Méthodes a noyau

Cours DEA 2003/04

Jean-Philippe Vert

Jean-Philippe.Vert@mines.org

Plan

- L'astuce noyau
- Le théoreme du représentant
- Kernel PCA
- Régression par moindre carrés régularisée
- Support Vector Machines

Introduction

La puissance des noyaux définis positifs sur un espace $\mathcal{X}$ provient de deux résultats ayant d'importantes implications pratiques:

- *l'astuce noyau* (*kernel trick*), basé sur la représentation d'un noyau d.p. comme un produit scalaire;
- le *théoreme du représentant* (*representer theorem*) basé sur la fonctionnelle de régularisation définie par un noyau d.p.

Ces deux propriétés permettent le développement de nombreux algorithmes d'analyse: les *méthodes a noyau*.

L'astuce noyau
(*kernel trick*)

Rappel

Nous avons démontré le théoreme suivant

Theoreme 1 *Si K est un n.d.p. sur un espace $\mathcal{X}$ quelconque, alors il existe un espace de Hilbert $\mathcal{H}$ muni du produit scalaire $\langle .,. \rangle_{\mathcal{H}}$ et une application*

$$\Phi : \mathcal{X} \mapsto \mathcal{H},$$

telle que:

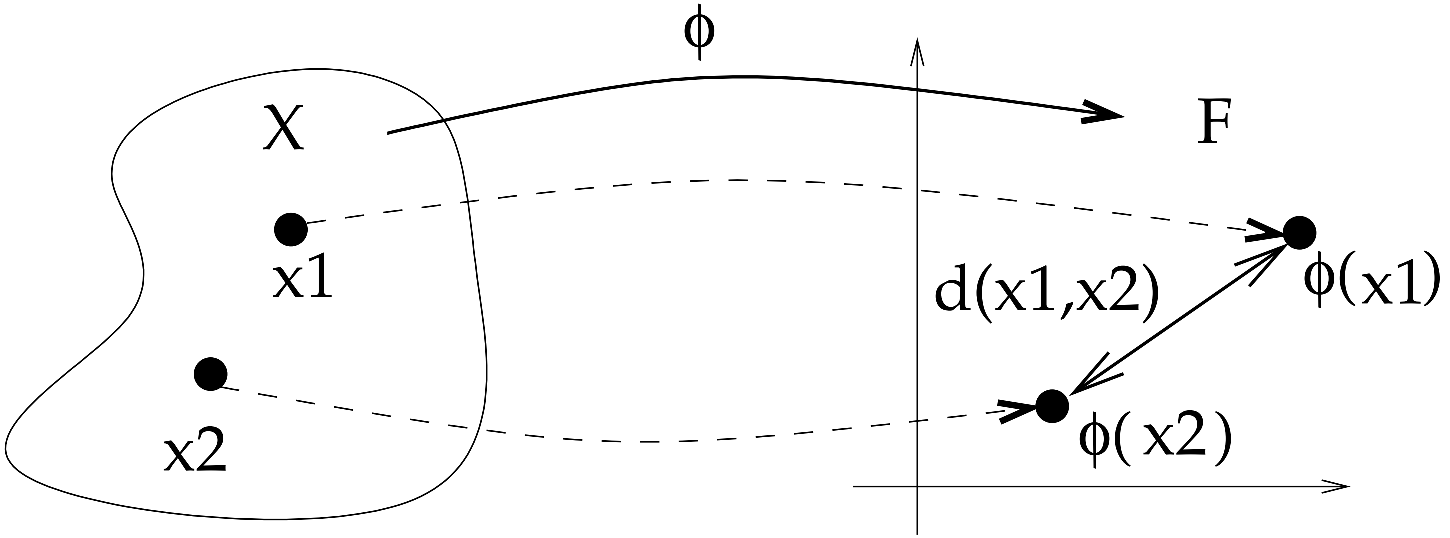
$$\forall \left(\mathbf{x}, \mathbf{x}'\right) \in \mathcal{X}^2, \quad K\left(\mathbf{x}, \mathbf{x}'\right) = \left\langle \Phi\left(\mathbf{x}\right), \Phi\left(\mathbf{x}'\right) \right\rangle_{\mathcal{H}}.$$

L'astuce noyau

Proposition 2 *Tout algorithme pour vecteurs qui puisse ne* s'exprimer qu'en termes de produits scalaires *entre vecteur peut etre effectué* implicitement *dans un espace de Hilbert en remplaçant chaque produit scalaire par l'évaluation d'un n.d.p. sur un espace quelconque.*

Ce théoreme trivial a d'immenses implications pratiques.

Exemple: calcul de distance



$$
\begin{aligned}
d\left(\mathbf{x}_1,\mathbf{x}_2\right)^2 &= \parallel \Phi\left(\mathbf{x}_1\right) - \Phi\left(\mathbf{x}_2\right) \parallel^2 \\
&= \left(\Phi\left(\mathbf{x}_1\right) - \Phi\left(\mathbf{x}_2\right)\right).\left(\Phi\left(\mathbf{x}_1\right) - \Phi\left(\mathbf{x}_2\right)\right) \\
&= \Phi\left(\mathbf{x}_1\right).\Phi\left(\mathbf{x}_1\right) + \Phi\left(\mathbf{x}_2\right).\Phi\left(\mathbf{x}_2\right) - 2\Phi\left(\mathbf{x}_1\right).\Phi\left(\mathbf{x}_2\right)
\end{aligned}
$$

$$d(\mathbf{x}_1,\mathbf{x}_2)^2 = K(\mathbf{x}_1,\mathbf{x}_1) + K(\mathbf{x}_2,\mathbf{x}_2) - 2K(\mathbf{x}_1,\mathbf{x}_2)$$

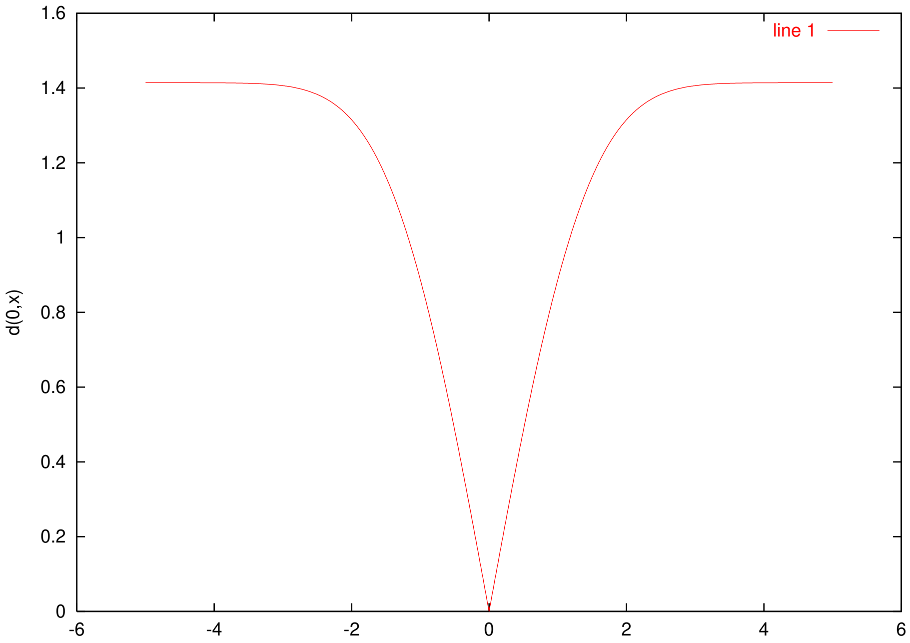
Calcul de distance

Example:

$$K(\mathbf{x}, \mathbf{y}) = e^{-\frac{\| \mathbf{x}-\mathbf{y} \|^2}{2\sigma^2}},$$

alors

$$d(\mathbf{x}, \mathbf{y}) = \sqrt{2\left[1 - e^{-\frac{\| \mathbf{x}-\mathbf{y} \|^2}{2\sigma^2}}\right]}$$



Exemple: distance point - ensemble

- Soit $\mathcal{S} = (\mathbf{x}_1, \cdots, \mathbf{x}_n)$ un ensemble fini d'objets
- Soit $\mathbf{x}$ un point quelconque
- Comment mesurer la *distance entre* $\mathbf{x}$ *et* $\mathcal{S}$?

Données vectorielles

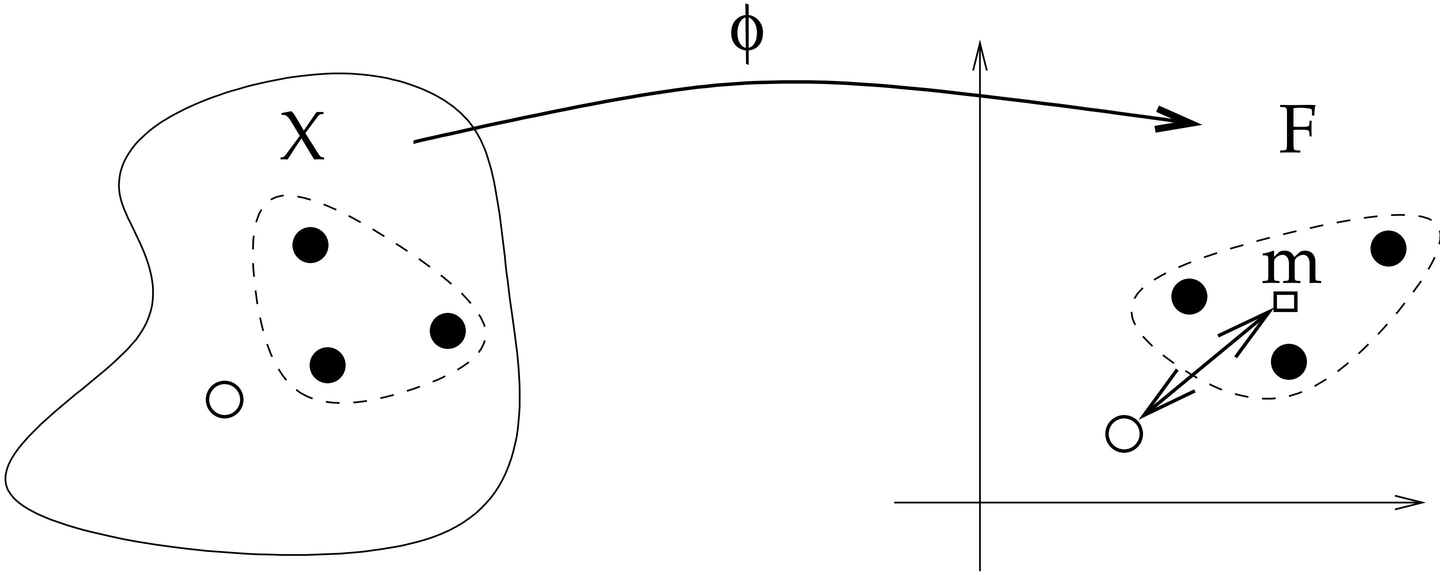
Si $\mathbf{x}_i \in \mathbb{R}^d$, alors on peut définir le barycentre de $\mathcal{S}$:

$$m := \frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n}\mathbf{x}_i,$$

et définir la distance de $\mathbf{x}$ a $\mathcal{S}$ par:

$$d\left(\mathbf{x},\mathcal{S}\right) := \parallel \mathbf{x} - m \parallel$$

Astuce noyau



$$d\left(\mathbf{x},\mathcal{S}\right) = \|\,\Phi\left(\mathbf{x}\right) - \frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n}\Phi(\mathbf{x}_i)\,\|$$

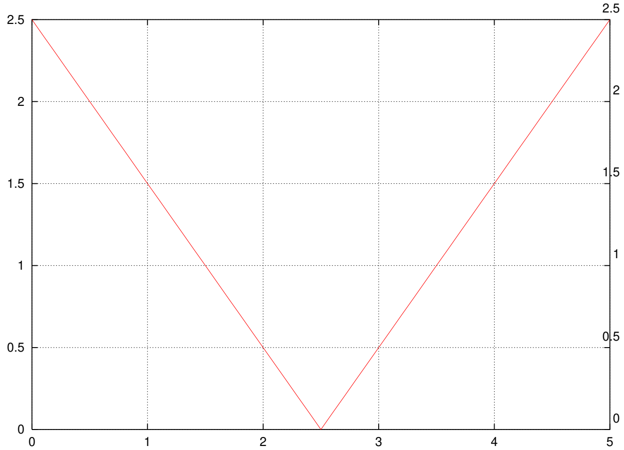
$$= \sqrt{K(\mathbf{x},\mathbf{x}) - \frac{2}{n}\sum_{i=1}^{n}K(\mathbf{x},\mathbf{x}_i) + \frac{1}{n^2}\sum_{i=1}^{n}\sum_{j=1}^{n}K(\mathbf{x}_i,\mathbf{x}_j)}.$$

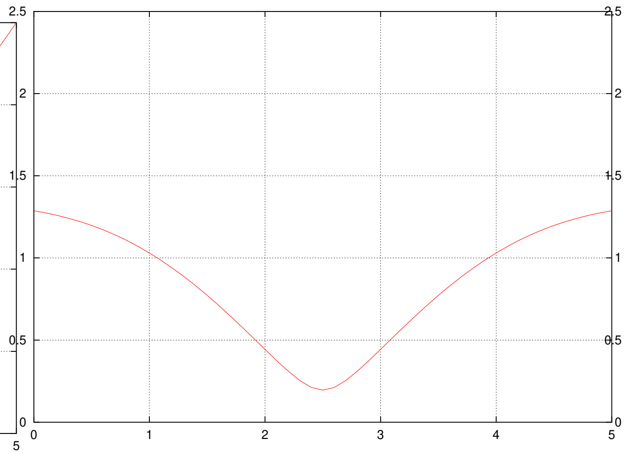
Remarque

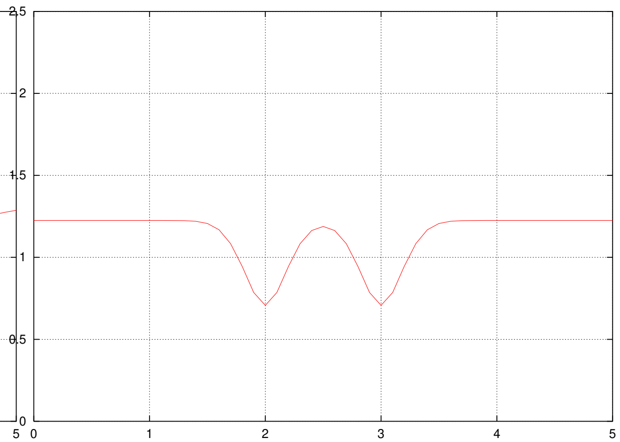
- Le point m n'a *pas nécessairement de pré-image* dans $\mathcal{X}$
- La distance obtenue est une distance Euclidienne

Exemples 1D

Distances avec l'ensemble de deux points $\mathcal{S} = \{2, 3\}$ pour différents noyaux:







$$K(\mathbf{x}, \mathbf{y}) = \mathbf{xy}.$$

(linéaire)

$$K(\mathbf{x}, \mathbf{y}) = e^{-\frac{(\mathbf{x}-\mathbf{y})^2}{2\sigma^2}}.$$

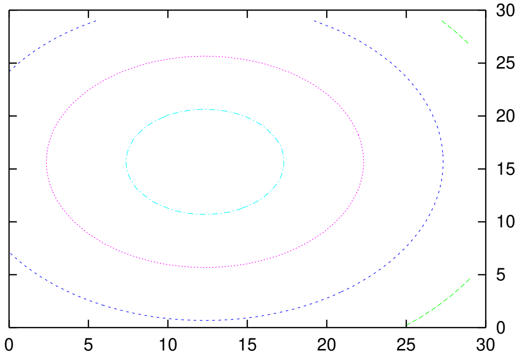
avec $\sigma = 1$.

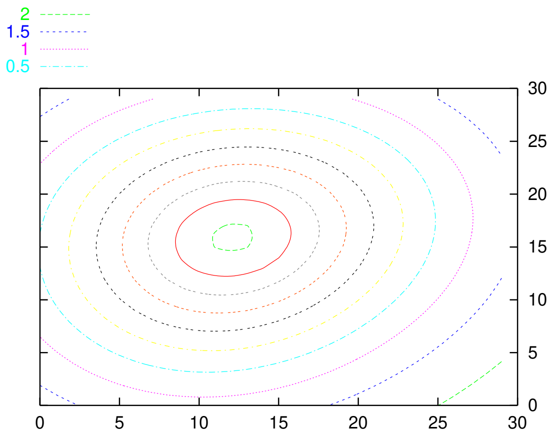
$$K(\mathbf{x}, \mathbf{y}) = e^{-\frac{(\mathbf{x}-\mathbf{y})^2}{2\sigma^2}}.$$

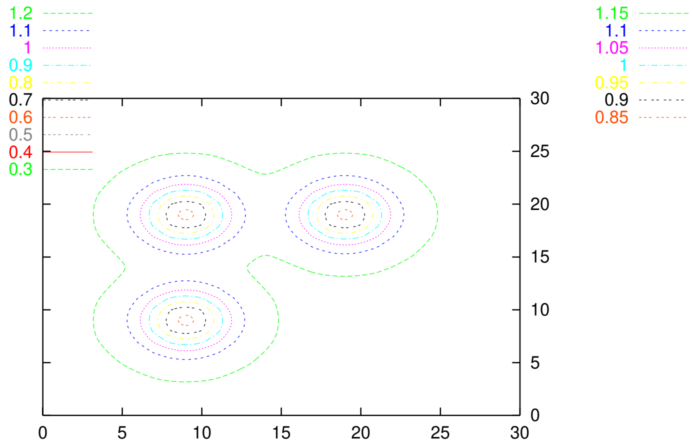
avec $\sigma = 0.2$.

Exemples 2D

Distances avec l'ensemble de 3 points $\mathcal{S} = \{(1,1)', (1,2)', (2,2)'\}$ pour différents noyaux:







$$K(\mathbf{x}, \mathbf{y}) = \mathbf{x}\mathbf{y}.$$

(linéaire)

$$K(\mathbf{x}, \mathbf{y}) = e^{-\frac{(\mathbf{x}-\mathbf{y})^2}{2\sigma^2}}.$$

avec $\sigma = 1$.

$$K(\mathbf{x}, \mathbf{y}) = e^{-\frac{(\mathbf{x}-\mathbf{y})^2}{2\sigma^2}}.$$

avec $\sigma = 0.2$.

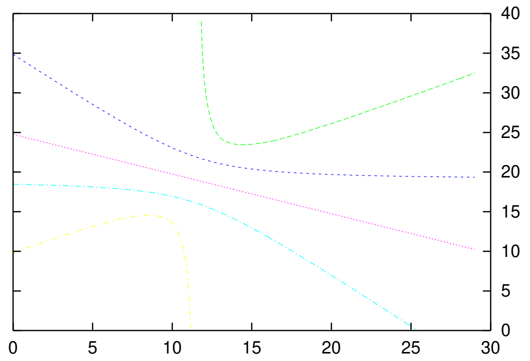
Application en discrimination

- Soient $\mathcal{S}_1$ et $\mathcal{S}_2$ deux ensembles d'objets appartenant a 2 classes différentes. Soit $\mathbf{x}$ un nouvel objet. Quel est sa classe?
- On peut choisir la classe $\mathcal{S}_i$ qui minimise $d\left(\mathbf{x}, \mathcal{S}_i\right)$.
- Grâce aux formules précédentes, on obtient:

$$\begin{aligned} d\left(\mathbf{x}, \mathcal{S}_1\right)^2 - d\left(\mathbf{x}, \mathcal{S}_2\right)^2 = & \frac{1}{\mid \mathcal{S}_1 \mid} \sum_{\mathbf{x}_i \in \mathcal{S}_1} K\left(\mathbf{x}, \mathbf{x}_i\right) \\ & - \frac{1}{\mid \mathcal{S}_2 \mid} \sum_{\mathbf{x}_j \in \mathcal{S}_2} K\left(\mathbf{x}, \mathbf{x}_j\right) + b. \end{aligned}$$

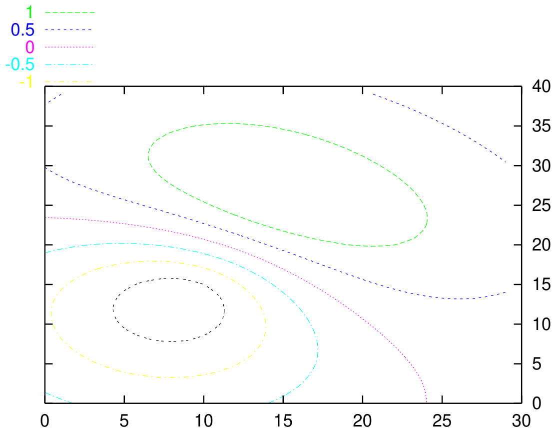
Exemple de discrimination

Courbes de niveaux de $d(\mathbf{x}, \mathcal{S}_1) - d(\mathbf{x}, \mathcal{S}_2)$ pour les ensembles $\mathcal{S}_1 = \{(1,1)', (1,2)'\}$ et $\mathcal{S}_1 = \{(1,3)', (2,2)'\}$ pour différents noyaux:



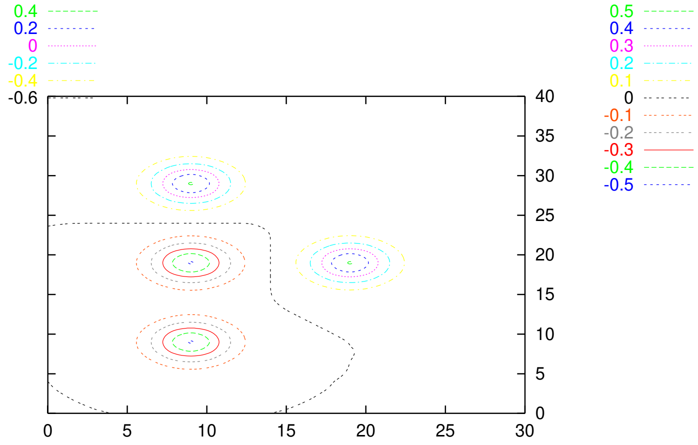
$$K(\mathbf{x}, \mathbf{y}) = \mathbf{x}\mathbf{y}.$$

(linéaire)



$$K(\mathbf{x}, \mathbf{y}) = e^{-\frac{(\mathbf{x}-\mathbf{y})^2}{2\sigma^2}}.$$

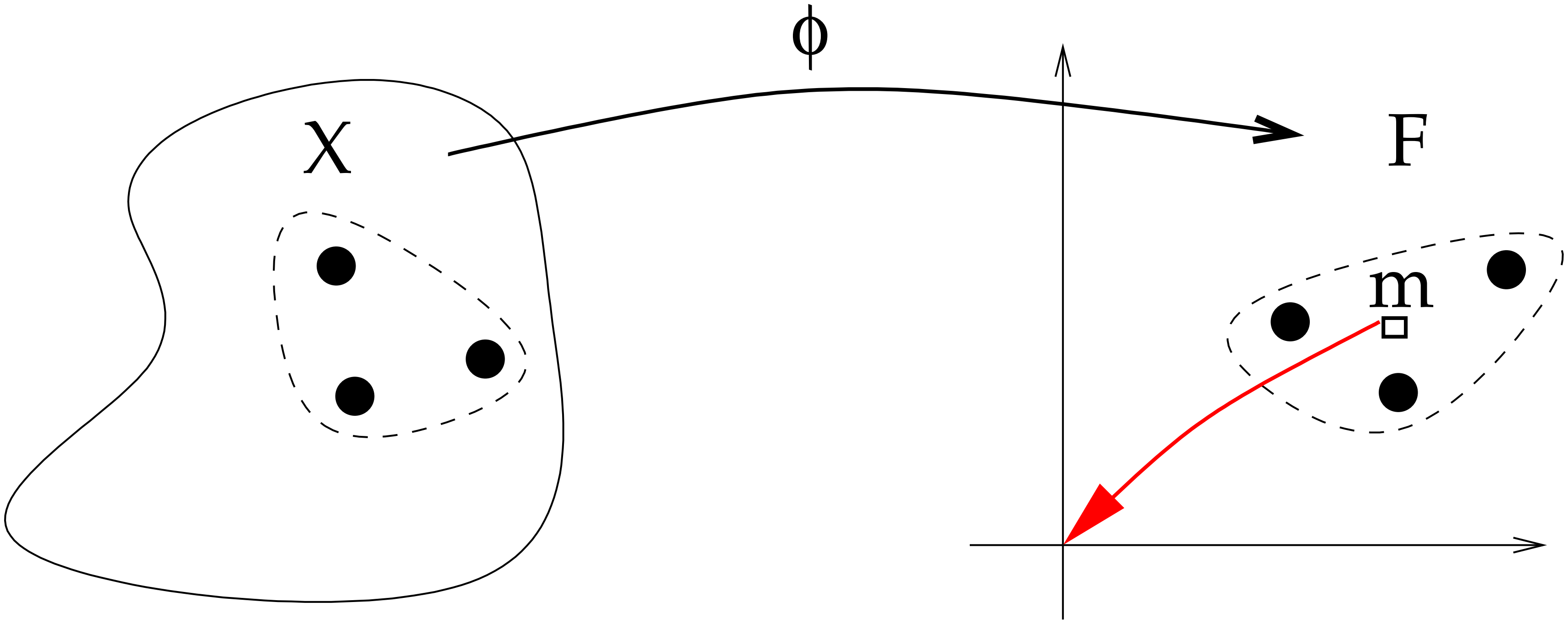
avec $\sigma = 1.$



$$K(\mathbf{x}, \mathbf{y}) = e^{-\frac{(\mathbf{x}-\mathbf{y})^2}{2\sigma^2}}.$$

avec $\sigma = 0.2$.

Exemple: centrer des données



Soit K une matrice de Gram $n \times n$. Comment calculer la matrice de Gram $n \times n$ pour les données centrées par translation?

Exemple: centrer des données (cont)

On calcule, pour $0 \leq i, j \leq n$:

$$
\begin{aligned}
K'_{i,j} &= \left(\Phi\left(\mathbf{x}_i\right) - m\right) . \left(\Phi\left(\mathbf{x}_j\right) - m\right) \\
&= \Phi\left(\mathbf{x}_i\right) . \Phi\left(\mathbf{x}_j\right) - m. \left(\Phi\left(\mathbf{x}_i\right) + \Phi\left(\mathbf{x}_j\right)\right) + m.m \\
&= K_{i,j} - \frac{1}{n}\sum_{k=1}^{n}\left(K_{i,k} + K_{j,k}\right) + \frac{1}{n^2}\sum_{k,l=1}^{n} K_{k,l}
\end{aligned}
$$

donc:

$$
K' = K - UK - KU + UKU = (I - U)\, K\, (I - U),
$$

avec $U_{i,j} = 1/n$ pour $1 \leq i, j \leq n$.

Bilan

Grâce a l'astuce noyau, il est possible de:

- Rendre *non-linéaire* des méthodes linéaires (avec un noyau RBF Gaussien par exemple)
- Plonger l'espace initial dans un *espace plus grand* et y travailler implicitement (par exemple, trouver un barycentre n'ayant pas de pré-image)

Le théoreme du représentant

Le théoreme (Kimeldorf et Wahba, 1970)

Theoreme 3 *Soit $\mathcal{X}$ un ensemble muni d'un noyau d.p. K, $\mathcal{H}_K$ l'e.h.n.r. associé, et $\mathcal{S} = \{\mathbf{x}_1, \cdots, \mathbf{x}_n\} \subset \mathcal{X}$ un ensemble fini d'objets.*
Soit $\Psi : \mathbb{R}^{n+1} \rightarrow \mathbb{R}$ une fonction de $n+1$ arguments, strictement croissante par rapport au dernier argument*.*
Alors, toute solution au probleme:

$$\min_{f \in \mathcal{H}_K} \Psi\left(f\left(\mathbf{x}_1\right), \cdots, f\left(\mathbf{x}_n\right), \| f \|_{\mathcal{H}_K}\right), \tag{1}$$

admet une représentation de la forme:

$$\forall \mathbf{x} \in \mathcal{X}, \quad f\left(\mathbf{x}\right) = \sum_{i=1}^{n} \alpha_i K\left(\mathbf{x}_i, \mathbf{x}\right). \tag{2}$$

Remarques

Souvent, la fonction Ψ a la forme:

$$\Psi\left(f\left(\mathbf{x}_1\right), \cdots, f\left(\mathbf{x}_n\right), \| f \|_{\mathcal{H}_K}\right) = c\left(f\left(\mathbf{x}_1\right), \cdots, f\left(\mathbf{x}_n\right)\right) + \lambda\Omega\left(\| f \|_{\mathcal{H}_K}\right)$$

ou $c(.)$ mesure le 'fit' de f a un probleme. Cette formulation a deux effets:

- La solution aura une *norme $\| f \|_{\mathcal{H}_K}$ aussi petite que possible*, ce qui peut etre bénéfique en soit (par exemple, si on recherche une fonction réguliere)
- En plus, par le théoreme précédent, on sait d'avance que la solution sera dans un *sous-espace de dimension n connue* (bien que $\mathcal{H}_K$ puisse être de dimension infinie), ce qui permet de développer des *algorithmes efficaces*.

Remarques (cont)

La plupart des méthodes a noyaux ont deux interprétations complémentaires:

- une interprétation *géométrique* dans le feature space, grace a l'astuce noyau. Meme si le feature space est grand, nous travaillerons en général dans le sous-espace de dimension au plus s engendré par les n points donnés.
- une interprétation *fonctionnelle*, grace au théoreme du représentant. C'est lui qui assure que nous travaillons en dimension finie.

Bien sûr ces 2 interprétation se superposent quand on voit l'e.h.n.r. comme un feature space fonctionnel.

Preuve

- Soit $\xi\left(f,\mathcal{S}\right)$ la fonction a minimiser dans le théoreme, et

$$\mathcal{H}_K^{\mathcal{S}} = \left\{ f \in \mathcal{H}_K : f\left(\mathbf{x}\right) = \sum_{i=1}^{n} \alpha_i K\left(\mathbf{x}_i, \mathbf{x}\right), \left(\alpha_1, \cdots, \alpha_n\right) \in \mathbb{R}^n \right\}.$$

- $\mathcal{H}_K^{\mathcal{S}}$ est un sous-espace de dimension finie, donc toute fonction $f \in \mathcal{H}_K$ est décomposable de maniere unique en:

$$f = f_{\mathcal{S}} + f_{\perp},$$

avec $f_{\mathcal{S}} \in \mathcal{H}_K^{\mathcal{S}}$ et $f_{\perp} \perp \mathcal{H}_K^{\mathcal{S}}$ (projection orthogonale).

Preuve (cont.)

- $\mathcal{H}_K$ étant un e.h.n.r., on a donc:

$$\forall i = 1, \cdots, n, \quad f_\perp(\mathbf{x}_i) = \langle f_\perp, K(\mathbf{x}_i, .) \rangle_{\mathcal{H}_K} = 0$$

car $K(\mathbf{x}_i, .) \in \mathcal{H}_K$, et donc:

$$\forall i = 1, \cdots, n, \quad f(\mathbf{x}_i) = f_{\mathcal{S}}(\mathbf{x}_i).$$

- Le théoreme de Pythagore dans $\mathcal{H}_K$ montre que:

$$\| f \|^2_{\mathcal{H}_K} = \| f_{\mathcal{S}} \|^2_{\mathcal{H}_K} + \| f_\perp \|^2_{\mathcal{H}_K}.$$

Preuve (cont.)

- On en déduit que:

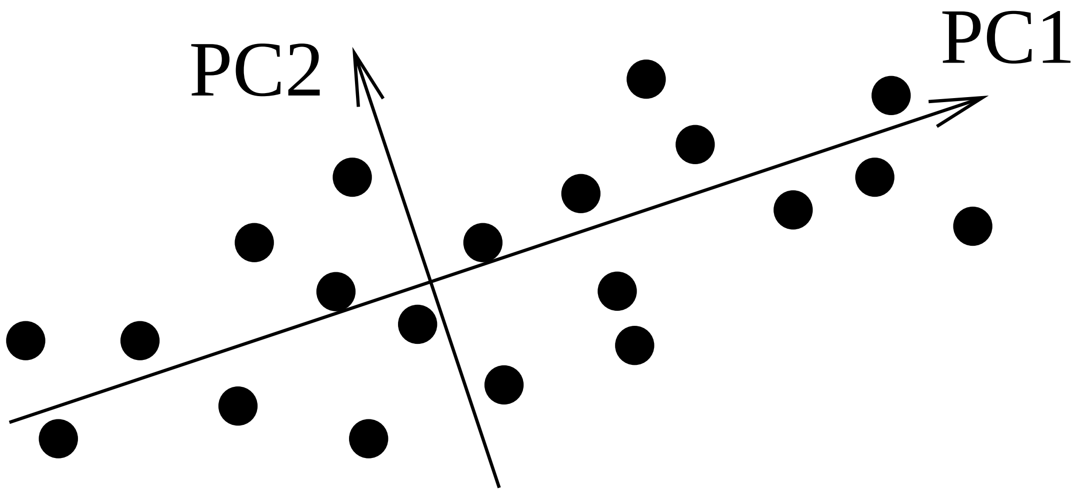
$$\xi\left(f,\mathcal{S}\right) \geq \xi\left(f_{\mathcal{S}},\mathcal{S}\right),$$

avec égalité si et seulement si $\| f_{\perp} \|_{\mathcal{H}_K} = 0$. Le minimum de Ψ est donc nécessairement dans $\mathcal{H}_K^{\mathcal{S}}$. $\square$

ACP a noyau

ACP: rappels

- Soit $\mathcal{S} = \{\mathbf{x}_1, \ldots, \mathbf{x}_n\}$ un ensemble de vecteurs ($\mathbf{x}_i \in \mathbb{R}^d$)
- L'*analyse en composantes principales* (ACP) permet de détecter les directions de forte variation



ACP classique

- Supposons que les données sont *centrées*:

$$\sum_{i=1}^{n} \mathbf{x}_i = 0.$$

- La *projection orthogonale* sur une direction $\boldsymbol{w} \in \mathbb{R}^d$ est la fonction $h_{\boldsymbol{w}} : \mathcal{X} \to \mathbb{R}$ définie par

$$h_{\boldsymbol{w}}(\mathbf{x}) = \mathbf{x}^\top \frac{\boldsymbol{w}}{\| \boldsymbol{w} \|}.$$

ACP: rappels (cont.)

- La *variance empirique* de $h_{\boldsymbol{w}}$ est:

$$\hat{var}\left(h_{\boldsymbol{w}}\right) := \frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n} h_{\boldsymbol{w}}\left(\mathbf{x}_i\right)^2 = \frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n} \frac{\left(\mathbf{x}_i^\top \boldsymbol{w}\right)^2}{\parallel \boldsymbol{w} \parallel^2}.$$

- La i-eme direction principale w_i ($i = 1, \ldots, d$) est définie par:

$$\boldsymbol{w}_i = \underset{\boldsymbol{w}\perp\{\boldsymbol{w}_1,\ldots,\boldsymbol{w}_{i-1}\}}{\arg\max} \hat{var}\left(h_{\boldsymbol{w}}\right).$$

ACP: rappels (cont.)

- Soit X la matrice $n \times d$ dont les lignes sont les données $\mathbf{x}_1, \ldots, \mathbf{x}_n$. On a alors:

$$\hat{var}\left(h_{\boldsymbol{w}}\right) = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^{n} \frac{\left(\mathbf{x}_i^\top \boldsymbol{w}\right)^2}{\| \boldsymbol{w} \|^2} = \frac{1}{n} \frac{\boldsymbol{w}^\top X^\top X \boldsymbol{w}}{\boldsymbol{w}^\top \boldsymbol{w}}.$$

- Les solutions de

$$\boldsymbol{w}_i = \underset{\boldsymbol{w} \perp \{\boldsymbol{w}_1, \ldots, \boldsymbol{w}_{i-1}\}}{\arg\max} \frac{1}{n} \frac{\boldsymbol{w}^\top X^\top X \boldsymbol{w}}{\boldsymbol{w}^\top \boldsymbol{w}}$$

sont les *vecteurs propres de* $C = X^\top X$, rangés par valeurs propres décroissantes

Vision fonctionnelle

- Soit $K(\mathbf{x}, \mathbf{y}) = \mathbf{x}^\top \mathbf{y}$ le noyau linéaire
- L'e.h.n.r. $\mathcal{H}$ associé est l'ensemble des fonctions:

$$f_{\boldsymbol{w}}(\mathbf{x}) = \boldsymbol{w}^\top \mathbf{x},$$

  muni de la norme $\| f_{\boldsymbol{w}} \|_{\mathcal{H}} = \| \boldsymbol{w} \|_{\mathbb{R}^d}$.
- On a donc:

$$v\hat{a}r\left(h_{\boldsymbol{w}}\right) = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^{n} \frac{\left(\mathbf{x}_i^\top \boldsymbol{w}\right)^2}{\| \boldsymbol{w} \|^2} = \frac{1}{n \| f_{\boldsymbol{w}} \|^2} \sum_{i=1}^{n} f_{\boldsymbol{w}}(\mathbf{x}_i)^2.$$

- De plus, $\boldsymbol{w} \perp \boldsymbol{w}' \Leftrightarrow f_{\boldsymbol{w}} \perp f_{\boldsymbol{w}'}$

Vision fonctionnelle (cont.)

- L'ACP consiste donc a résoudre, pour $i = 1, \ldots, d$:

$$f_i = \underset{f \perp \{f_1, \ldots, f_{i-1}\}}{\arg\max} \frac{1}{n \| f \|^2} \sum_{i=1}^{n} f(\mathbf{x}_i)^2 .$$

- On peut appliquer le theoreme du représentant (aussi valable dans un sous-espace): pour $i = 1, \ldots, d$, on a :

$$\forall \mathbf{x} \in \mathcal{X}, \quad f_i(\mathbf{x}) = \sum_{j=1}^{n} \alpha_{i,j} K(\mathbf{x}_j, \mathbf{x}) ,$$

avec $\boldsymbol{\alpha}_i = (\alpha_{i,1}, \ldots, \alpha_{i,n})^\top \in \mathbb{R}^n$.

Vision fonctionnelle (cont)

On a donc:

$$\| f_i \|_{\mathcal{H}}^2 = \sum_{k,l=1}^{d} \alpha_{i,k}\alpha_{i,l} K\left(\mathbf{x}_k, \mathbf{x}_l\right) = \boldsymbol{\alpha}_i^\top K \boldsymbol{\alpha}_i,$$

et de même:

$$\sum_{k=1}^{n} f_i\left(\mathbf{x}_k\right)^2 = \boldsymbol{\alpha}_i^\top K^2 \boldsymbol{\alpha}_i.$$

Vision fonctionnelle (cont)

Le probleme devient donc de maximiser en $\boldsymbol{\alpha}$ la fonction:

$$\boldsymbol{\alpha}_i = \arg\max_{\boldsymbol{\alpha}} \frac{\boldsymbol{\alpha}^\top K^2 \boldsymbol{\alpha}}{n \boldsymbol{\alpha}^\top K \boldsymbol{\alpha}},$$

sous les contraintes $\boldsymbol{\alpha}_i^\top K \boldsymbol{\alpha}_j = 0$ pour $j = 1, \ldots, i-1$.

Vision fonctionnelle (cont)

- Soient $(e_1, \dots, e_n)$ une base orthonormale de vecteurs propres de K associés aux valeurs propres $\lambda_1 \geq \dots \geq \lambda_n \geq 0$.
- Soit $\boldsymbol{\alpha}_i = \sum_{j=1}^{n} \beta_{ij} e_j$, alors

$$\frac{\boldsymbol{\alpha}^\top K^2 \boldsymbol{\alpha}}{n \boldsymbol{\alpha}^\top K \boldsymbol{\alpha}} = \frac{\sum_{i=1}^{n} \beta_{ii}^2 \lambda_i^2}{n \sum_{i=1}^{n} \beta_{ii}^2 \lambda_i},$$

qui est maximum pour $\boldsymbol{\alpha}_1 = \beta_{11} e_1$, $\boldsymbol{\alpha}_2 = \beta_{22} e_2$, *etc...*

Normalisation

- Pour $\boldsymbol{\alpha}_i = \beta_{ii} e_i$, on veut:

$$1 = \| f_i \|_{\mathcal{H}}^2 = \boldsymbol{\alpha}_i^\top K \boldsymbol{\alpha}_i = \beta_{ii}^2 \lambda_i ,$$

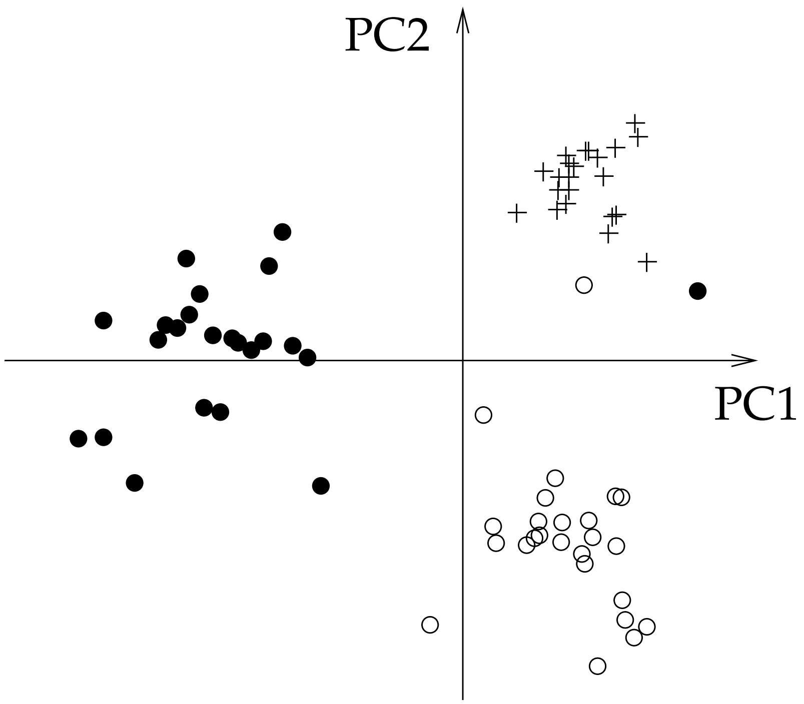
donc:

$$\boldsymbol{\alpha}_i = \frac{1}{\sqrt{\lambda_i}} e_i .$$

Remarques

- Il faut diagonaliser la matrice de Gram (centrée) au lieu de la matrice de covariance.
- L'analyse est identique en remplacant le noyau linéaire par n'importe quel noyau d.p.

Exemple

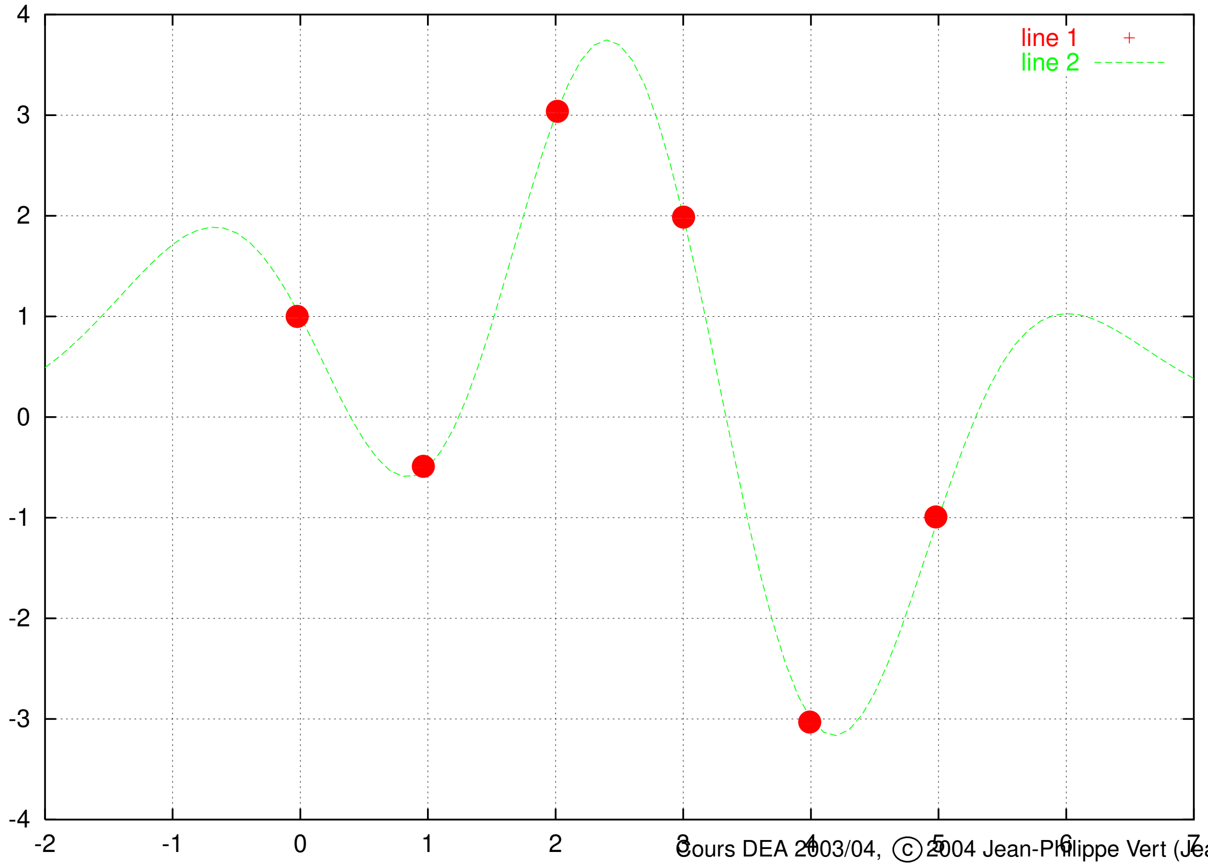


A set of 74 human tRNA sequences is analyzed using a kernel for sequences (the second-order marginalized kernel based on SCFG). This set of tRNAs contains three classes, called Ala-AGC (*white circles*), Asn-GTT (*black circles*) and Cys-GCA (*plus symbols*) (from Tsuda et al., 2003).

Regression par moindres carrés régularisée

Regression

- Soit $\mathcal{S} = \{\mathbf{x}_1, \ldots, \mathbf{x}_n\} \in \mathcal{X}^n$ un ensemble de points
- Soit $\{y_1, \ldots, y_n\} \in \mathbb{R}^n$ des nombres associés aux points
- Regression = trouver $f : \mathcal{X} \to \mathbb{R}$ pour *prédire y par $f(\mathbf{x})$*



Moindres carrés

- On mesure l'erreur si f prédit $f(\mathbf{x})$ au lieu de y par:

$$V(f(\mathbf{x}), y) = (y - f(\mathbf{x}))^2 .$$

- On se fixe un ensemble de fonctions $\mathcal{H}$
- La *regression par moindres carrés* consiste a minimiser:

$$\hat{f} = \arg\min_{f \in \mathcal{H}} \frac{1}{n} \sum_{i=1}^{n} (y_i - f(\mathbf{x}_i))^2$$

- Problemes: instabilité, risque d'overfitting si $\mathcal{H}$ est grand

Moindres carrés régularisés

- On choisit $\mathcal{H} = \mathcal{H}_K$, le rkhs associé a un noyau K sur $\mathcal{X}$
- On *régularise* la fonctionnelle a minimiser par:

$$\hat{f} = \arg\min_{f \in \mathcal{H}_K} \frac{1}{n} \sum_{i=1}^{n} (y_i - f(\mathbf{x}_i))^2 + \lambda \| f \|_{\mathcal{H}_K}^2 .$$

- *1er effet =* prévenir l'overfitting *en pénalisant les fonctions trop 'irrégulieres' (au sens du rkhs)*

Représentation des solutions

Par le *théoreme du représentant*, toute solution de

$$\hat{f} = \arg\min_{f \in \mathcal{H}_K} \frac{1}{n} \sum_{i=1}^{n} \left(y_i - f\left(\mathbf{x}_i\right)\right)^2 + \lambda \| f \|_{\mathcal{H}_K}^2 .$$

peut s'écrire sous la forme:

$$\hat{f} = \sum_{i=1}^{n} \alpha_i K\left(\mathbf{x}_i, \mathbf{x}\right).$$

2e effet = simplifie énormément la solution

Ecriture duale

- Soit $\boldsymbol{\alpha} = (\alpha_1, \ldots, \alpha_n)^\top \in \mathbb{R}^n$,
- K la matrice de Gram $n \times n$: $K_{i,j} = K\left(\mathbf{x}_i, \mathbf{x}_j\right)$.
- On a alors:

$$\left(\hat{f}\left(\mathbf{x}_1\right), \ldots, \hat{f}\left(\mathbf{x}_n\right)\right)^\top = K\boldsymbol{\alpha},$$

- et toujours

$$\| \hat{f} \|^2_{\mathcal{H}_K} = \boldsymbol{\alpha}^\top K \boldsymbol{\alpha}.$$

Ecriture duale (cont.)

Le probleme est donc équivalent a:

$$\arg\min_{\boldsymbol{\alpha}\in\mathbb{R}^n} \frac{1}{n}\left(K\boldsymbol{\alpha} - y\right)^\top \left(K\boldsymbol{\alpha} - y\right) + \lambda\boldsymbol{\alpha}^\top K\boldsymbol{\alpha}.$$

C'est une fonction convexe et différentiable en $\boldsymbol{\alpha}$: il est équivalent d'annuler sa dérivée:

$$\begin{aligned} 0 &= \frac{2}{n}K\left(K\boldsymbol{\alpha} - y\right) + 2\lambda K\boldsymbol{\alpha} \\ &= K\left[\left(K + \lambda n I\right)\boldsymbol{\alpha} - y\right] \end{aligned}$$

Ecriture duale (cont.)

- K étant une matrice symétrique elle est diagonalisable en base orthonormée, avec $Ker(K) \perp Im(K)$
- Dans cette base on voit que $(K + \lambda nI)^{-1}$ laisse $Im(K)$ et $Ker(K)$ invariants
- Donc le probleme est équivalent a:

$$(K + \lambda nI)\,\boldsymbol{\alpha} - y \in Ker(K)$$

$$\Leftrightarrow \boldsymbol{\alpha} - (K + \lambda nI)^{-1} y \in Ker(K)$$

$$\Leftrightarrow \boldsymbol{\alpha} = (K + \lambda nI)^{-1} y + \epsilon, \text{ avec } K\epsilon = 0.$$

Ecriture duale (cont.)

- Mais si $\boldsymbol{\alpha}' = \boldsymbol{\alpha} + \epsilon$ avec $K\epsilon = 0$, alors:

$$\| f - f' \|_{\mathcal{H}_K}^2 = (\boldsymbol{\alpha} - \boldsymbol{\alpha}')^\top K (\boldsymbol{\alpha} - \boldsymbol{\alpha}') = 0,$$

  donc $f = f'$.
- La solution au probleme initial est donc par exemple:

$$\hat{f} = \sum_{i=1}^{n} \alpha_i K(\mathbf{x}_i, \mathbf{x}),$$

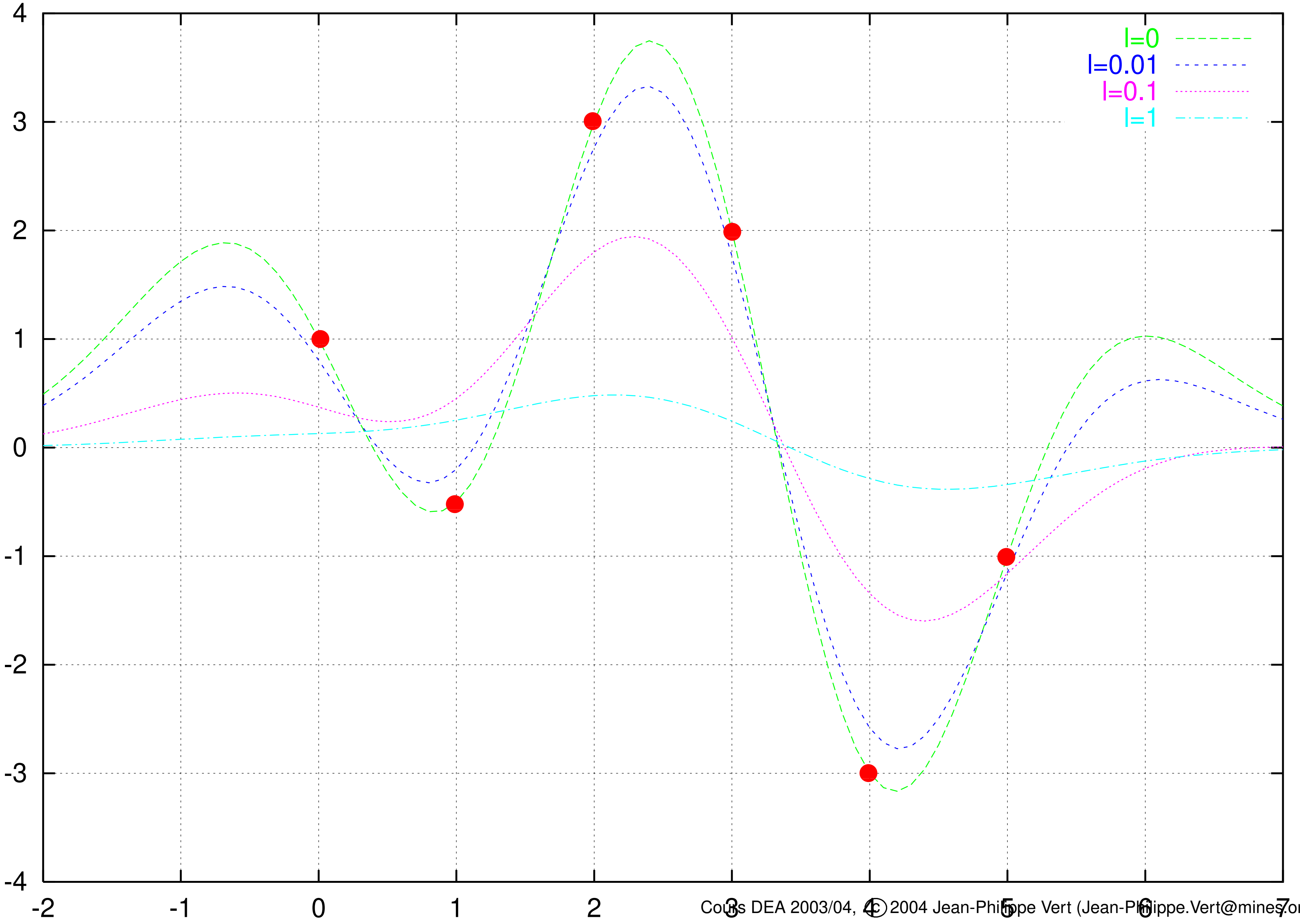
  avec

$$\boldsymbol{\alpha} = (K + \lambda n I)^{-1} y.$$

Remarques

- La matrice $(K + n\lambda I)^{-1}$ est *inversible quand $\lambda > 0$*.
- Quand $\lambda \to 0$, la méthode converge vers les moindres carrés ordinaires (minimisation de la perte empirique). Quand $\lambda \to \infty$, la solution tend vers $f = 0$.
- En pratique, on n'inverse pas la matrice $K + n\lambda I$, on utilise des *algorithmes de résolution de systemes linéaire*.
- Cette méthode pose des problemes pratiques quand *le nombre de points augmente*.

Exemple



Support Vector Machines (SVM) pour la classification binaire

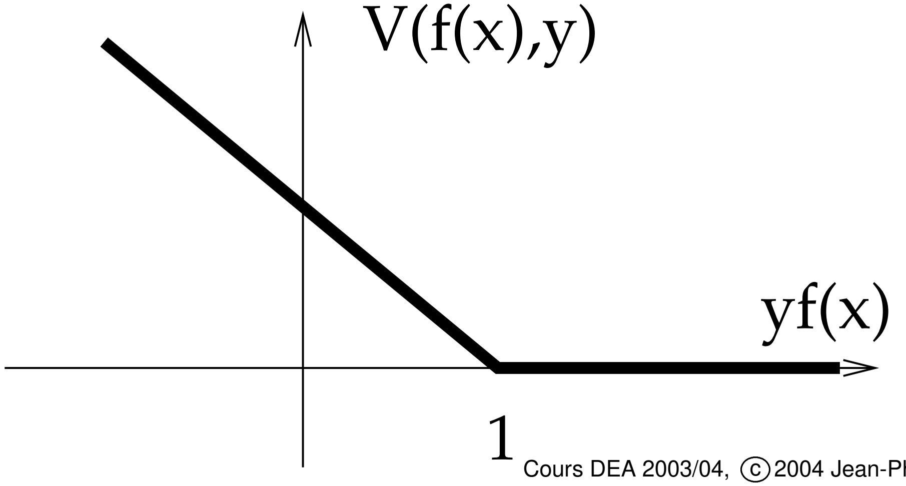
Classification binaire

- Soit $\mathcal{S} = \{\mathbf{x}_1, \ldots, \mathbf{x}_n\} \in \mathcal{X}^n$ un ensemble de points
- Soit $\{y_1, \ldots, y_n\} \in \{-1, +1\}$ des labels binaires associés aux points
- Classification = trouver $f : \mathcal{X} \rightarrow \{-1, +1\}$ pour *prédire le label y par $f(\mathbf{x})$*
- Ce probleme est souvent appelé *reconnaissance de forme* (*pattern recognition*).

La *hinge loss*

- On va chercher une fonction $f : \mathcal{X} \to \mathbb{R}$, et la prédiction sera le signe de $f(\mathbf{x})$.
- Si on prédit $f(\mathbf{x}) \in \mathbb{R}$ au lieu de $y \in \{-1, +1\}$, on va utiliser la fonction de perte suivante (*hinge loss*):

$$V_{hinge}(f(\mathbf{x}), y) = \begin{cases} 0 & \textit{si } yf(\mathbf{x}) \geq 1, \\ 1 - yf(\mathbf{x}) & \textit{sinon.} \end{cases}$$



Pourquoi la hinge loss?

- Pourquoi pas 1 si $yf(\mathbf{x}) < 0$, 0 sinon (indicatrice d'erreur)?
- La hinge loss est une fonction convexe de f
- Elle est minorée par la fonction erreur
- Elle force les points a s'éloigner de la frontiere de discrimination (important pour la généralisation)

Définition des SVM

- La SVM est l'algorithme qui consiste a minimiser

$$\hat{f} = \arg\min_{f \in \mathcal{H}_K} \frac{1}{n} \sum_{i=1}^{n} V_{hinge}\left(f\left(\mathbf{x}_i\right), y_i\right) + \lambda \| f \|^2_{\mathcal{H}_K}.$$

ou $\mathcal{H}_K$ est le rkhs associé a un noyau K sur $\mathcal{X}$.

- Par le théoreme du représentant, on sait que $\hat{f}$ va se décomposer en

$$\hat{f}\left(\mathbf{x}\right) = \sum_{i=1}^{n} \alpha_i K\left(\mathbf{x}_i, \mathbf{x}\right).$$

Variables "ressorts" (*slack variables*)

- La hinge loss est convexe en f mais non différentiable. On ne peut donc pas résoudre directement le probleme par dérivation
- On simplifie le probleme en introduisant des variables ressort $\boldsymbol{\xi} = (\xi_1, \ldots, \xi_n) \in \mathbb{R}^n$ et considérant le probleme équivalent:

$$\min_{f \in \mathcal{H}_K, \boldsymbol{\xi} \in \mathbb{R}^n} \frac{1}{n} \sum_{i=1}^{n} \xi_i + \lambda \| f \|_{\mathcal{H}_K}^2 ,$$

sous les contraintes:

$$\xi_i \geq V\left(f\left(\mathbf{x}_i\right), y_i\right), \text{ pour } i = 1, \ldots, n.$$

Variables "ressorts" (cont.)

Ce probleme est lui-meme équivalent a:

$$\min_{f \in \mathcal{H}_K, \boldsymbol{\xi} \in \mathbb{R}^n} \frac{1}{n} \sum_{i=1}^{n} \xi_i + \lambda \| f \|_{\mathcal{H}_K}^2 ,$$

sous les contraintes:

$$\begin{cases} \xi_i \geq 1 - y_i f\left(\mathbf{x}_i\right), & \textit{pour } i = 1, \ldots, n, \\ \xi_i \geq 0, & \textit{pour } i = 1, \ldots, n, \end{cases}$$

Probleme primal

En remplacant $\hat{f}$ par

$$\hat{f}(\mathbf{x}) = \sum_{i=1}^{n} \alpha_i K(\mathbf{x}_i, \mathbf{x}),$$

on obtient un probleme en $\boldsymbol{\alpha}$:

$$\min_{\boldsymbol{\alpha} \in \mathbb{R}^n, \boldsymbol{\xi} \in \mathbb{R}^n} \frac{1}{n} \sum_{i=1}^{n} \xi_i + \lambda \boldsymbol{\alpha}^\top K \boldsymbol{\alpha},$$

sous les contraintes:

$$\begin{cases} y_i \sum_{j=1}^{n} \alpha_j K(\mathbf{x}_i, \mathbf{x}_j) + \xi_i - 1 \geq 0, & \text{pour } i = 1, \ldots, n, \\ \xi_i \geq 0, & \text{pour } i = 1, \ldots, n. \end{cases}$$

Lagrangien

C'est un probleme classique de minimiser une fonctionnelle quadratique sous des contraintes linéaires (*programme quadratique*).
Introduisons le *Lagrangien* du probleme, en utilisant les multiplicateurs de Lagrange $\boldsymbol{\mu}$ et $\boldsymbol{\nu}$:

$$
\begin{aligned}
L\left(\boldsymbol{\alpha}, \boldsymbol{\xi}, \boldsymbol{\mu}, \boldsymbol{\nu}\right) = & \frac{1}{n} \sum_{i=1}^{n} \xi_i + \lambda \boldsymbol{\alpha}^\top K \boldsymbol{\alpha} \\
& - \sum_{i=1}^{n} \mu_i \left[y_i \sum_{j=1}^{n} \alpha_j K\left(\mathbf{x}_i, \mathbf{x}_j\right) + \xi_i - 1 \right] - \sum_{i=1}^{n} \nu_i \xi_i .
\end{aligned}
$$

Rappel (Lagrangien)

- Pour chaque $\boldsymbol{\mu} \geq 0$ et $\boldsymbol{\nu} \geq 0$, il faut *minimiser* en $\boldsymbol{\alpha}$ et $\boldsymbol{\xi}$:

$$\left(\boldsymbol{\alpha}^*(\boldsymbol{\mu},\boldsymbol{\nu}),\boldsymbol{\xi}^*(\boldsymbol{\mu},\boldsymbol{\nu})\right) := \operatorname*{arg\,min}_{(\boldsymbol{\alpha},\boldsymbol{\xi})\in\mathbb{R}^{2n}} L(\boldsymbol{\alpha},\boldsymbol{\xi},\boldsymbol{\mu},\boldsymbol{\nu}).$$

- Ensuite il faut chercher le *point selle*:

$$\begin{aligned}(\boldsymbol{\mu}^*,\boldsymbol{\nu}^*) &= \operatorname*{arg\,max}_{(\boldsymbol{\mu},\boldsymbol{\nu})\in(\mathbb{R}^+)^{2n}} L\left(\boldsymbol{\alpha}^*(\boldsymbol{\mu},\boldsymbol{\nu}),\boldsymbol{\xi}^*(\boldsymbol{\mu},\boldsymbol{\nu}),\boldsymbol{\mu},\boldsymbol{\nu}\right)\\ &= \operatorname*{arg\,max}_{(\boldsymbol{\mu},\boldsymbol{\nu})\in(\mathbb{R}^+)^{2n}} \min_{(\boldsymbol{\alpha},\boldsymbol{\xi})\in\mathbb{R}^{2n}} L(\boldsymbol{\alpha},\boldsymbol{\xi},\boldsymbol{\mu},\boldsymbol{\nu}).\end{aligned}$$

- La solution au probleme sous contrainte est alors:

$$\left(\boldsymbol{\alpha}^*(\boldsymbol{\mu}^*,\boldsymbol{\nu}^*),\boldsymbol{\xi}^*(\boldsymbol{\mu}^*,\boldsymbol{\nu}^*)\right).$$

Minimisation en α

L est une fonction quadratique en $\boldsymbol{\alpha}$. Pour trouver le minimum, il suffit donc d'annuler les dérivées:

$$\nabla_{\boldsymbol{\alpha}} L = 2\lambda K \boldsymbol{\alpha} - KY\boldsymbol{\mu} = K\left(2\lambda\boldsymbol{\alpha} - Y\boldsymbol{\mu}\right),$$

ou Y est la matrice diagonale $Y_{i,i} = y_i$. On en déduit:

$$\boldsymbol{\alpha} = \frac{Y\boldsymbol{\mu}}{2\lambda} + \epsilon,$$

avec $K\epsilon = 0$. Mais ϵ n'intervient pas dans f (cf regression MCR), donc on peut choisir par exemple $\epsilon = 0$ d'ou:

$$\alpha_i^*\left(\boldsymbol{\mu}, \boldsymbol{\nu}\right) = \frac{y_i \mu_i}{2\lambda}, \qquad \textit{pour } i = 1, \ldots, n.$$

Minmisation en ξ

L est une fonction linéaire en $\boldsymbol{\xi}$. Son minimum est donc $-\infty$, sauf si la dérivée est nulle:

$$\frac{\partial L}{\partial \xi_i} = \frac{1}{n} - \mu_i - \nu_i = 0.$$

Donc $\min_{\boldsymbol{\alpha},\boldsymbol{\xi}} L\left(\boldsymbol{\alpha},\boldsymbol{\xi},\boldsymbol{\mu},\boldsymbol{\nu}\right) > -\infty$ seulement si $\mu_i + \nu_i = 1/n$ pour $i = 1,\ldots,n$. Comme $\mu_i \geq 0$ et $\nu_i \geq 0$, cela est possible ssi

$$0 \leq \mu_i \leq \frac{1}{n},$$

car on peut alors prendre $\nu_i = 1/n - \mu_i$.

Probleme dual

On calcule donc:

$$L\left(\boldsymbol{\alpha}^*\left(\boldsymbol{\mu},\boldsymbol{\nu}\right),\boldsymbol{\xi}^*\left(\boldsymbol{\mu},\boldsymbol{\nu}\right),\boldsymbol{\mu},\boldsymbol{\nu}\right) =$$

$$\begin{cases} -\infty & \text{si } \mu_i < 0 \text{ ou } \mu_i > 1/n, \\ \sum_{i=1}^n \mu_i - \frac{1}{4\lambda}\sum_{i,j=1}^n y_i y_j \mu_i \mu_j K\left(\mathbf{x}_i,\mathbf{x}_j\right) & \text{sinon.} \end{cases}$$

Le probleme dual est donc:

$$\max_{0\leq\boldsymbol{\mu}\leq 1/n} \sum_{i=1}^n \mu_i - \frac{1}{4\lambda}\sum_{i,j=1}^n y_i y_j \mu_i \mu_j K\left(\mathbf{x}_i,\mathbf{x}_j\right).$$

Retour au primal

En replacant μ_i par $2\lambda\alpha_i y_i$, on obtient une nouvelle expression du probleme primal:

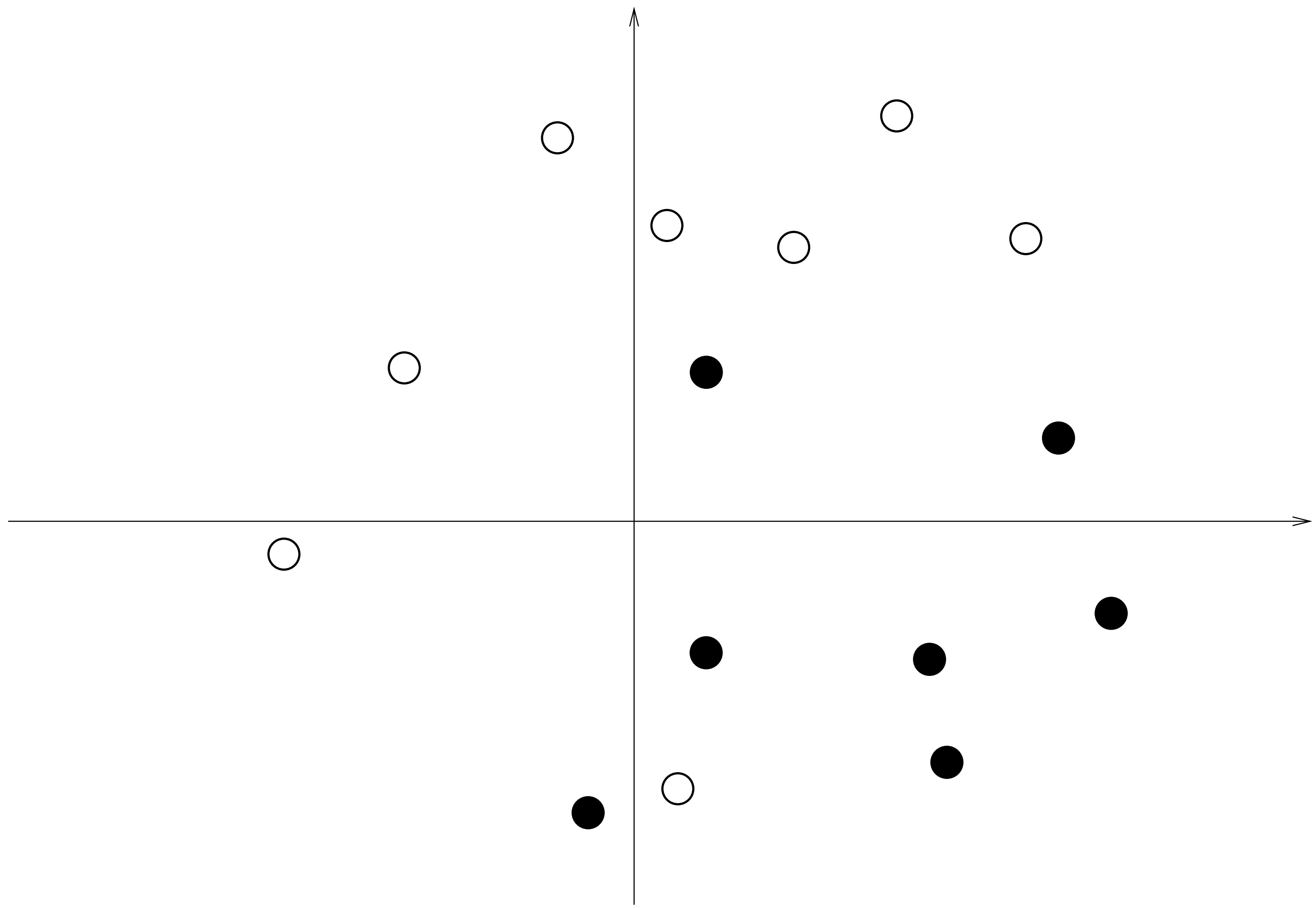
$$\max_{\boldsymbol{\alpha}\in\mathbb{R}^d} 2\sum_{i=1}^{n}\alpha_i y_i - \sum_{i,j=1}^{n}\alpha_i\alpha_j K\left(\mathbf{x}_i,\mathbf{x}_j\right)$$

$$= \max_{\boldsymbol{\alpha}\in\mathbb{R}^d} 2\boldsymbol{\alpha}^\top\mathbf{y} - \boldsymbol{\alpha}K\boldsymbol{\alpha},$$

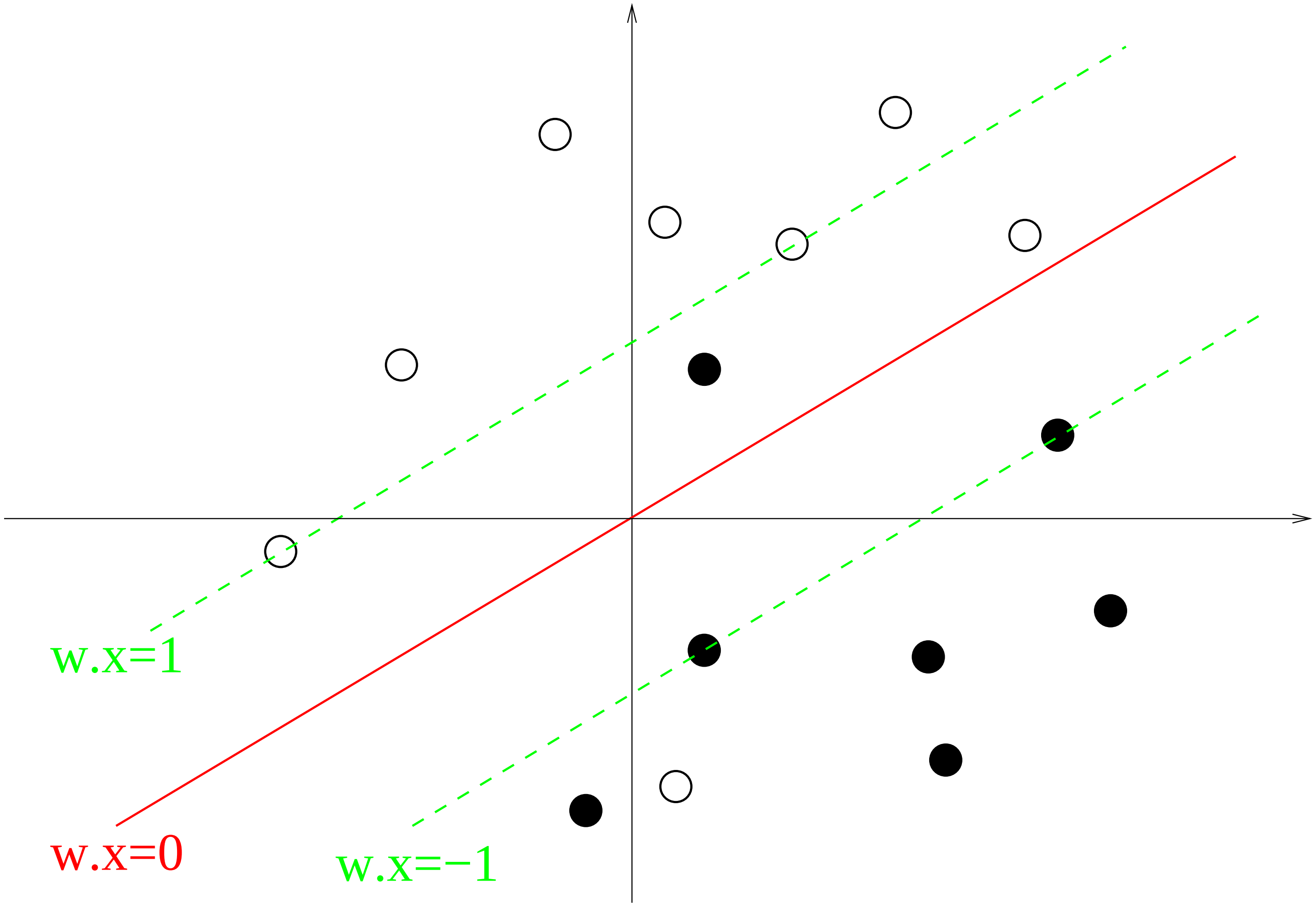
sous la contrainte:

$$0 \leq y_i\alpha_i \leq \frac{1}{2\lambda n}, \qquad \textit{pour}\ i = 1,\ldots,n.$$

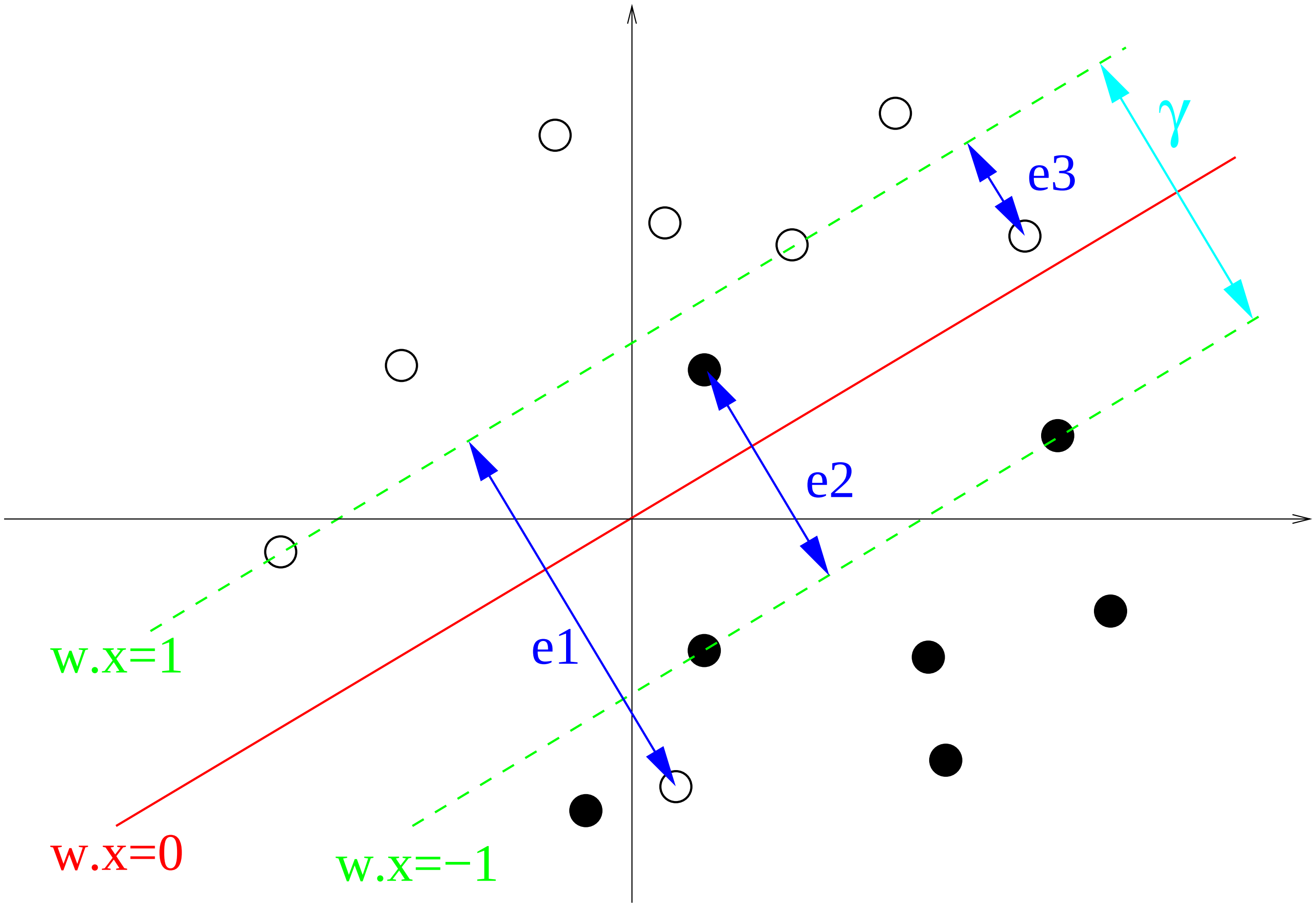
Interprétation géométrique



Interprétation géométrique



Interprétation géométrique



Interprétation géométrique

Des calculs élémentaires montrent que:

$$\gamma = \frac{2}{\| \mathbf{w} \|} = \frac{2}{\| f_w \|},$$

et

$$V_{hinge}\left(f\left(\mathbf{x}_i\right), y_i\right) = \frac{2e_i}{\gamma}$$

donc la SVM est solution de:

$$\min_{\mathbf{w} \in \mathbb{R}^d} \frac{\sum_{i=1}^{n} e_i}{\gamma n} + \frac{\lambda}{\gamma^2}.$$

Conditions de KKT

On rappelle (Kusch-Kuhn-Tucker) que pour la solution du probleme d'optimisation sous contraintes, on a, pour $i = 1, \ldots, n$:

$$\begin{cases} \mu_i \left[y_i f\left(\mathbf{x}_i\right) + \xi_i - 1 \right] = 0, \\ \nu_i \xi_i = 0, \end{cases}$$

avec

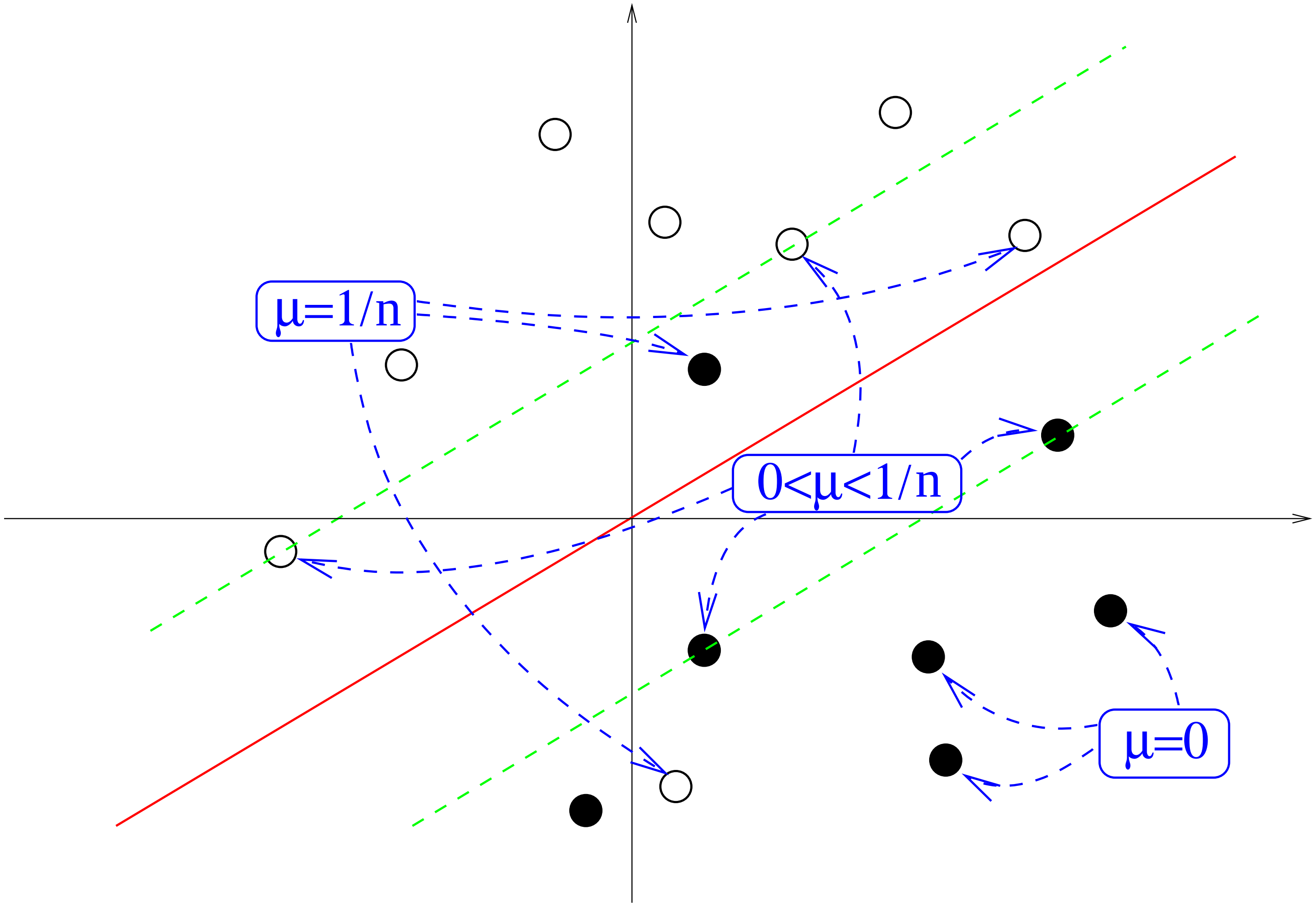
$$\begin{cases} 0 \leq \mu_i \leq \frac{1}{n}, \\ \mu_i + \nu_i = \frac{1}{n}. \end{cases}$$

Interprétation de μ

- Si $\mu_i = 0$, alors $\nu_i = 1/n > 0$ donc $\xi_i = 0$: $y_i f(\mathbf{x}_i) \geq 1$
- Si $0 < \mu_i < 1/n$ alors $0 < \nu_i$, donc les deux contraintes sont actives: $\xi_i = 0$ et $y_i f(\mathbf{x}_i) + \xi_i - 1 = 0$. On en déduit $y_i f(\mathbf{x}_i) = 1$
- Si $\mu_i = 1/n > 0$ alors $\nu_i = 0$, donc $\xi_i \geq 0$ et $y_i f(\mathbf{x}_i) \leq 1$

Les points avec $\mu_i > 0$ sont appelés les *vecteurs de support*.

Interprétation de μ



Vecteurs de support

- Les vecteurs de support sont les points pour lesquels $\mu_i > 0$, et donc $\alpha_i > 0$
- La fonction de discrimination est:

$$\forall \mathbf{x} \in \mathcal{X}, \quad f(\mathbf{x}) = \sum_{i=1}^{n} \alpha_i K(\mathbf{x}_i, \mathbf{x}) = \sum_{i \in SV} \alpha_i K(\mathbf{x}_i, \mathbf{x}),$$

  ou SV est l'ensemble des indices des vecteurs de support : *seuls les vecteurs de support importent pour la classification d'un nouveau point*.
- Typiquement, il y a peu de SV.

Implementations

Quelques bonnes implémentations:

- Gist
- SVMLight
- Spider

Remarque: C-SVM

D'habitude on écrit les SVM comme minimisant:

$$\arg\min_{f \in \mathcal{H}_K} \quad C \sum_{i=1}^{n} V_{hinge}\left(f\left(\mathbf{x}_i\right), y_i\right) + \| f \|^2_{\mathcal{H}_K}.$$

C'est bien sur équivalent en prenant $C = 1/n\lambda$. On parle alors de *C-SVM*. C est souvent un parametre des implémentations.

Extension 1 (exercice)

Plutot que des fonctions linéaires, on peut chercher des fonctions *affines* de la forme:

$$f_{\mathbf{w},b}(\mathbf{x}) = \mathbf{w} \cdot \mathbf{x} + b.$$

Dériver la forme duale quand on veut optimiser:

$$\underset{(\mathbf{x},b)\in\mathbb{R}^{d+1}}{\arg\min} \; C \sum_{i=1}^{n} V_{hinge}\left(f_{\mathbf{w},b}\left(\mathbf{x}_i\right), y_i\right) + \parallel w \parallel^2.$$

Extension 2 (exercice)

Dans le cas des fonctions affines de la forme de la forme:

$$f_{\mathbf{w},b}(\mathbf{x}) = \mathbf{w} \cdot \mathbf{x} + b,$$

une autre version des SVM consiste a minimiser:

$$\underset{(\mathbf{x},b)\in\mathbb{R}^{d+1}}{\arg\min}\, C \sum_{i=1}^{n} V_{hinge}\left(f_{\mathbf{w},b}(\mathbf{x}_i), y_i\right)^{2} + \| w \|^2 .$$

Ecrire la forme duale.