1 Support Vector Machines para Classificação de Nós em Redes utilizando Kernel de Difusão

Vítor Amorim Fróis

Support Vector Machines são uma das minhas ideias favoritas no contexto de Aprendizado de Máquina. É um conceito muito simples que combinado com matemática, se torna uma ferramenta poderosa. O cientista soviético Vladimir Vapnik trouxe a ideia original nos anos 60 mas apenas em 1992, um grupo de cientistias foram capazes de encontrar um truque que transformasse o modelo linear em não linear. Esse truque permite aplicar o modelo para qualquer tipo de dado desde que haja um kernel adequado. Assim, vamos ver como aplicar o conceito para classificação de nós em grafos.

1.1 Support Vector Machines

Imagine duas classes separáveis que vivem em um espaço qualquer. Para criar um modelo, devemos encontrar a melhor maneira de separá-los. Enquanto Árvores de Decisão e Redes Neurais tem suas ideias, SVM buscam encontrar uma faixa que realize a melhor separação.

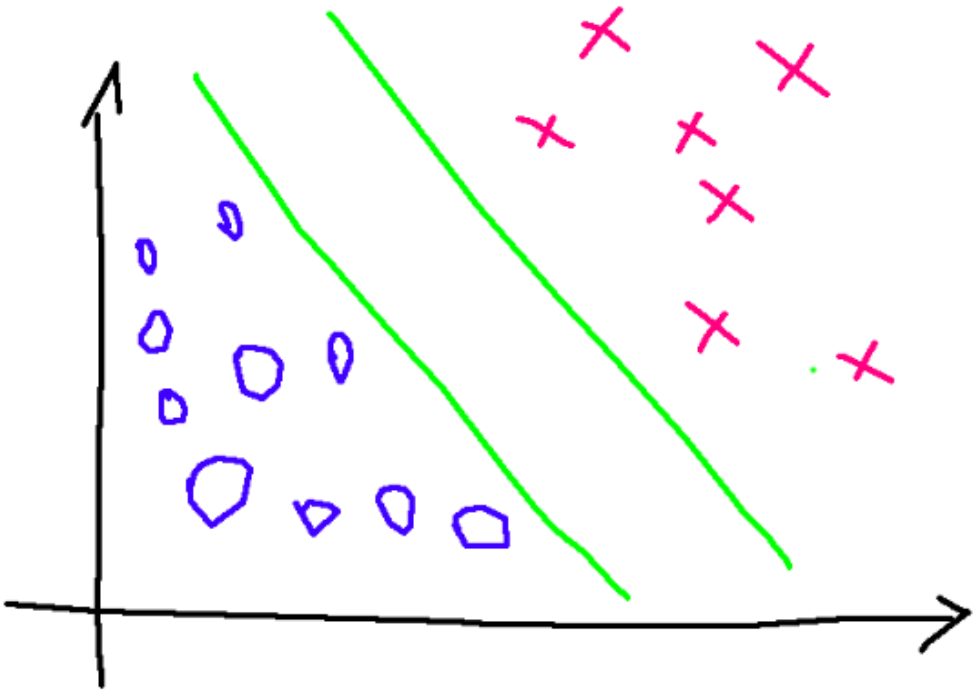


Figure 1: Xs e Os separados pela faixa verde

A faixa tem duas bordas e nós queremos maximizar a distância entre elas.

1.1.1 Regra de Decisão

Considere $\vec{w}$ um vetor perpendicular a faixa e considere que queremos classificar um novo exemplo $\vec{u}$. Nosso objetivo é checar se $\vec{u}$ pertence ao lado direito ou esquerdo da faixa. Para tanto, nós devemos projetar $\vec{u}$ em $\vec{w}$

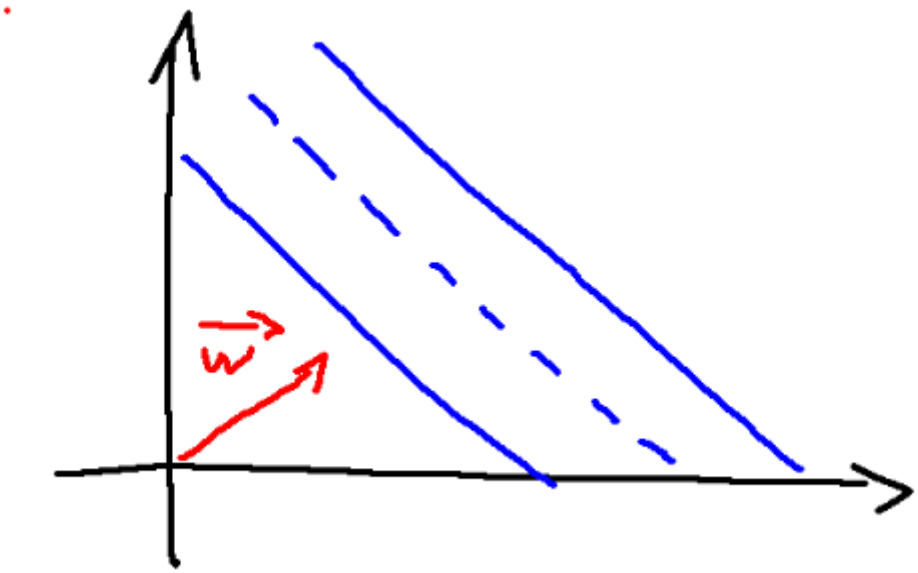


Figure 2: Street gutters and $\vec{w}$

Assim, para classificar $\vec{u}$ entre classe 1 ou 2, checamos se $\vec{w}\vec{u} \geq c$, onde c é uma constante. Considerando $c = -b$, podemos escrever uma regra de decisão:

- Se $\vec{w}\vec{u} + b \geq 0$ então $\vec{u}$ pertence a classe 1.

Ótimo! Mas ainda não sabemos qual valor usar, então devemos introduzir algumas restrições (constraints) a fim de calcular $\vec{w}$ e b. Considere x_1, x_2 amostras de classe 1 e 2 respectivamente. Assim,

$$\vec{w}\vec{x_1} + b \geq 1$$

$$\vec{w}\vec{x_2} + b \leq 1$$

Para conveniência introduzimos y de forma que

$$x_1 \implies y_i = 1$$

$$x_2 \implies y_i = -1$$

Assim reescrevemos (1) com y_i dos dois lados:

$$y_i(\vec{w}\vec{x_i} + b) \geq 1$$

Note que amostras nas bordas da faixa tem

$$y_i(\vec{w}\vec{x_i} + b) = 1$$

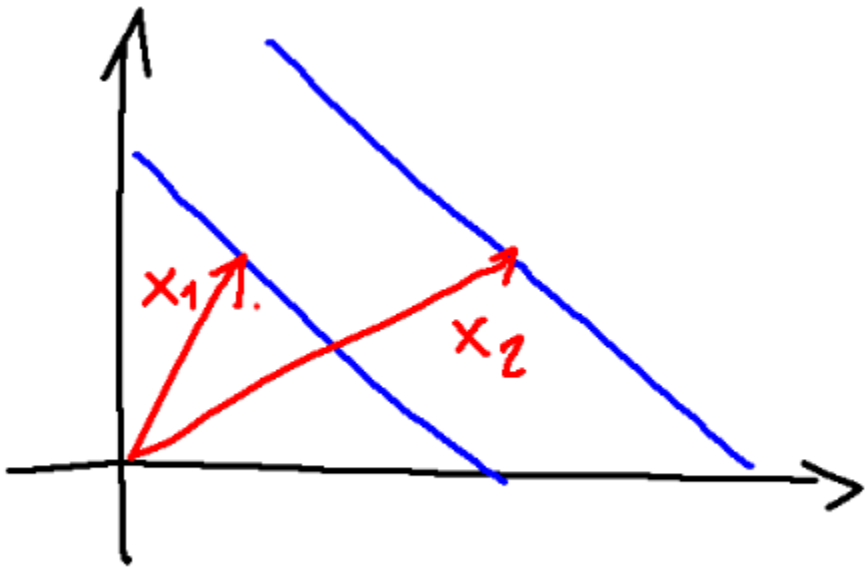


Figure 3: Samples on the gutters

1.1.2 Encontrando a faixa mais larga

Sabendo a equação para amostras nas bordas, podemos encontrar a largura da faixa ao projetar a diferença entre os representantes de cada classe nas boardas pela vetor perpendicular a faixa normalizado.

O vetor perpendicular que buscamos é $\frac{\vec{w}}{||\vec{w}||}$ e a diferença $(x_1 - x_2)$. Portanto, a largura da faixa é dada por width $= \frac{\vec{w}}{||\vec{w}||}(x_1 - x_2)$.

Reescrevendo (1) para amostras nas bordas obtemos

$$\vec{x_1} = \frac{1-b}{\vec{w}}$$

$$\vec{x_2} = -\frac{1-b}{\vec{w}}$$

E substituindo na fórmula da largura

$$\text{width} = \frac{\vec{w}}{||\vec{w}||}(\frac{1-b}{\vec{w}} + \frac{1-b}{\vec{w}}) = \frac{2}{||\vec{w}||}$$

Nós queremos maximizar a largura, isto é, maximizar $\frac{2}{||\vec{w}||}$. De forma mais conveniente, podemos minimizar $\frac{1}{2}||\vec{w}||^2$.

1.1.3 Otimização com Multiplicadores de Lagrange

Para minimizar $\frac{1}{2}||\vec{w}||^2$ com as restrições $y_i(\vec{w}\vec{x_i} + b) - 1 \geq 0$ (as quais garantem que cada amostra estará do lado correto) podemos utilizar Multiplicadores de Lagrange. O Lagrangiano é uma expressão da forma

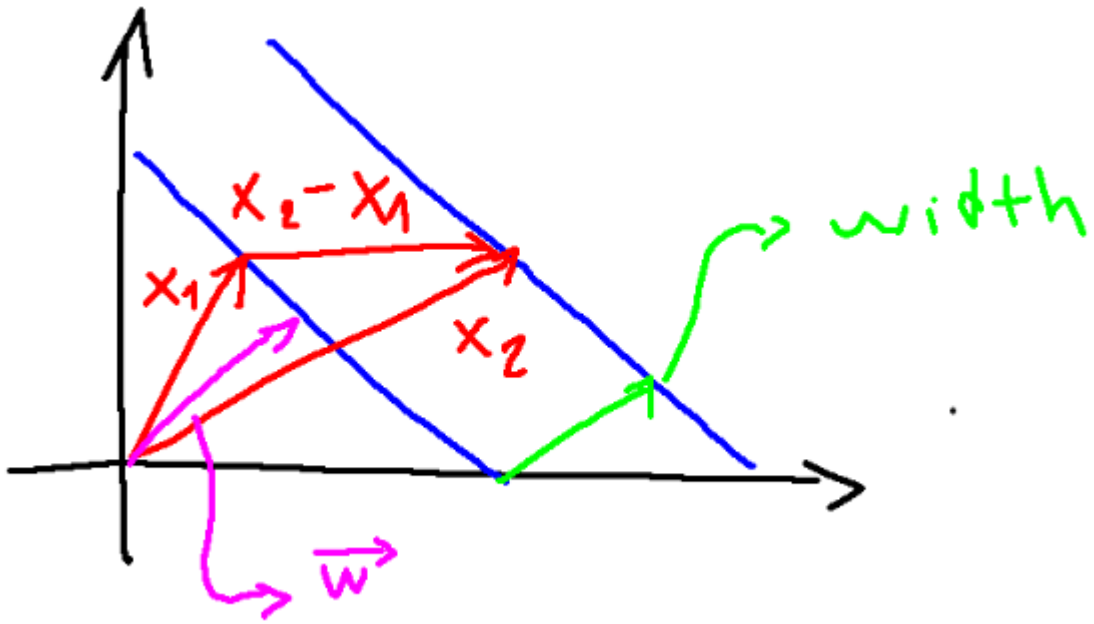


Figure 4: Visualizing street width

$L(x, \lambda) = f(x) - \lambda g(x)$. O valor mínimo é encontrado quando pegamos as derivadas parciais e igualamos a 0.

$$L = \frac{1}{2}||\vec{w}||^2 - \sum_l a_i(y_i(\vec{x_i}\vec{w} + b) - 1)$$

Introduzimos αs para cada amostra. A soma é realizada sobre o conjunto de amostras l.

Note que $\frac{\partial||\vec{w}||}{\partial\vec{w}} = \frac{\vec{w}}{||\vec{w}||}$.

Ao pegar as derivadas parciais obtemos

$$\frac{\partial L}{\partial \vec{w}} = \vec{w} - \sum_l a_i y_i \vec{x_i} = 0 \implies \vec{w} = \sum_l a_i y_i \vec{x_i}$$

$$\frac{\partial L}{\partial b} = \sum_l a_i y_i = 0$$

Resumindo, encontramos que o vetor $\vec{w}$ é uma combinação linear das amostras. Podemos substituir as expressões obtidas em L para encontrar:

$$L = \frac{1}{2}(\sum_l a_i y_i \vec{x_i})(\sum_l a_j y_j \vec{x_j}) - (\sum_l a_i y_i \vec{x_i})(\sum_l a_j y_j \vec{x_j}) + \sum_l a_i$$

$$L = \sum_l a_i - \frac{1}{2}(\sum_l a_i a_j y_i y_j \vec{x_i}\vec{x_j})$$

Finalmente! O mais importante aqui é descobrirmos que **a otimização depende apenas do produto escalar dos pares de amostras** $(\vec{x_i}\vec{x_j})$.

Podemos inserir o vetor obtido para a faixa $\vec{w} = \sum_l a_i y_i \vec{x_i}$ para encontrar uma nova regra de decisão:

Se $\sum_l a_i y_i \vec{x_i} \vec{u} + b \geq 0$ então $\vec{u}$ pertence a classe 1.

De forma similar, a **regra de decisão também depende apenas do produto escalar entre o vetor desconhecido e as amostras**.

Nota 1: é possível provar que o Lagrangiano pertence a um espaço convexo, e portanto, o máximo local também é global.

Nota 2: as amostras com $\alpha_i \neq 0$ serão aquelas nas bordas da faixa.

1.2 Kernel

Uma forma comum para lidar com a linearidade de um vetor $\vec{u} : R^m$ é criar uma função $\phi(x) : R^m R^n$ com $n \geq m$ em que as novas coordenadas $\phi(u)$ serão dadas por funções não lineares. Esse processo pode ser computacionalmente pesado, especialmente em altas dimensões.

Entretanto, como visto nos últimos parágrafos, para otimizar e classificar precisamos apenas do resultado de $u \cdot v$ ou $\phi(u) \cdot \phi(v)$. O Kernel Trick é que nós *não precisamos de uma função* ϕ, apenas de uma função que calcule o resultado de $\phi(u)\phi(v)$. Essa função é o kernel, representado pela letra k.

$$k(u, v) = \phi(u)\phi(v)$$

1.2.1 Kernel RBF

O Kernel Radial Basis Function (RBF), generaliza um kernel polinomial para gerar a relação entre vetores num espaço de dimensão infinita:

$$k(u, v) = \exp(-\lambda ||\vec{u} \cdot \vec{v}||)$$

1.3 Formulação Final

Considere um conjunto de amostras x, um kernel k. Uma nova amostra $\vec{u}$ é classificada usando

$$\text{sgn}(\sum_l a_i y_i k(\vec{x_i}, \vec{u}) + b)$$

onde $\vec{\alpha}$ resolve

$$\text{argmin}_{\vec{\alpha}} \sum_l a_i - \frac{1}{2}(\sum_l a_i a_j y_i y_j k(\vec{x_i}, \vec{x_j}))$$

$$\sum_l a_i y_i = 0$$

1.4 Inferência em Grafos

Em ciência de dados, os dados podem estar estruturados como nós de um grafo e não como vetores. Isso pode acontecer naturalmente, pela discretização de um espaço contínuo ou por que é conveniente.

Para aplicar SVMs em grafos, é preciso encontrar um $k(u, v)$ entre os nós.

1.4.1 Matriz de Adjacência

Não é um kernel válido :(Podemos encontrar vários problemas. Um exemplo muito claro é que nem todos vértices podem ser diretamente alcançáveis.

1.4.2 Difusão em Grafos

Para resolver esse problema, utilizamos a difusão em grafos. A difusão é um processo amplamente conhecido na física e pode ser interpretado como o espalhamento de uma substância quando introduzido em um meio.

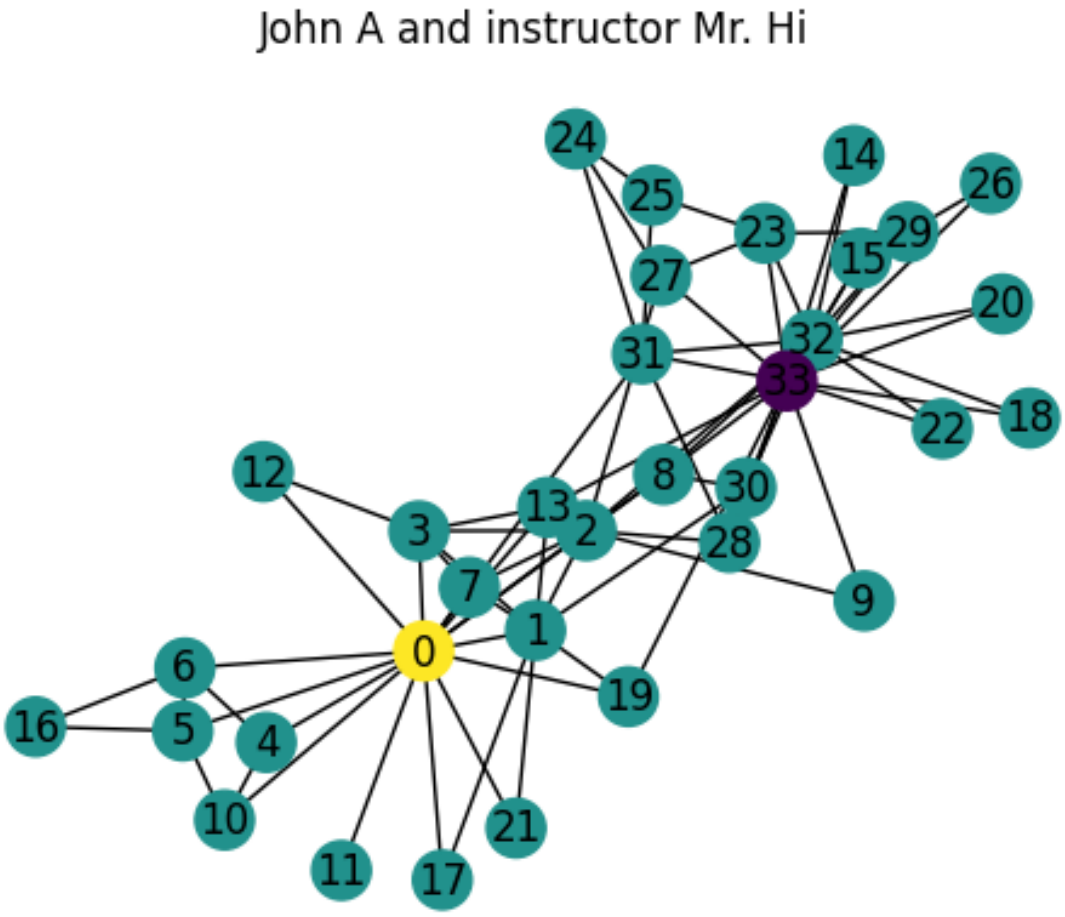
Na versão para grafos, a difusão pode ser considerada como um RBF em grafos e representa caminhadas aleatórias em tempo contínuo.

$$K = \exp(\Delta)$$

onde Δ é o Laplaciano da matriz de adjacência.

1.4.3 Exemplo: Karate Club

A rede social Karate Club foi estudada por Zachary por um período de três anos, de 1970 a 1972. A rede captura 34 membros do clube, documentando ligações entre pares de membros que interagiam fora do clube. Durante o estudo surgiu um conflito entre o administrador "John A" (nó 33) e o instrutor "Mr. Hi" (nó 0), o que levou à divisão do clube em dois. Metade dos membros formou um novo clube em torno do Sr. Hi; membros da outra parte encontraram um novo instrutor ou desistiram do caratê. Com base nos dados coletados, Zachary atribuiu corretamente todos os membros do clube, exceto um.



Vamos realizar a difusão no Grafo com

$$K = \exp(\Delta)$$

Para realizar a classificação, pegamos o sinal do estado de cada nó.

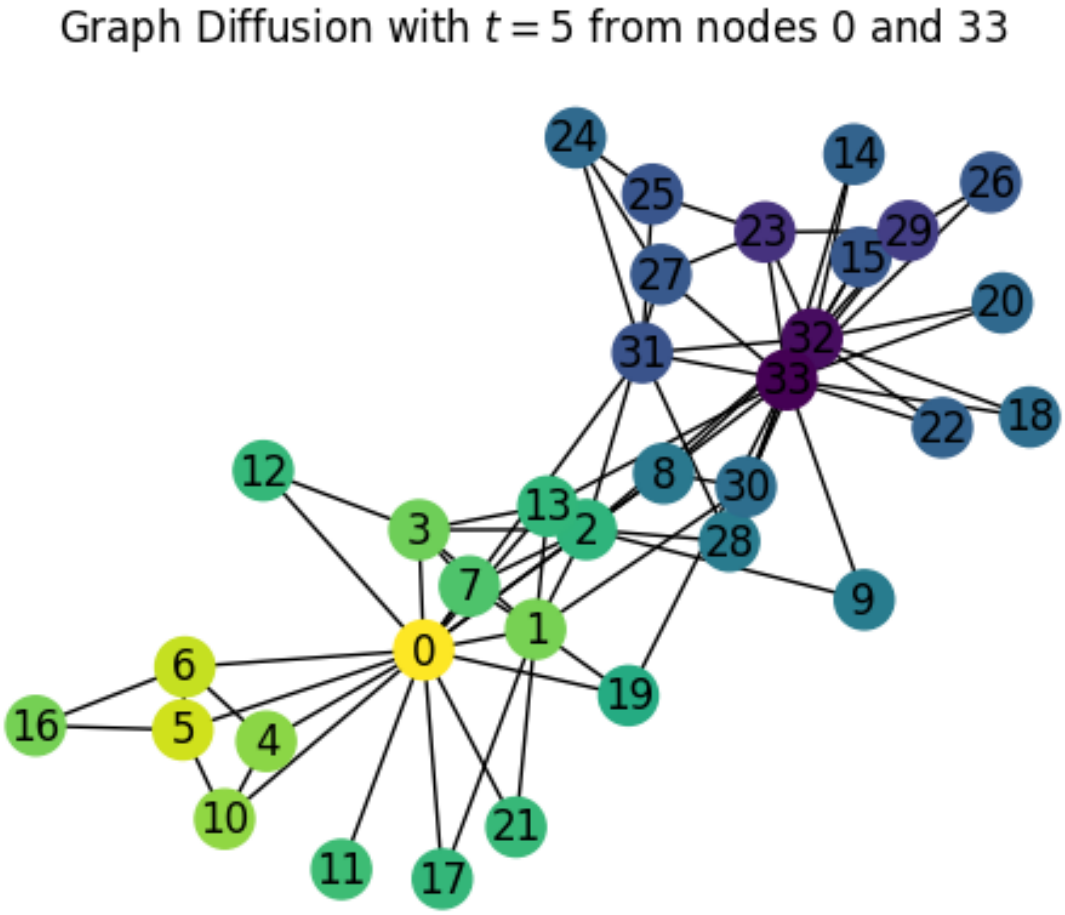


Figure 5: Difusão no Grafo

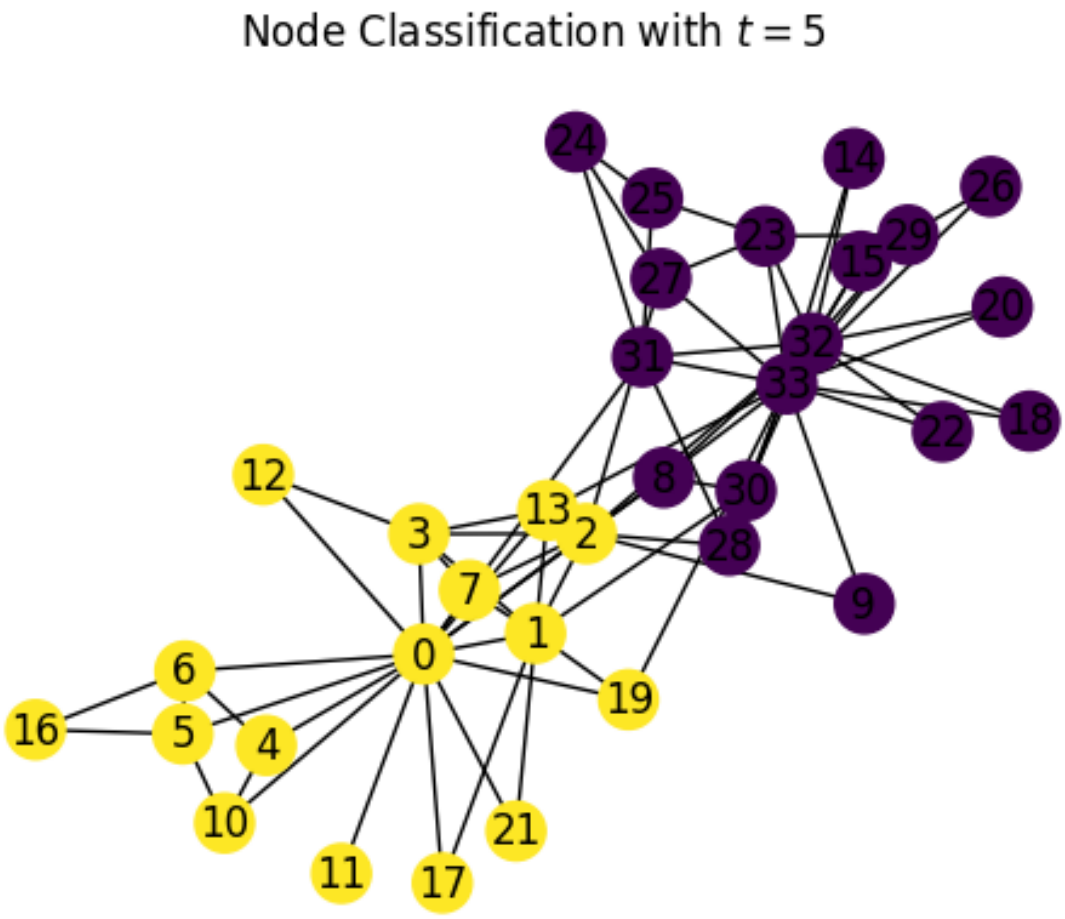


Figure 6: Nós classificados

1.4.4 Referências

- StatQuest on SVM
- Patrick Winston Lecture on SVM
- RBF kernel as a projection into infinite dimensions
- The Kernel Cookbook
- Inference on Graphs
- Diffusion Kernels