# SVM
# Support Vector Machine

Machines à Vecteurs de Support – Séparateurs à Vaste Marge

Ricco Rakotomalala

Université Lumière Lyon 2

# Plan

1. Classement binaire – Séparation linéaire
2. Maximisation de la marge (I) – Formulation initiale
3. Maximisation de la marge (II) – Formulation duale
4. Cas de la séparation imparfaite – Soft Margin
5. Fonction noyau – Séparation non linéaire
6. Calcul des probabilités d'affectation
7. Sélection de variables
8. Extension aux problèmes multi classes
9. Pratique des SVM – Logiciels et outils
10. Bilan – Avantages et inconvénients
11. Références bibliographiques

Construction d'un hyperplan séparateur

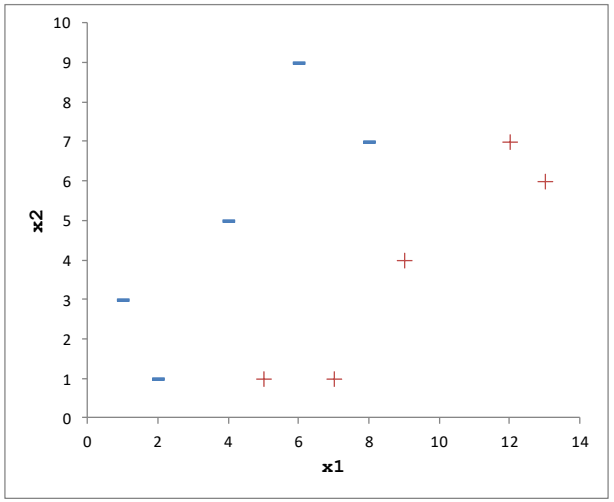
# DISCRIMINATION LINÉAIRE

# Discrimination binaire

## Problème linéairement séparable

Apprentissage supervisé : $Y = f(x_1, x_2, \ldots, x_p ; \beta)$ dans un cadre binaire c.-à-d. $Y \in \{+, -\}$ ou $Y \in \{+1, -1\}$

| x1 | x2 | y |
|---|---|---|
| 1 | 3 | -1 |
| 2 | 1 | -1 |
| 4 | 5 | -1 |
| 6 | 9 | -1 |
| 8 | 7 | -1 |
| 5 | 1 | 1 |
| 7 | 1 | 1 |
| 9 | 4 | 1 |
| 12 | 7 | 1 |
| 13 | 6 | 1 |



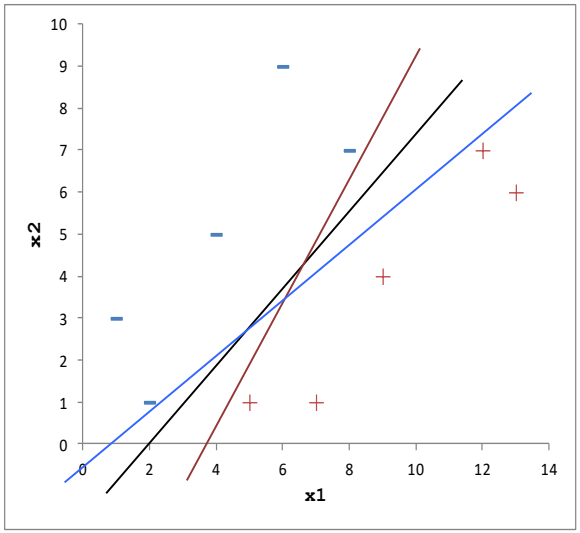

L'objectif est de trouver une séparation linéaire permettant de distinguer les '+' des '-'. Le classifieur se présente sous la forme d'une combinaison linéaire des variables.

$\beta=(\beta_1, \beta_2, \ldots, \beta_p)$ ainsi que $\beta_0$ sont les (p+1) paramètres à estimer.

$$f(x) = x^T \beta + \beta_0$$
$$= x_1\beta_1 + x_2\beta_2 + \cdots + \beta_0$$

# Recherche de la solution « optimale »

Une fois la « forme » de la fonction de séparation choisie, il faut choisir une solution parmi l'infinité de solutions possibles.



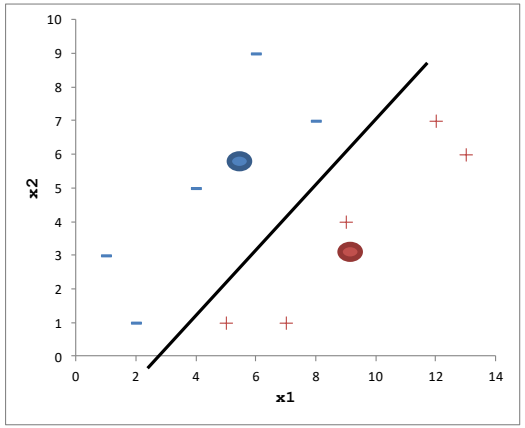

Deux questions clés toujours en « machine learning » :

(1) Choisir la forme de la séparation (''representation bias'' ou ''hypothesis bias'') ➔ choix de famille de fonction

(2) Privilégier une solution parmi l'ensemble des solutions possibles (''preference bias'') ➔ revient souvent à définir un critère à optimiser

## Exemple : Analyse discriminante linéaire

La droite de séparation est à mi-chemin entre les deux barycentres conditionnels au sens de la distance de Mahalanobis.



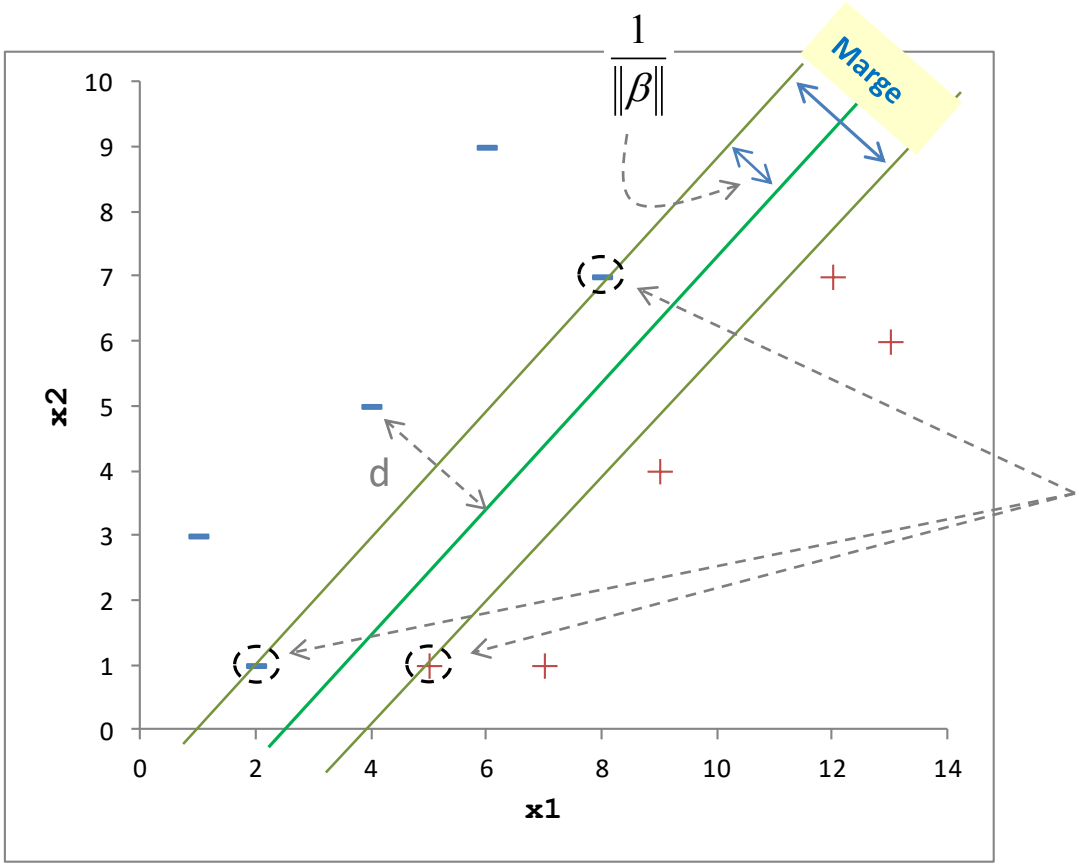
Première formulation

# MAXIMISATION DE LA MARGE (I)

# Principe de la maximisation de la marge

## Présentation intuitive

Hyperplan optimal doit maximiser la distance entre la frontière de séparation et les points de chaque classe qui lui sont le plus proche [HTF, page 132]




• Distance d'un point quelconque x avec la frontière (cf. projection orthogonale)

$$d = \frac{|x^T \beta + \beta_0|}{\|\beta\|}$$

• La marge maximale est égale à

$$\delta = \frac{2}{\|\beta\|}$$

• Les points où « s'appuient » les droites « marges » sont les « vecteurs de support ». Si on les retire de l'échantillon, la solution est modifiée.

• Plusieurs zones sont définies dans l'espace de représentation

f(x) = 0, on est sur la frontière

f(x) > 0, on classe « + »

f(x) < 0, on classe « - »

f(x) = +1 ou -1, on est sur les droites délimitant des vecteurs de support

# Maximisation de la marge

## Un exemple jouet sous **EXCEL (!)**

Nous utilisons le SOLVEUR pour résoudre notre problème d'optimisation.

| | beta.1 | beta.2 | beta.0 | | |
|---|---|---|---|---|---|
| | 0.667 | -0.667 | -1.667 | | |
| n° | x1 | x2 | y | f(x) | f(x)*y |
| 1 | 1 | 3 | -1 | -3 | 3 |
| 2 | 2 | 1 | -1 | -1 | 1 |
| 3 | 4 | 5 | -1 | -2.33333333 | 2.33333333 |
| 4 | 6 | 9 | -1 | -3.66666667 | 3.66666667 |
| 5 | 8 | 7 | -1 | -1 | 1 |
| 6 | 5 | 1 | 1 | 1 | 1 |
| 7 | 7 | 1 | 1 | 2.33333333 | 2.33333333 |
| 8 | 9 | 4 | 1 | 1.66666667 | 1.66666667 |
| 9 | 12 | 7 | 1 | 1.66666667 | 1.66666667 |
| 10 | 13 | 6 | 1 | 3 | 3 |

(p + 1) cellules variables

Contraintes saturées : 3 points supports à l'issue de l'optimisation (n°2, 5 et 6)

| Norme.Beta | 0.943 |
|---|---|

Cellule cible à définir $||\beta||$

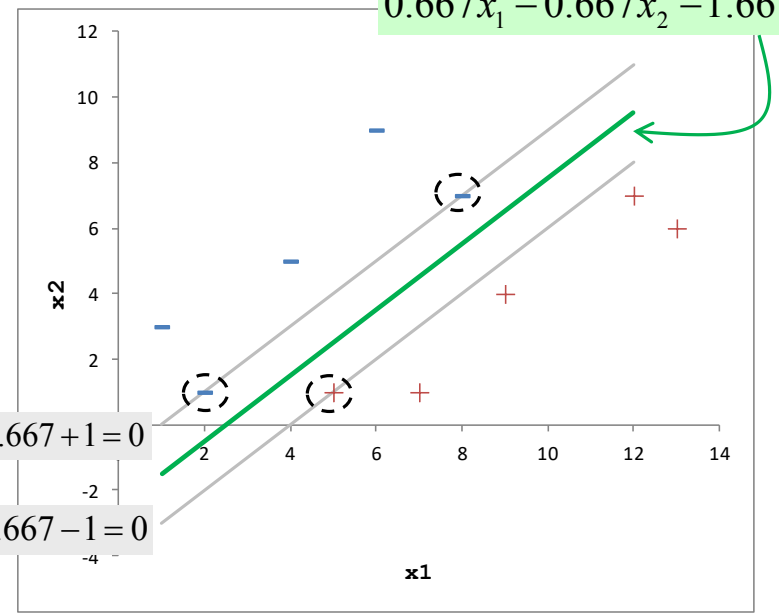
n = 10 contraintes

$$0.667x_1 - 0.667x_2 - 1.667 = 0$$

$$x^T\beta + \beta_0 \pm 1 = 0$$

$$0.667x_1 - 0.667x_2 - 1.667 + 1 = 0$$

$$0.667x_1 - 0.667x_2 - 1.667 - 1 = 0$$



# Première formulation

## Commentaires

Règle de classement pour un individu i* basé sur les coefficients estimés $\hat{\beta}_j$

$$f(x_{i*}) \begin{cases} \geq 0 \Rightarrow \hat{y}_{i*} = 1 \\ < 0 \Rightarrow \hat{y}_{i*} = -1 \end{cases}$$

| beta.1 | beta.2 | beta.0 | | |
|---|---|---|---|---|
| 0.667 | -0.667 | -1.667 | | |
| x1 | x2 | y | f(x) | prediction |
| 1 | 3 | -1 | -3 | -1 |
| 2 | 1 | -1 | -1 | -1 |
| 4 | 5 | -1 | -2.3333 | -1 |
| 6 | 9 | -1 | -3.6667 | -1 |
| 8 | 7 | -1 | -1 | -1 |
| 5 | 1 | 1 | 1 | 1 |
| 7 | 1 | 1 | 2.33333 | 1 |
| 9 | 4 | 1 | 1.66667 | 1 |
| 12 | 7 | 1 | 1.66667 | 1 |
| 13 | 6 | 1 | 3 | 1 |

**Inconvénients de cette première écriture « primale »**

(1) Les algorithmes d'optimisation numérique (prog. quadratique) ne sont pas opérationnels dès que « p » est grand (> quelques centaines). Ce qui arrive souvent dans le traitement des données complexes (text mining, image, …) (peu d'exemples, beaucoup de descripteurs)

(2) Cette écriture ne met pas en évidence la possibilité d'utiliser des fonctions « noyau » qui permettent d'aller au-delà du cadre des classifieurs linéaires

Expression duale du problème d'optimisation

# MAXIMISATION DE LA MARGE (II)

# Expression duale

## Optimisation

En introduisant les informations issues de l'annulation des dérivées partielles du Lagrangien, on obtient une optimisation ne dépendant que des multiplicateurs

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

Sous contrainte :

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

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

- $\langle x_i, x_{i'} \rangle$ est le produit scalaire entre les observations i et i'

$$\langle x_i, x_{i'} \rangle = \sum_{j=1}^{p} x_{ij} \times x_{i'j}$$

- $\alpha_i > 0$ vont définir les points importants c.à-d. les points supports

- Forcément, il y aura des points supports d'étiquettes différentes sinon cette condition ne peut pas être respectée.

# Exemple numérique

## Traitements sous Excel

Toujours avec le SOLVEUR, essayons de résoudre notre problème d'optimisation.

Cellules variables $\alpha_i$

Seuls les points supports présentent une « pondération » $\alpha_i$ non-nulle (n°2, 5 et 6)

La matrice $\langle x_i, x_{i'} \rangle$ est appelée matrice de Gram

$$\alpha_i \alpha_{i'} y_i y_{i'} \langle x_i, x_{i'} \rangle$$

| n° | x1 | x2 | y | alpha | y*alpha |
|---|---|---|---|---|---|
| 1 | 1 | 3 | -1 | **0** | 0 |
| 2 | 2 | 1 | -1 | **0.33333** | -0.3333 |
| 3 | 4 | 5 | -1 | **0** | 0 |
| 4 | 6 | 9 | -1 | **0** | 0 |
| 5 | 8 | 7 | -1 | **0.11111** | -0.1111 |
| 6 | 5 | 1 | 1 | **0.44444** | 0.44444 |
| 7 | 7 | 1 | 1 | **0** | 0 |
| 8 | 9 | 4 | 1 | **0** | 0 |
| 9 | 12 | 7 | 1 | **0** | 0 |
| 10 | 13 | 6 | 1 | **0** | 0 |

| n° | 1 | 2 | 3 | 4 | 5 | 6 | 7 | 8 | 9 | 10 |
|---|---|---|---|---|---|---|---|---|---|---|
| 1 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 |
| 2 | 0 | 0.6 | 0 | 0 | 0.9 | -1.6 | 0 | 0 | 0 | 0 |
| 3 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 |
| 4 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 |
| 5 | 0 | 0.9 | 0 | 0 | 1.4 | -2.3 | 0 | 0 | 0 | 0 |
| 6 | 0 | -1.6 | 0 | 0 | -2.3 | 5.1 | 0 | 0 | 0 | 0 |
| 7 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 |
| 8 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 |
| 9 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 |
| 10 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 |

Somme 0.88889 7.8E-16

$$\sum_{i=1}^{n} \alpha_i$$

LD **0.44444**

Somme 0.889

Racine 0.943

$$\sum_{i=1}^{n} \sum_{i'=1}^{n} \alpha_i \alpha_{i'} y_i y_{i'} \langle x_i, x_{i'} \rangle = 0.889$$

Fonction objectif $L_D(\alpha)$

$$\|\beta\| = \sqrt{\sum_{i=1}^{n} \sum_{i'=1}^{n} \alpha_i \alpha_{i'} y_i y_{i'} \langle x_i, x_{i'} \rangle} = 0.943$$

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

N'oublions pas que la marge est égale à $\delta = \frac{2}{\|\beta\|}$

# Classement d'un individu supplémentaire (I)

## Utilisation des points supports

Utilisation des points supports pour le classement des individus. Cette formulation sera fondamentale pour l'utilisation des fonctions « noyau ».

La fonction de classement peut s'écrire en fonction des coefficients $\beta$ ou des multiplicateurs $\alpha$

$$f(x) = x^T \beta + \beta_0$$

$$= \sum_{i=1}^{n} \alpha_i y_i \langle x_i, x \rangle + \beta_0$$

$$= \sum_{i' \in S} \alpha_{i'} y_{i'} \langle x_{i'}, x \rangle + \beta_0$$

<---- **S** est l'ensemble des points supports. Ce sont les seuls à avoir un poids $\alpha_i$ non nul.

Seuls les points supports participent au classement !

On a une sorte d'algorithme des plus proches voisins où seuls les points supports participent au classement. Lesquels étant pondérés ($\alpha_i$)

La constante $\beta_0$ peut être obtenue à partir des conditions de KKT appliquées sur un des points supports (cf. pages précédentes)

# Classement d'un individu supplémentaire (II)

## Exemple numérique

Pour le classement de l'individu n°1

$$f(x) = \sum_{i' \in S} \alpha_{i'} y_{i'} \langle x_{i'}, x \rangle + \beta_0$$
$$= 0.333 \times (-1) \times (2 \times 1 + 1 \times 3) + 0.111 \times (-1) \times (8 \times 1 + 7 \times 3) + 0.444 \times (1) \times (5 \times 1 + 1 \times 3) + (-1.667)$$
$$= -3.0$$

| n° | x1 | x2 | y | f(x) | prediction |
|---|---|---|---|---|---|
| 1 | 1 | 3 | -1 | -3.000 | -1 |
| 2 | 2 | 1 | -1 | -1.000 | -1 |
| 3 | 4 | 5 | -1 | -2.333 | -1 |
| 4 | 6 | 9 | -1 | -3.667 | -1 |
| 5 | 8 | 7 | -1 | -1.000 | -1 |
| 6 | 5 | 1 | 1 | 1.000 | 1 |
| 7 | 7 | 1 | 1 | 2.333 | 1 |
| 8 | 9 | 4 | 1 | 1.667 | 1 |
| 9 | 12 | 7 | 1 | 1.667 | 1 |
| 10 | 13 | 6 | 1 | 3.000 | 1 |

Utilisation des 3 points supports.

Vecteurs de support

| n° | x1 | x2 | y | alpha |
|---|---|---|---|---|
| 2 | 2 | 1 | -1 | **0.333** |
| 5 | 8 | 7 | -1 | **0.111** |
| 6 | 5 | 1 | 1 | **0.444** |

| | |
|---|---|
| Beta.0 | -1.667 |

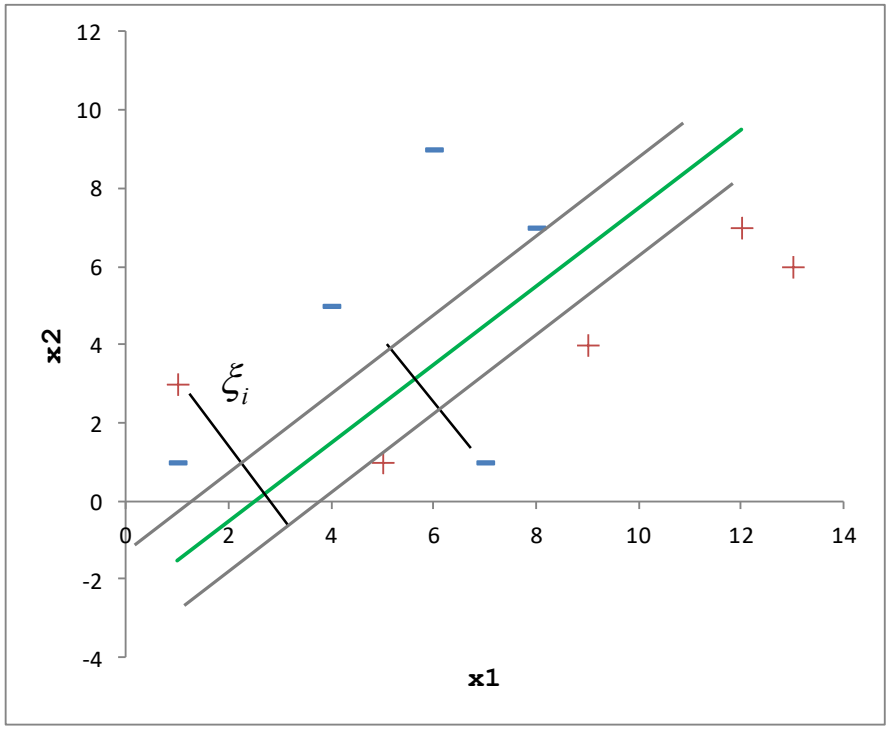
Cas de la séparation imparfaite

# SOFT MARGIN

# "Slack variables"

## Utilisation des variables de relaxation $\xi_i$

La séparation parfaite est une vue de l'esprit. En pratique, il arrive que des individus soient du mauvais côté de la frontière.




- $\xi$ est un vecteur de taille n
- $\xi_i \geq 0$ matérialise l'erreur de classement pour chaque observation
- $\xi_i = 0$, elle est nulle lorsque l'observation est du bon côté de la droite « marge » associée à sa classe
- $\xi_i < 1$, le point est du bon côté de la frontière, mais déborde de la droite « marge » associée à sa classe
- $\xi_i > 1$, l'individu est mal classé

# Reformulation de l'optimisation

## Introduction du paramètre de coût (cost parameter)

Il faut pénaliser les erreurs, plus ou moins fortement selon que l'on veuille plus ou moins « coller » aux données d'apprentissage (régularisation)

Formulation primale

$$\min_{\beta,\beta_0,\xi_i} \frac{1}{2}\|\beta\|^2 + C\sum_{i=1}^{n}\xi_i$$

$$s.c.$$

$$y_i \times (x_i^T\beta + \beta_0) \geq 1 - \xi_i, \forall i = 1,\ldots,n$$

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

La tolérance aux erreurs est plus ou moins accentuée avec le paramètre **C** (''cost'' parameter)

➔ C trop élevé, danger de sur-apprentissage

➔ C trop faible, sous-apprentissage

Formulation duale

$$\max_{\alpha} L_D(\alpha) = \sum_{i=1}^{n}\alpha_i - \frac{1}{2}\sum_{i=1}^{n}\sum_{i'=1}^{n}\alpha_i\alpha_{i'}y_iy_{i'}\langle x_i, x_{i'}\rangle$$

$$s.c.$$

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

$$0 \leq \alpha_i \leq C, \ \forall i$$

# Soft-margin - Un exemple

Formulation primale

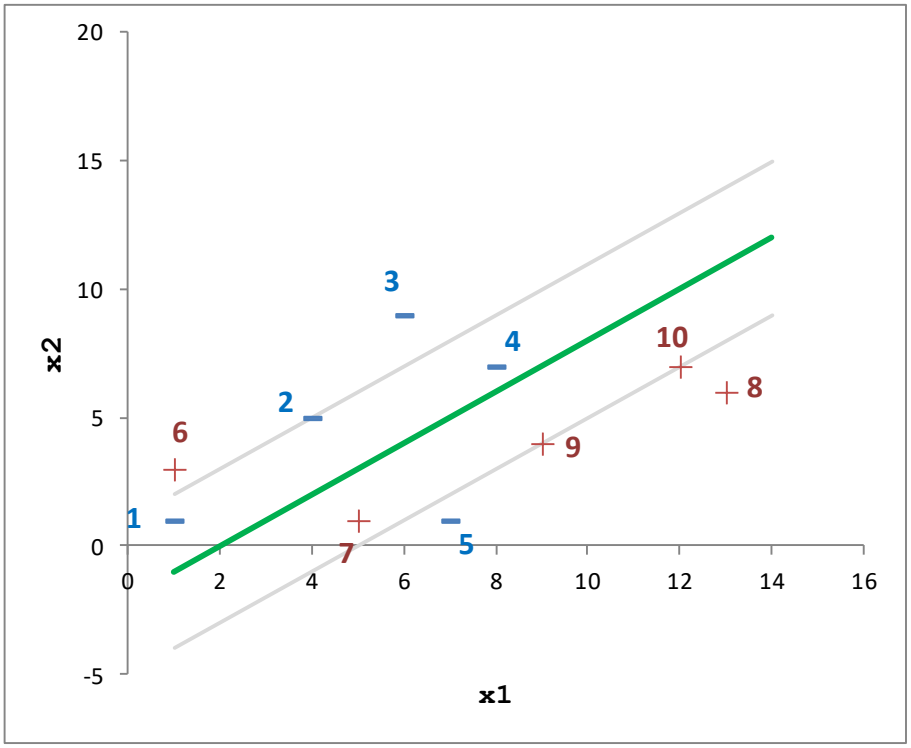
- Minimisation de la fonction objectif en fonction des $\beta$ et $\xi$
- C est un paramètre que l'on a fixé à C = 5

Le choix de **C** constituera un enjeu important en pratique

| | beta.1 | beta.2 | beta.0 | | | |
|---|---|---|---|---|---|---|
| | 0.333 | -0.333 | -0.667 | | | |
| n° | x1 | x2 | y | ksi | 1-ksi | y*f(x) |
| 1 | 1 | 1 | -1 | 0.333 | 0.667 | 0.667 |
| 2 | 4 | 5 | -1 | 0 | 1 | 1 |
| 3 | 6 | 9 | -1 | 0 | 1 | 1.667 |
| 4 | 8 | 7 | -1 | 0.667 | 0.333 | 0.333 |
| 5 | 7 | 1 | -1 | 2.333 | -1.333 | -1.333 |
| 6 | 1 | 3 | 1 | 2.333 | -1.333 | -1.333 |
| 7 | 5 | 1 | 1 | 0.333 | 0.667 | 0.667 |
| 8 | 13 | 6 | 1 | 0 | 1 | 1.667 |
| 9 | 9 | 4 | 1 | 0 | 1 | 1 |
| 10 | 12 | 7 | 1 | 0 | 1 | 1 |

| C | 5 |
|---|---|

| Fonc.Obj | 30.1111 |
|---|---|




- $y_i(x_i^T\beta+\beta_0)=1 - \xi_i$ : contrainte saturée ➔ point support (fond jaune dans le tableau) c.-à-d. on retire le point, la solution serait différente (8 points supports ici)
- $\xi_i = 0$ : Le point est du bon côté de sa droite marge
- $\xi_i \geq 1$ : Le point est du mauvais côté de la frontière (on observe 2 individus mal classés)
- $0 < \xi_i < 1$ : le point est du bon côté de la frontière, mais déborde de la droite « marge » associée à sa classe

L'astuce du noyau (''kernel trick'')

# DISCRIMINATION NON LINÉAIRE

# Changement de représentation

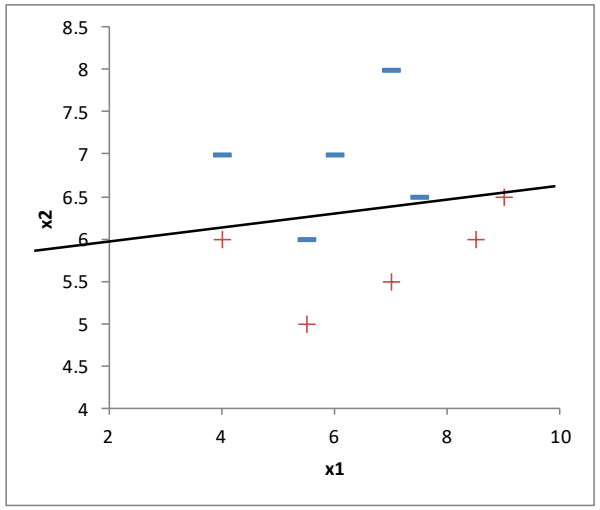
## Transformation de variables

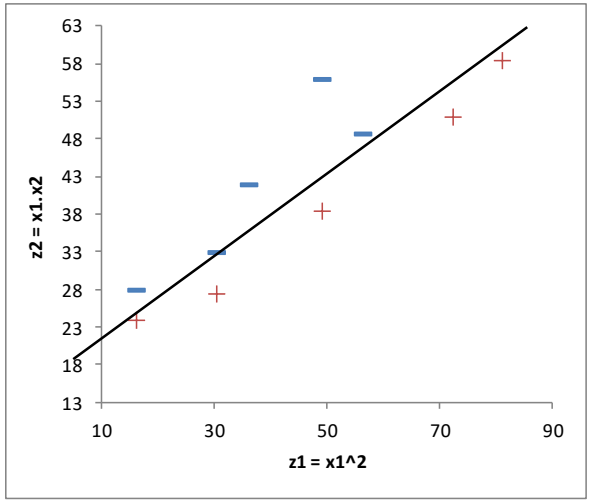
En réalisant les transformations de variables adéquates, on peut rendre linéairement séparable un problème qui ne l'est pas dans l'espace initial.

| n° | x1 | x2 | y |
|---|---|---|---|
| 1 | 4 | 7 | -1 |
| 2 | 7 | 8 | -1 |
| 3 | 5.5 | 6 | -1 |
| 4 | 6 | 7 | -1 |
| 5 | 7.5 | 6.5 | -1 |
| 6 | 5.5 | 5 | 1 |
| 7 | 4 | 6 | 1 |
| 8 | 7 | 5.5 | 1 |
| 9 | 8.5 | 6 | 1 |
| 10 | 9 | 6.5 | 1 |

| n° | z1 | z2 | y |
|---|---|---|---|
| 1 | 16 | 28 | -1 |
| 2 | 49 | 56 | -1 |
| 3 | 30.25 | 33 | -1 |
| 4 | 36 | 42 | -1 |
| 5 | 56.25 | 48.75 | -1 |
| 6 | 30.25 | 27.5 | 1 |
| 7 | 16 | 24 | 1 |
| 8 | 49 | 38.5 | 1 |
| 9 | 72.25 | 51 | 1 |
| 10 | 81 | 58.5 | 1 |

$$z_1 = x_1^2$$
$$z_2 = x_1 x_2$$




Mais démultiplier « physiquement » les variables intermédiaires dans la base est coûteux, sans être sûr d'aboutir à la bonne transformation.

# Les fonctions « noyau »

## Appliquées aux produits scalaires

Le produit scalaire entre les vecteurs individus tient une place importante dans les calculs (formulation duale). Or elles peuvent tirer profit des fonctions « noyau »

Soit une fonction de transformation $\phi(x)$ des variables initiales

Ex. $x = (x_1, x_2) \rightarrow \phi(x) = (x_1^2, \sqrt{2}x_1x_2, x_2^2)$

Avec la formulation duale, pour optimiser le Lagrangien, nous devons calculer la matrice des produits scalaire $<\phi(x_i), \phi(x_{i'})>$ pour chaque couple d'individus (i, i')

On doit manipuler 3 variables au lieu de 2, les calculs sont plus coûteux, sans compter le stockage des variables supplémentaires.

On peut trouver une fonction K(.), dite fonction noyau, tel que

$$K(x_i, x_{i'}) = \langle \phi(x_i), \phi(x_{i'}) \rangle$$

La principale conséquence est que l'on calcule simplement le produit scalaire $<x_i, x_{i'}>$, et on ne transforme que ce résultat avec la fonction noyau.

On ne manipule que les 2 variables initiales pour les calculs. Mais on se projette bien dans un espace à 3 dimensions !

# Noyau polynomial

## Exemples

Produit scalaire entre deux individus (vecteurs) *u et v* dont voici les valeurs

$$u = (4,7)$$
$$v = (2,5)$$

$$< u, v >= 4 \times 2 + 7 \times 5 = 43$$

Transformation (1)

$$\phi(x) = (x_1^2, \sqrt{2}x_1x_2, x_2^2)$$

$$\left.\begin{array}{l}\phi(u) = (16, 39.6, 49) \\ \phi(v) = (4, 14.1, 25)\end{array}\right\} \Rightarrow \langle \phi(u), \phi(v) \rangle = 1849$$

Fonction noyau correspondante (1)

$$K_1(u,v) = \left(\langle u, v \rangle\right)^2 = 43^2 = 1849$$

Les résultats sont équivalents. Avec K(.), on se projette dans un espace plus grand sans avoir à former explicitement les variables.

---

Transformation (2)

$$\phi(x) = (1, \sqrt{2}x_1, \sqrt{2}x_2, x_1^2, x_2^2, \sqrt{2}x_1x2)$$

$$\left.\begin{array}{l}\phi(u) = (1, 5.7, 9.9, 16, 49, 39.6) \\ \phi(v) = (1, 2.8, 7.1, 4, 25, 14.1)\end{array}\right\} \Rightarrow \langle \phi(u), \phi(v) \rangle = 1936$$

Fonction noyau correspondante (2)

$$K_2(u,v) = \left(1 + \langle u, v \rangle\right)^2 = (1+43)^2 = 1936$$

On se positionne dans un espace à 5 dimensions dans cette configuration.

# Quelques fonctions noyau

## Les plus usitées dans les logiciels (ex. Package Scikit-learn pour Python - SVC)

Le paramétrage est le principal enjeu lorsqu'on souhaite les mettre en œuvre sur nos données. Sans oublier le "cost parameter" **C**.

Noyau polynomial

$$K(u,v) = \left(\text{coef0} + \langle u, v \rangle\right)^{\text{degree}}$$

coef0 = 0 et degree = 1, nous avons le « noyau linéaire »

Noyau RBF (radial basis function)

$$K(u,v) = \exp\left(-\gamma \times \|u - v\|^2\right)$$

Si non spécifié, les outils choisissent par défaut (p : nombre de variables)

$$\gamma = \frac{1}{p}$$

Noyau sigmoid

$$K(u,v) = \tanh\left(\gamma \times \langle u, v \rangle + \text{coef0}\right)$$

Il y a un peu de polysémie dans les paramètres, mais ils ont été popularisés par la fameuse librairie LIBSVM intégrée dans de nombreux outils de Data Mining (Scikit-Learn pour Python, e1071 pour R, Tanagra, etc.)

Calcul des probabilités d'appartenance aux classes

Transformer l'output des SVM en probabilités

# NORMALISATION DES SCORES

# Probabilités d'appartenance aux classes

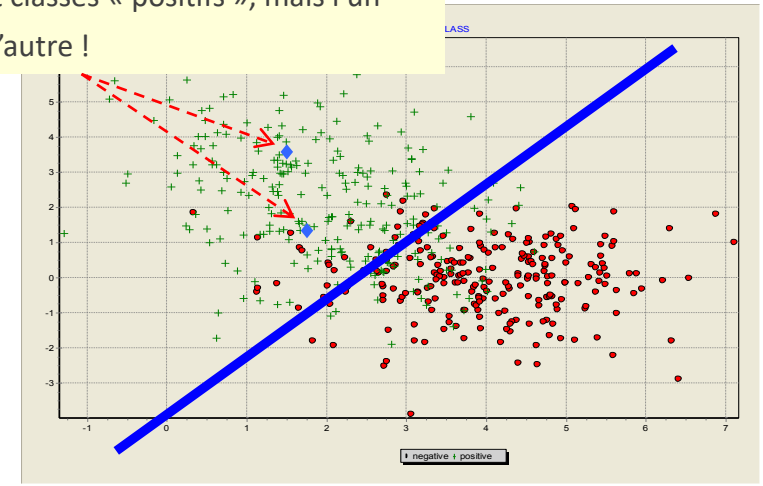
## Output des SVM = première version des scores (scores bruts)

(voir « Normalisation des scores »)

L'output de la fonction f(x) permet de classer les individus

$$f(x)\begin{cases} \geq 0 \Rightarrow \hat{y} = 1 \\ < 0 \Rightarrow \hat{y} = -1 \end{cases}$$

Les deux points sont classés « positifs », mais l'un est plus positif que l'autre !




Mais nous avons besoin d'une indication sur le degré de crédibilité de la réponse

|f(x)| est déjà une indication. Elle permet de classer les individus selon leur degré de positivité (ex. scoring)

**Mais…**

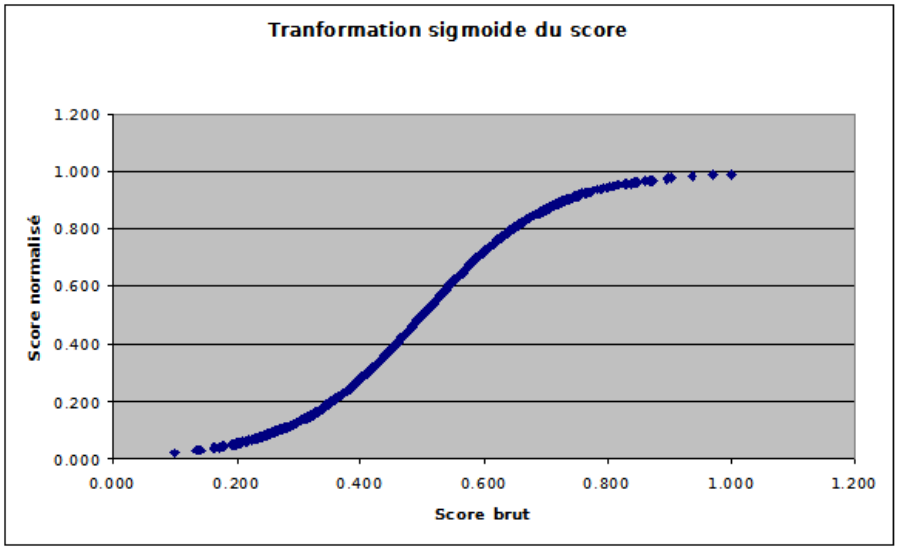
Mais dans de nombreux domaines, on a besoin d'une probabilité d'appartenance (ex. interprétation, utilisation d'une matrice de coûts, comparaison d'outputs avec d'autres méthodes, etc.)

# Méthode de Platt

## Estimation par le maximum de vraisemblance

On utilise une fonction sigmoïde simple permet de « mapper » f(x) dans l'intervalle [0, 1]

$$P(Y=1/x)=\frac{1}{1+\exp[-f(x)]}$$




On peut aller plus loin en utilisant une expression paramétrée et estimer les coefficients par maximum de vraisemblance

$$P(Y=1/x)=\frac{1}{1+\exp[-(a\times f(x)+b)]}$$

Un programme de régression logistique saura très bien estimer les valeurs de ''a'' et ''b''

# Méthode de Platt

## Un exemple

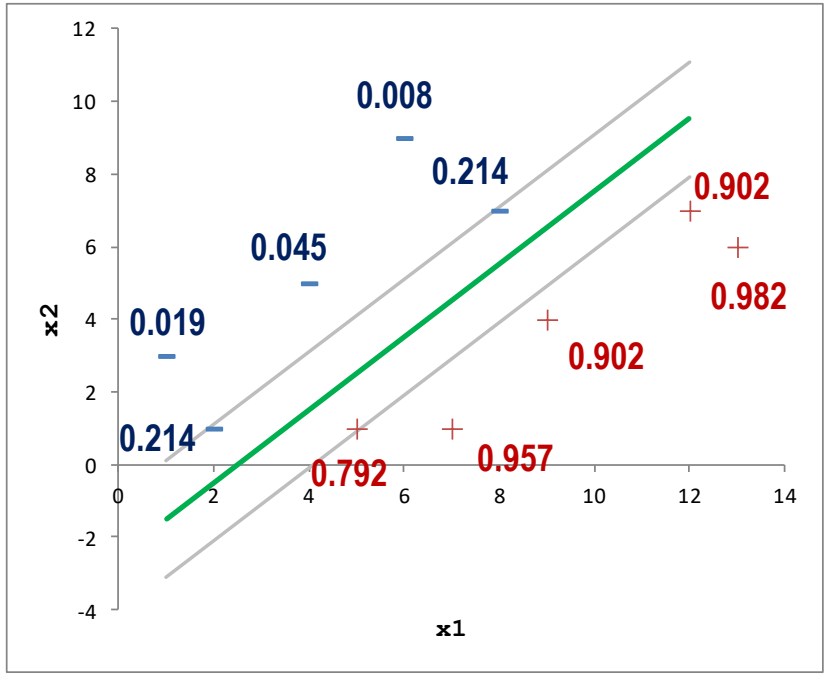
Revenons sur notre tout premier exemple (Page 9)

$$P(Y=1/x)=\frac{1}{1+\exp[-(1.32\times f(x)+0.02)]}$$

| | beta.1 | beta.2 | beta.0 | | |
|---|---|---|---|---|---|
| | 0.667 | -0.667 | -1.667 | | |
| n° | x1 | x2 | y | f(x) | P(y=1/x) |
| 1 | 1 | 3 | -1 | -3.000 | 0.019 |
| 2 | 2 | 1 | -1 | -1.000 | 0.214 |
| 3 | 4 | 5 | -1 | -2.333 | 0.045 |
| 4 | 6 | 9 | -1 | -3.667 | 0.008 |
| 5 | 8 | 7 | -1 | -1.000 | 0.214 |
| 6 | 5 | 1 | 1 | 1.000 | 0.792 |
| 7 | 7 | 1 | 1 | 2.333 | 0.957 |
| 8 | 9 | 4 | 1 | 1.667 | 0.902 |
| 9 | 12 | 7 | 1 | 1.667 | 0.902 |
| 10 | 13 | 6 | 1 | 3.000 | 0.982 |

| | |
|---|---|
| a | 1.32 |
| b | 0.02 |

Les probabilités sont cohérentes avec la position du point et son degré d'éloignement par rapport à la frontière.



Recherche des descripteurs « pertinents »

# SÉLECTION DE VARIABLES

# Méthodes externes

## Filtrage et wrapper

Techniques de sélection qui ne sont pas en relation directe avec la méthode d'apprentissage

### Méthode de filtrage

La sélection se fait en amont, avant et indépendamment de la méthode d'apprentissage utilisée par la suite. Souvent basée sur la notion de « corrélation » au sens large.

**Avantages** : Rapidité, généricité.
**Inconvénients** : Non relié aux caractéristiques de la méthode, rien de dit que les variables ainsi sélectionnées seront les meilleures.

### Méthode « wrapper »

Utilise le modèle comme une boîte noire. Recherche (ex. forward, backward) du meilleur sous-ensemble de variables optimisant un critère de performances (ex. taux d'erreur en validation croisée).

**Avantage** : relié à un critère de performance.
**Inconvénients** : Lourdeur des calculs ; danger de sur-apprentissage ; non connecté avec les caractéristiques intrinsèques de la méthode (ex. max de la marge pour les SVM).

# Méthode interne (intégrée, embedded)

## Critère de maximisation de la marge

2 axes clés : mesurer la contribution d'une variable, monter un algorithme autour de ce critère [ABE, page 192]

**Mesurer la contribution d'une variable "$x_j$" dans le modèle, sans avoir à relancer explicitement l'apprentissage sans "$x_j$"**

La variable $x_j$ est désactivée en mettant à zéro sa valeur

$$\Delta^{(j)}\|\beta\|^2 = \sum_{i,i' \in S} \alpha_i \alpha_{i'} y_i y_{i'} \left( K(x_i, x_{i'}) - K(x_i^{(j)}, x_{i'}^{(j)}) \right)$$

➔ Pour un noyau linéaire, cela équivaut à tester la nullité du coefficient $\beta_j$

**Stratégie de recherche backward du « meilleur » sous-ensemble de variables**

1. Calculer $\delta_0$, la marge initiale avec l'ensemble des variables
2. Trouver j* tel que $\Delta^{(j*)}||\beta||^2$ est minimum, la mettre de côté
3. Relancer l'apprentissage sans $x_{j*}$, calculer la nouvelle marge $\delta$
4. Si $\frac{\delta_0 - \delta}{\delta} < \varepsilon$ alors retirer xj* de la base, faire $\delta_0 = \delta$ et retour en 2. Sinon arrêt de l'algorithme.

2 informations essentielles :

- Le retrait d'une variable réduit toujours la marge. La question, est-ce que la réduction est significative ? Auquel cas il faut conserver la variable.
- $\varepsilon$ est un paramètre de l'algorithme ($\varepsilon$ élevé ➔ moins de variables)

Logiciels et packages – Paramétrage (Python, R et Tanagra)

# PRATIQUE DES SVM

# Python

## scikit-learn – SVC

```
#importation des données
import pandas
dtrain = pandas.read_table("ionosphere-train.txt",sep="\t",header=0,decimal=".")
print(dtrain.shape)
y_app = dtrain.as_matrix()[:,32]
X_app = dtrain.as_matrix()[:,0:32]
#importation de la classe de calcul
from sklearn.svm import SVC
svm = SVC() #instanciation de l'objet
#affichage des paramètres (paramètres par défaut ici c.-à-d. noyau 'rbf')
#pas de standardisation (scale) des données apparemment
print(svm)
#apprentissage – construction du modèle prédictif
svm.fit(X_app,y_app)
#importation des données test
dtest = pandas.read_table("ionosphere-test.txt",sep="\t",header=0,decimal=".")
print(dtest.shape)
y_test = dtest.as_matrix()[:,32]
X_test = dtest.as_matrix()[:,0:32]
#prédiction sur l'échantillon test
y_pred = svm.predict(X_test)
#evaluation : taux d'erreur = 0.07
from sklearn import metrics
err = 1.0 - metrics.accuracy_score(y_test,y_pred)
print(err)
```

*class* `sklearn.svm.` **SVC** (*C=1.0, kernel='rbf', degree=3, gamma='auto', coef0=0.0, shrinking=True, probability=False, tol=0.001, cache_size=200, class_weight=None, verbose=False, max_iter=-1, decision_function_shape=None, random_state=None*) [source]

C-Support Vector Classification.

The implementation is based on libsvm. The fit time complexity is more than quadratic with the number of samples which makes it hard to scale to dataset with more than a couple of 10000 samples.

The multiclass support is handled according to a one-vs-one scheme.

# Python

## scikit-learn - GridSearchCV

Scikit-learn propose un mécanisme de de recherche des paramètres optimaux en validation croisée. L'échantillon test n'est pas mis à contribution, il garde son statut d'arbitre impartial.

```
#classe grille de recherche
from sklearn.grid_search import GridSearchCV

#paramètres à tester – jouer sur les noyaux et le 'cost parameter'
parametres = {"kernel":['linear','poly','rbf','sigmoid'],"C":[0.1,0.5,1.0,2.0,10.0]}

#classifieur à utiliser
svmc = SVC()

#instanciation de la recherche
grille = GridSearchCV(estimator=svmc,param_grid=parametres,scoring="accuracy")

#lancer l'exploration
resultats = grille.fit(X_app,y_app)

#meilleur paramétrage : {'kernel' : 'rbf', 'C' : 10.0}
print(resultats.best_params_)

#prédiction avec le ''meilleur'' modèle identifié
ypredc = resultats.predict(X_test)

#performances du ''meilleur'' modèle – taux d'erreur = 0.045 (!)
err_best = 1.0 - metrics.accuracy_score(y_test,ypredc)
print(err_best)
```

# R

## e1071 – svm() de LIBSVM

**Description**

svm is used to train a support vector machine. It can be used to carry out general regression and classification (of nu and epsilon-type), as well as density-estimation. A formula interface is provided.

**Usage**

```
## S3 method for class 'formula'
svm(formula, data = NULL, ..., subset, na.action =
na.omit, scale = TRUE)
## Default S3 method:
svm(x, y = NULL, scale = TRUE, type = NULL, kernel =
"radial", degree = 3, gamma = if (is.vector(x)) 1 else 1 / ncol(x),
coef0 = 0, cost = 1, nu = 0.5,
class.weights = NULL, cachesize = 40, tolerance = 0.001, epsilon = 0.1,
shrinking = TRUE, cross = 0, probability = FALSE, fitted = TRUE,
..., subset, na.action = na.omit)
```

```
#importer les données
dtrain <- read.table("ionosphere-train.txt",header=T,sep="\t")
dtest <- read.table("ionosphere-test.txt",header=T,sep="\t")

#package "e1071"
library(e1071)

#apprentissage
#standardisation automatique des données, cf. paramètre scale
m1 <- svm(class ~ ., data = dtrain)

#affichage
print(m1)

#prediction
y1 <- predict(m1,newdata=dtest)

#matrice de confusion - taux d'erreur = 0.04
mc1 <- table(dtest$class,y1)
err1 <- 1 - sum(diag(mc1))/sum(mc1)
print(err1)
```

```
Call:
svm(formula = class ~ ., data = dtrain)


Parameters:
   SVM-Type:  C-classification
 SVM-Kernel:  radial
       cost:  1
      gamma:  0.03125

Number of Support Vectors:  77
```

Par rapport à scikit-learn, la standardisation des données (conseillée dans la plupart des cas) joue pleinement

# R

## e1071 – tune()

« e1071 » propose également (comme scikit-learn) un outil pour la recherche automatique des meilleurs paramètres

```
#grille de recherche des meilleurs paramètres en validation croisée « cross »
set.seed(1000) #pour obtenir à chaque lancement le même résultat
obj <- tune(svm, class ~ ., data = dtrain, ranges =
          list(kernel=c('linear','polynomial','radial', 'sigmoid'), cost =
          c(0.1,0.5,1.0,2.0,10)), tunecontrol = tune.control(sampling="cross"))

#affichage
print(obj)

#modélisation avec les nouveaux paramètres
m2 <- svm(class ~ ., data = dtrain, kernel='radial', cost = 2)

#affichage
print(m2)

#prédiction
y2 <- predict(m2,newdata=dtest)

#matrice de confusion - taux d'erreur = 0.035
mc2 <- table(dtest$class,y2)
err2 <- 1 - sum(diag(mc2))/sum(mc2)
print(err2)
```

```
Parameter tuning of 'svm':

- sampling method: 10-fold cross validation

- best parameters:
 kernel cost
 radial    2

- best performance: 0.06666667
```

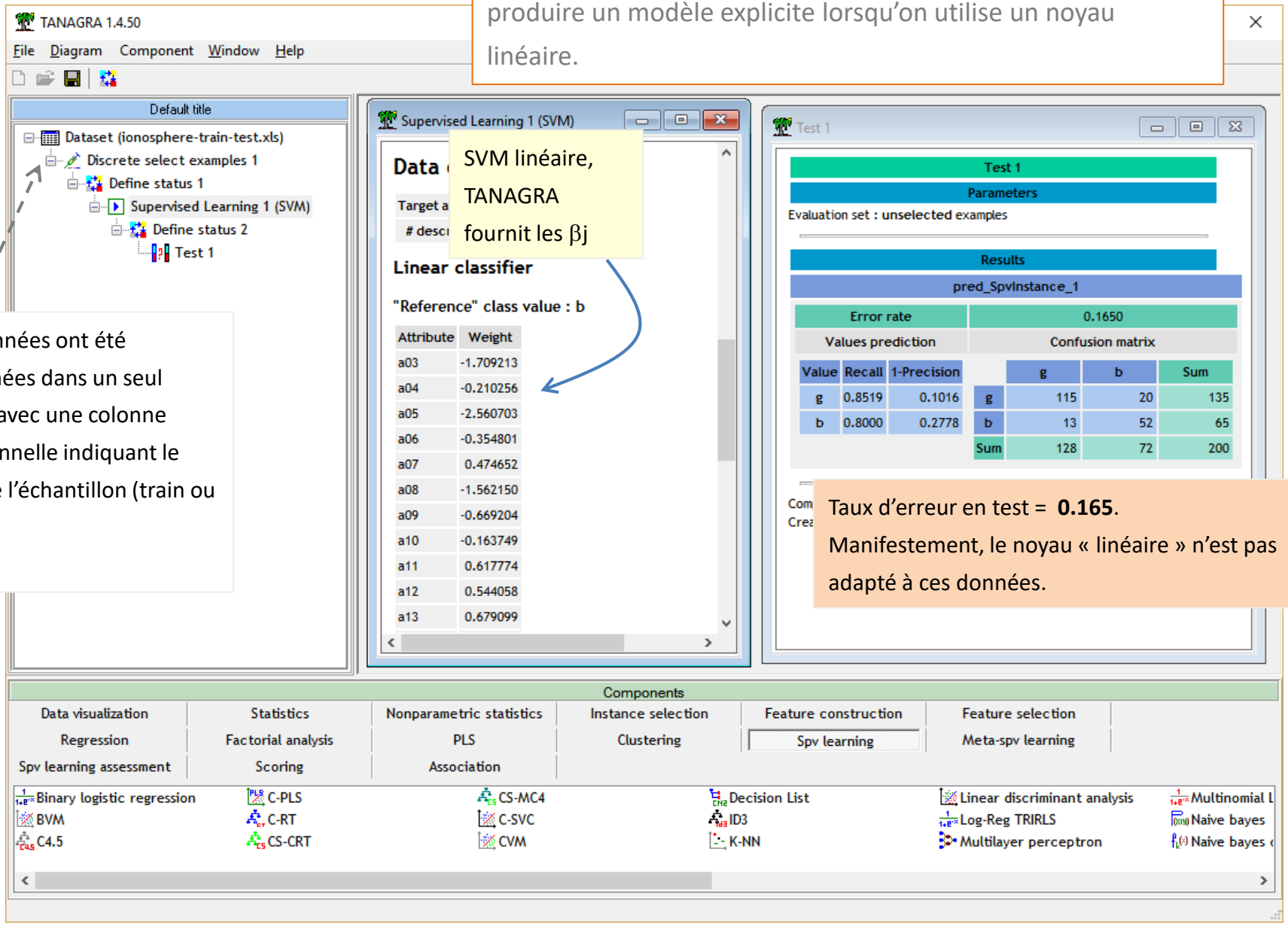
```
Parameters:
   SVM-Type:  C-classification
 SVM-Kernel:  radial
       cost:  2
      gamma:  0.03125

Number of Support Vectors:  62
```

# Tanagra

## SVM

SVM est une implémentation ad hoc. Sa spécificité est de produire un modèle explicite lorsqu'on utilise un noyau linéaire.




SVM linéaire, TANAGRA fournit les $\beta j$

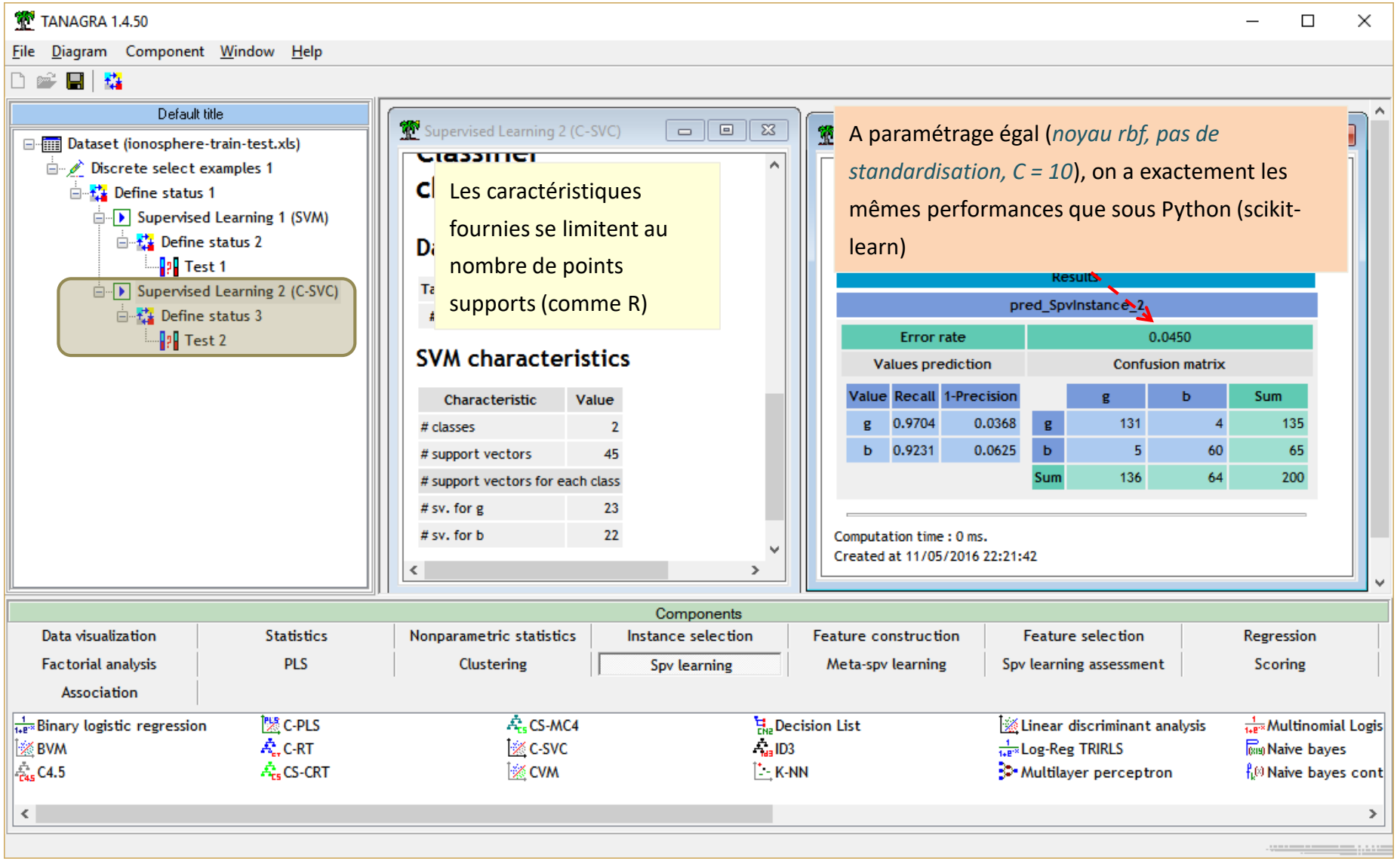
Les données ont été fusionnées dans un seul fichier avec une colonne additionnelle indiquant le type de l'échantillon (train ou test)

Taux d'erreur en test = **0.165**.

Manifestement, le noyau « linéaire » n'est pas adapté à ces données.

# Tanagra
## C-SVC

C-SVC est importée de la (fameuse) librairie LIBSVM



Avantages et inconvénients des SVM

# BILAN

# SVM - Avantages et inconvénients

Avantages

- Capacité à traiter de grandes dimensionnalités (#variables élevé)
- Robuste même quand le rapport ''#observations / #variables'' est inversé
- Traitement des problèmes non linéaires avec le choix des noyaux
- Non paramétrique
- Robuste par rapport aux points aberrants (contrôlé avec le paramètre C)
- #points supports donne une bonne indication de la complexité du problème traité
- Souvent performant dans les comparaisons avec les autres approches
- Paramétrage permet de la souplesse (ex. résistance au sur-apprentissage avec C)

Inconvénients

- Difficulté à identifier les bonnes valeurs des paramètres (et sensibilité aux paramètres)
- Difficulté à traiter les grandes bases avec #observations très élevé (capacité mémoire avec matrice de Gram – si implémentation naïve, temps de calcul)
- Problème lorsque les classes sont bruitées (multiplication des points supports)
- Pas de modèle explicite pour les noyaux non linéaires (utilisation des points supports)
- Difficulté d'interprétations (ex. pertinence des variables)
- Le traitement des problèmes multi-classes reste une question ouverte

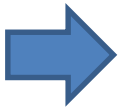
# SVM - Extensions

Popularisé dans le classement, les SVM peuvent s'appliquer à d'autres types de problèmes :

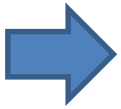
• l'apprentissage semi-supervisé (seule une partie des données est étiquetée)

• la régression (prédiction avec variable cible quantitative)

• la classification automatique (clustering)



Des fonctions « noyau » spécifiques à des domaines sont développées (text mining, image mining, reconnaissance de la parole,…). Il faut qu'elles soient adaptées à la notion de similarité entre observations dans le domaine.



L'approche SVM est très proche de la recherche, fertile en nouveautés. Toutes ne sont pas toujours disponibles dans les outils qui nous sont accessibles.