APRENDIZADO DE MÁQUINA

MÁQUINAS DE VETORES DE SUPORTE (SVM'S)

PROF. RONALDO CRISTIANO PRATI

ronaldo.prati@ufabc.edu.br

Bloco A, sala 513-2

SVM'S

- Máquinas de vetores de suporte são uma outra família de algoritmos de aprendizado de máquina supervisionado
  - Em certos casos, é mais simples de usar que redes neurais
  - Também tem ótimo desempenho em certas aplicações

FUNÇÃO DE CUSTO

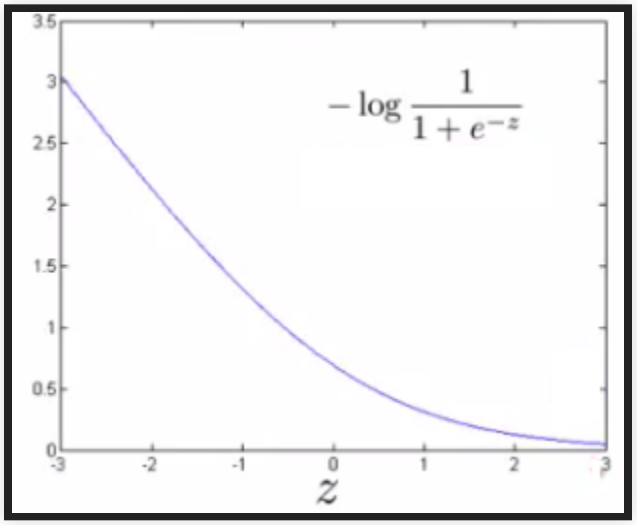
- Relembramos da função de custo da regressão logística:

$$J(\theta) = \frac{1}{m}\sum_{i}^{m} -y^i \log(h_\theta(x^i)) - (1 - y_i)\log(1 - h_\theta(x^i))$$

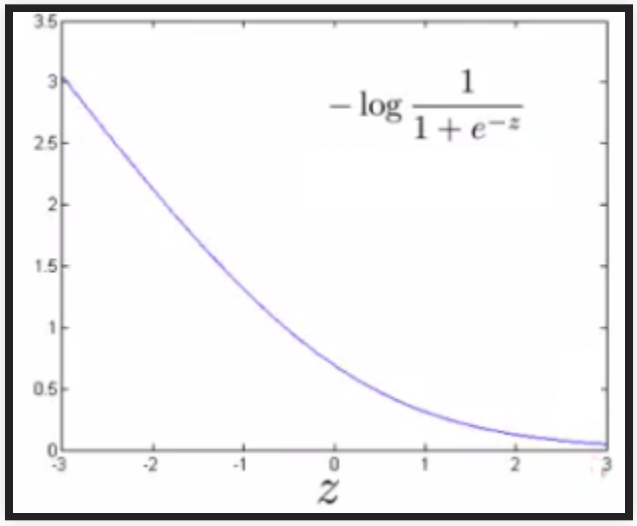
  - Na regressão logística queremos:
    - se $y = 1$, $h_\theta(x) \approx 1$ e $\theta^\intercal x > 0$
    - se $y = 0$, $h_\theta(x) \approx 0$ e $\theta^\intercal x < 0$

FUNÇÃO DE CUSTO

QUANDO $Y = 1$

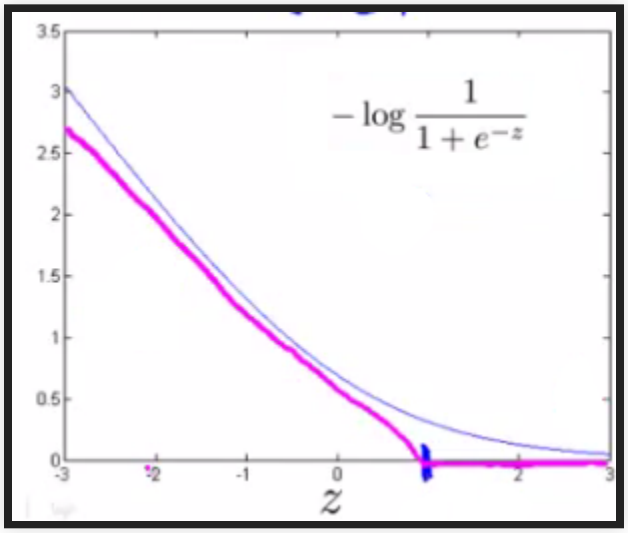


QUANDO $Y = 0$



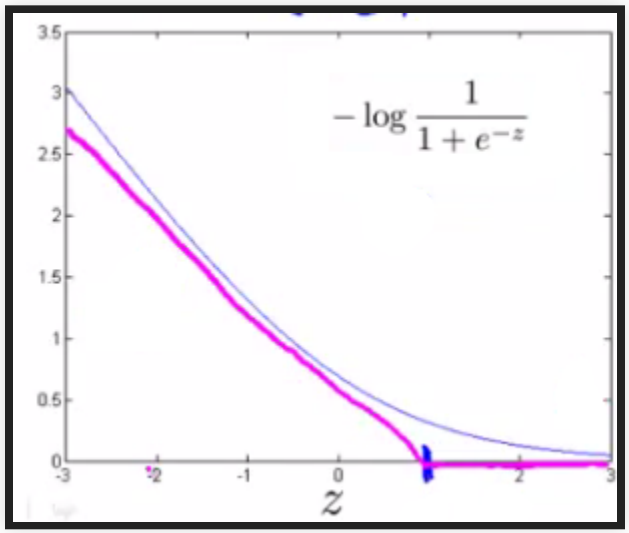
FUNÇÃO DE CUSTO - SVM

QUANDO $Y = 1$



$cost_1(z)$

QUANDO $Y = 0$



$cost_0(z)$

FUNÇÃO DE CUSTO COMPLETA - SVM

- Removemos $\frac{1}{m}$ (convenção, não altera o mínimo)
- Parâmetro de regularização associado ao primeiro termo (razão mais adiante)

$$\min_{\theta} C \sum_{i}^{m} -y^i cost_1(h_\theta(x^i)) - (1 - y_i) cost_0(1 - h_\theta(x^i)) +$$

FUNÇÃO DE CUSTO COMPLETA - SVM

- O parâmetro C pode é equivalente a $\frac{1}{\lambda}$.
  - Se quisermos regulizarar mais (reduzir overfitting), decrescemos C
  - Se quisermos regularizar menos (reduzir underfitting), aumentados C
- Ao contrário da regressão logística, a saída de $h_\theta(x)$ é somente 0 ou 1 (não uma probabilidade)

MAXIMIZAÇÃO DA MARGEM

- SVM também é conhecida como **classificador de margem larga**
- Em SVM queremos:
  - se $y = 1$, $\theta^\intercal x \geq 1$ (não apenas > 0)
  - se $y = 0$, $\theta^\intercal x \leq -1$ (não apenas < 0)

MAXIMIZAÇÃO DA MARGEM

- Para entender o efeito, vamos considerar um valor de C muito grande
- Nesse caso $\sum \theta^2$ predomina na função de custo, que resulta no problema

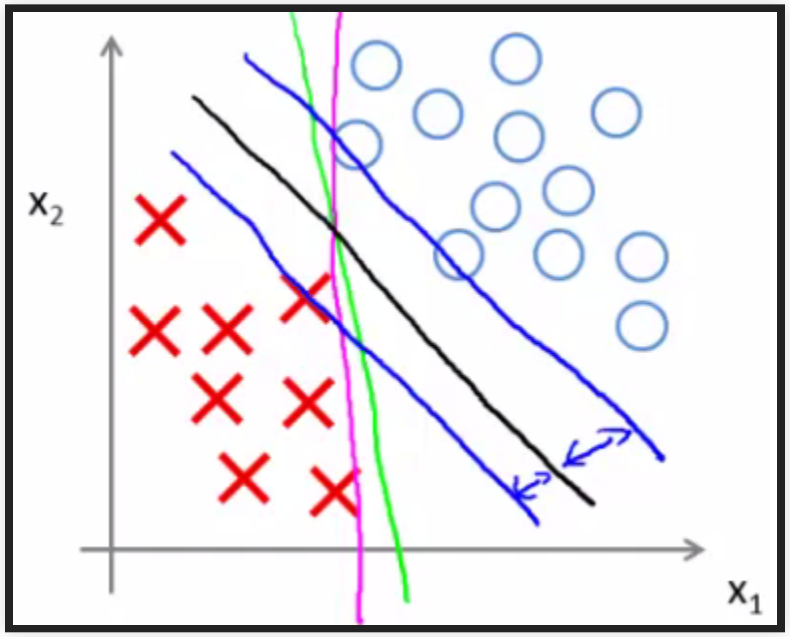
$$\min_{\theta} \frac{1}{2} \sum_{i}^{n} \theta^2$$

$$s.a. \theta^\intercal x \geq 1 \text{ se } y = 1$$

$$\theta^\intercal x \leq -1 \text{ se } y = 0$$

MAXIMIZAÇÃO DA MARGEM

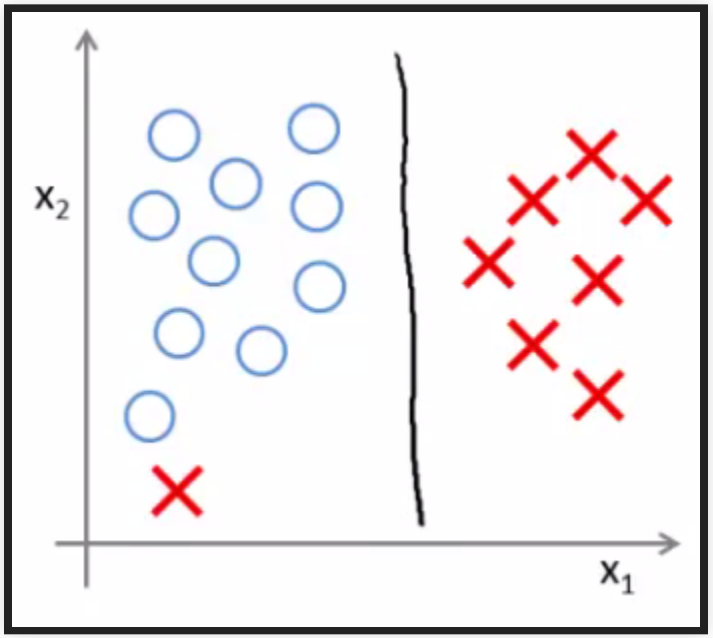
- Esse problema corresponde a encontrar a fronteira de decisão que maximiza a margem de separação entre as classes



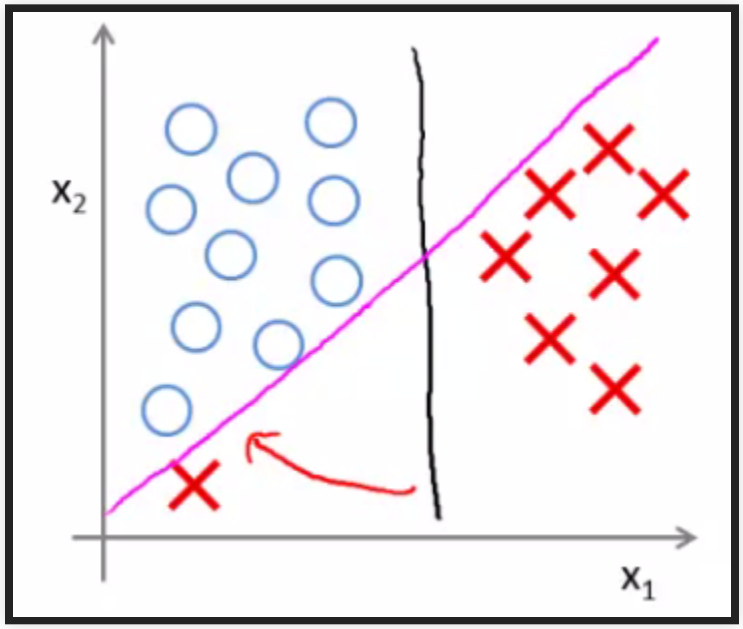
MAXIMIZAÇÃO DA MARGEM

- O parâmetro de regularização C ajuda a contornar *outliers*

C adequado



C muito grande



MAXIMIZAÇÃO DA MARGEM

- Por que a margem é maximizada?
- Vamos analisar intuitivamente
  - Vamos considerar um problema com 2 dimensões (é mais fácil desenhar)
  - Vamos desconsiderar θ_0 por hora
  - Vamos considerar também um problema linearmente separável

MAXIMIZAÇÃO DA MARGEM

- Relembre que queremos $\min_\theta \frac{1}{2} \sum_i^n \theta^2$
  - Vamos reescrever $\sum_i^n \theta^2$:

$$\begin{aligned} \sum \theta^2 &= (\theta_1^2 + \theta_2^2) \\ &= \left(\sqrt{\theta_1 + \theta_2}\right)^2 \\ &= \|\theta\|^2 \end{aligned}$$

  - em que $\|\theta\|^2$ é a norma (tamanho) do vetor

MAXIMIZAÇÃO DA MARGEM

- O que $\theta^\intercal x$ faz?

$$\begin{aligned}\theta^\intercal x^i &= \begin{bmatrix}\theta_1 \\ \theta_2\end{bmatrix} [x_1^i x_2^i] \\ &= \theta_1 x_1 + \theta_2 x_2 \\ &= \langle \theta, x^i \rangle \\ &= p^i \|\theta\|\end{aligned}$$

- em que $\langle \theta, x^i \rangle$ é o produto interno entre θ e x^i, e p^i é o comprimento da projeção de x^i em θ.

MAXIMIZAÇÃO DA MARGEM

- As restrições

$$\theta^{\mathsf{T}} x \geq 1 \text{ se } y = 1$$
$$\theta^{\mathsf{T}} x \leq -1 \text{ se } y = 0$$

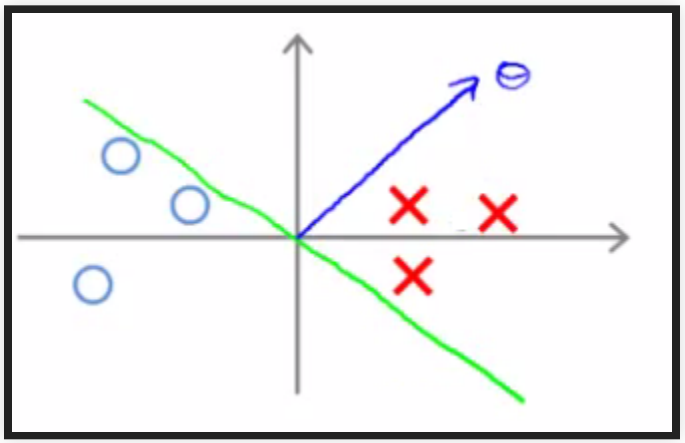
podem ser reinterpretadas como

$$p^i \|\theta\| \geq 1 \text{ se } y = 1$$
$$p^i \|\theta\| \leq -1 \text{ se } y = 0$$

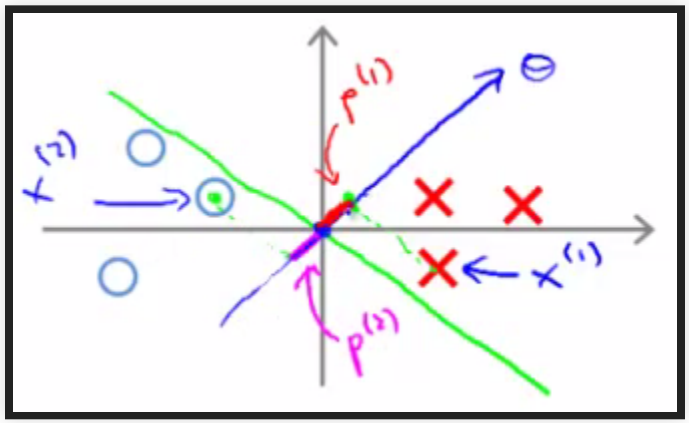
MAXIMIZAÇÃO DA MARGEM

- Se a margem entre as classes for pequena

Margem pequena



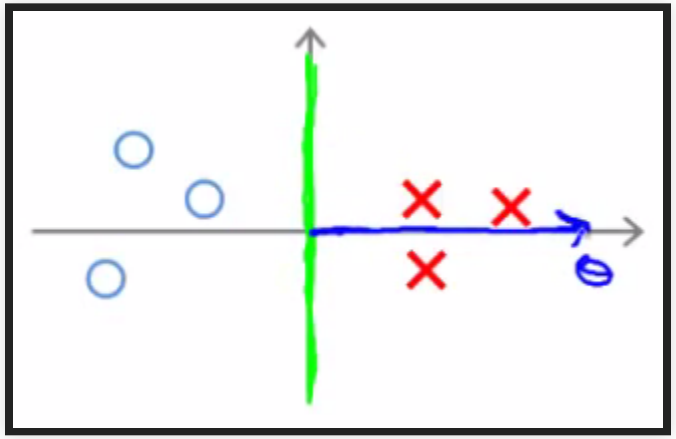
Projeção pequena



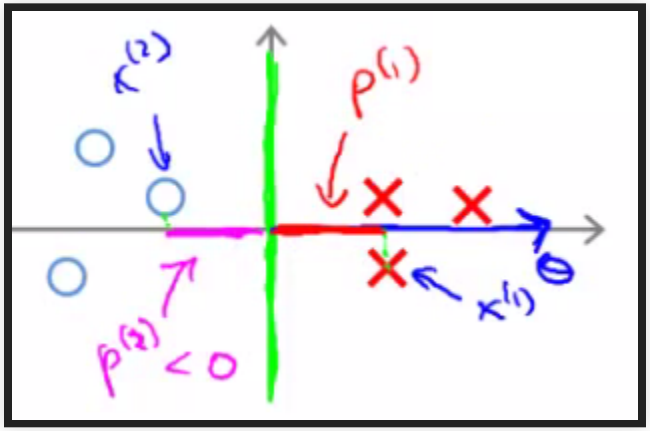
MAXIMIZAÇÃO DA MARGEM

- Se a margem entre as classes for grande

Margem grande



Projeção maximizada



MAXIMIZAÇÃO DA MARGEM

- Se p é pequeno, $||\theta||$ tem que ser grande para garantir as restrições.
- Mas queremos minimizar $||\theta||^2$!
- Maximizar p minimiza $||\theta||$

MAXIMIZAÇÃO DA MARGEM

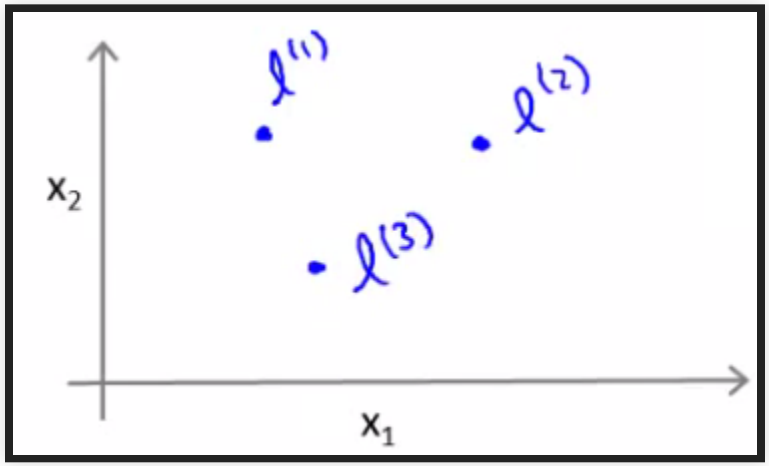
- Inicialmente ignoramos θ_0
  - A fronteira de decisão deve passar obrigatóriamente pela origem
- Se θ_0 puder assumir outros valores, não temos a restrição da fronteira de decisão passar pela origem
- Os princípios gerais continuam os mesmos

KERNEL

- O **kernel** é útil quando queremos computar uma fronteira de decisão não linear
- A ideia consiste em calcular um novo espaço de atributos
  - Já fizemos algo parecido quando usamos polinômios a partir do conjunto original de atributos
- Kernels são uma outra maneira de fazer isso

KERNEL GAUSSIANO

- Considere que temos 3 pontos de referencia l^1, l^2 e l^3



KERNEL GAUSSIANO

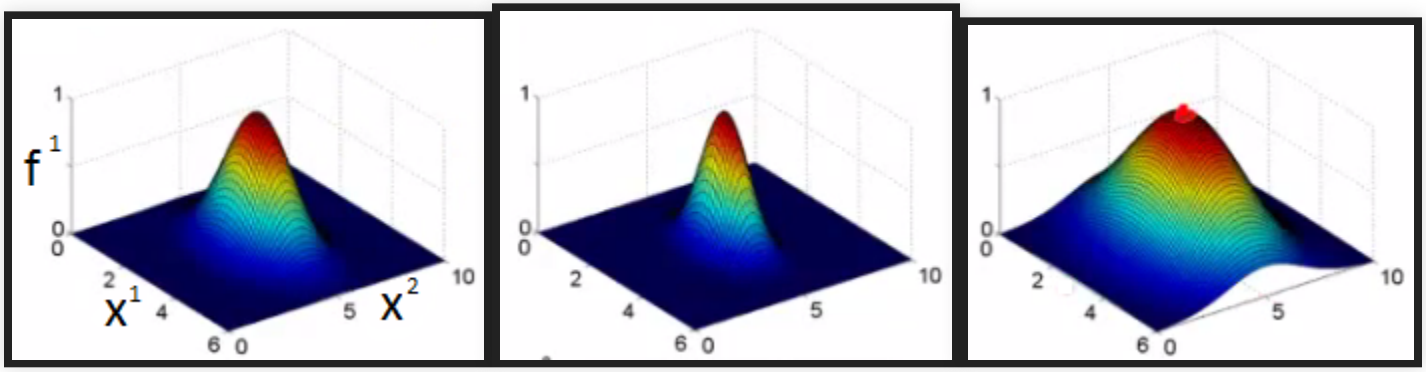
- Vamos agora definir 3 novos atributos f^1, f^2 e f^3 com base em l^1, l^2 e l^3 tal que:

$$f^i = \exp\left(-\frac{\|x - l^i\|}{2\sigma^2}\right)$$

- Essa função de similiradade é chamada de *kernel gaussiano*

INFLUÊNCIA DE SIGMA

- Sigma controla a "influência" da função de similaridade no espaço



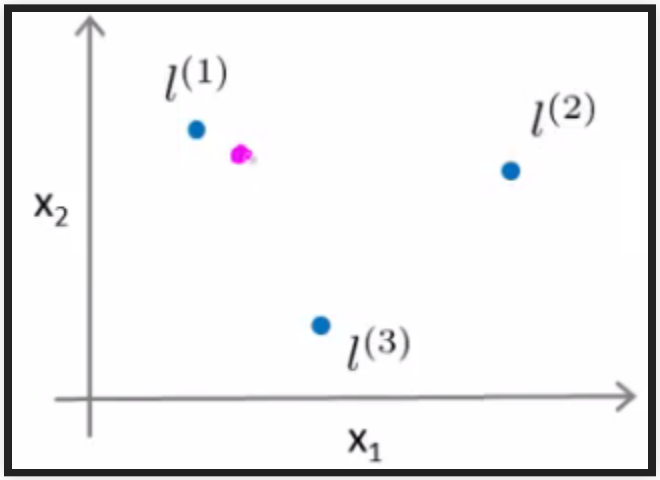
HIPÓTESE

- Como essa funções influenciam na hipótese?
- Vamos supor que $\sigma = [-0.5, 1, 1, 0]$

HIPÓTESE

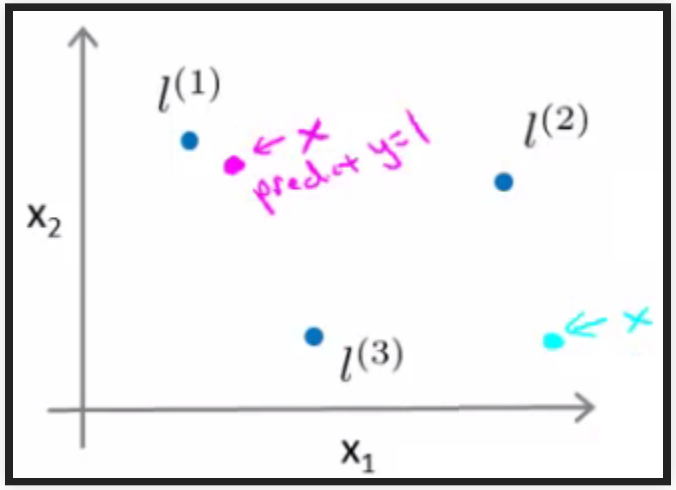
$$h := \theta_0 + \theta_1 f_1 + \theta_2 f_2 + \theta_3 f_3 \geq 0$$

$$-0.5 + 1 + 0 + 0 = 0.5$$



magenta é classificado como 1

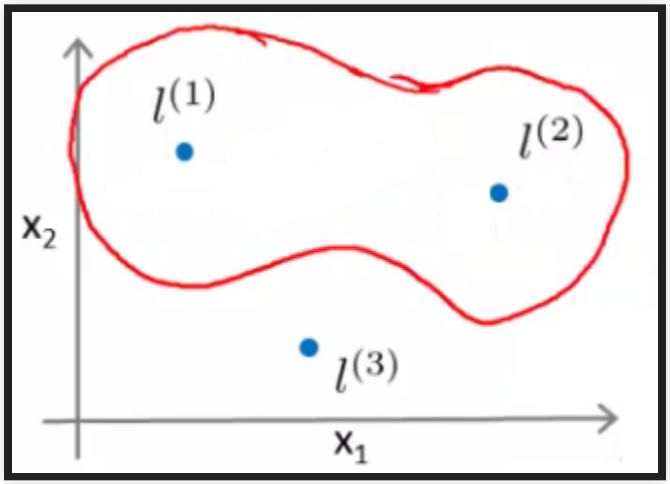
$$-0.5 + 0 + 0 + 0 = -0.5$$



verde é classificado como 0

HIPÓTESE

- Dentro da região marcada como vermelho é classificado como 1
- Fora é classificado como 0



KERNELS

- Podemos usar cada exemplo do conjunto de treinamento como um ponto de referência
- Cada novo atributo mede o quão próximo um novo exemplo está dos pontos do conjunto de treinamento
- Podemos usar SVM para aprender os valores de θ associados a cada novo atributo

KERNELS

- Isso nos leva a nova função de custo

$$\min_{\theta} C \sum_{i}^{m} -y^i cost_1(h_\theta(f^i)) - (1 - y_i) cost_0(1 - h_\theta(f^i)) -$$

- O calculo de θ^2 é normalmente implementado como $\theta^\intercal \theta$
  - Isso permite usar alguns truques como $\theta^\intercal M \theta$
  - M depende do kernel
  - Calcula uma variação desse termo de maneira mais eficiente

SVM COM KERNEL GAUSSIANO

OUTROS KERNELS

- Linear (não usar kernel)
- Polinomial (parecido com a ideia de usar polinômios de maior grau)
- String
- X^2
- Intersecção de histograma

Cada um tem um conjunto própio de parâmetros

IMPLEMENTAÇÃO

- Não é trivial implementar (não podemos usar a minização do gradiente diretamente)
- Diversos pacotes provêem implementações eficientes
  - Multiplos Kernels
  - Variações multiclasse
  - Diferentes abordagens de otimização