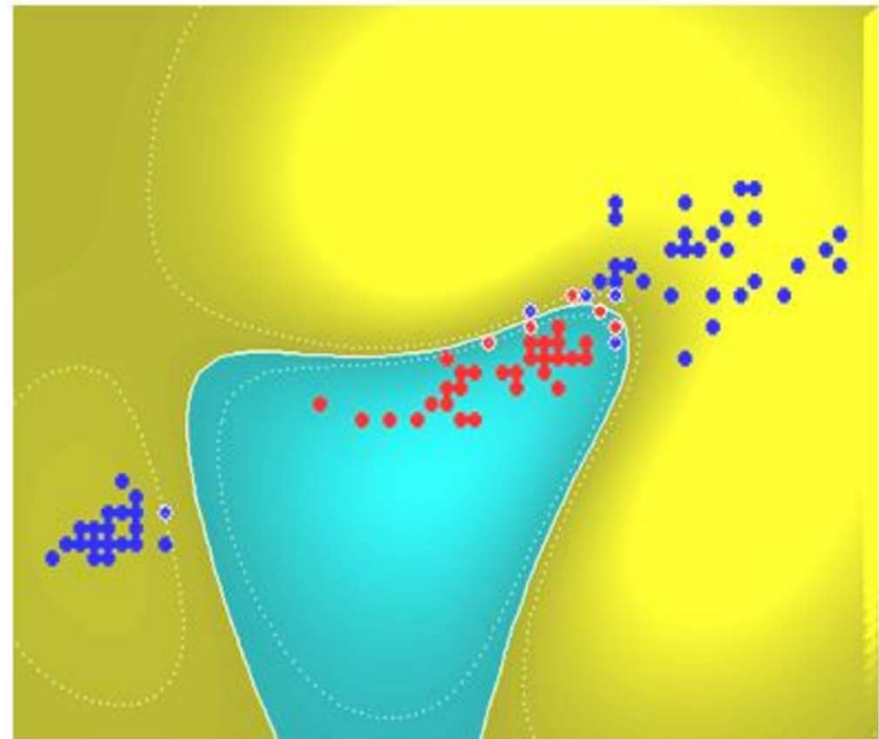
- Datos Iris
 - Kernel RBF, $s = 1$
 - $C = 10$



Support Vector Machine

Resultados:

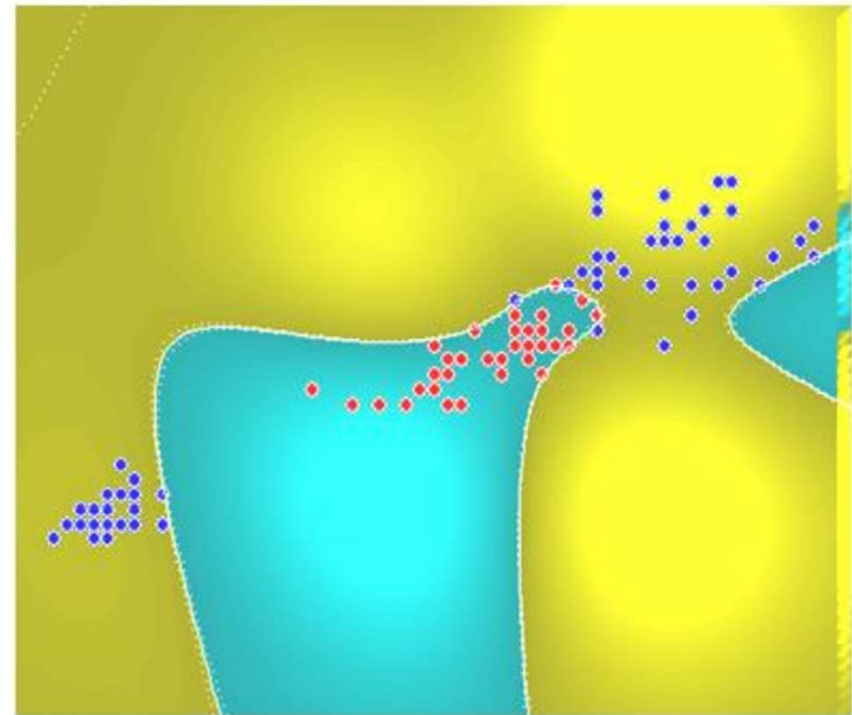
- Datos Iris
 - Kernel RBF, $s = 1$
 - $C = 1000$



Support Vector Machine

Resultados:

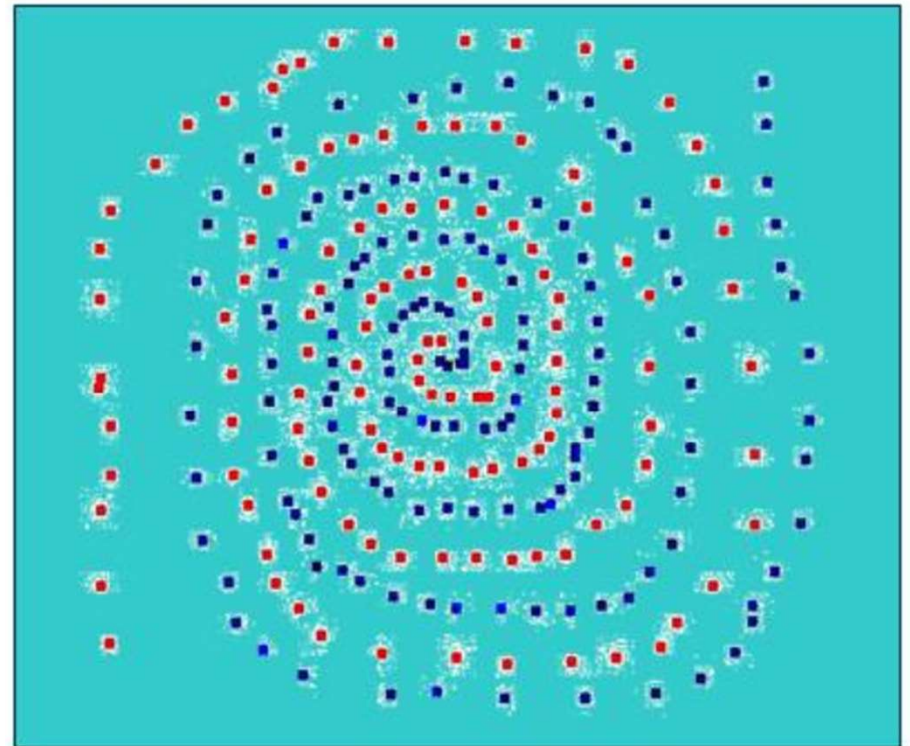
- Datos Iris
 - Kernel RBF, $s = 1$
 - $C = \text{infinito}$



Support Vector Machine

Resultados:

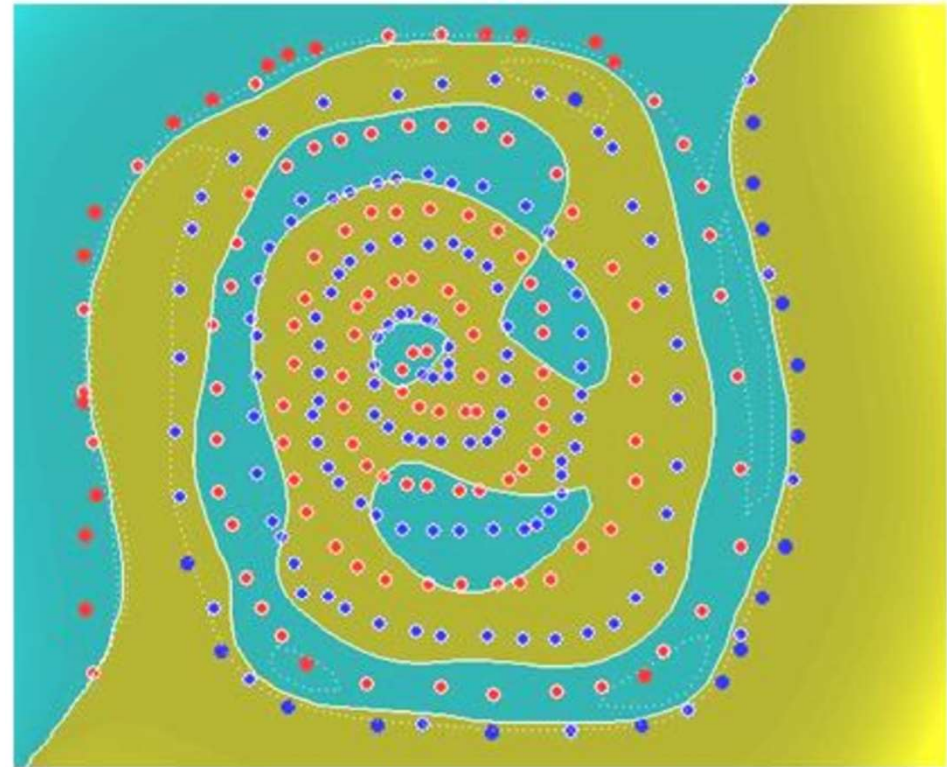
- Espiral complexa



Support Vector Machine

Resultados:

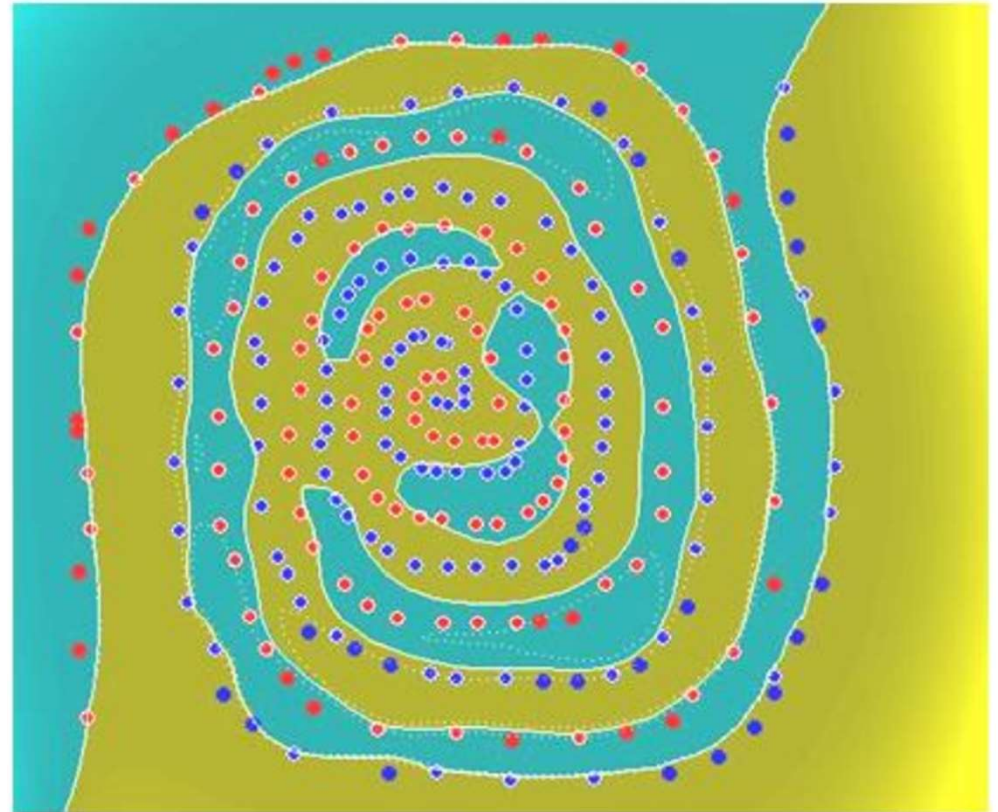
- Espiral complexa
 - Kernel RBF, $s = 1$
 - $C = \text{infinito}$



Support Vector Machine

Resultados:

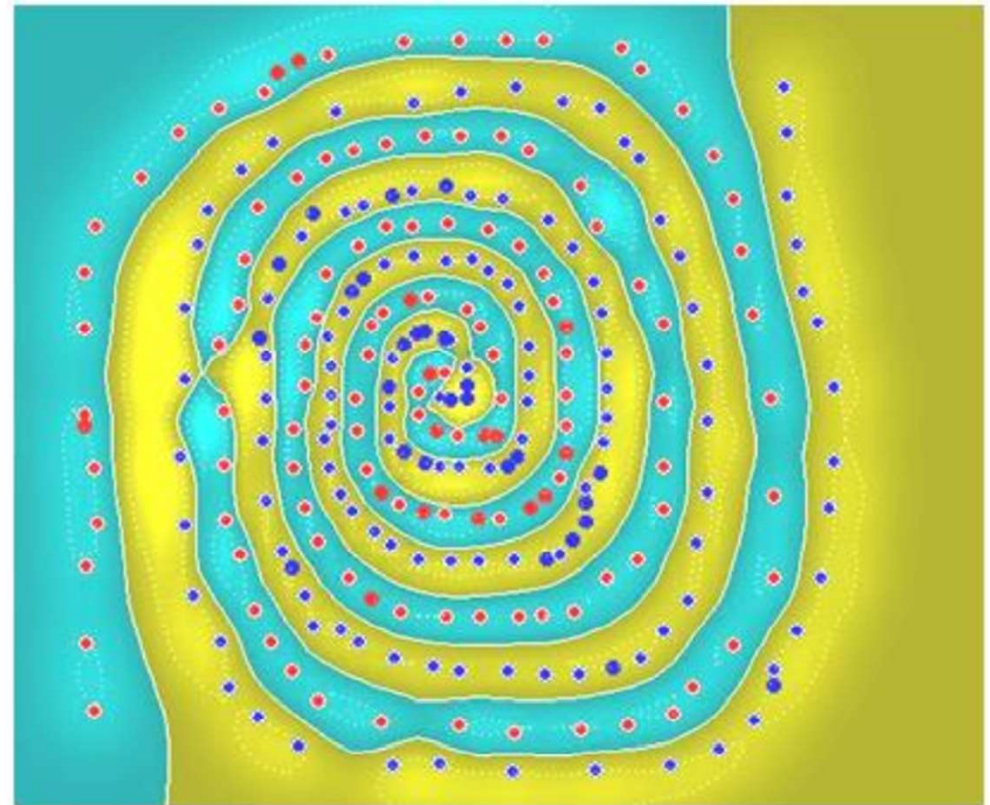
- Espiral complexa
 - Kernel RBF, $s = 0.5$
 - $C = \text{infinito}$



Support Vector Machine

Resultados:

- Espiral complexa
 - Kernel RBF, $s = 0.1$
 - $C = \text{infinito}$



Support Vector Machine

SVM é eficaz para alta dimensionalidade?

- A complexidade do classificador treinado é caracterizada pelo número de vetores suporte e não pela dimensionalidade dos dados.
- Os vetores suporte são exemplos de treinamentos essenciais ou críticos. Se um treinamento for repetido, os mesmos hiperplanos de separação devem ser encontrados (determinístico).
- O número de vetores suporte em um SVM pode ser usado para estimar o limite superior da taxa de erro esperado do classificador, o que é independente da dimensionalidade dos dados.
- Assim, SVM com um pequeno número de vetores suporte pode ter boa generalização, mesmo com a dimensionalidade dos dados alta.

Support Vector Machine

SVM vs RNA

□ SVM

- Novo conceito
- Algoritmo determinístico
- Ótimas propriedades para generalização
- Aprendizado difícil – usa técnicas de programação quadrática.
- Usando **kernels** (núcleos) é capaz de aprender funções complexas.

□ Redes Neurais

- Relativamente velho
- Algoritmo não-determinístico
- Generaliza bem, mas não tem forte fundamento matemático
- Pode aprender facilmente em um modo incremental.
- Para aprender funções complexas pode-se usar o multilayer perceptron (**que não é trivial**).

Support Vector Machine

Desvantagens:

- Sensibilidade aos parâmetros: O desempenho do SVM pode ser sensível à escolha dos parâmetros, como o coeficiente de penalidade C e o kernel utilizado, exigindo ajustes cuidadosos.
- Requer escala dos recursos: Antes de aplicar o SVM, é necessário normalizar ou escalar as características para evitar que recursos com escalas muito diferentes afetem o resultado.
- Dificuldade em lidar com dados desbalanceados: Quando as classes são desbalanceadas (uma classe tem muito mais exemplos que outra), o SVM pode favorecer a classe majoritária, resultando em baixo desempenho para a classe minoritária.

Support Vector Machine

Utilidades:

- Classificação: SVM é comumente usado para classificação binária e multiclasse, sendo eficiente em tarefas de classificação.
- Regressão: SVM também pode ser usado para problemas de regressão, estimando valores numéricos ao invés de classes.
- Detecção de Anomalias: SVM é útil na detecção de anomalias, identificando padrões incomuns em dados.
- Classificação em Dados de Alta Dimensão: É adequado para dados com muitas características, como em análise de texto e processamento de imagens.

Support Vector Machine

Aplicações práticas:

- **Detecção de Fraudes em Cartões de Crédito:** Usado para identificar transações fraudulentas com base em padrões de uso de cartões de crédito.
- **Diagnóstico de Câncer:** Aplicado para classificar amostras de tecido como benignas ou malignas em testes de biópsia, auxiliando no diagnóstico precoce e tratamento eficiente de pacientes com câncer.
- **Reconhecimento de Rostos:** Usado para identificar e reconhecer rostos em imagens, sendo utilizado em sistemas de autenticação e vigilância.
- **Análise de Sentimento em Redes Sociais:** Aplicado para classificar comentários ou postagens em sentimentos positivos ou negativos, permitindo análise de opiniões e feedback de usuários em mídias sociais.
- **Previsão de Preços de Ações:** O SVM pode ser usado para prever os preços futuros das ações com base em padrões históricos de mercado, auxiliando investidores na tomada de decisões financeiras.

Support Vector Machine

E agora?

Comentários