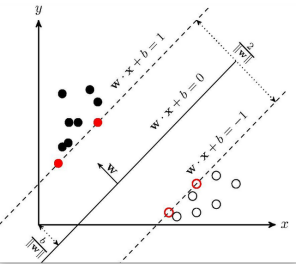
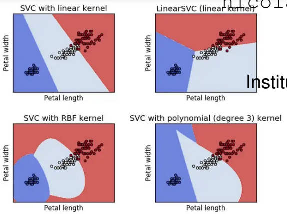
Noyaux, SVM





Cours 3
ML Master MIND

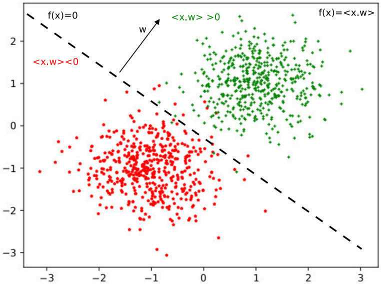
Nicolas Baskiotis
nicolas.baskiotis@sorbonne-universite.fr

équipe MLIA,
Institut des Systèmes Intelligents et de Robotique (ISIR)
Sorbonne Université

S2 (2025-2026)

Plan

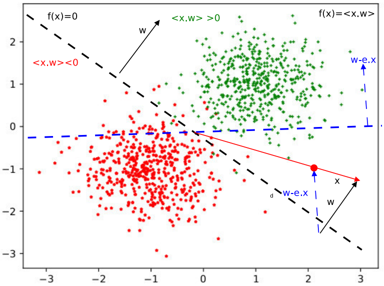
Rappel de l'algorithme



Principe :

- Séparateur linéaire : $f(\mathbf{x}) = \langle \mathbf{x}, \mathbf{w} \rangle + b$
- Algorithme d'apprentissage :
  Répéter :
  - Tirer $(\mathbf{x}, y)$ au hasard
  - Si $yf(\mathbf{x}) > 0$ ne rien faire (point bien classé)
  - Sinon $\mathbf{w} = \mathbf{w} + y\mathbf{x}$

Rappel de l’algorithme

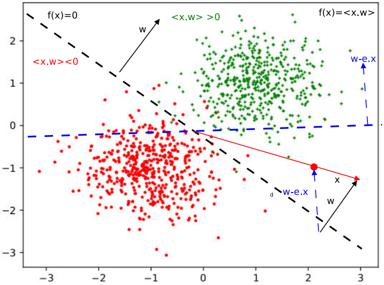


Considérations géométriques

Que représente :

- $\mathbf{w}$ par rapport à la séparatrice ?
- $\langle \mathbf{w}, \mathbf{x} \rangle$?
- la règle de mise à jour : si $(y\langle w.\mathbf{x}\rangle) < 0$ corriger $\mathbf{w} = \mathbf{w} + y\mathbf{x}$?

Rappel de l'algorithme



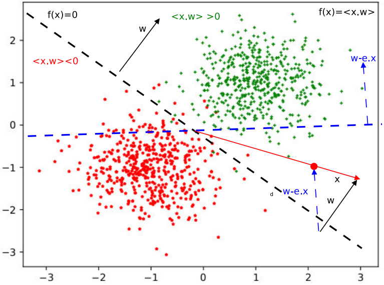
Considérations géométriques

Que représente :

- $\mathbf{w}$ par rapport à la séparatrice ? $\Rightarrow$ la normale à l'hyper plan
- $\langle \mathbf{w}, \mathbf{x}\rangle = cos(\mathbf{w}, \mathbf{x})\|\mathbf{x}\|\|\mathbf{w}\|$, angle entre les deux vecteurs.
- la règle de mise à jour : si $(y\langle w.\mathbf{x}\rangle) < 0$ corriger $\mathbf{w} = \mathbf{w} + y\mathbf{x}$?

$\Rightarrow$ $\langle \mathbf{w} + y\mathbf{x}, \mathbf{x}\rangle = \langle \mathbf{w}, \mathbf{x}\rangle + y\|\mathbf{x}\|^2$, permet donc d'augmenter ou de diminuer l'angle

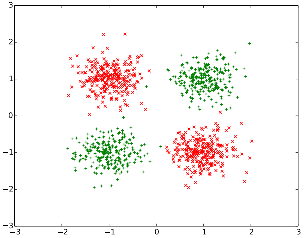
Rappel de l’algorithme



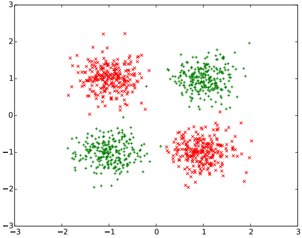
Questions

- Solution unique ?
- Certaines solutions meilleures que d’autres ?

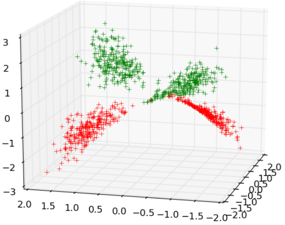
Données non séparables linéairement



Données non séparables linéairement



x_1, x_2



x_1, x_2 et $x_3 = x_1 * x_2$

Solutions

- Utiliser des fonctions non-linéaires (réseau de neurones)
- Augmenter les dimensions : projection des données dans un espace de dimension supérieure

Projection des données

Exprimer les données dans un espace de plus grande dimension

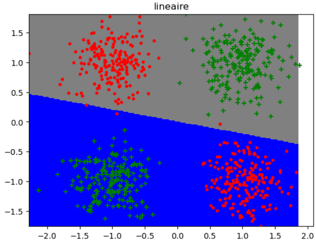
- On considère une fonction $\phi(\mathbf{x}) : \mathbb{R}^d \rightarrow \mathbb{R}^{d'}$, généralement $d' >> d$.
- Nouvel ensemble d'apprentissage : $\{(\mathbf{z}^k, y^k)\}_{k=1}^N$ avec $\mathbf{z}^i = \phi(\mathbf{x}^i)$
- Modèle lineaire : $\sum_{i=1}^{d'} w_i z_i = \sum_{i=1}^{d'} w_i \phi(x_i)$
- Même algo d'optimisation : descente de gradient avec le coût perceptron

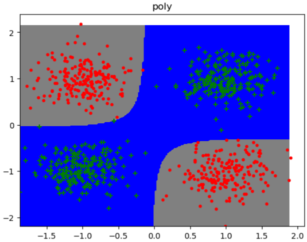
Exemple : Projection polynomiale

On considère $\mathbf{x} \in \mathbb{R}^3$, pour une projection de degré 2 :

- $\phi(\mathbf{x}) = (x_1, x_2, x_3, x_1x_2, x_1x_3, x_2x_3, x_1^2, x_2^2, x_3^2) \in \mathbb{R}^9$
- Nouvelle forme de la frontière de décision :
  $w_1x_1 + w_2x_2 + w_3x_3 + w_4x_1x_2 + w_5x_1x_3 + w_6x_2x_3 + w_7x_1^2 + w_8x_2^2 + w_9x_3^2 = 0$

Projection des données



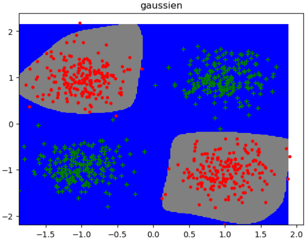


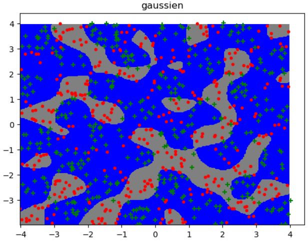
Exemple : Projection polynomiale

On considère $\mathbf{x} \in \mathbb{R}^3$, pour une projection de degré 2 :

- $\phi(\mathbf{x}) = (x_1, x_2, x_3, x_1x_2, x_1x_3, x_2x_3, x_1^2, x_2^2, x_3^2) \in \mathbb{R}^9$
- Nouvelle forme de la frontière de décision :
  $w_1x_1 + w_2x_2 + w_3x_3 + w_4x_1x_2 + w_5x_1x_3 + w_6x_2x_3 + w_7x_1^2 + w_8x_2^2 + w_9x_3^2 = 0$

Projection des données





Exemple : Projection Gaussienne sur une base

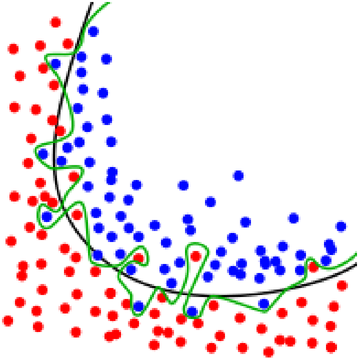
On considère une base $\{\mathbf{x}'^j\}_{j=1}^M$ de point dans $\mathbb{R}^d$, la projection d'un exemple $\mathbf{x}$ est constitué des M distances gaussiennes aux points $\mathbf{x}'^j$ de la base :

- $\phi(\mathbf{x}) = (e^{\|\mathbf{x}-\mathbf{x}'^1\|^2/2\sigma}, e^{\|\mathbf{x}-\mathbf{x}'^2\|^2/2\sigma}, \ldots, e^{\|\mathbf{x}-\mathbf{x}'^M\|^2/2\sigma})$
- Nouvelle forme de la frontière de décision : $w_1 e^{\|\mathbf{x}-\mathbf{x}'^1\|^2/2\sigma} + w_2 e^{\|\mathbf{x}-\mathbf{x}'^2\|^2/2\sigma} + \ldots + w_M e^{\|\mathbf{x}-\mathbf{x}'^M\|^2/2\sigma} = 0$
- Seuls les points $\mathbf{x}'$ proche de $\mathbf{x}$ jouent un rôle (et donc seuls les poids associés).
- Très proche d'un k-NN avec prise en compte de la distance, **mais** les poids sont appris automatiquement !

Projection des données

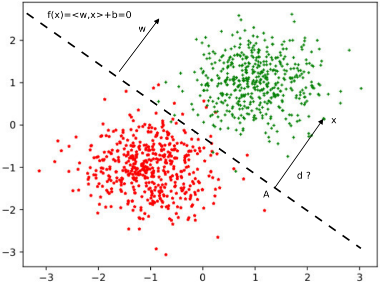
Oui mais ...

- Quelle projection ?
- Et le sur-apprentissage ?
- Et les “mauvaises” données (le bruit) ?



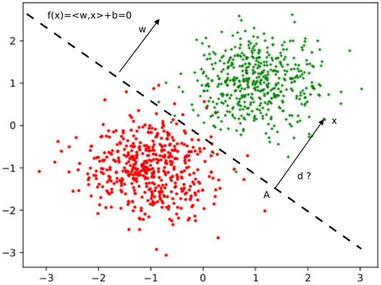
Plan

Considérations géométriques



Distance géométrique à la séparatrice

Considérations géométriques

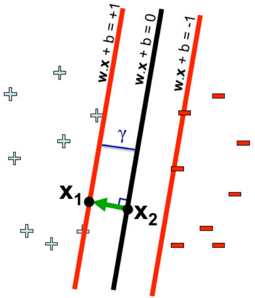


Distance géométrique à la séparatrice

- $d = |AX|$, or $X = A + d\frac{\mathbf{w}}{\|\mathbf{w}\|}$ (pour un exemple au dessus de la séparatrice)
- De plus, $f(A) =< \mathbf{w}, A > +b = 0$, donc $\langle \mathbf{w}, X - d\frac{\mathbf{w}}{\|\mathbf{w}\|}\rangle + b = 0$
- Soit $d = \frac{\langle \mathbf{w}, X\rangle + b}{\|\mathbf{w}\|} = \frac{f(\mathbf{x})}{\|\mathbf{w}\|}$.
- $f(\mathbf{x})$ est la distance *fonctionnelle* à la séparatrice

Remarque : $\mathbf{w}$ est défini à une constante multiplicative près...

Unicité de la solution



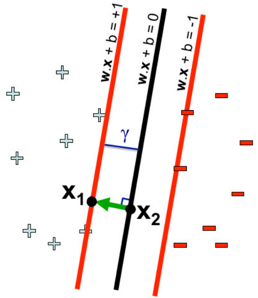
Si séparable

- Introduction d'une contrainte : la distance fonctionnelle aux points les plus proches est fixée à 1

$\Rightarrow f(\mathbf{x}) = \mathbf{w}\mathbf{x}_1 + b = \pm 1$

- Tous les points sont tq : $yf(\mathbf{x}) \geq 1$.
- On note γ la distance euclidienne : $\mathbf{x}_1 - \mathbf{x}_2 = \gamma \frac{\mathbf{w}}{||\mathbf{w}||}$
- γ : distance entre l'hyperplan (frontière) et le point $\mathbf{x}_1$ le plus proche
- γ est appelé la marge (symétrique ? pourquoi ?)

Se donner de la marge



Si séparable

- $f(\mathbf{x}) = \mathbf{w}\mathbf{x}_1 + b = 1$ et $\mathbf{x}_1 - \mathbf{x}_2 = \gamma \frac{\mathbf{w}}{\|\mathbf{w}\|}$
- On a $f(\mathbf{x}_1) - f(\mathbf{x}_2) = 1 = (\mathbf{w}\mathbf{x}_1 + b) - (\mathbf{w}\mathbf{x}_2 + b) = \mathbf{w}(\mathbf{x}_1 - \mathbf{x}_2)$
- Soit $\gamma \frac{\mathbf{w}\mathbf{w}}{\|\mathbf{w}\|} = 1$, donc $\gamma \|\mathbf{w}\| = 1$, soit $\gamma = \frac{1}{\|\mathbf{w}\|}$

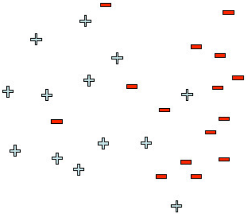
$\Rightarrow$ Maximiser la marge $\Leftrightarrow$ minimiser $\|\mathbf{w}\|$!

- Nouvelle formulation :
  minimiser $\|\mathbf{w}\|^2$ tel que

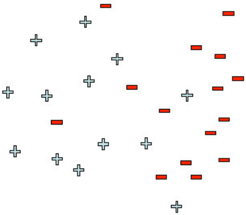
$$\forall i, (\mathbf{w}\mathbf{x}^i + b) y^i \geq 1$$

Problème d'optimisation quadratique convexe

Et si les données sont bruitées ?



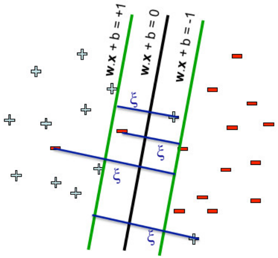
Et si les données sont bruitées ?



Prendre en compte les erreurs

- Minimiser $\|\mathbf{w}\| + K$#Erreurs
  tel que $(\mathbf{w}\mathbf{x}^i + b)y^i \geq 1$
- Problème NP difficile (et les problèmes inhérents au coût 0-1).

Et si les données sont bruitées ?



Approche Support Vector Machine

- Introduire des variables "ressorts" (slack) ξ^i : on tolère une "débordement" $(\mathbf{w}\mathbf{x}^i + b)y^i \geq 1 - \xi_i$, avec $\xi_i \geq 0$.
- Ce "débordement" doit être le plus petit possible

$\Rightarrow$ Minimiser $\|\mathbf{w}\|^2 + K\sum \xi_j$
tq $(\mathbf{w}\mathbf{x}^i + b)y^i \geq 1 - \xi_i$ et $\xi_i \geq 0$

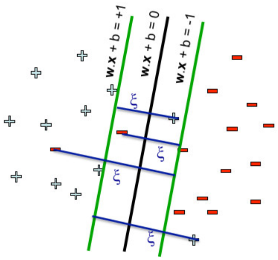
- Si la marge est plus grande que 1 $\rightarrow$ pas de coût de débordement, sinon coût linéaire :

$$\begin{cases} \xi_i = 0 & \text{si } (\mathbf{w}\mathbf{x}^i + b)y^i \geq 1 \\ \xi_i = 1 - (\mathbf{w}\mathbf{x}^i + b)y^i & \text{si } (\mathbf{w}\mathbf{x}^i + b)y^i < 1 \end{cases}$$

$\Rightarrow$ $\xi_i = max(0, 1 - (\mathbf{w}\mathbf{x}^i + b)y^i)$ (hinge-loss !)

- Pourquoi la constante K ? Comment la choisir ?

Et si les données sont bruitées ?



Approche Support Vector Machine

- Introduire des variables “ressorts” (slack) ξ^i : on tolère une ”débordement” $(\mathbf{wx}^i + b)y^i \geq 1 - \xi_i$, avec $\xi_i \geq 0$.
- Ce ”débordement” doit être le plus petit possible

$\Rightarrow$ Minimiser $\|\mathbf{w}\|^2 + K\sum \xi_j$
tq $(\mathbf{wx}^i + b)y^i \geq 1 - \xi_i$ et $\xi_i \geq 0$

- Si la marge est plus grande que 1 $\rightarrow$ pas de coût de débordement, sinon coût linéaire :

$$\begin{cases} \xi_i = 0 & \text{si } (\mathbf{wx}^i + b)y^i \geq 1 \\ \xi_i = 1 - (\mathbf{wx}^i + b)y^i & \text{si } (\mathbf{wx}^i + b)y^i < 1 \end{cases}$$

$\Rightarrow$ $\xi_i = max(0, 1 - (\mathbf{wx}^i + b)y^i)$ (hinge-loss !)

- Pourquoi la constante K ? Comment la choisir ?

Formulation

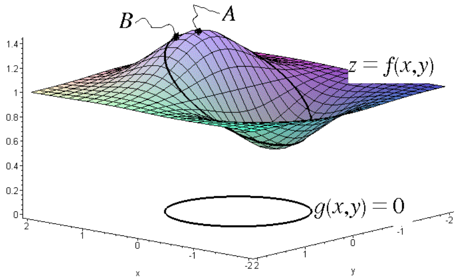
- Minimiser : $\|\mathbf{w}\|^2 + K\sum \ell(y^i, \mathbf{wx}^i + b)$, avec $\ell(y, \hat{y}) = max(0, 1 - y\hat{y})$
- $\|\mathbf{w}\|^2 \rightarrow$ terme de régularisation pour controler le sur-apprentissage.

Plan

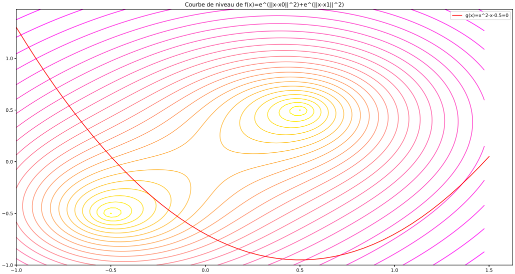
Optmisation avec contraintes

Permet de résoudre les problèmes de type :

minimiser$_{\mathbf{x}}$ $f(\mathbf{x})$ avec un ensemble de contraintes $c_i(\mathbf{x}) \leq 0$



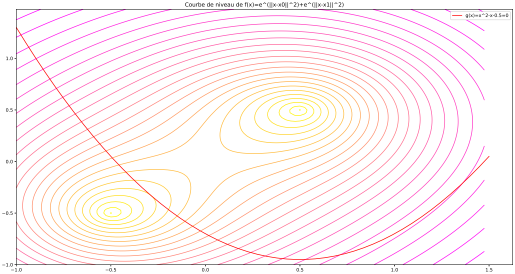
Optimisation avec contraintes d'égalité



Formulation et intuition

- Problème du type : $\min_{\mathbf{x}}\ f(\mathbf{x})$ tq $g(\mathbf{x}) = 0$

Optimisation avec contraintes d'égalité



Formulation et intuition

- Problème du type : $\min_{\mathbf{x}} f(\mathbf{x})$ tq $g(\mathbf{x}) = 0$
- Au point optimal $\mathbf{x}_0$, $\nabla f(\mathbf{x}_0) = \lambda \nabla g(\mathbf{x}_0)$, les gradients sont alignés
  - soit $\mathbf{x}_0$ est un minimum de $f \rightarrow \lambda = 0$
  - soit en *suivant* g, la valeur de f ne change pas $\rightarrow$ g tangente à l'isocourbe de f

Un outil magique : le lagrangien

Multiplicateurs de Lagrange

- Fonction auxiliaire : $\mathcal{L}(\mathbf{x}, \lambda) = f(\mathbf{x}) - \lambda g(\mathbf{x})$ dont on cherche l'optimum (λ : multiplicateur de Lagrange)
- On cherche $\nabla \mathcal{L}_{\mathbf{x},\lambda}(\mathbf{x}, \lambda) = 0$, soit
  - $\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \lambda} = 0 = g(\mathbf{x})$ (contrainte d'égalité)
  - $\nabla_{\mathbf{x}} \mathcal{L}(\mathbf{x}, \lambda) = 0, \quad \nabla_{\mathbf{x}} f(\mathbf{x}) = \lambda \nabla_{\mathbf{x}} g(\mathbf{x})$

Remarques

- Condition nécessaire mais pas suffisante ! (le signe du déterminant du Hessien donne la condition suffisante)
- Généralisable à un nombre quelconques de contraintes : introduire autant de multiplicateurs que de contraintes
- Avantage : problème avec contraintes $\Rightarrow$ problème sans contraintes ! (mais au prix de nouvelles variables)

Optimisation avec contraintes d'inégalité

Formulation

$\min_{\mathbf{x}} \; f(\mathbf{x})$ tel que $c_1(\mathbf{x}) \leq 0, \ldots c_n(\mathbf{x}) \leq 0$ et $g_1(\mathbf{x}) = 0, \ldots, g_m(\mathbf{x}) = 0$

Multiplicateurs de Lagrange - formulation duale

- Pour chaque contrainte d'inégalité c_i, on introduit une variable $\lambda_i \geq 0$
- Pour chaque contrainte d'égalité g_j, on introduit une variable $\mu_j \in \mathbb{R}$
- Lagrangien : $\mathcal{L}(\mathbf{x}, \boldsymbol{\lambda}, \boldsymbol{\mu}) = f(\mathbf{x}) + \sum_i \lambda_i c_i(\mathbf{x}) + \sum_j \mu_j g_j(\mathbf{x})$
- Fonction duale :
$$\mathcal{G}(\boldsymbol{\lambda}, \boldsymbol{\mu}) = inf_{\mathbf{x}} \mathcal{L}(\mathbf{x}, \boldsymbol{\lambda}, \boldsymbol{\mu})$$
- $\mathcal{G}$ est toujours concave
- Pour $\lambda_i \geq 0$, $\mathcal{G}(\boldsymbol{\lambda}, \boldsymbol{\mu}) \leq f(\mathbf{x}^*)$ avec $\mathbf{x}^*$ solution du primale.
- $\min_{\mathbf{x}} f(\mathbf{x})$tq $c_i(\mathbf{x}) \leq 0, \; g_i(\mathbf{x}) = 0 \iff \max_{\boldsymbol{\lambda}, \boldsymbol{\mu}} \min_{\mathbf{x}} \mathcal{L}(\mathbf{x}, \boldsymbol{\lambda}, \boldsymbol{\mu})$
$\iff \min_{\mathbf{x}} \max_{\boldsymbol{\lambda}, \boldsymbol{\mu}} \mathcal{L}(\mathbf{x}, \boldsymbol{\lambda}, \boldsymbol{\mu})$
- Problème duale associé au problème primal : $\max_{\boldsymbol{\lambda}, \boldsymbol{\mu}} \min_{\mathbf{x}} \mathcal{L}(\mathbf{x}, \boldsymbol{\lambda}, \boldsymbol{\mu})$

Conditions d'optimalité de Karush Kuhn Tucker

Formulation

$\min_{\mathbf{x}} \ f(\mathbf{x}) \quad$ tel que $c_1(\mathbf{x}) \leq 0, \ldots c_n(\mathbf{x}) \leq 0$ et $g_1(\mathbf{x}) = 0, \ldots, g_m(\mathbf{x}) = 0$

Conditions nécéssaires d'optimalité de Karush Kuhn Tucker (KKT)

Si $(\mathbf{x}^*, \boldsymbol{\lambda}^*, \boldsymbol{\mu}^*)$ est optimal, alors

- $\nabla\mathcal{L}(\mathbf{x}^*, \boldsymbol{\lambda}^*, \boldsymbol{\mu}^*) = 0$ (stationarité)
- $\forall\ i\ c_i(\mathbf{x}^*) \leq 0$, $\forall\ j\ g_j(\mathbf{x}^*) = 0$ (admissibilité primale)
- $\forall\ i\ \lambda_i^* \geq 0$ (admissibilité duale)
- $\lambda_i^* c_i(\mathbf{x}^*) = 0$ (complémentarité) : si $c_i(\mathbf{x}^*) < 0$, alors $\lambda_i = 0$ (contrainte inactive), sinon $\lambda_i > 0$ et $c_i(\mathbf{x}^*) = 0$.

Plan

La recette magique

Dans le cas simple (sans variables slack)

Le problème primal

minimiser$_{\mathbf{w},b}$ $\frac{1}{2}\|\mathbf{w}\|^2$ tel que $y^i(\mathbf{w}\mathbf{x}^i + b) \geq 1$

Fonction de Lagrange

- $L(\mathbf{w}, b, \alpha) = \frac{1}{2}\|\mathbf{w}\|^2 - \sum_i \alpha_i(y^i(\mathbf{w}\mathbf{x}^i + b) - 1)$
- Si $\mathbf{w}, b$ sont des minimums, alors il existe $\alpha_i \geq 0$ tel que le gradient du lagrangien soit nul.
- Conditions d'optimalité (Karush Kuhn Tucker) :

$$\alpha_i(y^i(\mathbf{w}\mathbf{x}^i + b) - 1) = 0 \rightarrow \begin{cases} \alpha_i = 0 \\ \alpha_i > 0 \Rightarrow (y^i(\mathbf{w}\mathbf{x}^i + b) - 1) = 0 \end{cases}$$

Résolution

Lagrangien

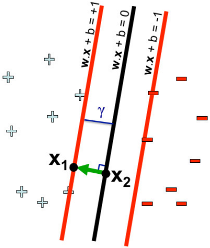
- $L(\mathbf{w}, b, \alpha) = \frac{1}{2}\|\mathbf{w}\|^2 - \sum_i \alpha_i (y^i(\mathbf{w}\mathbf{x}^i + b) - 1)$

Dérivées

- $\nabla_{\mathbf{w}} L(\mathbf{w}, b, \alpha) = \mathbf{w} - \sum_i \alpha_i y^i \mathbf{x}^i = 0$, donc $\mathbf{w} = \sum_i \alpha_i y^i \mathbf{x}^i$
- $\nabla_b L(\mathbf{w}, b, \alpha) = \sum_i \alpha_i y^i = 0$

$\Rightarrow$ maximiser$_\alpha$ $\quad -\frac{1}{2}\sum_{i,j} \alpha_i \alpha_j y^i y^j < \mathbf{x}^i, \mathbf{x}^j > + \sum_i \alpha_i$
tel que $\sum \alpha_i y^i = 0$ et $\alpha_i \geq 0$.

Remarques importantes



- $\mathbf{w} = \sum_i \alpha_i y^i \mathbf{x}^i$: le vecteur de poids est une combinaison linéaire des exemples d'apprentissage !
- Il y a (même beaucoup) de α_i qui sont nuls $\Rightarrow$ exemples non pris en compte (normal ?)
- La fonction de décision résultante :

$$f(\mathbf{x}) = \langle \mathbf{w}\mathbf{x} \rangle + b = \sum_i \alpha_i y^i \langle \mathbf{x}^i \mathbf{x} \rangle + b$$

ne fait intervenir que des produits scalaires entre les exemples d'apprentissage et l'exemple à classifier.

Dans le cas compliqué (avec slack)

Le problème primal

minimiser$_{w,b}$ $\frac{1}{2}\|\mathbf{w}\|^2 + K\sum_i \xi_i$ tel que $y^i(\mathbf{w}\mathbf{x}^i + b) \geq 1 - \xi_i$ et $\xi_i \geq 0$

Lagrangien

- $L(\mathbf{w}, b, \alpha) = \frac{1}{2}\|\mathbf{w}\|^2 + K\sum_i \xi_i - \sum_i \alpha_i(y^i(\mathbf{w}\mathbf{x}^i + b) + \xi_i - 1) - \sum_i \eta_i\xi_i$

Dérivées

- $\nabla_{\mathbf{w}} L(\mathbf{w}, b, \alpha, \xi, \eta) = \mathbf{w} - \sum_i \alpha_i y^i \mathbf{x}^i = 0$
- $\nabla_b L(\mathbf{w}, b, \alpha, \xi, \eta) = \sum_i \alpha_i y^i = 0$
- $\nabla_\xi L(\mathbf{w}, b, \alpha, \xi, \eta) = K - \alpha_i - \eta_i = 0$

$\Rightarrow$ maximiser$_\alpha$ $-\frac{1}{2}\sum_{i,j} \alpha_i\alpha_j y^i y^j < \mathbf{x}^i, \mathbf{x}^j > + \sum_i \alpha_i$
tel que $\sum \alpha_i y^i = 0$ et $\alpha_i \in [0, K]$.

- Conditions d'optimalité (KKT) :

$$\begin{cases} \alpha_i(y^i(\mathbf{w}\mathbf{x}^i + b) + \xi_i - 1) = 0 \\ \eta_i\xi_i = 0 \end{cases} \rightarrow \begin{cases} \alpha_i = 0 \Rightarrow y^i(\mathbf{w}\mathbf{x}^i + b) \geq 1 \\ 0 < \alpha_i < K \Rightarrow (y^i(\mathbf{w}\mathbf{x}^i + b) - 1) = 1 \\ \alpha_i = K \Rightarrow (y^i(\mathbf{w}\mathbf{x}^i + b) - 1) \leq 1 \end{cases}$$

Plan

LE détail important

Dans toutes les formulations, ce qui importe c'est le produit scalaire !

- minimiser$_{\mathbf{w},b}$ $\frac{1}{2}\|\mathbf{w}\|^2 + K\sum_i \xi_i$ tel que $y^i(\mathbf{w}\mathbf{x}^i + b) \geq 1 - \xi_i$ et $\xi_i \geq 0$

$\Leftrightarrow$ maximiser$_\alpha$ $-\frac{1}{2}\sum_{i,j} \alpha_i\alpha_j y^i y^j < \mathbf{x}^i, \mathbf{x}^j > + \sum_i \alpha_i$
tel que $\sum \alpha_i y^i = 0$ et $\alpha_i \in [0, K]$.

- Sauf dans $\mathbf{w}^* = \sum_i \alpha_i y^i \mathbf{x}^i$
- mais : $f(\mathbf{x}) = \sum_i \alpha_i y_i < \mathbf{x}^i, \mathbf{x} > + b$

Pourquoi donc ?

Non linéarité $\rightarrow$ projection

- On veut considérer une projection $\phi : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^{n'}, \quad n << n'$
- Par exemple, $\phi(\mathbf{x}) = (x_1, x_2, \ldots, x_d, x_1x_1, x_1x_2, \ldots, x_dx_d)$
- On peut noter : $K(\mathbf{x}^i, \mathbf{x}^j) = \langle \phi(\mathbf{x}^i), \phi(\mathbf{x}^j) \rangle$
- $\mathbf{w}^* = \sum_i \alpha_i y^i \phi(\mathbf{x}^i)$

Le SVM fait intervenir les quantités :

Espace de départ	Espace projeté
$\langle \mathbf{x}^1, \mathbf{x}^2 \rangle$	$\langle \phi(\mathbf{x}^1), \phi(\mathbf{x}^2) \rangle = K(\mathbf{x}^1, \mathbf{x}^2)$
$\langle \mathbf{w}, \mathbf{x} \rangle$	$\langle \mathbf{w}, \phi(\mathbf{x}) \rangle = \sum_i \alpha_i y^i \langle \phi(\mathbf{x}^i) \phi(\mathbf{x}) \rangle = \sum_i \alpha_i y^i K(\mathbf{x}^i, \mathbf{x})$
$f(\mathbf{x}) = \sum_i \alpha_i y^i \langle \mathbf{x}^i, \mathbf{x} \rangle + b$	$f(\mathbf{x}) = \sum_i \alpha_i y^i \langle \phi(\mathbf{x}^i), \phi(\mathbf{x}) \rangle + b = \sum_i \alpha_i y^i K(\mathbf{x}^i, \mathbf{x}) + b$

Projection et produit scalaire

Exemple : projection polynômiale

Soit $\phi_2(\mathbf{x}) = (x_0x_0, x_0x_1, \ldots, x_0x_d, x_1x_0, x_1x_1, \ldots, x_dx_d)$ avec $x_0 = 1$:

- $\langle\phi_2(\mathbf{x})\phi_2(\mathbf{x}')\rangle = \sum_{i=0}^{d}\sum_{j=0}^{d}(x_ix_j)(x'_ix'_j)$
  $= \sum_{i=0}^{d}\sum_{j=0}^{d}(x_ix'_i)(x_jx'_j)$
  $= (x_0x'_0 + x_1x'_1 + \ldots x_dx'_d)^2$
  $= (1 + \langle\mathbf{x}, \mathbf{x}'\rangle)^2$
  $K(\mathbf{x}, \mathbf{x}') = \langle\phi(\mathbf{x}), \phi(\mathbf{x}')\rangle = (1 + \langle\mathbf{x}, \mathbf{x}'\rangle)^2$ beaucoup moins chère à calculer (linéraire en D).
- Kernel Trick : remplacer le calcul coûteux (et pas toujours possible) de $\langle\phi(\mathbf{x}), \phi(\mathbf{x}')\rangle$ par une fonction moins coûteuse $K(\mathbf{x}, \mathbf{x}')$

Une projection infinie : le noyau gaussien

Soit $K(\mathbf{x},\mathbf{x}') = e^{-\gamma\|\mathbf{x}-\mathbf{x}'\|^2}$:

$$\begin{aligned}
K(\mathbf{x},\mathbf{x}') &= e^{-\gamma\|\mathbf{x}-\mathbf{x}'\|^2} \\
&= e^{-\gamma(\|\mathbf{x}\|^2+\|\mathbf{x}'\|^2-2\mathbf{x}\mathbf{x}')} \\
&= e^{-\gamma\|\mathbf{x}\|^2} e^{-\gamma\|\mathbf{x}'\|^2} e^{2\gamma\mathbf{x}\mathbf{x}'} \\
&= e^{-\gamma\|\mathbf{x}\|^2} e^{-\gamma\|\mathbf{x}'\|^2} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(2\gamma\mathbf{x}\mathbf{x}')^n}{n!} \\
&= \sum_{n=0}^{\infty} \left(\sqrt{\frac{(2\gamma)^n}{n!}} e^{-\gamma\|\mathbf{x}\|^2} \phi_n(\mathbf{x})\right) \left(\sqrt{\frac{(2\gamma)^n}{n!}} e^{-\gamma\|\mathbf{x}'\|^2} \phi_n(\mathbf{x}')\right)
\end{aligned}$$

Avec ϕ_n tel que $\langle \phi_n(\mathbf{x})\phi_n(\mathbf{x}')\rangle = (\langle \mathbf{x}\mathbf{x}'\rangle)^n$
$\Rightarrow K$ correspond au produit scalaire d'une concaténation infinie de projection

Les noyaux

Définition

- Forme généralisée de produit scalaire : $k(\mathbf{x}, \mathbf{x}') =< \phi(\mathbf{x}), \phi(\mathbf{x}') >$
- Noyaux admissibles : tous ceux qui peuvent se mettre sous la forme d'un produit scalaire de deux projections (il existe ϕ tel que ...).
- Mathématiquement : fonction semi-définie positive : pour toute fonction f carré intégrable, $\int_{x,x'} f(x)k(x,x')f(x')dxdx' > 0$.
- Ou, sur un échantillon $\{x^1, \ldots, x^n\}$, si k est symétrique et pour tout $c_i \in \mathbb{R}$, $\sum_{i,j} c_i c_j k(x_i, x_j) \geq 0$.

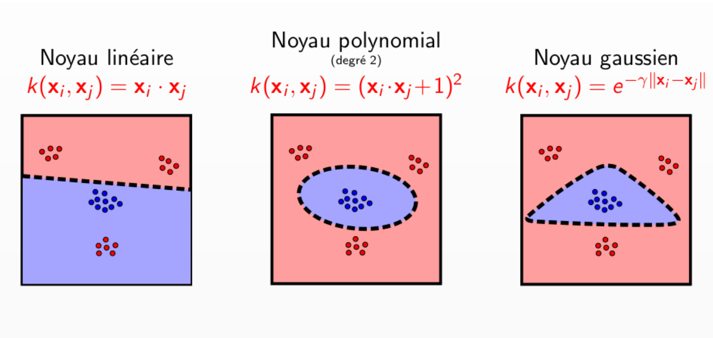
Opération

Si k, k' sont des noyaux, alors sont aussi des noyaux:

- $k(x,x') + k'(x,x')$
- $k(x,x') * k'(x,x')$
- $k(f(x), f'(x)$
- $f(k(x,x'))$ pour f polynôme
- $exp(k(x,x'))$

Quelques exemples

- Noyau gaussien : $k(x, x') = exp(-\|x - x'\|^2/\sigma^2)$
  $f(\mathbf{x}) = \sum_i \alpha_i y^i e^{-\frac{\|\mathbf{x}^i - \mathbf{x}\|^2}{\sigma^2}}$ $\Rightarrow$ très proche du K-NN
- Kernel String pour le texte
- Noyau de convolution : $k(x, x') = \sum_{w \in x} \sum_{w' \in x'} k'(w, w')$
- Noyau sur les arbres, les graphes ...
- Penser aux noyaux comme une mesure de similarité entre deux objets !
  - si éloignés $\rightarrow$ 0 (produit scalaire orthogonal)
  - si proches $\rightarrow$ valeur maximale (vecteurs alignés)
  - si opposés $\rightarrow$ valeur négative minimale (vecteurs opposés)



Conclusion

- Mythe : Les SVMs fonctionnent parce que l'on projette en très haute dimension

$\Rightarrow$ alors on aurait besoin de bien plus de données

- Combiné à la contrainte de marge.
- On retrouve une forme générique des problèmes d'apprentissage :
  $R(f) = \sum \ell(f(\mathbf{x}^i), y^i) + \Omega(f)$,
  avec ℓ une fonction de coût (risque empirique) et Ω une régularisation sur la complexité de la fonction f.
- Permet de régler le sur-apprentissage (ou de manière équivalent de contraindre la classe de fonction considérée).
- Les noyaux s'adaptent à beaucoup d'autres méthodes (Régression ridge par exemple)