Support Vector Machines

Florence d'Alché-Buc

Contact: florence.dalche@telecom-paristech.fr,
Télécom Paris France

Outline

Classification binaire supervisée

Cadre probabiliste et statistique 1/2

- Soit X un vecteur aléatoire de $\mathcal{X} = \mathbb{R}^p$
- Y une variable aléatoire discrète $\mathcal{Y} = \{-1, 1\}$
- Soit $\mathbb{P}$ la loi de probabilité jointe de (X,Y)
- Soit $\mathcal{S}_n = \{(x_1, y_1), \ldots, (x_n, y_n)\}$, i.i.d. sample from $\mathbb{P}$.

Cadre probabiliste et statistique 2/2

- Soit $f : \mathbb{R}^p \to \{-1, +1\}$ une fonction de classification binaire: $f(x) = \text{sign}(h(x))$ avec $h : \mathbb{R}^p \to \mathbb{R} \in \mathcal{H}$
- Soit $\ell : \{-1, +1\} \times \mathbb{R} \to \mathbb{R}$ une fonction de perte
- Risque empirique $R_n(h) = \frac{1}{n} \sum_i \ell(y_i, h(x_i))$ et un terme régularisateur $\Omega(h)$ qui mesure la *complexité* de h.
- On cherche : $\hat{h} = \arg\min_{h \in \mathcal{H}} R_n(h) + \lambda \Omega(h)$

Et en pratique, comment fait-on ?

Méthodologie pour développer une approche discriminante

- Définir
  - l'**espace de représentation** des entrées

Et en pratique, comment fait-on ?

Méthodologie pour développer une approche discriminante

- Définir
  - l'**espace de représentation** des entrées
  - la **classe des fonctions** de classification binaire considérées

Et en pratique, comment fait-on ?

Méthodologie pour développer une approche discriminante

- Définir
  - l'**espace de représentation** des entrées
  - la **classe des fonctions** de classification binaire considérées
  - la **fonction de coût** à minimiser pour obtenir le meilleur classifieur dans cette classe

Et en pratique, comment fait-on ?

Méthodologie pour développer une approche discriminante

- Définir
  - l'**espace de représentation** des entrées
  - la **classe des fonctions** de classification binaire considérées
  - la **fonction de coût** à minimiser pour obtenir le meilleur classifieur dans cette classe
  - l'**algorithme de minimisation** de cette fonction de coût

Et en pratique, comment fait-on ?

Méthodologie pour développer une approche discriminante

- Définir
  - l'**espace de représentation** des entrées
  - la **classe des fonctions** de classification binaire considérées
  - la **fonction de coût** à minimiser pour obtenir le meilleur classifieur dans cette classe
  - l'**algorithme de minimisation** de cette fonction de coût
  - une **méthode de sélection de modèle** pour définir les hyperparamètres

Outline

Séparateur linéaire

Définition

Soit $\mathbf{x} \in \mathbb{R}^p$

$h(\mathbf{x}) = \text{signe}(\mathbf{w}^T\mathbf{x} + b)$

L'équation : $\mathbf{w}^T\mathbf{x} + b = 0$ définit un hyperplan dans l'espace euclidien $\mathbb{R}^p$

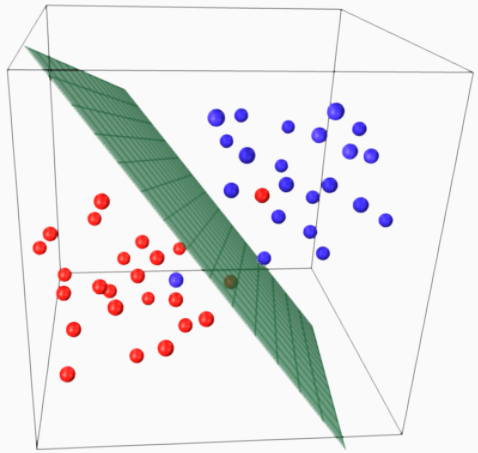
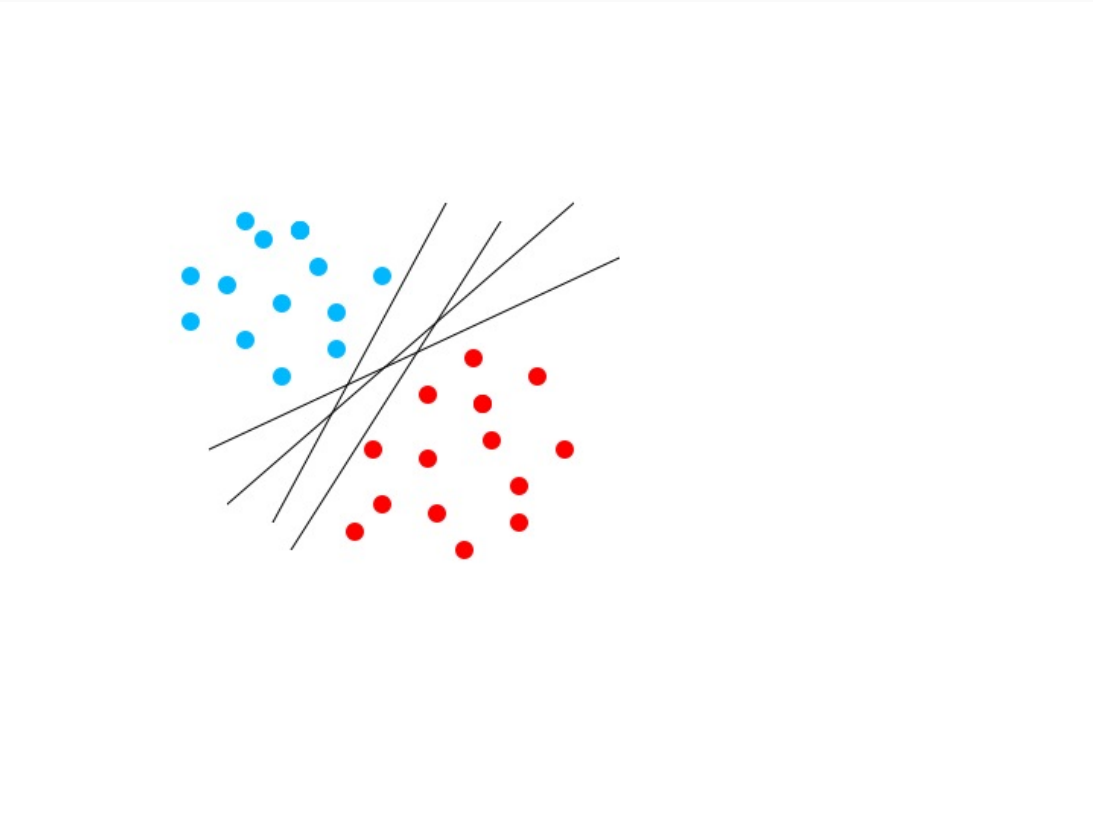


Figure 1: Exemple: données d'apprentissage en 3D et séparateur linéaire

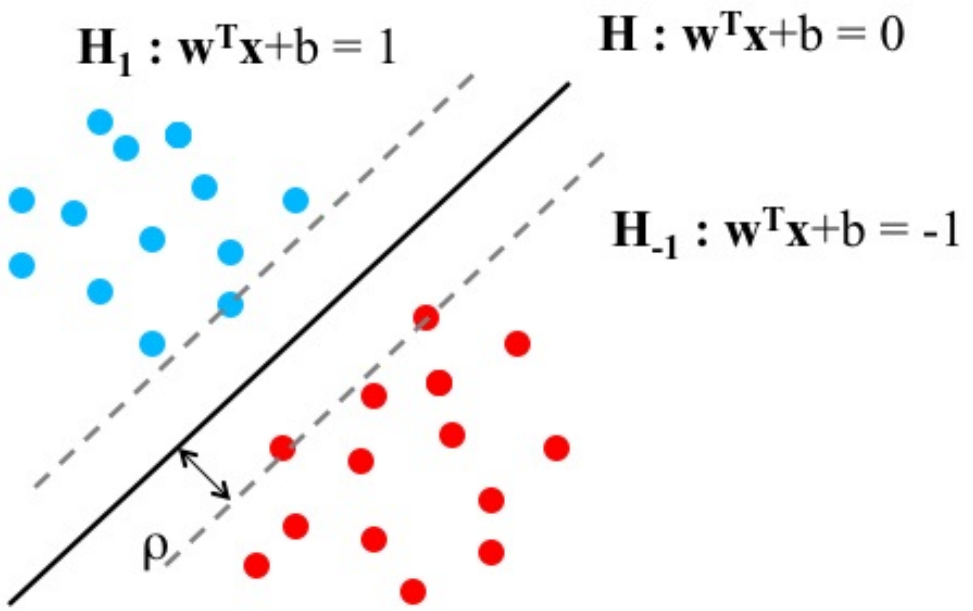
N.B.: C'est aussi l'équation d'un perceptron !

Cas de données linéairement séparables



Exemple en 2D: quelle droite choisir ?

Critère de marge



Critère de marge

Notion de marge géométrique

- Pour séparer les données, on considère un triplet d'hyperplans:
  - H: $\mathbf{w}^T\mathbf{x} + b = 0$, $H_1 : \mathbf{w}^T\mathbf{x} + b = 1$, $H_{-1} : \mathbf{w}^T\mathbf{x} + b = -1$
- On appelle *marge géométrique*, $\rho(\mathbf{w})$ la plus petite distance entre les données et l'hyperplan H, ici donc la moitié de la distance entre H_1 et H_{-1}
- Un calcul simple donne : $\rho(\mathbf{w}) = \frac{1}{||\mathbf{w}||}$.

Nouvelle fonction de coût à optimiser

Comment déterminer w et b ?

- Maximiser la marge $\rho(\mathbf{w})$ tout en séparant les données de part et d'autre de H_1 et H_{-1}
- Séparer les données bleues $(y_i = 1)$: $\mathbf{w}^T\mathbf{x}_i + b \geq 1$
- Séparer les données rouges $(y_i = -1)$: $\mathbf{w}^T\mathbf{x}_i + b \leq -1$

SVM linéaire: cas séparable

Optimisation dans l'espace primal

$$\begin{aligned} &\underset{\mathbf{w},b}{\text{minimiser}} && \frac{1}{2}\|\mathbf{w}\|^2 \\ &\text{sous la contrainte} && y_i(\mathbf{w}^T\mathbf{x}_i + \mathrm{b}) \geq 1,\ i = 1, \ldots, n. \end{aligned}$$

Référence

Boser, B. E.; Guyon, I. M.; Vapnik, V. N. (1992). "A training algorithm for optimal margin classifiers". Proceedings of the fifth annual workshop on Computational learning theory - COLT '92. p. 144.

Programmation quadratique sous contraintes d'inégalités affines

Problème primal:

$$\begin{aligned} \underset{\mathbf{w},b}{\text{minimiser}} \quad & \frac{1}{2}\|\mathbf{w}\|^2 \\ \text{sous la contrainte} \quad & 1 - y_i(\mathbf{w}^T\mathbf{x}_i + \mathrm{b}) \leq 0, \ i = 1, \ldots, n. \end{aligned}$$

Programmation quadratique sous contraintes d'inégalités affines

On peut définir une nouvelle fonction objectif: la somme de la fonction à minimiser + la somme des contraintes multipliées par des coefficients positifs , dits de Lagrange

Lagrangien

$$\mathcal{L}(\mathbf{w}, b, \boldsymbol{\alpha}) = \frac{1}{2}||\mathbf{w}||^2 + \sum_i \alpha_i(1 - y_i(\mathbf{w}^T\mathbf{x}_i + \mathrm{b}))$$

$$\forall i, \alpha_i \geq 0$$

La solution de **ce** problème convexe sous contraintes d'inégalités **affines** peut être obtenue en résolvant un problème de point de selle : $\min_{\mathbf{w}} \max_{\boldsymbol{\alpha}} \mathcal{L}(\mathbf{w}, \boldsymbol{\alpha})$. Lorsque la fonction est convexe en $\mathbf{w}$ (b) et concave en α, nous pouvons intervertir le min et le max.

Conditions de Karush-Kunh-Tucker

En l'extremum, on a

$$\nabla_{\mathbf{w}} \mathcal{L}(\mathbf{w}) = \mathbf{w} - \sum_{i=1}^{n} \alpha_i y_i \mathbf{x}_i = 0$$

$$\nabla_b \mathcal{L}(b) = -\sum_{i=1}^{n} \alpha_i y_i = 0$$

$$\forall i, \alpha_i \geq 0$$

$$\forall i, \alpha_i [1 - y_i(\mathbf{w}^T \mathbf{x}_i + b)] = 0$$

Obtention des α_i : résolution dans l'espace dual

$$\mathcal{L}(\alpha) = \sum_i \alpha_i - \frac{1}{2} \sum_{i,j} \alpha_i \alpha_j y_i y_j (\mathbf{x}_i^T \mathbf{x}_j)$$

- Maximiser $\mathcal{L}$ sous les contraintes $\alpha_i \geq 0, \forall i = 1, \ldots, n$ et $\sum_i \alpha_i y_i = 0$,
- Faire appel à un solveur quadratique

SVM linéaires ou Optimal Margin Hyperplan

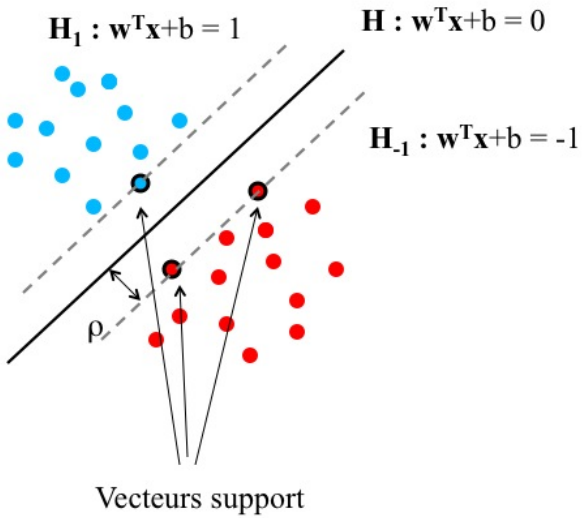
Supposons que les multiplicateurs de Lagrange α_i soient déterminés :

Equation d'un SVM linéaire

$$f(\mathbf{x}) = \text{signe}(\sum_{i=1}^{n} \alpha_i y_i \mathbf{x}_i^T \mathbf{x} + b)$$

Pour classer une donnée $\mathbf{x}$, ce classifier combine linéairement les valeurs de classe y_i des données support avec des poids du type $\alpha_i \mathbf{x}_i^T \mathbf{x}$ dépendant de la ressemblance entre $\mathbf{x}$ et les données support au sens du produit scalaire.

Vecteurs "supports"

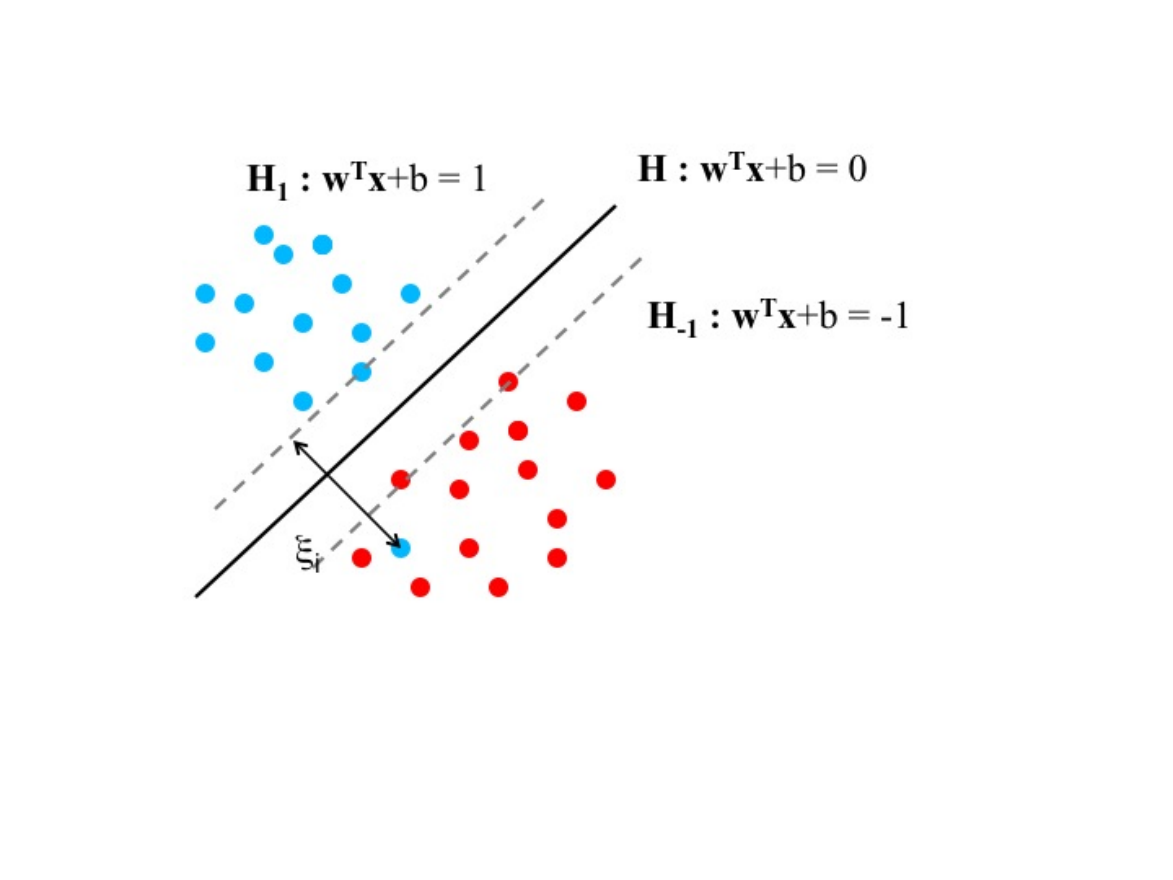


Les données d'apprentissage $\mathbf{x}_i$ telles que $\alpha_i \neq 0$ sont sur l'un ou l'autre des hyperplans H_1 ou H_{-1}. Seules ces données dites *vecteur de support* comptent dans la définition de $\mathbf{w} = \sum_{i=1}^{n} \alpha_i y_i \mathbf{x}_i$

NB : b est obtenu en choisissant une donnée support ($\alpha_i \neq 0$)

Problème: dans le cas données non séparables

Si on applique un solveur quadratique à des données du type:



alors, l'algorithme ne peut pas réussir à satisfaire les contraintes...

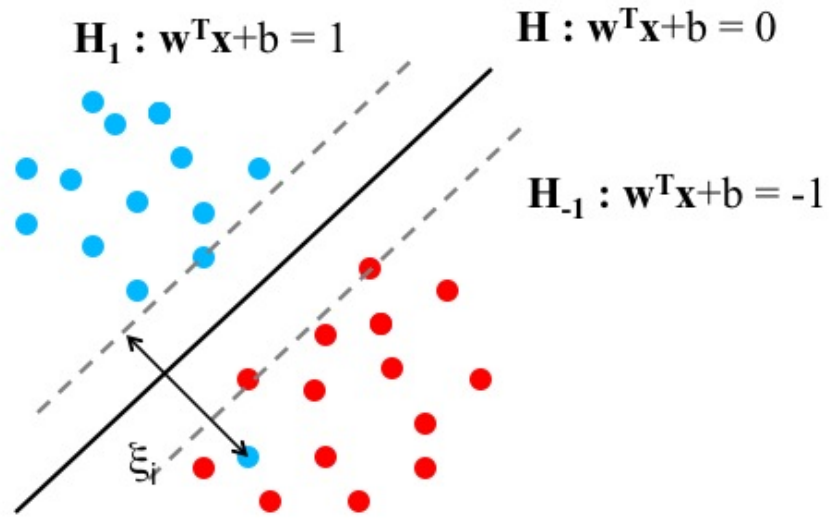
Cas réaliste: SVM linéaire dans le cas données non séparables

Introduire une variable d'écart ξ_i pour chaque donnée:

Problème dans le primal

$$\begin{aligned} \min_{\mathbf{w},b,\xi} \quad & \frac{1}{2}\|\mathbf{w}\|^2 + C\sum_{i=1}^{n}\xi_i \\ \text{sous les contraintes} \quad & y_i(\mathbf{w}^T\mathbf{x}_i + \mathrm{b}) \geq 1 - \xi_i \; i = 1, \ldots, n. \\ & \xi_i \geq 0 \; i = 1, \ldots, n. \end{aligned}$$

Cas réaliste: SVM linéaire dans le cas données non séparables



Notion de marge douce

Cas réaliste: SVM linéaire dans le cas données non séparables

Problème dans le dual

$$\max_{\alpha} \quad \sum_i \alpha_i - \frac{1}{2}\sum_{i,j} \alpha_i \alpha_j y_i y_j \mathbf{x}_i^T \mathbf{x}_j$$

$$\text{sous les contraintes} \quad 0 \leq \alpha_i \leq C \; i = 1, \ldots, n.$$

$$\sum_i \alpha_i y_i = 0.$$

Conditions de Karush-Kuhn-Tucker (KKT)

Soit α^* la solution du problème dual:

$$\forall i, [y_i f_{w^*,b^*}(x_i) - 1 + \xi_i^*] \leq 0 \quad (1)$$

$$\forall i, \alpha_i^* \geq 0 \quad (2)$$

$$\forall i, \alpha_i^* [y_i f_{w^*,b^*}(x_i) - 1 + \xi_i^*] = 0 \quad (3)$$

$$\forall i, \mu_i^* \geq 0 \quad (4)$$

$$\forall i, \mu_i^* \xi_i^* = 0 \quad (5)$$

$$\forall i, \alpha_i^* + \mu_i^* = C \quad (6)$$

$$\forall i, \xi_i^* \geq 0 \quad (7)$$

$$\mathbf{w}^* = \sum_i \alpha_i^* y_i \mathbf{x}_i \quad (8)$$

$$\sum_i \alpha_i^* y_i = 0 \quad (9)$$

(10)

Différents cas de figure

Soit α^* la solution du problème dual:

- si $\alpha_i^* = 0$, alors $\mu_i^* = C > 0$ et donc, $\xi_i^* = 0$: x_i^* est bien classé mais n'intervient pas dans le paramétrage de la fonction de décision
- si $0 < \alpha_i^* < C$, alors $\mu_i^* > 0$ et donc $\xi_i^* = 0$: x_i^* est sur un des hyperplans H_1 ou H_{-1}., est support
- si $\alpha_i^* = C$, alors $\mu_i^* = 0$, $\xi_i^* = 1 - y_i f_{w^*,b^*}(x_i) \geq 0$, x_i^* est support

NB : on calcule b^* en utilisant un i tel que $0 < \alpha_i^* < C$

Cas réaliste: SVM linéaire dans le cas données non séparables

Quelques remarques

- certaines données support peuvent donc être de l'autre côté des hyperplans H.
- C est un hyperparamètre qui contrôle le compromis entre la complexité du modèle et le nombre d'erreurs de classification du modèle.

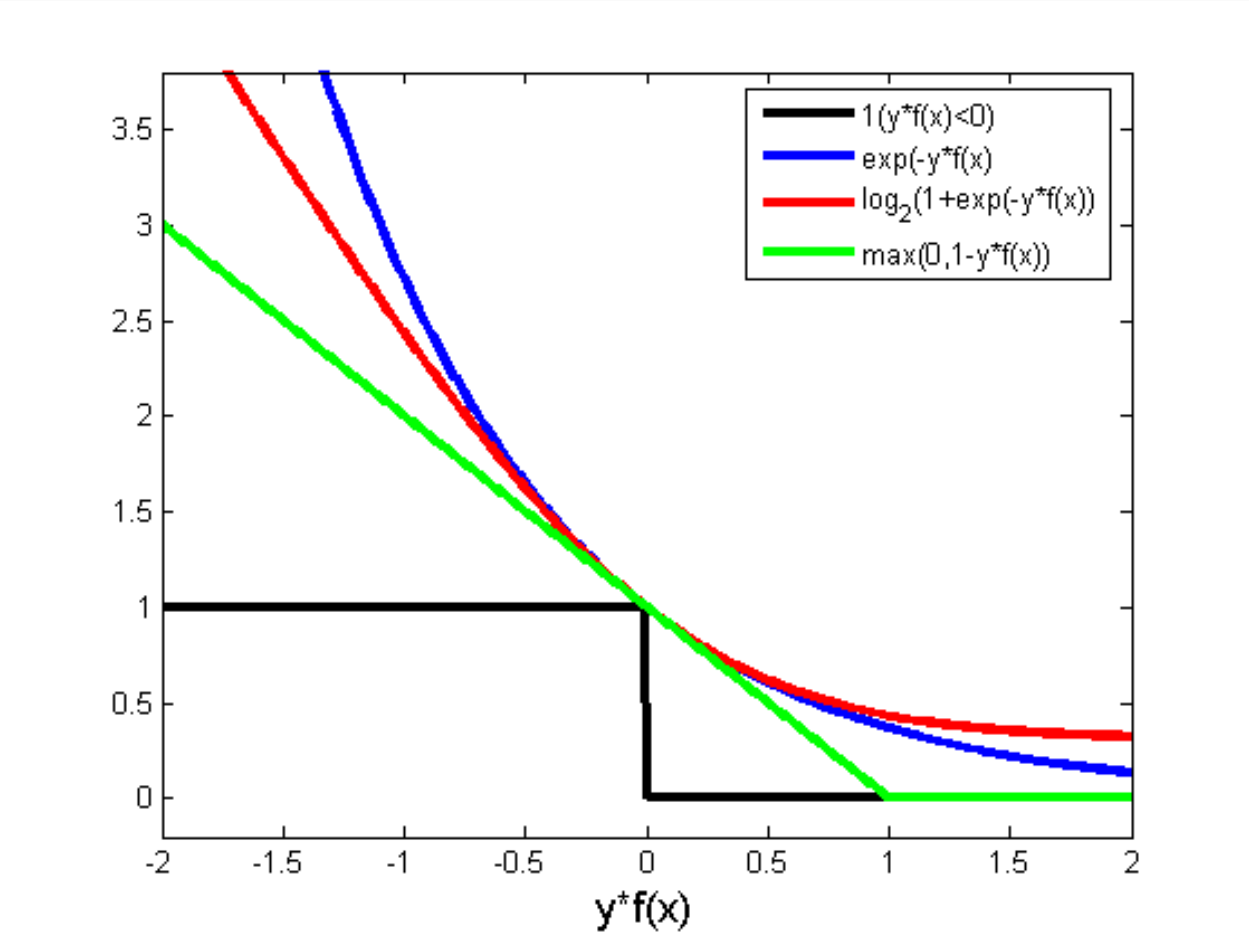
SVM : approche par régularisation

Optimisation dans l'espace primal

$$\min_{\mathbf{w},b} \quad \sum_{i=1}^{n}(1 - y_i(\mathbf{w}^T\mathbf{x}_i + b))_+ + \lambda\frac{1}{2}\|\mathbf{w}\|^2$$

Avec: $(z)_+ = max(0, z)$
$f(\mathbf{x}) = \text{signe}(h(\mathbf{x}))$
Fonction de coût: Hinge loss $L(\mathbf{x}, y, h(\mathbf{x})) = (1 - yh(\mathbf{x}))_+$
$yh(\mathbf{x})$ est appelée marge du classifieur

Approche régularisée: comparaison des termes de pertes



References

Historiques:

- BOSER, Bernhard E., Isabelle M. GUYON, and Vladimir N. VAPNIK, 1992. A training algorithm for optimal margin classifiers. In: COLT 92: Proceedings of the Fifth Annual Workshop on Computational Learning Theory. New York, NY, USA: ACM Press.
- CORTES, Corinna, and Vladimir VAPNIK, 1995. Support-vector networks. Machine Learning, 20(3).

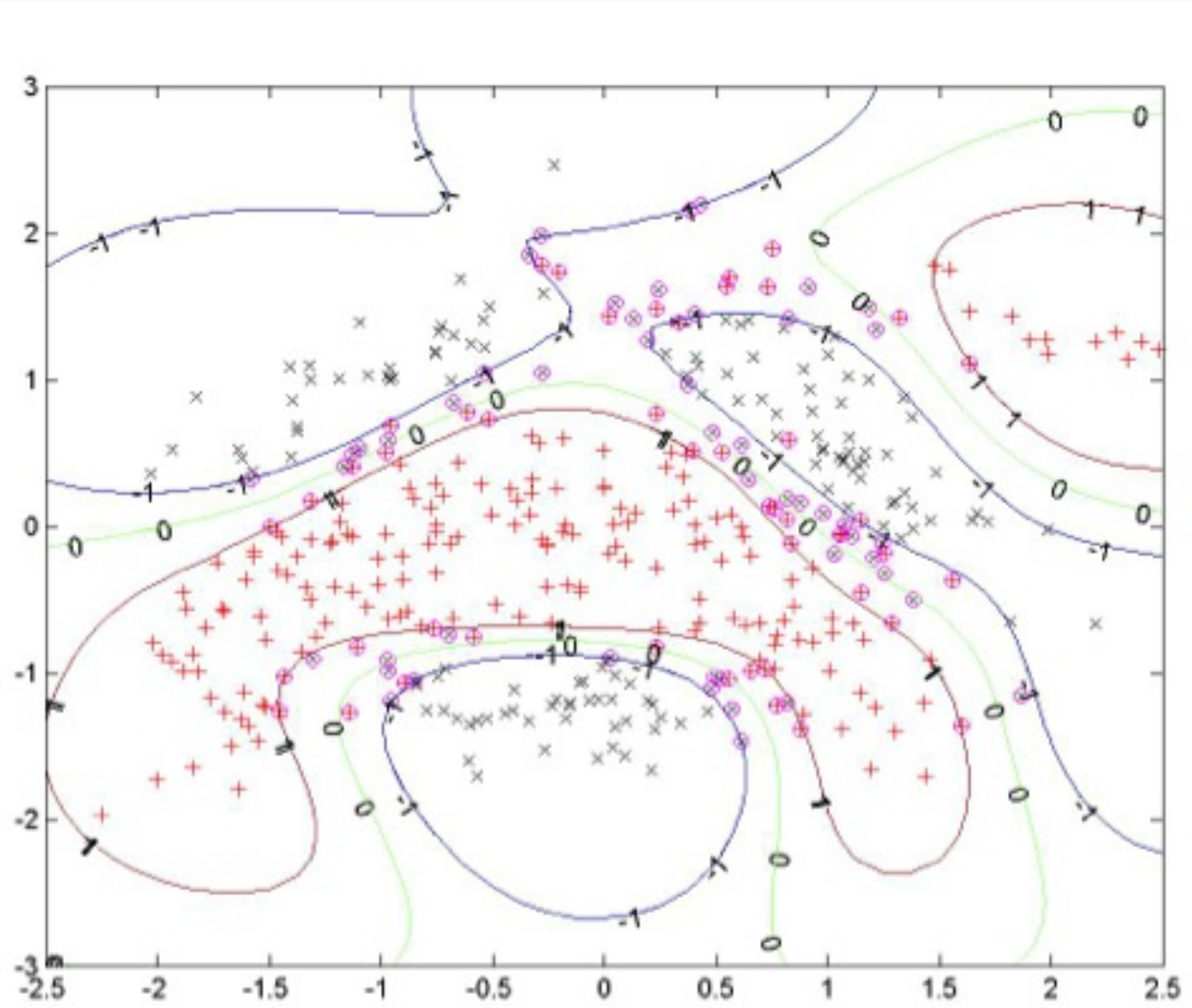
Revue:

- Article vraiment sympa, complet (un peu de maths) : A tutorial review of RKHS methods in Machine Learning, Hofman , Schoelkopf, Smola, 2005 (`https://www.researchgate.net/publication/228827159_A_Tutorial_Review_of_RKHS_Methods_in_Machine_Learning`)

Outline

Support Vector Machine : le cas non linéaire

On voudrait pouvoir séparer non linéairement des données comme ici:



Remarque

Le problème de l'hyperplan de marge optimale ne fait intervenir les données d'apprentissage qu'à travers de produits scalaires.

$$\begin{aligned} \max_{\alpha} \quad & \sum_i \alpha_i - \frac{1}{2} \sum_{i,j} \alpha_i \alpha_j y_i y_j \mathbf{x}_i^T \mathbf{x}_j \\ \text{sous les contraintes} \quad & 0 \leq \alpha_i \leq C \ i = 1, \ldots, n. \\ & \sum_i \alpha_i y_i = 0. \end{aligned}$$

Idée 1/2

Si je transforme les données à l'aide d'une fonction ϕ (non linéaire), et que je pose le problème suivant dans l'espace primal:

Problème dans le primal

$$\begin{aligned} \min_{\mathbf{w},b,\xi} \quad & \frac{1}{2}\|\mathbf{w}\|^2 + C\sum_{i=1}^{n}\xi_i \\ \text{sous les contraintes} \quad & y_i(\mathbf{w}^T\phi(\mathbf{x}_i) + \mathrm{b}) \geq 1 - \xi_i \; i = 1, \ldots, n. \\ & \xi_i \geq 0 \; i = 1, \ldots, n. \end{aligned}$$

.. je peux apprendre une fonction de séparation non linéaire.

Idée 2/2

et si je sais calculer les produits scalaires $\phi(\mathbf{x}_i)^T\phi(\mathbf{x}_j)$, je peux résoudre le problème dual suivant:

$$\begin{aligned} \max_{\alpha} \quad & \sum_i \alpha_i - \frac{1}{2}\sum_{i,j} \alpha_i\alpha_j y_i y_j \phi(\mathbf{x}_i)^T\phi(\mathbf{x}_j) \\ \text{sous les contraintes} \quad & 0 \leq \alpha_i \leq C \ , i = 1, \ldots, n. \\ & \sum_i \alpha_i y_i = 0 \ . \end{aligned}$$

Pour classer une nouvelle donné $\mathbf{x}$, je n'ai besoin que de savoir calculer $\phi(\mathbf{x}_i)^T\phi(\mathbf{x})$:

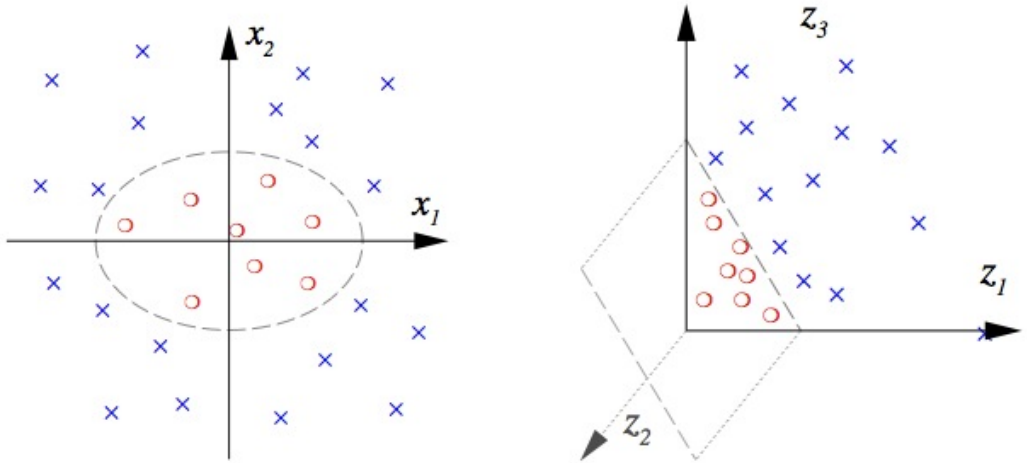
$f(\mathbf{x}) = \text{signe}(\sum_i \alpha_i y_i \phi(\mathbf{x}_i)^T\phi(\mathbf{x}) + b)$

Astuce du noyau

Au lieu de définir ϕ, je remplace $\mathbf{x}_i^T \mathbf{x}_j$ par l'image par une fonction k : $k(\mathbf{x}_i, \mathbf{x}_j)$ telle qu'il existe un espace de re-description (*feature space*) $\mathcal{F}$ et une fonction de re-description (*feature map*) $\phi : \mathcal{X} \to \mathcal{F}$ et $\forall (\mathbf{x}, \mathbf{x}') \in \mathcal{X}, k(\mathbf{x}, \mathbf{x}') = \phi(\mathbf{x})^T \phi(\mathbf{x}')$, alors je peux appliquer le même algorithme d'optimisation (résolution dans le dual) et j'obtiens :
$f(\mathbf{x}) = \text{signe}(\sum_{i=1}^{n} \alpha_i y_i k(\mathbf{x}_i, \mathbf{x}) + b)$
Des telles fonctions k existent et sont appelées *noyaux*.

Exemple : noyau polynomial

$$\Phi : \mathbb{R}^2 \to \mathbb{R}^3$$
$$(x_1, x_2) \mapsto (z_1, z_2, z_3) := (x_1^2, \sqrt{2}\, x_1 x_2, x_2^2)$$



Exemple : noyau polynomial

Astuce du noyau

On remarque que $\phi(\mathbf{x}_1)^T \phi(\mathbf{x}')$ peut se calculer sans travailler dans $\mathbb{R}^3$

Je peux définir $k(\mathbf{x}, \mathbf{x}') = \phi(\mathbf{x})^T \phi(\mathbf{x}') = (\mathbf{x}^T \mathbf{x}')^2$

Outline

Noyaux

Définition
Soit $\mathcal{X}$ un ensemble. Soit k:$\mathcal{X} \times \mathcal{X} \to \mathbb{R}$, une fonction symétrique. La fonction k est appelée *noyau* positif défini si et seulement si quel que soit le sous-ensemble fini $\{\mathbf{x}_1, \ldots, \mathbf{x}_m\}$ de $\mathcal{X}$ et le vecteur colonne $\mathbf{c}$ de $\mathbb{R}^m$, $\mathbf{c}^T K \mathbf{c} = \sum_{i,j=1}^{m} c_i c_j k(x_i, x_j) \geq 0$

N.B.: on impose donc que toute matrice construite à partir d'un nombre fini d'éléments de $\mathcal{X}$ soit semi-définie positive.

Propriété des noyaux

Théorème de Moore-Aronzajn (simplifié)
Soit K un noyau positif défini. Alors, il existe un espace de Hilbert $\mathcal{F}$, appelé *espace de redescription* et une fonction $\phi : \mathcal{X} \to \mathcal{F}$, appelée fonction de redescription (en anglais, feature map) telle que: $\langle \phi(x), \phi(x') \rangle_{\mathcal{F}} = k(x, x')$.

Propriété des noyaux

Théorème de Moore-Aronzajn

Soit K un noyau positif défini. Alors, il existe un espace de Hilbert $\mathcal{F}$, appelé *espace de redescription* et une fonction $\phi : \mathcal{X} \to \mathcal{F}$, appelée fonction de redescription (en anglais, feature map) telle que: $\langle \phi(x), \phi(x') \rangle_{\mathcal{F}} = k(x, x')$.

Il existe un unique espace de redescription $\mathcal{F}$,appelé espace de Hilbert à noyau autoreproduisant k, qui a la propriété suivante Pour tout x, la fonction $t \to k(t, x)$ appartient à $\mathcal{F}$, et k vérifie la propriété autoreproduisante

$$\langle f, k(\cdot, x) \rangle_{\mathcal{F}} = f(x)$$

Il s'agit de : $\mathcal{F} = \overline{\{x \to \sum_{i \in I} k(x, z_i), z_i \in \mathcal{X}\}}$.

Noyaux

Noyaux entre vecteurs

$\forall \mathbf{x}, \mathbf{x}' \in \mathbb{R}^p$

- Noyau linéaire : $k(\mathbf{x}, \mathbf{x}') = \mathbf{x}^T \mathbf{x}'$
- Noyau polynomial : $k(\mathbf{x}, \mathbf{x}') = (\mathbf{x}^T \mathbf{x}' + c)^d$
- Noyau gaussien : $k(\mathbf{x}, \mathbf{x}') = \exp(-\gamma ||\mathbf{x} - \mathbf{x}'||^2)$

Construction de noyaux

Propriétés de fermeture

Soient k_1 et k_2 deux noyaux sur $\mathcal{X} \times \mathcal{X}$. Soit $g : \mathcal{X} \to \mathbb{R}$. Soit $a \in \mathbb{R}^+$.

$$k(x, x') = k_1(x, x') + k_2(x, x')$$
$$k(x, x') = a k_1(x, x')$$
$$k(x, x') = k_1(x, x') k_2(x, x')$$
$$k(x, x') = g(x) g(x')$$
$$k(x, x') = k_1(g(x), g(x'))$$

Les fonctions k ainsi définis sont des noyaux.

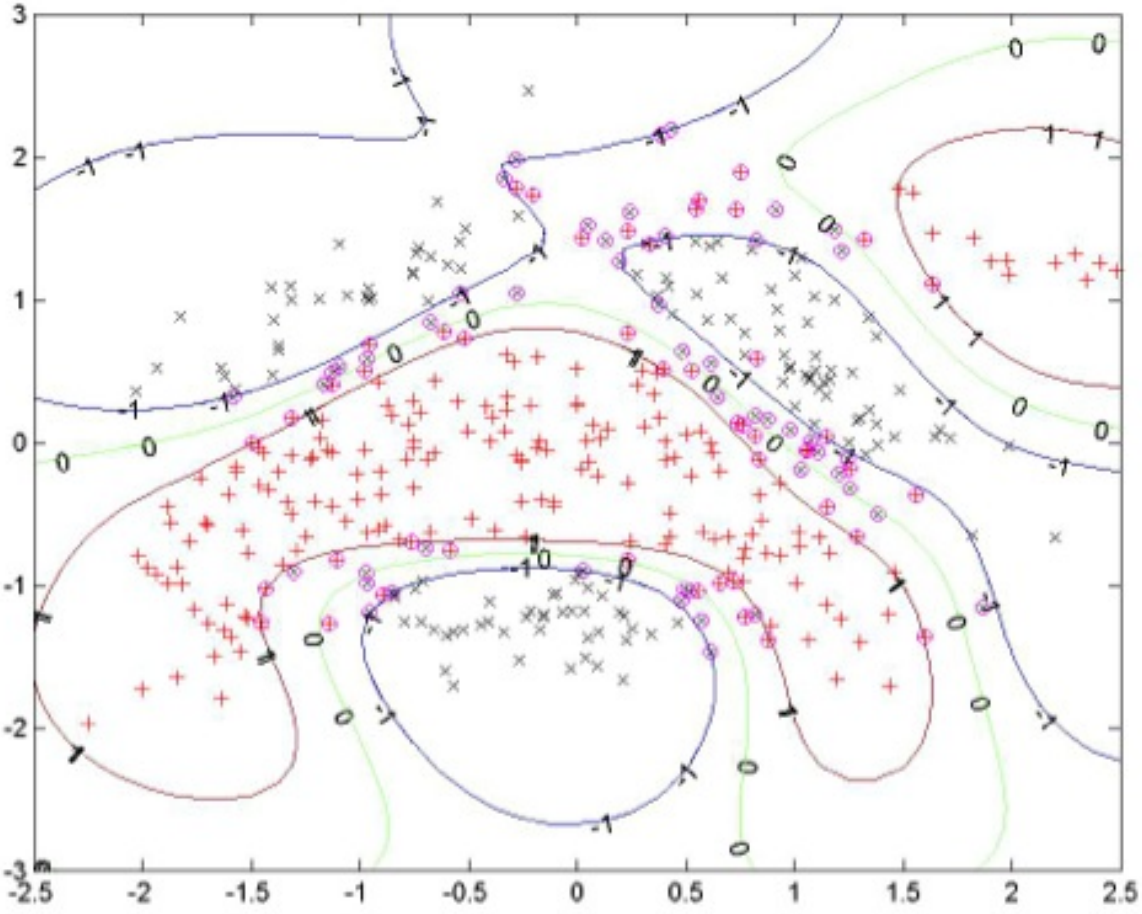
Autre usage des noyaux

On peut construire des noyaux pour des données structurées : graphes, séquences, arbres et appliquer les SVM !

- Classifier des molécules
- Classifier des documents structurés
- Traiter des séquences biologiques
- ...

Outline

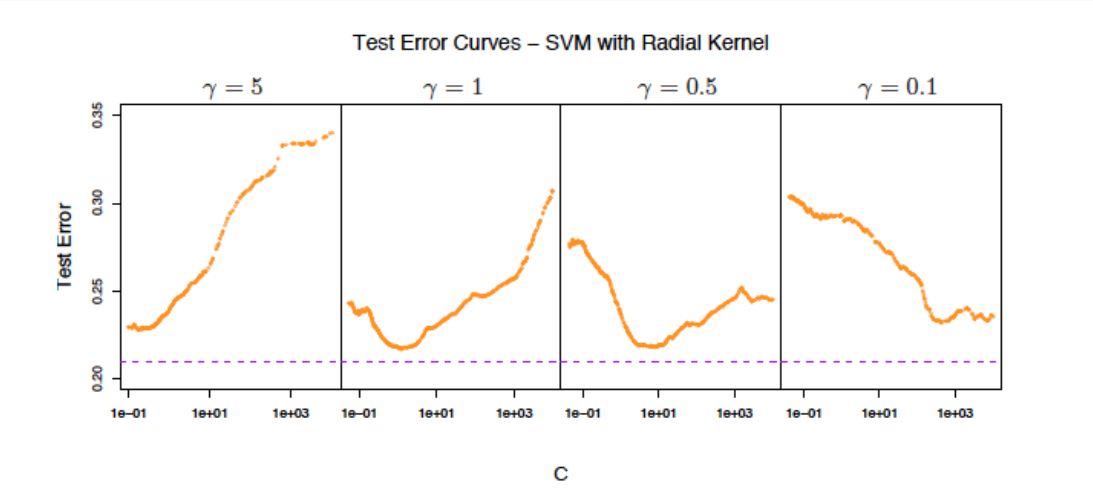
Support Vector Machine : séparateur non linéaire par noyau gaussien



$$f(\mathbf{x}) = \text{signe}(\sum_{i=1}^{n} \alpha_i y_i k(\mathbf{x}_i, \mathbf{x}) + b)$$

Cas du noyau gaussien : rôle de γ

En plus de l'hyperparamètre C, il faudra aussi régler la valeur du paramètre γ



Dans chacun des cas, on trouve un minimum différent pour C.
Utiliser la Validation Croisée pour sélectionner γ et C.

Comment définir un noyau pour une application spécifique ?

- Utiliser les propriétés de fermeture pour construire de nouveaux noyaux
- Important: les noyaux peuvent être utilisés pour comparer de différents types de données
  - **Données structurées**: (sets), graphs, trees, sequences, ...
- **Apprentissage de noyaux**:
  - Apprentissage d'hyperparamètre: voir Chapelle et al. 2002
  - Apprentissage de noyau multiple: étant donnés $k_1, \ldots, k_m$, apprendre une combinaison convexe $\sum_i \beta_i k_i$ de noyaux (voir SimpleMKL Rakotomamonjy et al. 2008, ou Kloft et al. 2010)

Outline

Régression

Cadre probabiliste et statistique

Soit X un vecteur aléatoire de $\mathcal{X} = \mathbb{R}^p$

Y une variable aléatoire continue $\mathcal{Y} = \mathbb{R}$

Soit P la loi de probabilité jointe de (X,Y), loi fixée mais inconnue

Supposons que $S_{app} = \{(x_i, y_i), i = 1, \ldots, n\}$ soit un échantillon i.i.d. tiré de la loi P

Régression

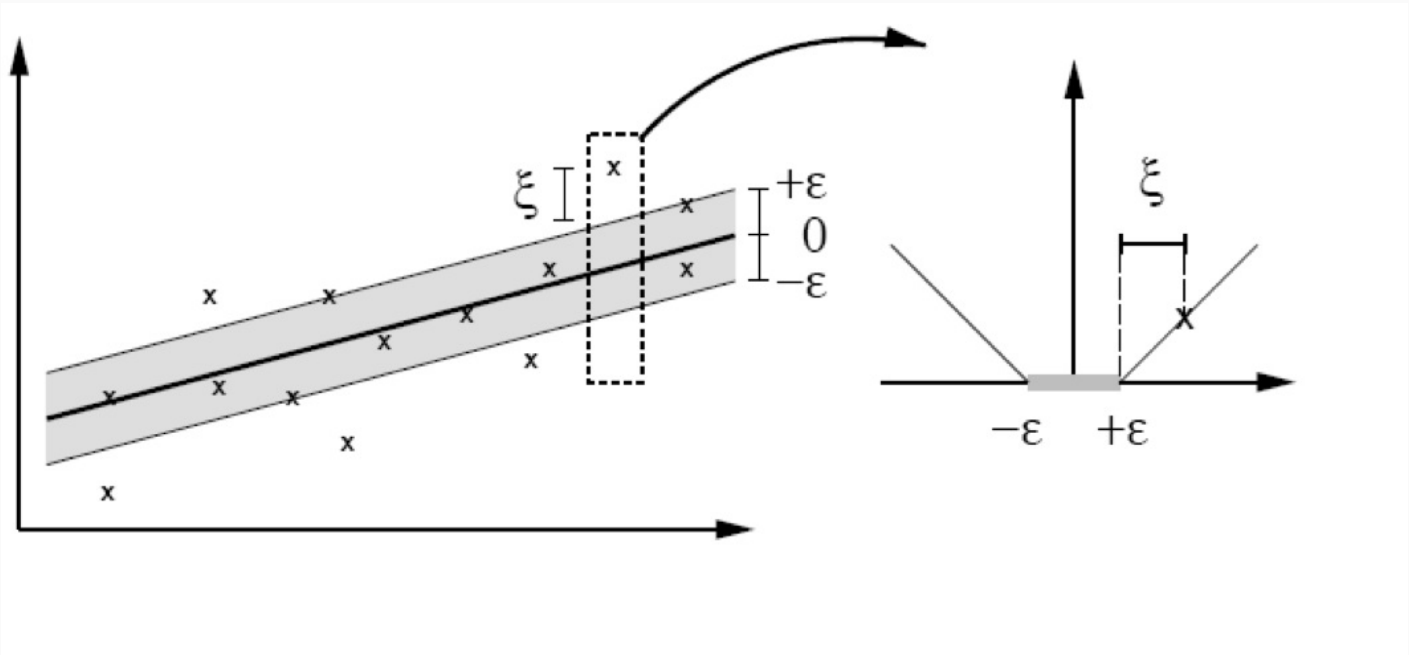
Cadre probabiliste et statistique

- A partir de S_{app}, déterminer la fonction $f \in \mathcal{F}$ qui minimise $R(f) = \mathbb{E}_P[\ell(X, Y, f(X)]$
- ℓ étant une fonction de coût local qui mesure à quel point la vraie cible et la prédiction par le classifieur sont différentes

Pb: la loi jointe n'est pas connue : on ne peut pas calculer $R(f)$

Support Vector Regression

- Extend the idea of maximal soft margin to regression
- Impose an ϵ-tube : perte ϵ-insensible $|y' - y|_\epsilon = max(0, |y' - y| - \epsilon)$



Support Vector Regression

SVR in the primal space
Given C and ϵ

$\min_{w,b,\xi} \frac{1}{2} \|\mathbf{w}\|^2 + C \sum_i (\xi_i + \xi_i^*)$

s.c.

$\forall i = 1, \dots n, y_i - f(x_i) \leq \epsilon + \xi_i$

$\forall i = 1, \dots n, f(x_i) - y_i \leq \epsilon + \xi_i^*$

$\forall i = 1, \xi_i \geq 0, \xi_i^* \geq 0$

with $f(x) = w^T \phi(x) + b$

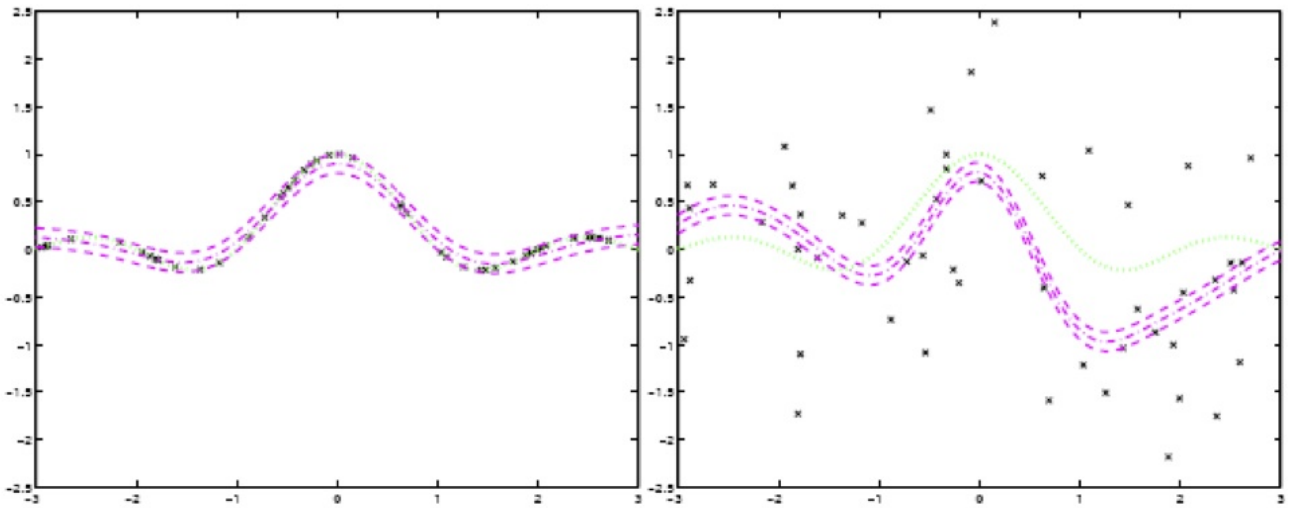
General case : ϕ is a feature map associated with a positive definite kernel k.

Solution in the dual

$\min_{\alpha,\alpha^*} \sum_{i,j}(\alpha_i - \alpha_i^*)(\alpha_j - \alpha_j^*)k(x_i, x_j) + \epsilon \sum_i(\alpha_i + \alpha_i^*) - \sum_i y_i(\alpha_i - \alpha_i^*)$
s.c. $\sum_i(\alpha_i - \alpha_i^*) = 0$ and $0 \leq \alpha_i \leq C$ and $0 \leq \alpha_i^* \leq C$
$w = \sum_{i=1}^n(\alpha_i - \alpha_i^*)\phi(x_i)$
Solution

$$f(x) = \sum_{i=1}^{n}(\alpha_i - \alpha_i^*)k(x_i, x) + b$$

Support Vector Regression: example in 1D



Identical machine parameters ($\varepsilon = 0.2$), but different amounts of noise in the data.

B. Schölkopf, Canberra, February 2002

Outline

Conclusion 1

Classification supervisée par Support Vector Machine:

Avantages

- 1 unique minimum, programmation quadratique sous contraintes linéaires: c'est vraiment le premier l'intérêt !
- Avec noyau universel comme le noyau Gaussien : c'est un approximateur universel
- Flexible : adapter le noyau au type de données, souvent l'unique solution dans le cas de données structurées
- Multi-classe: M classifieurs une classe contre toutes les autres, on prend le meilleur score (marge).
- Statistique : algorithme inspiré des résultats théoriques de Vapnik et Chervonenkis

Conclusion 2

Classification supervisée par Support Vector Machine:

Désavantages

- Choix du noyau, pas d'apprentissage du noyau en tant que tel, seulement sélection de poids d'un noyau multiple
- Algorithme d'optimisation coûteux en temps et en mémoire
- Pour vraiment passer à l'échelle (au de la de 5000 données): passer par des approximations Nystrom (approximation de rang faible de la matrice de Gram) ou Random Fourier Features (approximation spectrale du noyau)

Conclusion

Astuce du noyau en général

- s'applique à d'autres algorithmes
- PCA $\rightarrow$ Kernel PCA (vous verrez cela avec Slim Essid, dans le Module Apprentissage non supervis/'e)
- CCA $\rightarrow$ Kernel CCA

S'applique en sortie !

- traiter des fonctions à sorties complexes et non à valeurs réelles
- requiert d'utiliser en entrée des noyaux à valeurs opérateurs (ex:matrices)

References

Historiques:

- BOSER, Bernhard E., Isabelle M. GUYON, and Vladimir N. VAPNIK, 1992. A training algorithm for optimal margin classifiers. In: COLT â92: Proceedings of the Fifth Annual Workshop on Computational Learning Theory. New York, NY, USA: ACM Press.
- CORTES, Corinna, and Vladimir VAPNIK, 1995. Support-vector networks. Machine Learning, 20(3).

Revue:

- Article vraiment sympa, complet (un peu de maths) : A tutorial review of RKHS methods in Machine Learning, Hofman , Schoelkopf, Smola, 2005 (`https://www.researchgate.net/publication/228827159_A_Tutorial_Review_of_RKHS_Methods_in_Machine_Learning`)