Institut
Mines-Telecom

Support Vector Machine

Florence d'Alché-Buc,
florence.dalche@telecom-paristech.fr

Outline

Outline

Construire un détecteur de spam

Apprendre à classer des messages

Echantillon d'apprentissage

fonction de classification
(un programme)

$$f: \mathcal{X} \to \{-1, 1\}$$

Classification binaire supervisée

Cadre probabiliste et statistique

Soit X un vecteur aléatoire de $\mathcal{X} = \mathbb{R}^p$
Y une variable aléatoire discrète $\mathcal{Y} = -1, 1$
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

Classification binaire supervisée

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 classe et la classe prédite par le classifieur sont différentes

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

Apprentissage statistique - en pratique

Exemple de l'approche par régularisation

- A la place de $R(f)$, on minimise la somme de deux termes :
  - le risque empirique $R_n(f) = \frac{1}{n}\sum_i \ell(x_i, y_i, f(x_i))$
  - un terme régularisateur $\Omega(f)$ qui mesure la "complexité" de f.
- On cherche : $\hat{f} \in \arg\min_{f\in\mathcal{F}} R_n(f) + \lambda\Omega(f)$

Apprentissage statistique - en pratique

Exemple de l'approche par régularisation

- A la place de $R(f)$, on minimise la somme de deux termes :
  - le risque empirique $R_n(f) = \frac{1}{n}\sum_i \ell(x_i, y_i, f(x_i))$
  - un terme régularisateur $\Omega(f)$ qui mesure la "complexité" de f.
- On cherche : $\hat{f} \in \arg\min_{f\in\mathcal{F}} R_n(f) + \lambda\Omega(f)$

NB : on cherche à obtenir un compromis entre une bonne adéquation aux données et une complexité limitée : $\Omega(f)$ est en général choisi pour renforcer la régularité de la fonction

Un problème de classification binaire supervisée de documents

Méthodologie

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

Un problème de classification binaire supervisée de documents

Méthodologie

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

Un problème de classification binaire supervisée de documents

Méthodologie

- Définir
  - l'**espace de représentation** des messages
  - la **classe des fonctions** de classification binaire considérées
  - la **fonction de perte** à minimiser

Un problème de classification binaire supervisée de documents

Méthodologie

- Définir
  - l'**espace de représentation** des messages
  - la **classe des fonctions** de classification binaire considérées
  - la **fonction de perte** à minimiser
  - l'**algorithme de minimisation** de cette fonction de coût

Un problème de classification binaire supervisée de documents

Méthodologie

- Définir
  - l'**espace de représentation** des messages
  - la **classe des fonctions** de classification binaire considérées
  - la **fonction de perte** à minimiser
  - l'**algorithme de minimisation** de cette fonction de coût
  - une **méthode de sélection de modèle** et une mÃ©thode d'estimation des performances du classifieur

Fonctions de classification

Ce que vous connaissez déjà

- Perceptron
- Régression logistique linéaire
- k-plus-proches voisins
- Arbre de décision ...

Ce cours : une nouvelle classe de fonctions

- les **machines à vecteurs de support** aussi appelées séparateurs à vaste marge
- Variantes : linéaire, non linéaire
- Extenstion à la régression

Outline

Outline

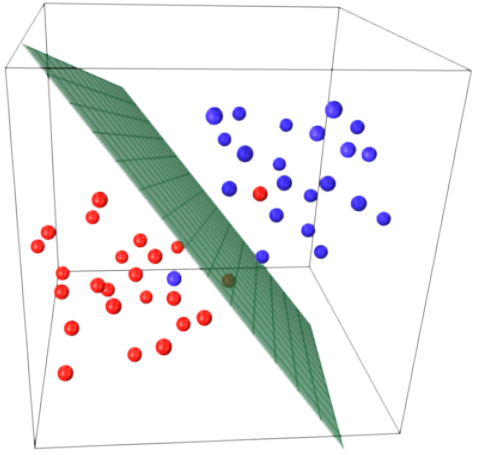
Séparateur linéaire

Définition

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

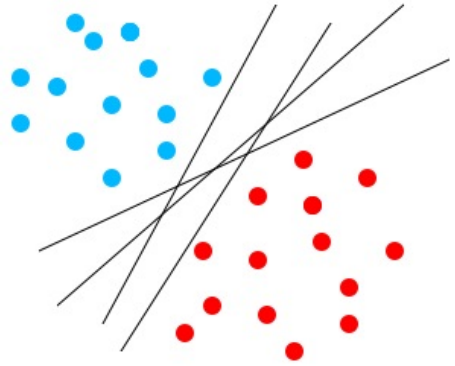
$f(\mathbf{x}) = \text{signe}(\mathbf{w}^T\mathbf{x} + b)$

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



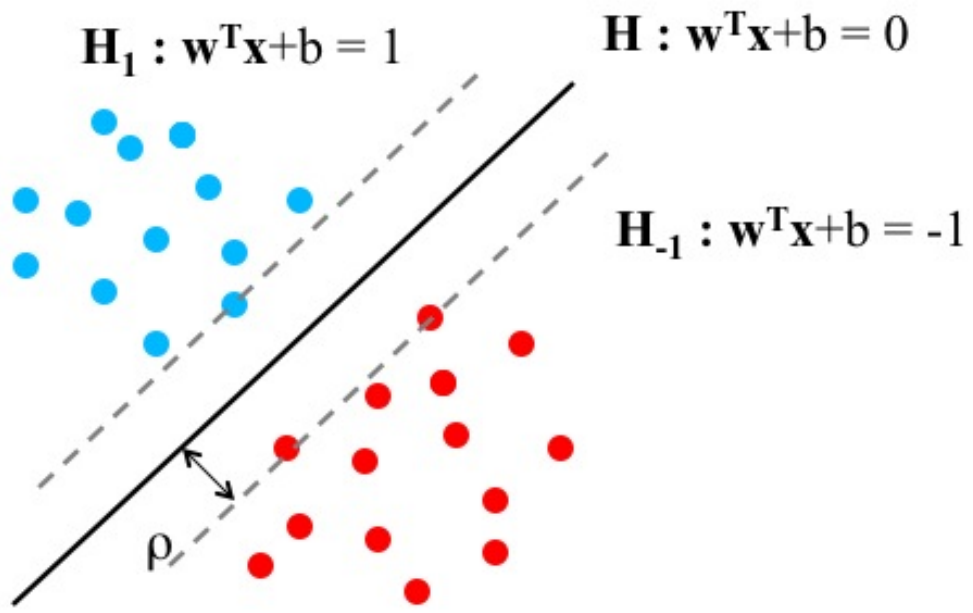
Exemple : données d'apprentissage en 3D et séparateur linéaire

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 inégalités

Problème du type (attention les notations changent !)

- un problème d'optimisation $(\mathcal{P})$ est défini par

$$\begin{array}{rl} \text{minimiser sur } \mathbb{R}^n & J(\mathbf{x}) \\ \text{avec} & h_i(\mathbf{x}) = 0\,, 1 \leq i \leq p \\ & g_j(\mathbf{x}) \leq 0\,, 1 \leq j \leq q \end{array}$$

- rappel de vocabulaire :
  - les h_i sont les **contraintes d'égalité** (notées $\mathbf{h}(\mathbf{x}) = 0$)
  - les g_j sont les **contraintes d'inégalité** (notées $\mathbf{g}(\mathbf{x}) \leq 0$)
  - l'**ensemble des contraintes** est

$$\mathcal{C} = \{\mathbf{x} \in \mathbb{R}^n | h_i(\mathbf{x}) = 0\,, 1 \leq i \leq p \text{ et } g_j(\mathbf{x}) \leq 0\,, 1 \leq j \leq q\}$$

ensemble des points admissibles ou **réalisables**

Programmation quadratique sous contraintes inégalités

Lagrangien

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

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

Conditions de Karush-Kunh-Tucker

En l'extremum, on a

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

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

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

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

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

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 $\alpha_i \geq 0$ et $\sum_i \alpha_i y_i = 0, \forall i = 1, \ldots, n$
- Faire appel à un solveur quadratique

SVM linéaires ou Optimal Margin Hyperplan

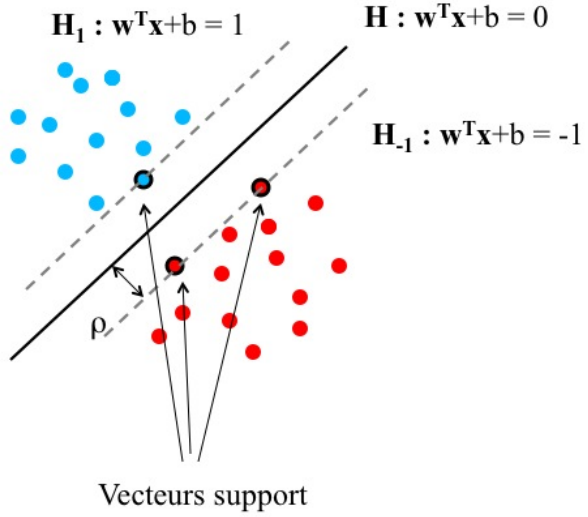
Supposons que les multiplicateurs de Lagrange α_i soient déterminés :

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 ($\alpha_i \neq 0$)

Cas réaliste : SVM linéaire dans le cas données non séparables

Introduire une variable d'écart ξ_i pour chaque donnée :

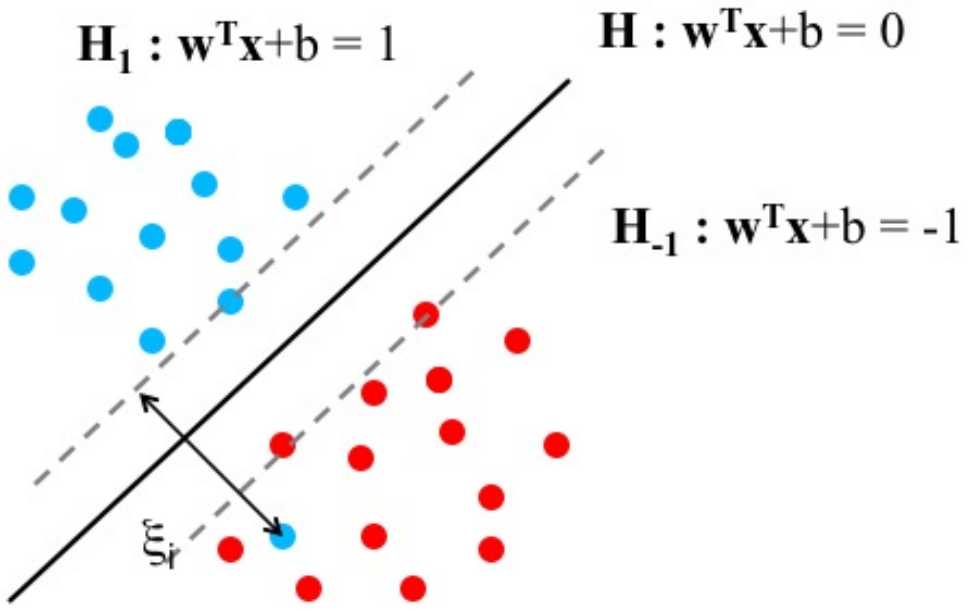
Problème dans le primal

$$\min_{\mathbf{w},b,\xi} \quad \frac{1}{2}\|\mathbf{w}\|^2 + C\sum_{i=1}^{n}\xi_i$$

$$\text{sous les contraintes} \quad y_i(\mathbf{w}^T\mathbf{x}_i + \mathrm{b}) \geq 1 - \xi_i \; i = 1, \ldots, n.$$

$$\xi_i \geq 0 \; i = 1, \ldots, n.$$

Cas réaliste : SVM linéaire dans le cas données non séparables



Cas réaliste : SVM linéaire dans le cas données non séparables

Problème dans le dual

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

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

$$\sum_i \alpha_i y_i \; i = 1, \ldots, n.$$

Conditions KKT

Soit α^* la solution du problème dual :

$$\forall i, [y_i f_{w^*,b^*}(x_i) - 1 + \xi_i^*] \leq 0$$
$$\forall i, \alpha_i^* \geq 0$$
$$\forall i, \alpha_i^* [y_i f_{w^*,b^*}(x_i) - 1 + \xi_i^*] = 0$$
$$\forall i, \mu_i^* \geq 0$$
$$\forall i, \mu_i^* \xi_i^* = 0$$
$$\forall i, \alpha_i^* + \mu_i^* = C$$
$$\forall i, \xi_i^* \geq 0$$
$$\mathbf{w}^* = \sum_i \alpha_i^* y_i \mathbf{x}_i$$
$$\sum_i \alpha_i^* y_i = 0$$

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
- si $0 < \alpha_i^* < C$ alors $\mu_i^* > 0$ et donc, $\xi_i^* = 0$: x_i est tel que : $y_i f(x_i) = 1$
- si $\alpha_i^* = C$, alors $\mu_i^* = 0$, on ne peut rien déduire sur ξ_i

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_1 ou H_{-1}
- 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

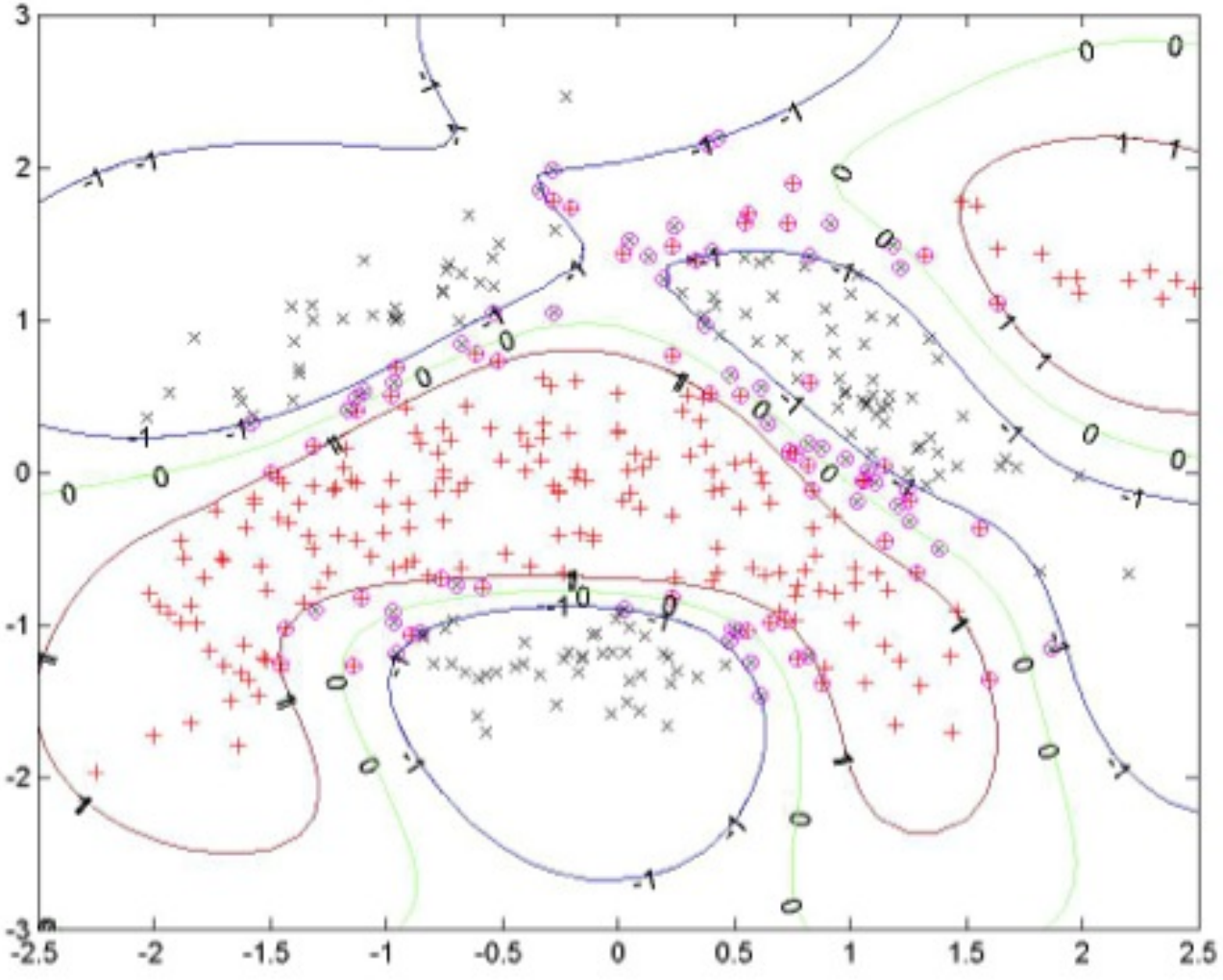
Optimisation dans l'espace primal

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

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

Outline

Support Vector Machine : le cas non linéaire



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

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

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

$$\sum_i \alpha_i y_i \; i = 1, \ldots, n.$$

Motivation
SVM linéaires
Passage au cas non linéaire et noyaux
Support Vector Regression

=

Remarque 1 : apprentissage

Si je transforme les données à l'aide d'une fonction ϕ (non linéaire) et si je sais calculer les produits scalaires $\phi(\mathbf{x}_i)^T\phi(\mathbf{x}_j)$, je peux apprendre une fonction de séparation non linéaire.

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

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

$$\sum_i \alpha_i y_i \; i = 1, \ldots, n.$$

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

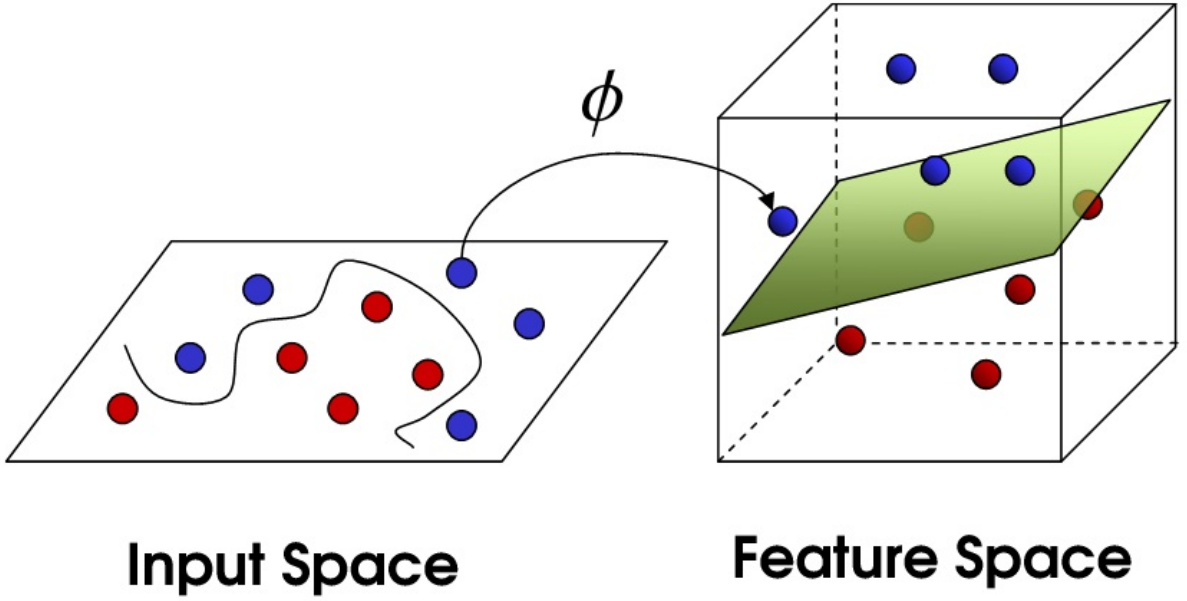
Astuce du noyau

Si 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 caractérisques $\mathcal{F}$ et une fonction de caractéristique (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 :

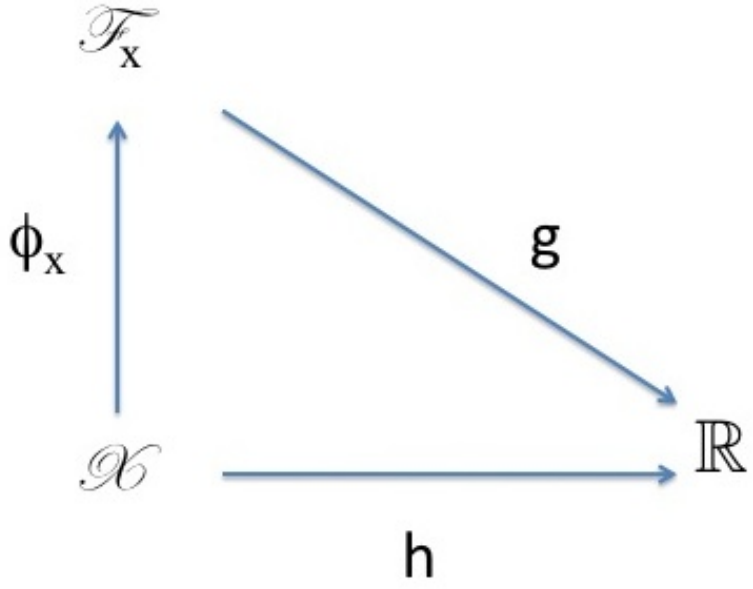
$f(\mathbf{x}) = \text{signe}(\sum_{i=1}^{n} \alpha_i y_i k(\mathbf{x}_i, \mathbf{x}) + b)$

Des telles fonctions existent et sont appelées *noyaux*.

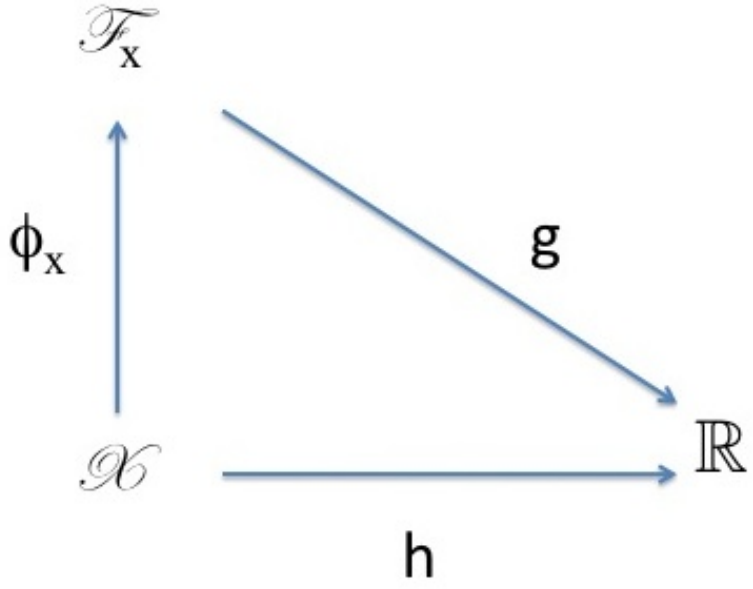
Kernel trick and feature map 1/2



Kernel trick and feature map 2/2



Kernel trick and feature map 2/2



$h(\mathbf{x}) = \sum_{i=1}^{n} \alpha_i \phi(x)^T \phi(x_i) = \sum_{i=1}^{n} \alpha_i k(x, x_i)$,
avec $k : \mathcal{X} \times \mathcal{X} \rightarrow \mathbb{R}$ un noyau positif défini.

Noyaux

Définition

Soit $\mathcal{X}$ un ensemble. Soit k :$\mathcal{X} \times \mathcal{X} \rightarrow \mathbb{R}$, 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 $\mathbb{R}^m$,
$\mathbf{c}^T K \mathbf{c} = \sum_{i,j=1}^{m} c_i c_j k(x_i, x_j) \geq 0$

Théorème de Moore-Aronzajn

Théorème de Moore-Aronzajn

Soit K un noyau positif défini. Alors, il existe un unique espace de Hilbert $\mathcal{F}$ pour lequel k est un noyau reproduisant :
$\forall x \in \mathcal{X}, \langle f(\cdot), k(\cdot, x)\rangle_{\mathcal{F}} = f(x)$
And especially we have : $\langle k(\cdot, x), k(\cdot, x')\rangle_{\mathcal{F}} = k(x, x')$

Théorème de Moore-Aronzajn

Théorème de Moore-Aronzajn

Soit K un noyau positif défini. Alors, il existe un unique espace de Hilbert $\mathcal{F}$ pour lequel k est un noyau reproduisant :
$\forall x \in \mathcal{X}, \langle f(\cdot), k(\cdot, x)\rangle_{\mathcal{F}} = f(x)$
And especially we have : $\langle k(\cdot, x), k(\cdot, x')\rangle_{\mathcal{F}} = k(x, x')$

NB :*Cela veut dire qu'on peut toujours choisir* $\phi(x) = k(\cdot, x)$
Important : un noyau peut admettre plusieurs fonctions de caractérisques et espaces correspondants mais un seul est RKHS (espace de Hilbert à noyau reproduisant).

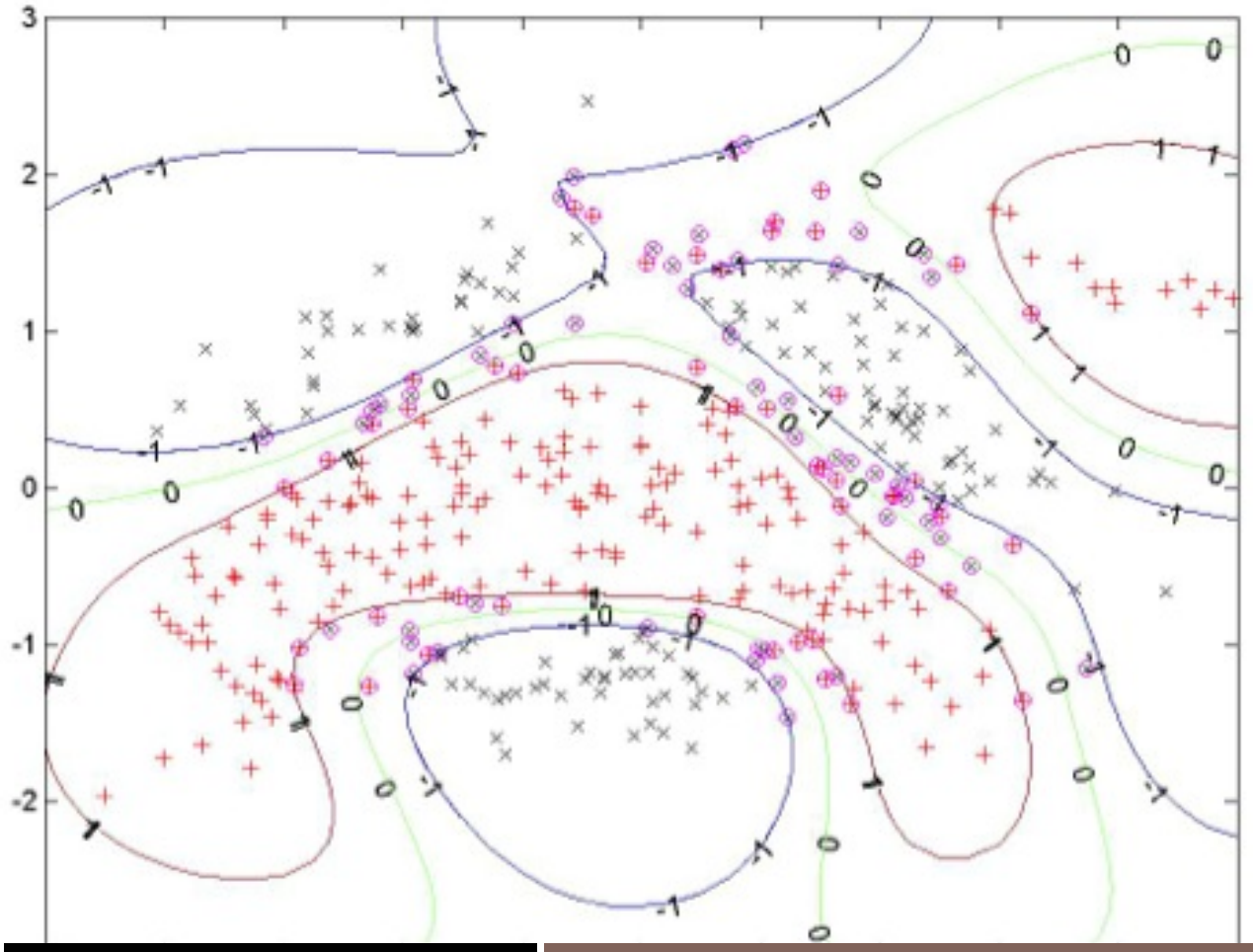
Noyaux

Noyaux entre vecteurs

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

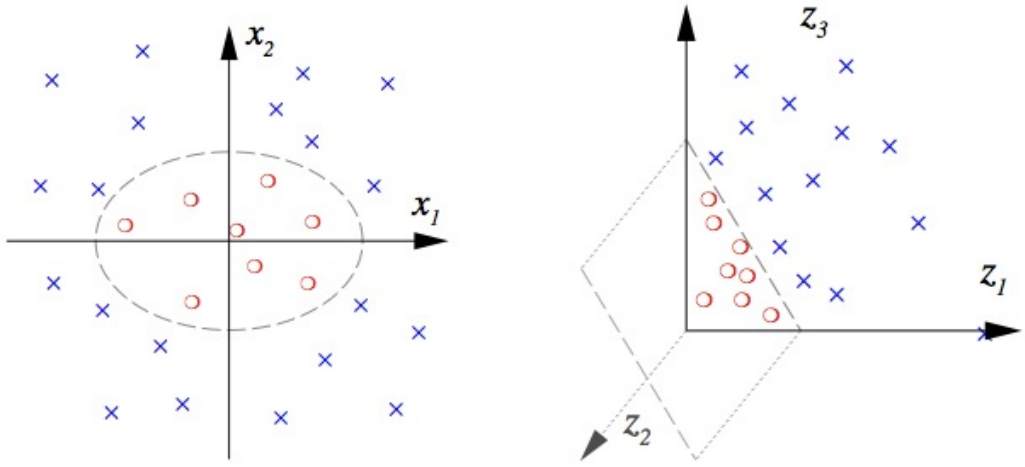
- Noyau linéaire : $k(\mathbf{x}, \mathbf{x}') = \mathbf{x}^T\mathbf{x}'$
- Noyau polynomial : $k(\mathbf{x}, \mathbf{x}') = (\mathbf{x}^T\mathbf{x}' + c)^d$
- Noyau gaussien : $k(\mathbf{x}, \mathbf{x}') = \exp(-\gamma||\mathbf{x} - \mathbf{x}'||^2)$

Support Vector Machine : séparateur non linéaire par noyau gaussien



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

Kernel design

- Use closure properties to build new kernels from existing ones
- Kernels can be defined for various objects :
  - **Structured objects** : (sets), graphs, trees, sequences, ...
  - Unstructured data with underlying structure : texts, images, documents, signal, biological objects
- **Kernel learning** :
  - Hyperparameter learning : see Chapelle et al. 2002
  - Multiple Kernel Learning : given $k_1, \ldots, k_m$, learn a convex combination $\sum_i \beta_i k_i$ of kernels (see SimpleMKL Rakotomamonjy et al. 2008, unifying view in Kloft et al. 2010)

Quel noyau pour notre notre détecteur de spams ?

On peut prendre soit :

- le noyau linéaire
- le noyau gaussien ou une de ses variantes
  - Connaissance *a priori* d'une matrice de similarité sémantique A entre mots
  - Appliquer A au vecteur $\mathbf{x}$ revient à faire apparaître des mots proches sémantiquement
  - $k(\mathbf{x}, \mathbf{x}') = \exp(-\gamma||A(\mathbf{x} - \mathbf{x}')||^2)$
  - équivalent à : $k(\mathbf{x}, \mathbf{x}') = \exp[-\gamma(A(\mathbf{x} - \mathbf{x}'))^T(A(\mathbf{x} - \mathbf{x}'))]$
  - soit : $k(\mathbf{x}, \mathbf{x}') = \exp[-\gamma(\mathbf{x} - \mathbf{x}')^T A^T A(\mathbf{x} - \mathbf{x}')]$

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

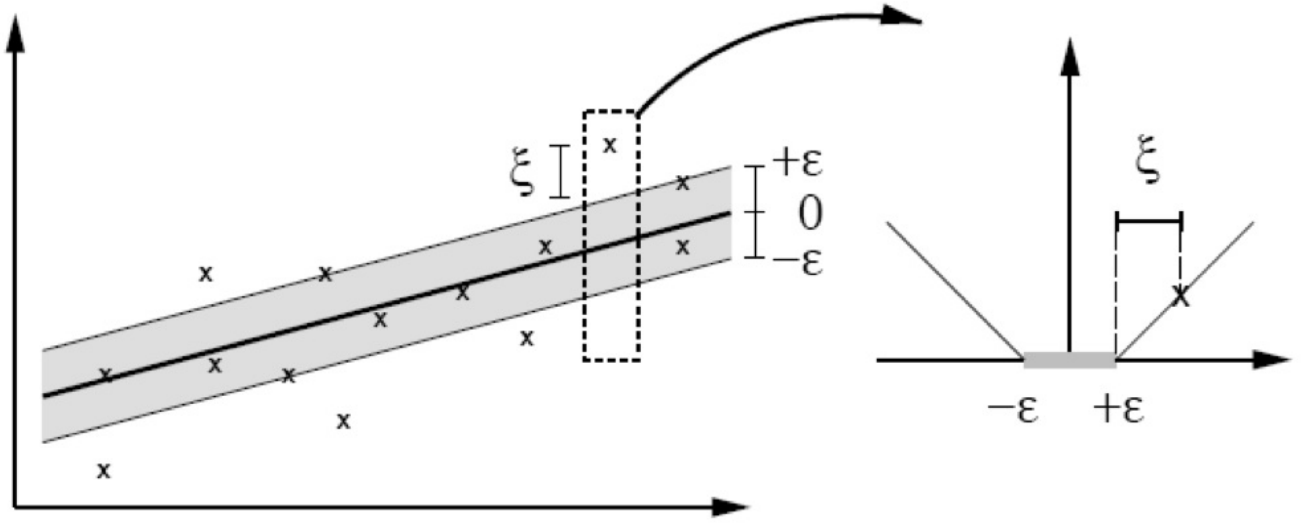
Cadre probabiliste et statistique

- 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 -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.

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

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

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

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

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

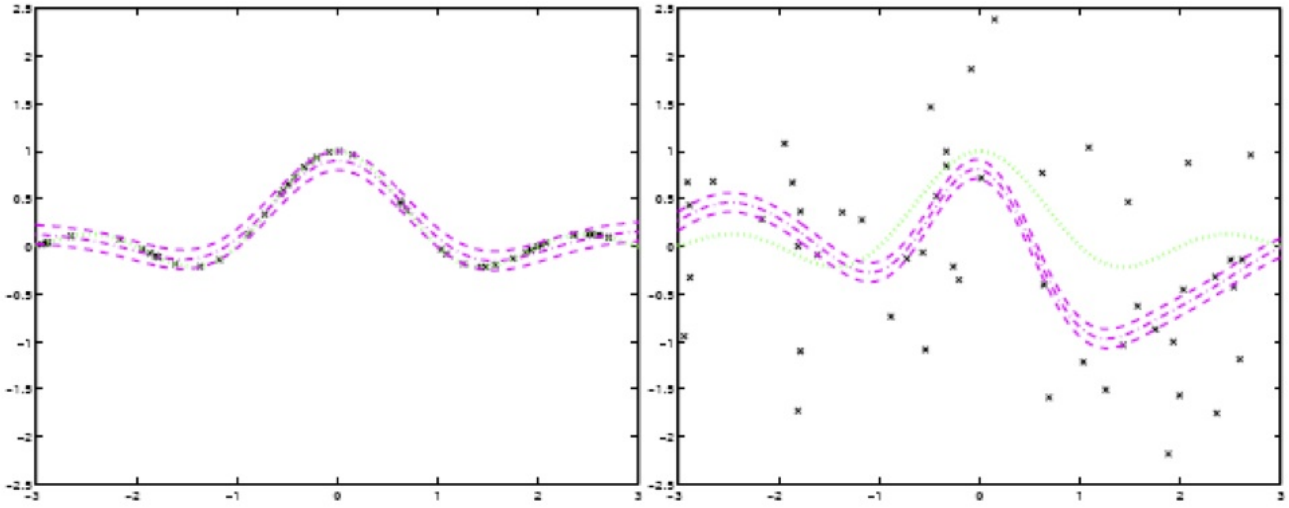
Solution in the dual

$\min_{\alpha,\alpha^*} \sum_{i,j}(\alpha_i - \alpha_i^*)(\alpha_j - \alpha_j^*)k(x_i, x_j) + \epsilon \sum_i(\alpha_i + \alpha_i^*) - \sum_i y_i(\alpha_i - \alpha_i^*)$
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