## MDI343 - Cours 5: Support Vector Machines

Florence d'Alché—Buc Institut Mines-Télécom, Télécom ParisTech, LTCI florence.dalche@telecom-paristech.fr

### **Outline**

- Rappels
- SVM linéaires
- Passage au cas non linéaire et noyaux
- Support Vector Regression
- 6 References

## Classification binaire supervisée

### Cadre probabiliste et statistique 1/2

- Soit *X* un vecteur aléatoire de  $\mathcal{X} = \mathbb{R}^p$
- Exemple: X décrit les caractéristiques ("features") d'un message ou document
- Y une variable aléatoire discrète  $\mathcal{Y} = \{-1, 1\}$
- Soit ℙ la loi de probabilité jointe de (X,Y)
- Soit  $S_n = \{(x_1, y_1), \dots, (x_n, y_n)\}$ , i.i.d. sample from  $\mathbb{P}$ .

## Classification binaire supervisée

### Cadre probabiliste et statistique 2/2

- Soit  $h: \mathbb{R}^p \to \{-1, +1\}$  une fonction de classification binaire
- Soit  $\ell: \{\mathbb{R}^p, -1, +1\} \times \{-1, +1\} \to \mathbb{R}$  une fonction de perte ou coût
- 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 :  $\hat{h} = \arg\min_{h \in \mathcal{H}} R_n(h) + \lambda \Omega(h)$

- Définir
  - l'espace de représentation des entrées

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

- 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

- 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

- 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**

- Rappels
- SVM linéaires
- Passage au cas non linéaire et noyaux
- Support Vector Regression
- 6 References

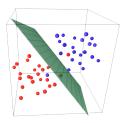
# Séparateur linéaire

#### Définition

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

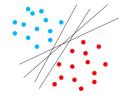
$$h(\mathbf{x}) = \text{signe}(\mathbf{w}^T \mathbf{x} + b)$$

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



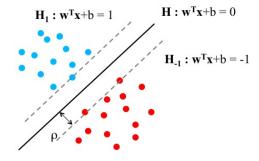
Exemple: données d'apprentissage en 3D et séparateur linéaire

## 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:
  - $\blacksquare$  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 ρ(w) tout en séparant les données de part et d'autre de H<sub>1</sub> et H<sub>-1</sub>
- Séparer les données bleues  $(y_i = 1)$  :  $\mathbf{w}^T \mathbf{x}_i + b \ge 1$
- Séparer les données rouges  $(y_i = -1)$  :  $\mathbf{w}^T \mathbf{x}_i + b \le -1$

## SVM linéaire: cas séparable

### Optimisation dans l'espace primal

```
minimiser \frac{1}{\mathbf{w},b} \|\mathbf{w}\|^2 sous la contrainte y_i(\mathbf{w}^T\mathbf{x}_i + \mathbf{b}) \ge 1, \ i = 1, \dots, n.
```

#### 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!)

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

minimiser sur 
$$\mathbb{R}^n$$
  $J(\mathbf{x})$  avec  $h_i(\mathbf{x}) = 0, 1 \le i \le p$   $g_j(\mathbf{x}) \le 0, 1 \le j \le q$ 

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

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

ensemble des points admissibles ou réalisables

## Programming under inequality constraints

Problem of the following kind:

 $\min_{x} f(x)$ 

s.c.  $g(x) \le 0$ 

- Here: g(x): linear constraints
- f is strictly convex
- **1** Lagrangian:  $J(x, \lambda) = f(x) + \lambda g(x), \lambda \ge 0$

# Programmation quadratique sous contraintes inégalités

minimiser 
$$\frac{1}{2} \|\mathbf{w}\|^2$$
 sous la contrainte  $1 - y_i(\mathbf{w}^T \mathbf{x}_i + \mathbf{b}) \le 0, \ i = 1, ..., n.$ 

### Lagrangien

$$\mathcal{L}(\mathbf{w}, b, \alpha) = \frac{1}{2} ||\mathbf{w}||^2 + \sum_{i} \alpha_i (1 - y_i (\mathbf{w}^T \mathbf{x}_i + \mathbf{b}))$$
$$\forall i, \alpha_i \ge 0$$

### Conditions de Karush-Kunh-Tucker

### En l'extremum, on a

$$\nabla_{\mathbf{w}} \mathcal{L}(\mathbf{w}) = \mathbf{w} - \sum_{i=1}^{n} \alpha_{i} y_{i} \mathbf{x}_{i} = 0$$

$$\nabla_{b} \mathcal{L}(b) = -\sum_{i=1}^{n} \alpha_{i} y_{i} = 0$$

$$\forall i, \alpha_{i} \geq 0$$

$$\forall i, \alpha_{i} [1 - y_{i} (\mathbf{w}^{T} \mathbf{x}_{i} + b)] = 0$$

# Obtention des $\alpha_i$ : 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  $\sum_i \alpha_i y_i = 0, \forall i = 1, \dots, n$
- Faire appel à un solveur quadratique

## SVM linéaires ou Optimal Margin Hyperplan

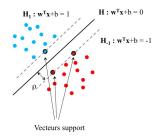
Supposons que les multiplicateurs de Lagrange  $\alpha_i$  soient déterminés :

### 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"



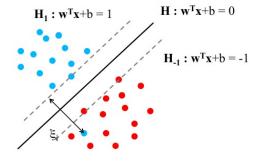
Les données d'apprentissage  $\mathbf{x}_i$  telles que  $\alpha_i \neq 0$  sont sur l'un ou l'autre des hyperplans  $H_1$  ou  $H_{-1}$ . Seules ces données dites *vecteur de support* comptent dans la définition de  $\mathbf{w} = \sum_{i=1}^n \alpha_i y_i \mathbf{x}_i$ 

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

Introduire une variable d'écart  $\xi_i$  pour chaque donnée:

### Problème dans le primal

$$\min_{\mathbf{w},b,\xi} \frac{1}{2} \|\mathbf{w}\|^2 + C \sum_{i=1}^n \xi_i$$
 sous les contraintes  $y_i(\mathbf{w}^T \mathbf{x}_i + \mathbf{b}) \ge 1 - \xi_i \ i = 1, \dots, n$ .  $\xi_i \ge 0 \ i = 1, \dots, n$ .



#### Problème dans le dual

$$\max_{\alpha} \qquad \qquad \sum_{i} \alpha_{i} - \frac{1}{2} \sum_{i,j} \alpha_{i} \alpha_{j} y_{i} y_{j} \mathbf{x}_{i}^{T} \mathbf{x}_{j}$$
 sous les contraintes 
$$0 \leq \alpha_{i} \leq C \ i = 1, \dots, n.$$
 
$$\sum_{i} \alpha_{i} y_{i} \ i = 1, \dots, n.$$

## Conditions de Karush-Kuhn-Tucker (KKT)

### Soit $\alpha^*$ la solution du problème dual:

$$\forall i, [y_{i}f_{w^{*},b^{*}}(x_{i}) - 1 + \xi_{i}^{*}] \leq 0$$

$$\forall i, \alpha_{i}^{*} \geq 0$$

$$\forall i, \alpha_{i}^{*}[y_{i}f_{w^{*},b^{*}}(x_{i}) - 1 + \xi_{i}^{*}] = 0$$

$$\forall i, \mu_{i}^{*} \geq 0$$

$$\forall i, \mu_{i}^{*} \leq 0$$

$$\forall i, \mu_{i}^{*} \xi_{i}^{*} = 0$$
(5)

$$\forall i, \mu_i^* \xi_i^* = 0$$

$$\forall i, \alpha_i^* + \mu_i^* = C$$

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

$$\mathbf{w}^* = \sum_{i} \alpha_i^* y_i \mathbf{x}_i$$
$$\sum_{i} \alpha_i^* y_i = 0$$

$$\sum_i \alpha_i^* y_i = 0$$

(9)(10)

(6)

(7)

(8)

## Différents cas de figure

Soit  $\alpha^*$  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  $\mu_i^* = 0$ ,  $\xi_i^* = 1 y_i f_{w^*,b^*}(x_i)$

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

### Quelques remarques

- certaines données support peuvent donc être de l'autre côté des hyperplans H<sub>1</sub> ou H<sub>-1</sub>
- 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

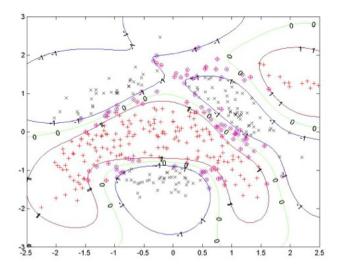
$$\min_{\mathbf{w},b} \quad \sum_{i=1}^{n} (1 - y_i(\mathbf{w}^T \mathbf{x}_i + b))_+ + \lambda \frac{1}{2} \|\mathbf{w}\|^2$$

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**

- Rappels
- SVM linéaires
- Passage au cas non linéaire et noyaux
- Support Vector Regression
- 6 References

## Support Vector Machine : le cas non linéaire



## Remarque

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

## Remarque 1: apprentissage

Si je transforme les données à l'aide d'une fonction  $\phi$  (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.

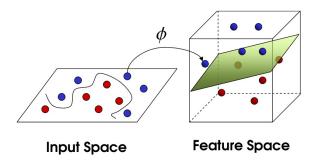
$$\max_{\alpha} \qquad \sum_{i} \alpha_{i} - \frac{1}{2} \sum_{i,j} \alpha_{i} \alpha_{j} y_{i} y_{j} \phi(\mathbf{x}_{i})^{T} \phi(\mathbf{x}_{j})$$
sous les contraintes  $0 \leq \alpha_{i} \leq C \ i = 1, \dots, n$ .
$$\sum_{i} \alpha_{i} y_{i} \ i = 1, \dots, n$$
.

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

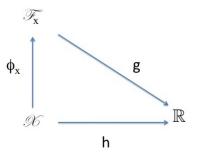
## Astuce du noyau

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 :  $f(\mathbf{x}) = \operatorname{signe}(\sum_{i=1}^n \alpha_i y_i k(\mathbf{x}_i, \mathbf{x}) + b)$  Des telles fonctions existent et sont appelées *noyaux*.

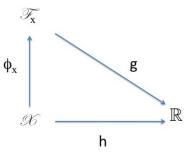
## Astuce du noyau et fonction de redescription 1/2



# Astuce et fonction de redescription 2/2



# Astuce et fonction de redescription 2/2



Fonction h du type:  $h(\mathbf{x}) = \sum_{i=1}^{n} \beta_{i} \phi(x)^{T} \phi(x_{i}) = \sum_{i=1}^{n} \beta_{i} k(x, x_{i}),$  avec  $k : \mathcal{X} \times \mathcal{X} \to \mathbb{R}$  un noyau positif défini.

### 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  $\{\mathbf x_1,\dots,\mathbf x_m\}$  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:

$$\langle \phi(\mathbf{x}), \phi(\mathbf{x}') \rangle_{\mathcal{F}} = k(\mathbf{x}, \mathbf{x}').$$

N.B.: pour un noyau k, il peut exister plusieurs couples  $(\mathcal{F}, \phi)$ .

# Propriété des noyaux

#### Théorème de Moore-Aronzajn 2 (plus précis)

Il existe une unique fonction de redescription et un unique espace de Hilbert tels que:  $\langle \phi(x), f \rangle_{\mathcal{F}} = f(x)$ . Il s'agit de la fonction définie par  $\phi(x) = k(\cdot, x)$  et de l'espace de Hilbert à noyau autoreproduisant qui est l'espace fonctionnel engendré par  $\{\sum_{\ell} k(\cdot, z_{\ell})\beta_{\ell}, z_{\ell} \in \mathcal{X}\}$  et completé par les limites des suites de Cauchy de ces fonctions.

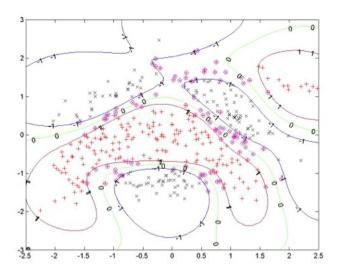
# Noyaux

#### Noyaux entre vecteurs

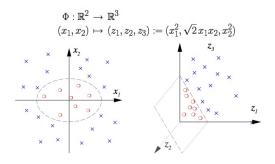
 $\forall \mathbf{x}, \mathbf{x}' \in \mathbb{R}^p$ 

- 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



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

# Autre usage des noyaux

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

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

# 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 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 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**

- Rappels
- SVM linéaires
- Passage au cas non linéaire et noyaux
- Support Vector Regression
- 6 References

## 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  $S_{app} = \{(x_i, y_i), i = 1, ..., n\}$  soit un échantillon i.i.d.

tiré de la loi P

# Régression

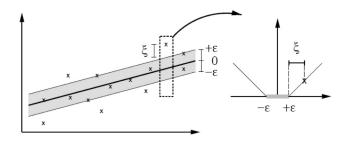
#### Cadre probabiliste et statistique

- A partir de  $S_{app}$ , déterminer la fonction  $f \in \mathcal{F}$  qui minimise  $R(f) = \mathbb{E}_P[\ell(X, Y, f(X))]$
- ullet 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  $\varepsilon$ -tube : perte  $\varepsilon$ -insensible  $|y'-y|_{\varepsilon}=\max(0,|y'-y|-\varepsilon)$



# Support Vector Regression

#### SVR in the primal space

```
Given C and \varepsilon \min_{w,b,\xi} \frac{1}{2} ||\mathbf{w}||^2 + C \sum_i (\xi_i + \xi_i^*) s.c. \forall i = 1, \dots, y_i - f(x_i) \le \varepsilon + \xi_i \forall i = 1, \dots, f(x_i) - y_i \le \varepsilon + \xi_i^* \forall i = 1, \xi_i \ge 0, \xi_i^* \ge 0 with f(x) = w^T \phi(x) + b
```

General case :  $\phi$  is a feature map associated with a positive definite kernel k.

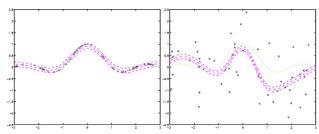
#### Solution in the dual

$$\begin{aligned} &\min_{\alpha,\alpha^*} \sum_{i,j} (\alpha_i - \alpha_i^*) (\alpha_j - \alpha_j^*) k(\mathbf{x}_i, \mathbf{x}_j) + \varepsilon \sum_i (\alpha_i + \alpha_i^*) - \sum_i \mathbf{y}_i (\alpha_i - \alpha_i^*) \\ &\text{s.c. } \sum_i (\alpha_i - \alpha_i^*) = 0 \text{ and } 0 \leq \alpha_i \leq C \text{ and } 0 \leq \alpha_i^* \leq C \\ &w = \sum_{i=1}^n (\alpha_i - \alpha_i^*) \phi(\mathbf{x}_i) \end{aligned}$$

#### 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**

- Rappels
- SVM linéaires
- Passage au cas non linéaire et noyaux
- Support Vector Regression
- References

#### References

- BOSER, Bernhard E., Isabelle M. GUYON, and Vladimir N.
   VAPNIK, 1992. A training algorithm for optimal margin classifiers.
   In: COLT âĂŹ92: Proceedings of the Fifth Annual Workshop on Computational Learning Theory. New York, NY, USA: ACM Press, pp. 144-152.
- CORTES, Corinna, and Vladimir VAPNIK, 1995. Support-vector networks. Machine Learning, 20(3), 273âĂŞ297.
- 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)