SVM

ENSAE-ENSAI
Formation continue
(Cepe)

Plan

Plan

Introduction

Généralités I

- Les SVM (Support Vector Machine) (en français : *séparateurs à vaste marge* ou *machines à vecteurs supports*) sont issus de la théorie de Vapnik-Tchervonenkis (dénommée théorie VC) : (Cortes et Vapnik, 1995), (Vapnik, 1995).
- L'objectif historique des SVM est de classifier une variable binaire via un hyperplan de marge maximale, les SVM constituent une généralisation des classifieurs linéaires.
- Les SVM intègrent le contrôle de la complexité, ce qu'on peut appréhender via la dimension de Vapnik-Tchervonenkis qui est un indicateur du pouvoir séparateur d'une famille de fonctions.
- C'est une méthode souvent utilisée en pratique au vu des bons résultats obtenus.

Généralités II

- On parle de marge (*hard margin*) lorsque les données sont linéairement séparables et de marge souple (*soft margin*) lorsque les données ne le sont pas.
- Dans le cas où les données ne sont pas linéairement séparables, on utilise ce qu'on appelle l'astuce du noyau (*kernel trick*).
- Il existe également les SVR dans le cadre de la régression.
- Il faut normaliser les covariables.

Données considérées

- On dispose d'un échantillon de $(X_1, \ldots, X_p, Y)$:

$$d_n = (x_{i1}, \ldots, x_{ip}, y_i)_{i \in \{1,\ldots,n\}} \ .$$

- On considère dans la suite que :
  - $X \in \mathbb{R}^p$:
    Toutes les covariables sont considérés quantitatives. Mais il est également possible de considérer des covariables qualitatives.
  - $Y \in \{-1, 1\}$:
    On se place dans le cadre d'une classification supervisée binaire

Généralités sur les hyperplans I

- Dans $\mathbb{R}^p$, un hyperplan $\mathcal{H}$ admet comme équation :

$$\omega_0 + \omega_1 x_1 + \ldots + \omega_p x_p = 0 \ ,$$

ce qu'on peut noter également :

$$\omega_0 + \langle \omega, x \rangle = 0$$

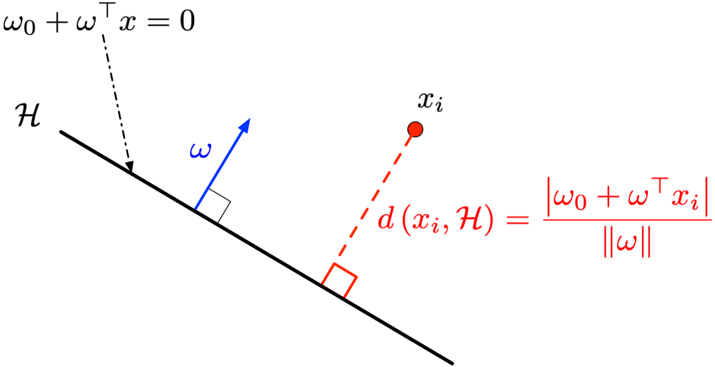
ou encore :

$$\omega_0 + \omega^\top x = 0$$

où $\omega = (\omega_1, \ldots, \omega_p)^\top \in \mathbb{R}^p$ et $x = (x_1, \ldots, x_p)^\top \in \mathbb{R}^p$.

- ω est le vecteur normal de l'hyperplan $\mathcal{H}$.
- Par exemple : un hyperplan dans $\mathbb{R}^2$ est une droite, un hyperplan dans $\mathbb{R}^3$ est un plan.

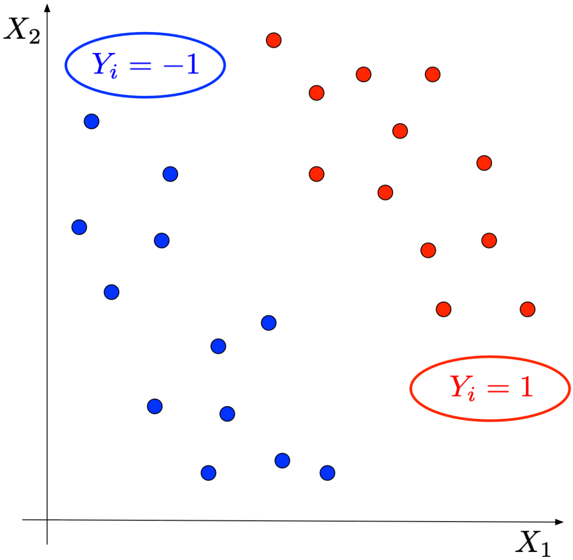
Généralités sur les hyperplans II



Plan

Cas linéairement séparable

Données linéairement séparables I



Données linéairement séparables II

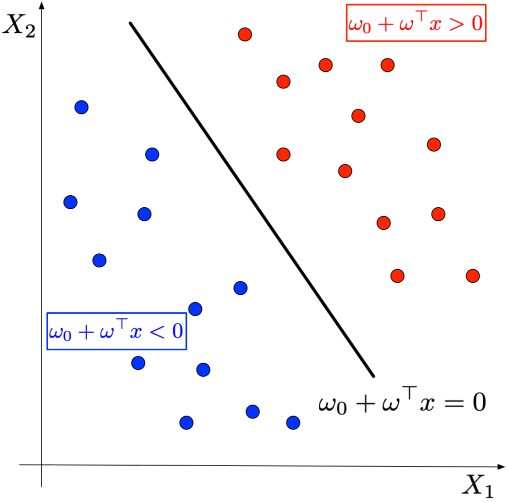
- On dit que $(x_1, y_1), \ldots, (x_n, y_n)$ sont linéairement séparables s'il existe $(\omega_0, \omega) \in \mathbb{R} \times \mathbb{R}^d$ tels que :

$$\forall i \in \{1, \ldots, n\} : y_i = \begin{cases} 1 & \text{si } \omega_0 + \omega^\top x_i > 0 \\ -1 & \text{si } \omega_0 + \omega^\top x_i < 0 \end{cases} .$$

- Cette propriété est équivalente à :

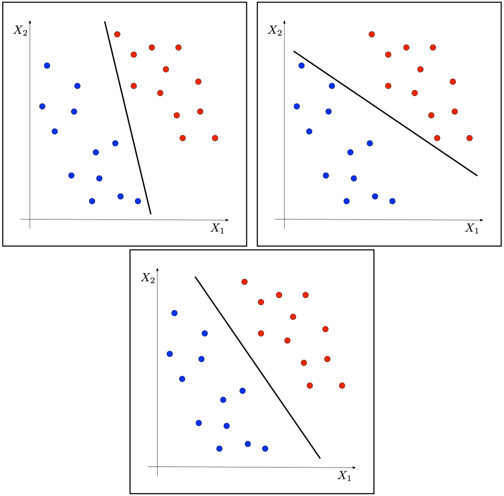
$$y_i \left(\omega_0 + \omega^\top x \right) > 0 .$$

Données linéairement séparables III



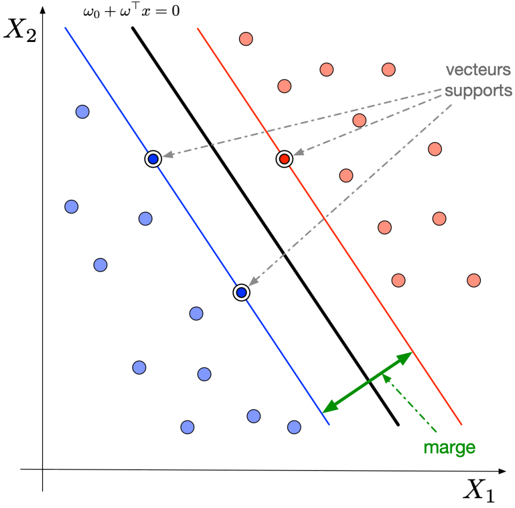
Le choix de l'hyperplan séparateur

- Il existe une infinité d'hyperplans séparateurs possibles :



- Vapnik a proposé de maximiser la marge, soit la distance minimale entre les 2 classes déterminées par l'hyperplan séparateur.

Marge et vecteurs supports



Formalisation du problème I

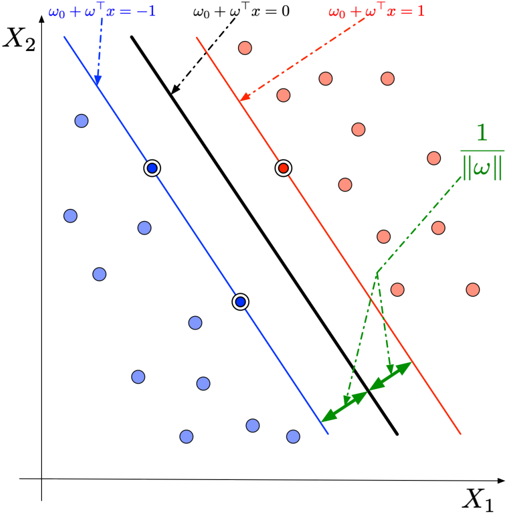
- On pose comme contrainte que les vecteurs supports sont situés sur les hyperplans canoniques d'équations :

$$\begin{cases} \omega_0 + \omega^\top x = -1 \\ \omega_0 + \omega^\top x = 1 \end{cases} .$$

- La marge vaut dans ce cas :

$$\frac{2}{\|\omega\|} .$$

Formalisation du problème II



Formalisation du problème III

- On obtient donc le problème suivant :

$$\max_{\omega_0,\omega} \frac{2}{\|\omega\|}$$

$$\text{sc} \quad \forall i \in \{1,\ldots,n\} : y_i \left(\omega_0 + \omega^\top x_i\right) \geq 1 \ .$$

- Dans la suite, on considère le problème primal équivalent :

$$\min_{\omega_0,\omega} \frac{1}{2} \|\omega\|^2$$

$$\text{sc} \quad \forall i \in \{1,\ldots,n\} : y_i \left(\omega_0 + \omega^\top x_i\right) \geq 1 \ .$$

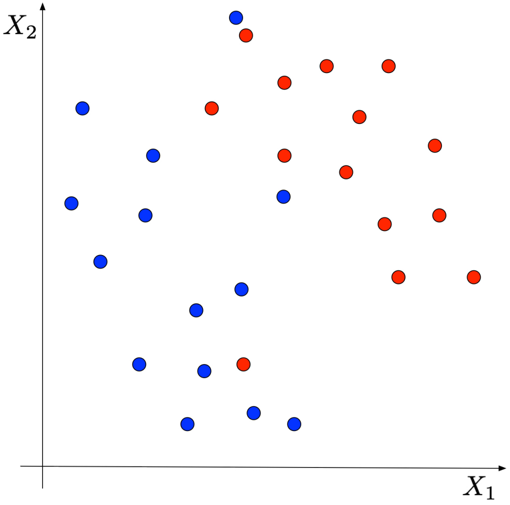
- Le carré et la division par 2 ont respectivement comme objectif de faciliter l'optimisation (fonction convexe) et de « normaliser » la dérivée.

- Il s'agit d'un programme d'optimisation quadratique classique.

Plan

Cas non-séparable

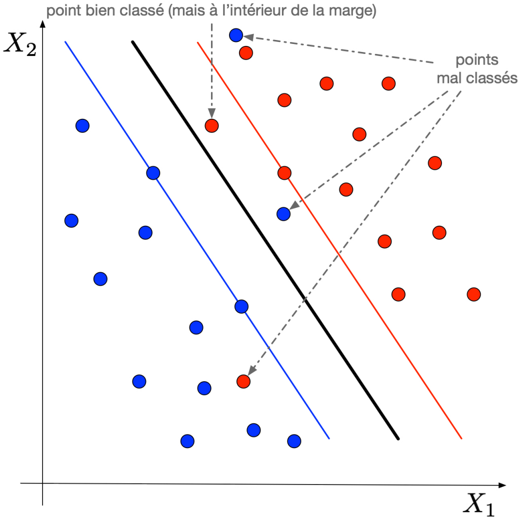
Exemple non-séparable



Lever les contraintes I

- Il est rare d'être confronté à un problème linéairement séparable.
- On lève la contrainte en tolérant que :
  - certains points soient bien classés mais à l'intérieur de la zone définie par la marge,
  - certains points soient mal classés.

Lever les contraintes II



Un outil : les variables ressorts I

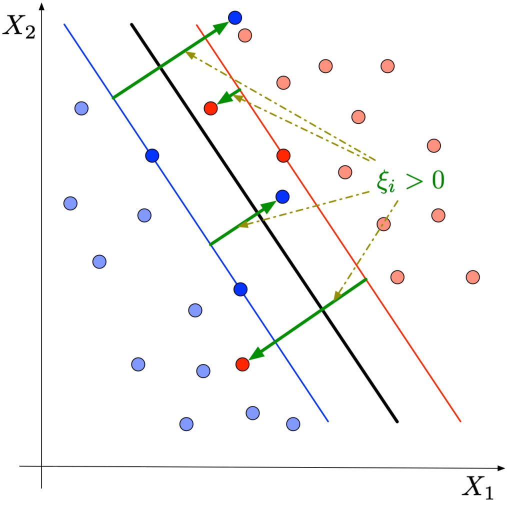
- On créé des variables ressorts (*slack variables*) $(\xi_1, \ldots, \xi_n)$ telles que :

$$y_i \left(\omega_0 + \omega^\top x_i \right) \geq 1 - \xi_i \ .$$

- On peut distinguer les cas suivants :
  - $\xi_i \in]0,1]$: les points sont bien classés mais à l'intérieur (strictement) de la zone définie par la marge.
  - $\xi_i > 1$: les points sont mal classés.
  - $\xi_i = 0$: les points sont bien classés et à l'extérieur de la zone définie par la marge.

- L'enjeu est de ne pas pas avoir trop de variables ressorts non nulles (et lorsqu'elles le sont, qu'elles soient les plus faibles possibles).

Un outil : les variables ressorts II



Un nouveau problème I

- Dans le cas linéairement séparable, le problème considéré est :

$$\begin{aligned} &\min_{\omega_0,\omega} \frac{1}{2}\|\omega\|^2 \\ \text{sc} \quad &\forall i \in \{1,\dots,n\} : y_i\left(\omega_0 + \omega^\top x\right) \geq 1 \ . \end{aligned}$$

Un nouveau problème II

- Dans le cas non-linéairement séparable, le problème considéré devient :

$$\min_{\omega_0,\omega,\xi} \frac{1}{2}\|\omega\|^2 + C\sum_{i=1}^{n}\xi_i$$

$$\text{sc} \quad \forall i \in \{1,\ldots,n\} : y_i\left(\omega_0 + \omega^\top x\right) \geq 1 - \xi_i \ ,$$

$$\forall i \in \{1,\ldots,n\} : \xi_i \geq 0 \ .$$

où $\xi = (\xi_1,\ldots,\xi_n)^\top$.

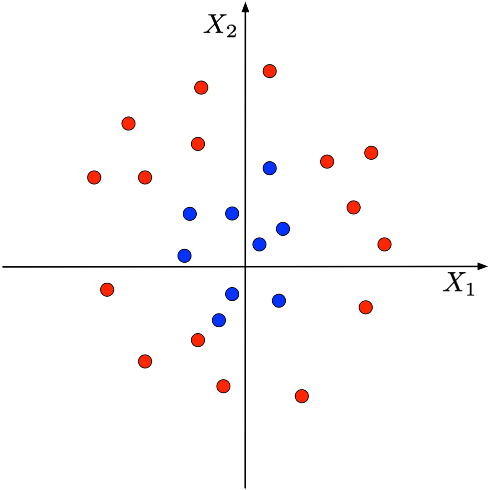
Choix de l'hyperparamètre C

- L'hyperparamètre C contrôle de le compromis entre le nombre d'erreurs de classification et le niveau de la marge.
- Le cas linéairement séparable correspond à une valeur C infinie.
- On choisit l'hyperparamètre C par validation croisée.

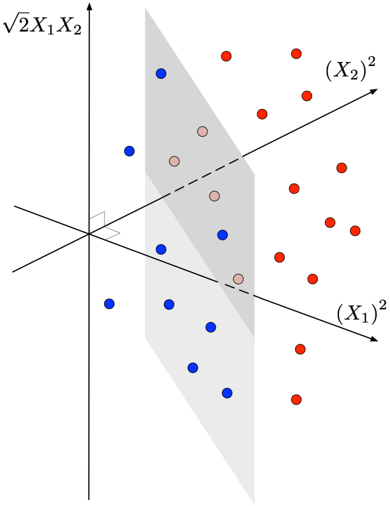
Plan

Astuce du noyau

Changer la dimension I



Changer la dimension II



Astuce du noyau (*kernel trick*)

- Déterminer un classifieur linéaire dans l'espace des observations n'est pas toujours opportun.
- On « envoie » les observations (dans l'espace $\mathcal{X}$) dans un nouvel espace $\mathcal{X}'$, l'espace de représentation (*feature space*), afin d'accroître la séparabilité linéaire .
- On considère pour cela une fonction Φ définie sur $\mathcal{X}$ et à valeurs dans $\mathcal{X}'$.
- Dans le problème d'optimisation des SVM, on retrouve les produits $x_i^\top x_{i'}$ dans l'espace des observations, donc des produits $\Phi(x_i)^\top \Phi(x_{i'})$ dans l'espace de représentation.
- Il n'est pas nécessaire de déterminer Φ, on utilisera des noyaux K tels que :

$$K(x_i, x_{i'}) = \Phi(x_i)^\top \Phi(x_{i'})$$

pour i et i' dans $\{1, \ldots, n\}$.

Retour au problème d'optimisation I

- Dans le cas linéairement séparable, on devait résoudre le problème dual suivant dans l'espace des observations :

$$\max_{\alpha} \sum_{i=1}^{n} \alpha_i - \frac{1}{2} \sum_{i=1}^{n} \sum_{i'=1}^{n} \alpha_i \, \alpha_{i'} \, y_i \, y_{i'} \, x_i^\top x_{i'}$$

$$\text{sc} \quad \forall i \in \{1, \dots, n\} : \alpha_i \geq 0 \; ,$$

$$\sum_{i=1}^{n} \alpha_i y_i = 0 \; .$$

Retour au problème d'optimisation II

- Dans le cas linéairement séparable, on doit maintenant résoudre le problème dual suivant dans l'espace de représentation :

$$\max_{\alpha} \sum_{i=1}^{n} \alpha_i - \frac{1}{2} \sum_{i=1}^{n} \sum_{i'=1}^{n} \alpha_i \alpha_{i'} y_i y_{i'} \Phi(x_i)^\top \Phi(x_{i'})$$

$$\text{sc} \quad \forall i \in \{1, \dots, n\} : \alpha_i \geq 0 \; ,$$

$$\sum_{i=1}^{n} \alpha_i y_i = 0 \; .$$

Retour au problème d'optimisation III

- Dans le cas linéairement séparable, on doit résoudre le problème dual suivant dans l'espace de représentation :

$$\max_{\alpha} \sum_{i=1}^{n} \alpha_i - \frac{1}{2} \sum_{i=1}^{n} \sum_{i'=1}^{n} \alpha_i \, \alpha_{i'} \, y_i \, y_{i'} \, K(x_i, x_{i'})$$

$$\text{sc} \quad \forall i \in \{1, \ldots, n\} : \alpha_i \geq 0 \ ,$$

$$\sum_{i=1}^{n} \alpha_i y_i = 0 \ .$$

Noyau

- Une fonction $K : \mathcal{X} \times \mathcal{X} \to \mathbb{R}$ est un noyau si et seulement si :
  - K est une fonction symétrique :
  $$\forall (x, x') \in \mathcal{X} \times \mathcal{X} : K(x, x') = K(x', x) \ .$$
  - K est une fonction semi-définie positive :
  $$\forall n \in \mathbb{N}^{\star}, \forall (x_1, \dots, x_n) \in \mathcal{X}^n, \forall (a_1, \dots, a_n) \in \mathbb{R}^n :$$
  $$\sum_{i=1}^{n} \sum_{i'=1}^{n} a_i a_j K(x_i, x_{i'}) \geq 0 \ .$$

Un exemple de noyau

- Pour une observation $x_i = (x_{i1}, x_{i2})^\top$, on considère la fonction suivante :

$$\begin{array}{rccc} \Phi : & \mathbb{R}^2 & \rightarrow & \mathbb{R}^3 \\ & (x_{i1}\,,\,x_{i2})^\top & \mapsto & \left(x_{i1}^2\,,\,\sqrt{2}\,x_{i1}\,x_{i2}\,,\,x_{i2}^2\right)^\top \end{array}$$

- On peut montrer que pour 2 observations x_i et $x_{i'}$:

$$\begin{aligned} K(x_i, x_{i'}) &= \Phi(x_i)^\top \Phi(x_{i'}) \\ &= \left(x_{i1}x_{i'}^{1}\right)^2 + 2\,(x_{i1}x_{i'1})\,(x_{i2}x_{i'2}) + (x_{i2}x_{i'2})^2 \\ &= (x_{i1}x_{i'1} + x_{i2}x_{i'2})^2 \\ &= \left(x_i^\top x_{i'}\right)^2 \;. \end{aligned}$$

Quelques noyaux (parmi bien d'autres)

- Noyau affine :

$$K\left(x_i, x_{i'}\right) = x_i^\top x_{i'} + c\ .$$

- Noyau polynomial :

$$K\left(x_i, x_{i'}\right) = \left(x_i^\top x_{i'} + c\right)^d\ .$$

- Noyau laplacien :

$$K\left(x_i, x_{i'}\right) = \exp\left(-\frac{\|x_i - x_{i'}\|}{\sigma}\right)\ .$$

- Noyau gaussien (ou RBF : Radial Basis Function) :

$$K\left(x_i, x_{i'}\right) = \exp\left(-\frac{\|x_i - x_{i'}\|^2}{2\sigma^2}\right)\ .$$

En pratique

- On choisit :
  - l'hyperparamètre C,
  - le noyau K,

par validation croisée.

Compléments

- Dans le cas où on dispose de $K > 2$ classes, on peut par exemple considérer K discriminations binaires « classe k » contre « classe autre que k » pour $k \in \{1, \ldots, K\}$.
- Il est également possible d'utiliser ces méthodes pour la régression : on parle alors de SVR : (Drucker et collab., 1997), (Vapnik et collab., 1997).

Plan

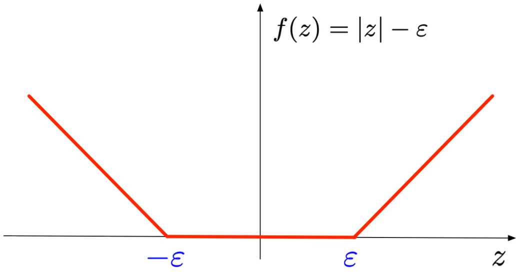
Cas de la régression

Fonction de perte

- Vapnik a introduit la fonction de perte suivante (ε-*insensitive loss function*) pour mesurer la qualité de l'ajustement de la fonction de régression m :

$$\ell\left(m\left(x\right), y\right) = \begin{cases} \left|m\left(x\right) - y\right| - \varepsilon & \text{si } \left|m\left(x\right) - y\right| > \varepsilon \\ 0 & \text{sinon} \end{cases}$$

où $\varepsilon > 0$.



Risque empirique

- Le risque empirique vaut :

$$R_n(m) = \sum_{i=1}^{n} \left(|m(x_i) - y_i| - \varepsilon \right) = \sum_{i=1}^{n} \left(\xi_i + \xi_i^\star \right)$$

où :

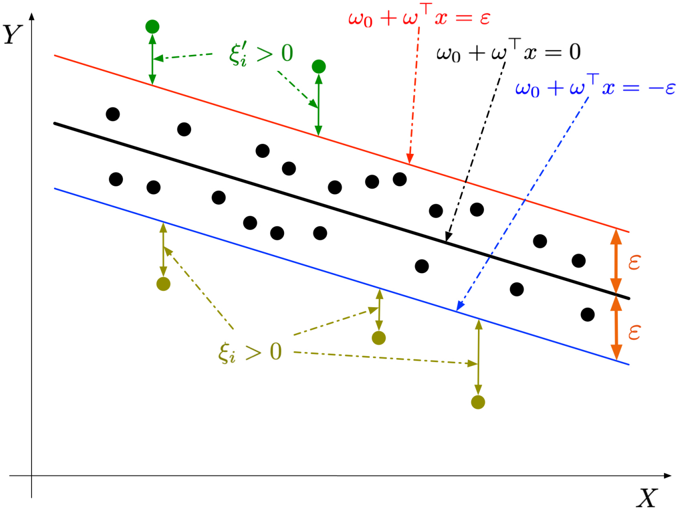
$$\begin{cases} \xi_i = m(x_i) - \varepsilon - y_i & \text{si } y_i < m(x_i) - \varepsilon \\ 0 & \text{sinon} \end{cases}$$

et :

$$\begin{cases} \xi_i^\star = y_i - m(x_i) - \varepsilon & \text{si } y_i > m(x_i) + \varepsilon \\ 0 & \text{sinon} \end{cases}$$

.

Cas linéaire I



Cas linéaire II

- On considère la fonction de régression :

$$\forall x \in \mathbb{R}^p : m_{\omega_0,\omega}(x) = \omega_0 + \omega^\top x \ .$$

- On cherche ω_0 et ω de manière à minimiser la somme de la perte qui traduit l'ajustement et d'un terme de régularisation (assurant la parcimonie) $\|\omega\|^2$.

- On considère le problème suivant :

$$\begin{aligned} & \min_{\omega_0,\omega} \ \frac{1}{2}\|\omega\|^2 + C\sum_{i=1}^{n}(\xi_i + \xi_i^\star) \\ \text{sc} \quad & \forall i \in \{1,\ldots,n\} : m_{\omega_0,\omega}(x_i) - y_i \leq \varepsilon + \xi_i \ , \\ & \forall i \in \{1,\ldots,n\} : y_i - m_{\omega_0,\omega}(x_i) \leq \varepsilon + \xi_i^\star \ , \\ & \forall i \in \{1,\ldots,n\} : \xi_i \geq 0 \ , \\ & \forall i \in \{1,\ldots,n\} : \xi_i^\star \geq 0 \ . \end{aligned}$$

Choix des hyperparamètres ε et C

- L'hyperparamètre ε contrôle la largeur du « tube » : plus ε est important, moins on a de vecteurs support et plus lisse est l'estimation.
- L'hyperparamètre C contrôle de le compromis entre l'erreur d'ajustement et le niveau de la marge. On le choisit par validation croisée.

Références I

Boyd, S. et L. Vandenberghe. 2003, *Convex optimization*, Cambridge University Press.

Cortes, C. et V. N. Vapnik. 1995, «Support-vector networks», *Machine Learning*, vol. 20, n° 3, p. 273–297.

Drucker, H., C. J. Burges, L. Kaufman, A. Smola et V. N. Vapnik. 1997, «Support vector regression machines», dans *Advances in neural information processing systems*, vol. 9, édité par M. C. Mozer, M. I. Jordan et T. Petsche, MIT Press, p. 155–161.

Schölkopf, B. et A. J. Smola. 2001, *Learning with Kernels. Support vector machines, regularization, optimization, and beyond*, MIT Press.

Vapnik, V. N. 1995, *The nature of statistical learning theory*, Springer.

Références II

Vapnik, V. N., S. E. Golowich et A. Smola. 1997, «Support vector method for function approximation, regression estimation, and signal processing», dans *Advances in neural information processing systems*, vol. 9, édité par M. C. Mozer, M. I. Jordan et T. Petsche, MIT Press, p. 281–287.