Dados $\vec{w} \in \mathbb{R}^p$ y $b \in \mathbb{R}$, fijos, se define una aplicación lineal $f : \mathbb{R}^p \to \mathbb{R}$ como:

$$f(\vec{x}) = \langle \vec{w}, \vec{x} \rangle + b = \vec{w}'\,\vec{x} + b = \sum_{j=1}^{p} w_j\, x_j + b$$

Se llama hiperplano, π, al subconjunto de puntos $\mathbb{R}^p$ que verifican:

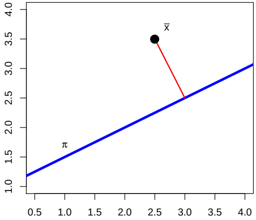
$$\pi = \{\vec{x} | f(\vec{x}) = 0\,\}$$

Cualquier hiperplano de $\mathbb{R}^2$ define una recta

El vector $\vec{w}$ es ortogonal a todos los puntos del hiperplano

La distancia entre un hiperplano π y un punto $\vec{x} \in \mathbb{R}^p$ viene dada por la expresión:

$$dist(\pi, \vec{x}) = \frac{f(\vec{x})}{||\vec{w}||} \qquad \text{con} \qquad ||\vec{w}|| = \sqrt{\sum_{j=1}^{p} w_j^2}$$



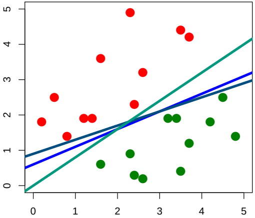
Conjunto linealmente separable

Un conjunto de puntos $(\vec{x}_i, y_i)_{i=1}^n$ con $\vec{x}_i \in \mathbb{R}^p$, $y_i \in \{-1, +1\}$, es linealmente separable si existe un hiperplano π tal que:

- $f(\vec{x}_i) = (\langle \vec{w}, \vec{x}_i \rangle + b) \geq 0 \quad \text{si } y_i = +1$
- $f(\vec{x}_i) = (\langle \vec{w}, \vec{x}_i \rangle + b) \leq 0 \quad \text{si } y_i = -1$

Esas dos condiciones son equivalentes a:

$$y_i f(\vec{x}_i) = y_i(\langle \vec{w}, \vec{x} \rangle + b) \geq 0 \quad i = 1, \ldots, n$$



Cuando existe un hiperplano de separación un criterio razonable para clasificar un punto $\vec{x}$ es:

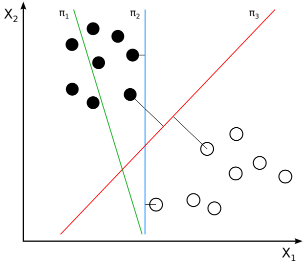
$$G(\vec{x}) = signo(f(\vec{x}))$$

Margen de un hiperplano de sepación

Dado un conjunto de puntos $(\vec{x}_i)_{i=1}^n$ con $\vec{x}_i \in \mathbb{R}^p$, y un hiperplano de separación $\pi = \{\vec{x} \mid \vec{w}' \cdot \vec{x} + b = 0\}$ se define su margen como el valor M tal que

$$M = \min_{i=1,\ldots,n} \operatorname{dist}(\vec{x}_i, \pi)$$

- π_1 no es hiperplano de separación
- π_2 es hiperplano de separación con margen pequeño
- π_3 es el hiperplano de separación con margen máximo



Hiperplano óptimo

Es el hiperplano de separación con margen máximo.
El problema se puede plantear como la búsqueda del hiperplano óptimo deseparación, es decir, :

$$\text{Maximizar } M$$

$$y_i \cdot \frac{\langle \vec{w}, \vec{x} \rangle + b}{||\vec{w}||} \geq M$$

Imponiendo la condición

$$M \cdot \|\vec{w}\| = 1 \Longleftrightarrow M = \frac{1}{\|\vec{w}\|}$$

$$\begin{array}{c} \text{Maximizar } \frac{1}{\|\vec{w}\|} \\ y_i \left[\langle \vec{w}, \vec{x} \rangle + b \right] \geq 1 \end{array} \Longleftrightarrow \begin{array}{c} \text{Minimizar } \|\vec{w}\| \\ y_i \left[\langle \vec{w}, \vec{x} \rangle + b \right] - 1 \geq 0 \end{array}$$

Máquinas de Vector Soporte

- Problema de optimización cuadrática con restricciones lineales.
- La función lagrangiana es

$$L(\vec{w}, b, \vec{\alpha}) = \frac{1}{2}\langle \vec{w}, \vec{w} \rangle - \sum_{i=1}^{n} \alpha_i \left[y_i(\langle \vec{w}, \vec{x}_i \rangle + b) - 1 \right]$$

- Aplicando las condiciones de Karush-Kuhn-Tucker se obtiene

$$\frac{\partial L}{\partial \vec{w}} = 0 \Longleftrightarrow \vec{w}^* = \sum_{i=1}^{n} \alpha_i \cdot y_i \cdot \vec{x}_i \qquad i = 1, \ldots, n$$

$$\frac{\partial L}{\partial b} = 0 \Longleftrightarrow \sum_{i=1}^{n} \alpha_i \cdot y_i = 0 \qquad i = 1, \ldots, n$$

$$\alpha_i [1 - y_i(\langle \vec{w}^*, \vec{x}_i \rangle + b^*)] = 0$$

$$L(\vec{\alpha}) = \sum_{i=1}^{n} \alpha_i - \frac{1}{2} \sum_{i=1}^{n} \sum_{j=1}^{n} \alpha_i \alpha_j y_i y_j \langle \vec{x}_i, \vec{x}_j \rangle$$

Se puede plantear el problema inicial en su forma dual:

$$\text{Maximizar } L(\alpha)$$

$$\sum_{i=1}^{n} \alpha_i \cdot y_i = 0$$

$$\alpha_i \geq 0 \qquad i = 1, \ldots, n$$

Una vez calculado α^*, se obtiene

$$f(\vec{x}) = \sum_{i=1}^{n} \alpha_i^* \cdot y_i \cdot \langle \vec{x}, \vec{x}_i \rangle + b^*$$

Analizando la condición

$$\alpha_i - \alpha_i \cdot y_i \cdot \langle \vec{w}^*, \vec{x}_i \rangle + b^* = 0$$

- $\alpha_i > 0 \iff 1 = y_i \cdot (\langle \vec{w}^*, \vec{x}_i \rangle + b^*)$
  que corresponde a los vectores soporte

$$b^* = y_{vs} - \langle \vec{w}^*, \vec{x}_{vs} \rangle$$

- $\alpha_i = 0$ el punto 'x_i' no interviene en el hiperplano óptimo

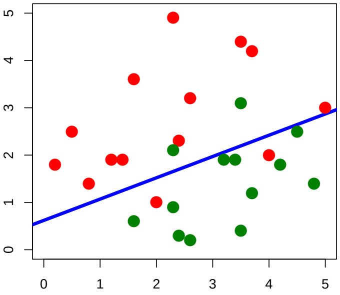
La estimación de b^* se hace con todos los vectores soporte:

$$b^* = \frac{1}{N_{vs}} \sum_{k=1}^{N_{vs}} (y_{vs} - \langle \vec{w}^*, \vec{x}_{vs} \rangle)$$

En la mayor parte de los problemas reales no existen hiperplanos de separación y se plantea la búsqueda de hiperplanos que verifiquen unas condiciones más suaves:

$$y_i \cdot (\langle \vec{w}, \vec{x}_i \rangle + b) \geq 1 - \xi_i \quad \text{con } \xi_i \geq 0 \;\; i = 1, \ldots, n$$

- Las variables ξ_i se denominan de holgura y permiten la existencia de puntos mal clasificados.
- Cuando $\xi_i = 0$ es el problema anterior



El nuevo problema de optimización viene dado por:

$$L(\vec{w}, \vec{\xi}) = \frac{1}{2}\langle \vec{w}, \vec{w} \rangle + C \sum_{i=1}^{n} \xi_i$$

sujeto a las restricciones

$$y_i \cdot (\langle \vec{w}, \vec{x}_i \rangle + b) + \xi_i - 1 \geq 0; \quad \xi_i \geq 0; \quad i = 1, \ldots, n$$

C representa la penalización de los puntos mal clasificados

Estos hiperplanos se denominan de margen blando

Máquinas de Vector Soporte

- La función lagrangiana del hiperplano de margen blando es:

$$L(\vec{w}, b, \vec{\xi}, \vec{\alpha}, \vec{\beta}) =$$

$$= \frac{1}{2}\langle \vec{w}, \vec{w} \rangle + C\sum_{i=1}^{n} \xi_i - \sum_{i=1}^{n} \alpha_i \left[y_i(\langle \vec{w}, \vec{x}_i \rangle + b) + \xi_i - 1 \right] - \sum_{i=1}^{n} \beta_i \xi_i$$

- Aplicando las condiciones de Karush-Kuhn-Tucker se obtiene

$$\frac{\partial L}{\partial \vec{w}} = 0 \Longleftrightarrow \vec{w}^* = \sum_{i=1}^{n} \alpha_i \cdot y_i \cdot \vec{x}_i \qquad i = 1, \ldots, n$$

$$\frac{\partial L}{\partial b} = 0 \Longleftrightarrow \sum_{i=1}^{n} \alpha_i \cdot y_i = 0 \qquad i = 1, \ldots, n$$

$$\frac{\partial L}{\partial \xi_i} = 0 \Longleftrightarrow C = \alpha_i - \beta_i$$

$$\alpha_i [1 - y_i(\langle \vec{w}^*, \vec{x}_i \rangle + b^*) - \xi_i] = 0, \quad i = 1 \ldots, n$$

$$\beta_i \, \xi_i = 0, \quad i = 1 \ldots, n$$

Máquinas de Vector Soporte

$$L(\vec{\alpha}) = \sum_{i=1}^{n} \alpha_i - \frac{1}{2} \sum_{i=1}^{n} \sum_{j=1}^{n} \alpha_i \alpha_j y_i y_j \langle \vec{x}_i, \vec{x}_j \rangle$$

Se puede plantear el problema inicial en su forma dual:

$$\text{Maximizar } L(\alpha)$$

$$\sum_{i=1}^{n} \alpha_i \cdot y_i = 0$$

$$0 \leq \alpha_i \leq C \qquad i = 1, \ldots, n$$

Una vez calculado α^*, se obtiene

$$f(\vec{x}) = \sum_{i=1}^{n} \alpha_i^* \cdot y_i \cdot \langle \vec{x}, \vec{x}_i \rangle + b^*$$

Máquinas de Vector Soporte

Teniendo en cuenta las condiciones que debe cumplir la solución

$$1)\ C = \alpha_i - \beta_i; \quad 2)\ \beta_i \xi_i = 0, \quad i = 1\ldots, n$$

$$3)\ \alpha_i[1 - y_i(\langle \vec{w}^*, \vec{x}_i \rangle + b^*) - \xi_i] = 0, \quad i = 1\ldots, n$$

se pueden caracterizar los puntos $\vec{x}_i$

- Si $\vec{x}_i$ no es separable $\iff \xi_i > 0$. Por tanto $\beta_i = 0$, $\alpha_i = C$ y

$$y_i(\langle \vec{w}^*, \vec{x}_i \rangle + b^*) = 1 + \xi_i$$

- Si $\alpha_i = 0$ entonces $\beta_i = C$, $\xi_i = 0 \iff \vec{x}_i$ es separable
- Cuando $0 < \alpha_i < C \iff \beta_i \neq 0 \iff \xi_i = 0$. Por lo tanto

$$y_i(\langle \vec{w}^*, \vec{x}_i \rangle + b^*) = 1$$

es decir, $\vec{x}_i$ es un vector soporte y permiten estimar b^*

$$b^* = \frac{1}{N_{vs}} \sum_{k=1}^{N_{vs}} (y_k - \langle \vec{w}^*, \vec{x}_k \rangle)$$

Cuando las clases no son separables se plantea "pasar" los datos a un espacio de dimensión mayor en los que se cumpla la condición de separabilidad.
El espacio transformado se denomina espacio de características.

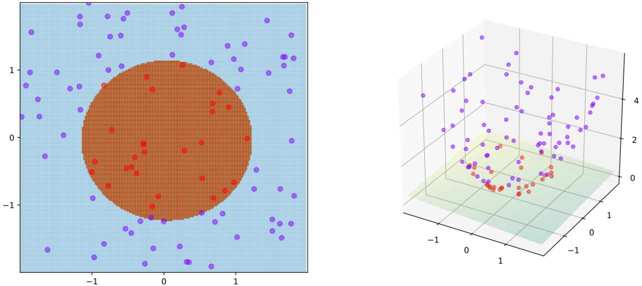
$$\Phi : \mathbb{X} \rightarrow F$$

$$\vec{x} \rightarrow \Phi(\vec{x}) = (\phi_1(\vec{x}), \ldots, \phi_m(\vec{x}))$$

donde alguna de las funciones ϕ_j no es lineal.

El objetivo es buscar el hiperplano óptimo en el espacio de características, que produce una frontera no lineal en el espacio inicial.

Máquinas de Vector Soporte



$$\text{Transformación} : (a, b) \to (a, b, a^2 + b^2)$$

Funciones Núcleo

Sea K una función $K : \mathbb{X} \times \mathbb{X} \to \mathbb{R}$
que verifica las condiciones

1. $K(\vec{x}, \vec{x}') = K(\vec{x}', \vec{x})$ (simétrica)
2. $K(\vec{x}, \vec{x}) \geq 0$ (semidefinida positiva)

Algunos ejemplos de funciones núcleo:

- $K(\vec{x}, \vec{x}') = \langle \vec{x}, \vec{x}' \rangle$
- $K(\vec{x}, \vec{x}') = (\lambda \langle \vec{x}, \vec{x}' \rangle + \gamma)^p$
- $K(\vec{x}, \vec{x}') = exp(\lambda \langle \vec{x} - \vec{x}' \rangle); \quad \lambda > 0$

Teorema de Moore-Aronszajn

Para cualquier función $K : \mathbb{X} \times \mathbb{X} \rightarrow \mathbb{R}$ simétrica y semidefinida positiva, existe un espacio de Hilbert (normado y completo) y una función $\Phi : \mathbb{X} \rightarrow F$ tal que

$$K(\vec{x}, \vec{x}') = \langle \Phi(\vec{x}), \Phi(\vec{x}') \rangle$$

Este resultado permite calcular el producto escalar $\langle \Phi(\vec{x}), \Phi(\vec{x}') \rangle$ sin necesidad de conocer la función Φ

Máquinas de Vector Soporte

En el espacio de características se busca la función:

$$f(\vec{x}) = \langle \vec{w}, \Phi(\vec{x}) \rangle + b$$

que en su forma dual se expresa como:

$$f(\vec{x}) = \sum_{i=1}^{n} \alpha_i^* y_i K(\vec{x}, \vec{x}_i)$$

Se resuelve mediante el siguiente problema de optimización

$$Max \sum_{i=1}^{n} \alpha_i - \frac{1}{2} \sum_{i=1}^{n} \sum_{j=1}^{n} \alpha_i \alpha_j y_i y_j \langle \vec{x}_i, \vec{x}_j \rangle$$

$$\sum_{i=1}^{n} \alpha_i \cdot y_i = 0$$

$$0 \leq \alpha_i \leq C \qquad i = 1, \ldots, n$$

La librería e1071 de R puede usarse para aplicar las máquinas de vector soporte.

```
mvs_salida <- svm (y ~ x, datos.entrena)
mvs_pred   <- predict (mvs_salida, datos.prueba)
tune.svm (svm, y~x, data=datos.entrena,
          ranges=list(cost=10^(-1:3),gamma=10^(-3:0))
```

Puntos débiles de las Máquinas de Vector Soporte

- Las MVS son muy sensibles a los parámetros que intervienen en su cáculo.Es aconsejable probar con diferentes valores y analizar los resultados y su estabilidad
- En los problemas de clasificación es preferible usar un núcleo gaussiano y la función objetivo basada en el coste C; en este caso sólo son necesarios los parámetors λ y C.
  - Buscar un C adecuado probando con valores entre 1 y 1000, usando validación cruzada. Con el C seleccionado buscar el λ adecuado.
  - Buscar simultáneamente sobre λ y C, usando una malla.
- SVM es sensible a las unidades de las variables y es conviente realizar una tipificación.