Aprendizado de métrica de distância sobre o desempenho de um classificador Máquina de Vetor de Suporte (*SVM*).

Leonardo Vieira da Costa* Cristiano Leite de Castro**

* *Programa de Pós-Graduação em Engenharia Elétrica, Universidade Federal de Minas Gerais Brasil (Tel: 31-99619-4092; e-mail: lvieirad@ufmg.br).*

** *Departamento de Engenharia Elétrica, Universidade Federal de Minas Gerais Brasil (e-mail: crislcastro@ufmg.br)*

Abstract: The Metric Learning has been of great use in the development of algorithms machine learning, standing out for the solution of problems related to the performance of classifiers. An efficient classification tool is the Support Vector Machine (*SVM*), designed to achieve good generalization capability. This study aims to propose the use of distance metric learning on the performance of an *SVM* classifier. This method uses the Mean Square Error (MSE) to find the best *Kernel* in the training base, and thus apply it to the test base. In the realized experiments, it was verified that the adjustment of the *Kernel* parameters through a metric learning approach can considerably improve the performance of an *SVM* classifier.

Resumo: O aprendizado de métrica tem sido de grande utilidade no desenvolvimento de algoritmos de aprendizado de máquinas, destacando-se para a solução de problemas relacionados com o desempenho de classificadores. Uma ferramenta de classificação eficiente é a Máquina de Vetor de Suporte (*SVM*), projetada para obter uma boa capacidade de generalização. Este trabalho tem como objetivo propor a utilização de um aprendizado de métrica de distância sobre o desempenho de um classificador *SVM*. Tal método utiliza-se do Erro Quadrático Médio (MSE) para encontrar o melhor *Kernel* na base de treinamento, e assim aplicá-lo à base de teste. Nos experimentos realizados, foi constatado que o ajuste dos parâmetros do *Kernel* por meio de uma abordagem de aprendizagem métrica pode melhorar consideravelmente o desempenho de um classificador *SVM*.

Keywords: *Metric Learning; Machine Learning; Support Vector Machine; Kernel; Mean Square Error.*

Palavras-chaves: *Aprendizado de Métrica; Máquina de Vetor de Suporte; Kernel; Erro Quadrático Médio.*

1. INTRODUÇÃO

O bom desempenho de um algoritmo de aprendizado de máquinas depende do tipo de métrica utilizada para a avaliação da distância ou, do lado avesso, da medida de semelhança entre pontos ou vetores no espaço de entrada. No algoritmo de qualquer classificador, dependendo do cálculo das distâncias entre vetores, podem-se obter diferentes tipos de classificação para novos dados ainda não vistos. Neste sentido, o objetivo do aprendizado de uma métrica consiste em proporcionar um rescalonamento dos dados de modo que a solução encontrada melhore a acurácia de um determinado classificador.

É importante ressaltar o trabalho do Xing et al. (2003) que tem como objetivo o aprendizado de métrica de distância como um problema de programação convexa restrita. Tal trabalho utiliza uma métrica de distância global com o objetivo de minimizar a distância entre os pares de dados. De outra forma, o autor Lebanon (2003) utiliza o aprendizado a partir de exemplos rotulados e em função

da distância de uma geometria da informação. Já para autor Bar-Hillel et al. (2003) a métrica de distância tem como objetivos minimizar a distância entre os pontos de dados dentro dos mesmos rótulos e maximizar a distância entre os pontos de dados de rótulos diferentes. Wang et al. (2014) propôs um framework para sugerir novos métodos de aprendizado de métrica, que pode ser implementado utilizando máquina de vetores de suporte (*SVM*).

Um classificador muito utilizado é Máquina de Vetor de Suporte (*SVM*) desenvolvida por Boser et al. (1992). A *SVM* constrói um hiperplano ou conjunto de hiperplanos em um espaço de alta dimensão, que pode ser usado para classificação, regressão ou outras tarefas. Uma boa separação é obtida pelo hiperplano que tem a maior distância até o ponto de dados de treinamento mais próximo de qualquer classe, chamada como margem funcional. Em geral, quanto maior a margem, menor o erro de generalização do classificador com base na teoria de aprendizado estatístico. A sua fórmula resulta em um problema convexo que pode

ser resolvido por programação quadrática demonstrada em Vapnik (1999) conforme equação 1.

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

$$\text{sujeito a } 0 \leq \alpha_i \leq C \text{ e } \sum_{i=1}^n \alpha_i y_i = 0 \quad (1)$$

$$\text{onde } k(\vec{x}_i, \vec{x}_j) = \exp\left(-\frac{\|\vec{x}_i - \vec{x}_j\|^2}{2\sigma^2}\right)$$

Onde são os coeficientes de Lagrange, C é a variável de folga e K é a função de *Kernel*. A escolha tanto do *Kernel* e dos parâmetros influenciam diretamente na qualidade do classificador demonstrado em Scholkopf and Smola (2004).

Figura 1. $\sigma = 0.02$ sobre-ajuste.

Figura 2. $\sigma = 0.3$ sub-ajuste.

Figura 3. $\sigma =$ Distância média dos N vizinhos.

A necessidade de escolher um bom valor para parâmetro σ conforme Zaidi and Squire (2010) é de extrema importância para o desempenho do classificador. Valores muito altos podem gerar um sub-ajuste, em contrapartida, valores muito baixos geram sobre-ajuste. Nas Fig. 1, 2 e 3 verifica-se o efeito da variação do parâmetro σ na classificação dos dados.

2. METODOLOGIA

Nesta seção, é descrito o algoritmo de aprendizado de métrica de distância sobre o desempenho de um classificador *SVM*. A proposta desse trabalho é encontrar uma métrica ideal minimizando diretamente o erro quadrático médio na base de treinamento. Tal minimização irá definir o melhor *Kernel*, para posteriormente aplicá-lo na base de teste.

2.1 Erro quadrático Médio (MSE)

Para avaliar o desempenho de um método de aprendizagem estatística de um conjunto de dados, é preciso alguma metodologia para medir o quão próximas às previsões estarão dos dados observados. Ou seja, é necessário quantificar a extensão para o qual o valor de resposta previsto para uma determinada observação está próximo do verdadeiro valor de resposta para essa observação. No ajuste de regressão, a medida mais comumente usada é o erro quadrático médio (MSE), dado pela equação 2.

$$MSE = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n (y_i - \hat{f}(x_i))^2 \quad (2)$$

Onde $\hat{f}(x_i)$ é a predição que $\hat{f}$ dá para a i -enésima observação James et al. (2014). O MSE será pequeno se as respostas previstas estiverem muito próximas das respostas verdadeiras, e será grande se as observações forem substancialmente diferentes entre o previsto e o verdadeiro.

2.2 Distância Minkowski

A proximidade entre dois dados x_i e x_j é denotada por $d(x_i, x_j)$. Uma maneira de medir a similaridade entre os atributos contínuos é através do cálculo de distância entre eles. Para que a distância seja considerada uma métrica deve-se satisfazer as seguintes condições:

- $d(x_i, x_j) \geq 0$;
- $d(x_i, x_j) = 0$, se e somente se $x_i = x_j$;
- $d(x_i, x_j) = d(x_j, x_i)$;
- $d(x_i, x_l) \leq d(x_i, x_j) + d(x_j, x_l)$.

Uma das distâncias utilizadas no cálculo de similaridade entre dois dados é a distância de *Minkowski*. Tal distância é calculada pela equação 3 onde d é o número de atributos do dado conforme Jain et al. (1988).

$$d(x_i, x_j) = \sqrt[p]{\sum_{k=1}^d (|x_{ik} - x_{jk}|)^p}, p \geq 1 \quad (3)$$

Quando $p=1$ a distância *Minkowski* se equivale à distância *Manhattan*, da mesma forma quando $p=2$ a distância *Minkowski* se equivale à distância *euclidiana*.

2.3 Função de Kernel SVM

Máquinas de Vetores de Suporte (*SVM*) são classificadores que estimam o resultado y_j de um valor qualquer de x_j através de uma soma ponderada de resultados y_i pelo valor da função de *Kernel* $K(x_j; x_i)$ demonstrado por Yang and

Jin (2006). A função de *Kernel* proposta neste trabalho é uma métrica mais geral da equação (3) está descrita na equação 4.

$$d_A^2(x_i, x_j) = \|x_i - x_j\|_A^2 = (x_i - x_j)^T A (x_i - x_j) \quad (4)$$

Onde A é uma matriz de distância *Minkowski* calculada pela equação 4 variando o valor de p .

2.4 Toda a Metodologia

Dado um determinado problema, como por exemplo, o de classificação, faz-se necessária a realização de diversas etapas a fim de implementar o método:

- Primeiramente calcula-se os *Kernels* do *SVM* variando a matriz A de distância *Minkowski* em função do p .
- Posteriormente calcula-se o menor erro (MSE) quadrático médio nos dados de treinamento.
- Após realizado o ranqueamento dos *Kernels* em função do MSE, escolhe-se o *Kernel* com menor MSE e aplica-se aos dados de teste.
- Por fim verifica-se a acurácia do modelo proposto

Figura 4. Estrutura do método proposto.

A Fig. 4 ilustra os principais componentes de todo o algoritmo do método proposto e o modo como eles se conectam. Desta forma, a metodologia desse trabalho mostra que o aprendizado de métrica acontece na variação do valor do parâmetro p da métrica *Minkowski*. Tal parâmetro tem um valor específico dependendo da base de treino, correspondendo assim a uma métrica diferente

aprendida após realizado o ranqueamento dos *Kernels* em função do *MSE*. Posteriormente ao ranqueamento, escolhe-se o *Kernel* com menor *MSE* e aplica-se aos dados de teste.

3. RESULTADOS E DISCUSSÃO

A fim de testar o método proposto para o problema de classificação, cinco bases de dados encontradas em Dua and Graff (2007) foram escolhidas neste trabalho. As bases de dados serão descritas para melhor exemplificar o desempenho do método proposto frente a Máquinas de Vetores de Suporte (*SVM*) com *Kernel Gaussiano*. Toda a implementação foi realizada utilizando o *software R Team* (2013). Utilizou-se também o pacote 'kernlab' que disponibiliza o algoritmo *SVM*.

3.1 Base de dados Default

A base de dados *Default* é um conjunto de registros dos clientes para uma empresa de cartão de crédito. Ela possui 4 características organizadas em 10.000 amostras e apresentado na Tabela 1.

A variável escolhida como resposta foi a *Student*. Apesar do grande número de amostras a base de dados apresenta uma distribuição bem definida. Por esse motivo os dois métodos obtiveram ótimos desempenhos na base de teste.

Tabela 1. Informações sobre a base de dados Default.

Atributo	Descrição
Default	Yes ou No
Student	Yes ou No
Income	Contínuo entre 0 e 2654.323
Balance	Contínuo entre 771.9677 e 73554.23

3.2 Base de dados Iris

A base de dados *Iris* tem como objetivo classificar a espécie de planta *Iris*. O atributo *Species* possui três classes: *Iris Setosa*, *Iris Versicolour*, *Iris Virginica*. A Base é composta por 5 características e 150 amostras apresentado na Tabela 2.

Tabela 2. Informações sobre o Bando de Dados Iris.

Atributo	Descrição
Species	Setosa, Versicolour e Virginica
sepal length	Contínuo entre 4.3 e 7.9
sepal width	Contínuo entre 2 e 4.4
petal length	Contínuo entre 1 e 6.9
spetal width	Contínuo entre 0.1 e 2.5

Devido à simplicidade da base e a clara diferenciação entre as classes conforme Fig 5, o método proposto e o *SVM* foram capazes de classificar corretamente quase todas as amostras na base de teste.

3.3 Base de dados 1985 Auto Imports

O conjunto de dados 1985 *Auto Imports* consiste de 193 amostras. Para cada amostra, 26 atributos podem ser observados como descrito na Tabela 3.

Figura 5. Distribuição dos dados da base de dados Iris.

Tabela 3. Informações sobre a base de dados
1985 Auto Imports.

Atributo	Descrição
symboling	-3, -2, -1, 0, 1, 2, 3.
normalized-losses	Contínuo entre 65 e 256.
fuel-type	diesel, gas.
aspiration	std, turbo
num-of-doors	four, two
body-style	hardtop, wagon, sedan, hatchback
drive-wheels	4wd, fwd, rwd.
engine-location:	front, rear
wheel-base	Contínuo entre 86.6 e 120.9.
length	Contínuo entre 141.1 e 208.1
width	Contínuo entre 60.3 e 72.3
height	Contínuo entre 47.8 e 59.8
curb-weight	Contínuo entre 1488 e 4066
engine-type	dohc, dohc, l, ohc, ohcf, ohcv, rotor
num-of-cylinders	eight, five, four, six, three, twelve, two
engine-size	Contínuo entre 61 e 326
fuel-system	1bbl, 2bbl, 4bbl, idi, mfi, mpfi, spdi, spfi
bore	Contínuo entre 2.54 e 3.94
stroke	Contínuo entre 2.07 e 4.17
compression-ratio	Contínuo entre 7 e 23
horsepower	Contínuo entre 48 e 288
peak-rpm	Contínuo entre 4150 e 6600
city-mpg	Contínuo entre 13 e 49
highway-mpg	Contínuo entre 16 e 54
price	Contínuo entre 5118 e 45400

Uma nova característica foi criada para definir a classificação das amostras baseada na característica existente *symboling*. Tal característica foi dividida em duas classes, a classe de clientes com baixo risco de análise do seguro que tem valores de *symboling* menores ou iguais a zero, e a classe com alto risco de análise do seguro que tem valores de *symboling* maiores do que zero. O método proposto e o *SVM* foram capazes de classificar corretamente quase todas as amostras na base de teste.

3.4 Base de dados Scale Weight & Distance

A base de dados *Scale Weight & Distance* tem como objetivo modelar resultados experimentais psicológicos. O atributo *Class Name* possui três classes: *left*, *right* e *balanced*. A base é composta por 5 características e 625 amostras apresentado em Tabela 4.

O método proposto e o *SVM* apresentaram uma acurácia muito semelhante na base de teste

Tabela 4. Informações sobre a base de Dados
Scale Weight & Distance

Atributo	Descrição
Class Name	left, right e balanced
Left-Weight	Contínuo entre 1 e 5
Left-Distance	Contínuo entre 1 e 5
Right-Weight	Contínuo entre 1 e 5
Right-Distance	Contínuo entre 1 e 5

3.5 Base de dados House Boston

A base de dados *House Boston* tem como objetivo mostrar os valores das casas do subúrbio de *Boston*. Ele possui 13 características de valores contínuos com 5066 amostras apresentado em Tabela 5.

Tabela 5. Informações sobre a base de dados
House Boston.

Atributo	Descrição
CRIM	Taxa de criminalidade per capita por cidade
ZN	Proporção de terrenos residenciais por zonas para lotes 25.000 sq.ft.
INDUS	Proporção de negócios não-varejo por cidade
CHAS	Lado da cidade em relação ao Rio Charles
NOX	Concentração de óxidos nítricos (partes por 10 milhões)
RM	Número médio de quartos por habitação
AGE	Proporção de IDADE das unidades ocupadas pelo proprietário construídas antes de 1940
DIS	Distâncias ponderadas a cinco centros de emprego de Boston
RAD	Índice RAD de acessibilidade a estradas principais
TAX	Imposto sobre o Valor Agregado por \$ 10.000
PTRATIO	Relação aluno-professor por cidade
B	$1000 (B_k - 0,63)^2$ onde B_k é a proporção de negros por cidade
LSTAT	% status da população com menor renda
MEDV	Valor médio das casas ocupadas por proprietários em \$1000

Como o objetivo deste trabalho é calcular a acurácia do modelo proposto, foi criada uma nova característica que leva em conta o valor médio das casas ocupadas por proprietários em \$ 1000 (MEDV). Considerou-se casas com valores menores ou iguais a 21.8 como casas da classe “inferiores”, e casas acima dos valores de 21.8 como casas da classe “superiores”. Depois dessa operação a base ficou balanceada entre as duas classes e posteriormente foram aplicados os dois métodos para verificar a acurácia. O método proposto teve um desempenho muito superior na base de teste

3.6 Comparação dos métodos nas cinco bases de dados

A Fig. 5 mostra a comparação do método proposto neste artigo com o *SVM* nas cinco bases de dados. Os dados foram divididos entre treinamento e teste, e posteriormente computou-se o percentual da acurácia de cada método na base de teste.

O método proposto possui uma acurácia muito semelhante à do método *SVM* em quatro bancos de dados, utilizando

Figura 6. Gráfico com a acurácia dos modelos em %.

a base teste. O ponto de destaque foi a superioridade da acurácia do método apresentado utilizando-se a base de teste do banco de dados do *House Boston*, o que indica uma boa capacidade de generalização do modelo criado.

4. CONCLUSÃO

Este artigo propõe a utilização de um aprendizado de métrica de distância sobre o desempenho de um classificador *SVM*. O método proposto utiliza-se do erro quadrático médio (MSE) para ranquear o melhor *Kernel* na base de treinamento. Uma vez definido o *Kernel* que possui o menor MSE aplica-se o mesmo na base de teste e verifica-se a acurácia.

Os resultados alcançados nos experimentos realizados em cinco bases de dados, o modelo proposto demonstra que na base de dados *House Boston*, a acurácia no conjunto de teste foi melhor do que o *SVM*. Foi descoberto que o ajuste dos parâmetros do *Kernel* por meio de uma abordagem de aprendizagem métrica pode melhorar o desempenho de um classificador *SVM*.

Em trabalhos futuros serão investigadas variações na modificação da matriz de distância para encontrar o melhor *Kernel*.

REFERÊNCIAS

- Bar-Hillel, Aharon, Hertz, Tomer, Shental, Noam, Weinshall, and Daphna (2003). Learning distance functions using equivalence relations. *Proceedings of the 20th International Conference on Machine Learning (ICML-03)*, 11–18.
- Boser, B., Guyon, I., and Vapnik, V. (1992). A training algorithm for optimal margin classifiers. *Proceedings of the Fifth Annual Workshop on Computational Learning Theory*, ACM Press, pp. 144–152.
- Dua, D. and Graff, C. (2007). Machine learning repository - uci. *University of California, Irvine, School of Information and Computer Sciences*, URL <http://archive.ics.uci.edu/ml>.
- Jain, A., and Dubes, R. (1988). Algorithms for clustering data. *Prentice-Hall*.
- James, G., Witten, D., Hastie, T., and Tibshirani, R. (2014). An introduction to statistical learning: with

applications in r. *Springer Publishing Company, Incorporated*.

- Lebanon, G. (2003). Flexible metric nearest neighbor classification. *Proc. Uncertainty in Artificial Intelligence*.
- Scholkopf, B. and Smola, A. (2004). Learning with kernels, support vector machines, regularization, optimization and beyond. *The MIT Press*.
- Team, R.C. (2013). R: A language and environment for statistical computing. *R Foundation for Statistical Computing, Vienna, Austria*, URL <http://www.R-project.org/>.
- Vapnik, V. (1999). An overview of statistical learning theory. *IEEE Transactions on Neural Networks* 10, no. 5, 988–999.
- Wang, Faqiang, Zuo, Wangmeng, Zhang, Lei, Meng, Deyu, Zhang, and David (2014). A kernel classification framework for metric learning. *IEEE transactions on neural networks and learning systems*, 26(9), 1950–1962.
- Xing, P. E., Jordan, I. M., Russell, J. S., Ng, and Y. A. (2003). Distance metric learning with application to clustering with side-information. *Advances in neural information processing systems*, 521–528.
- Yang, L. and Jin, R. (2006). Distance metric learning: A comprehensive survey. *Department of Computer Science and Engineering Michigan State University*.
- Zaidi, N. and Squire, D. (2010). Svms and data dependent distance metric. *Clayton School of Information Technology, Monash University, Clayton, VIC, 3800*.