Travaux dirigés nº 3 : Séparateurs linéaires

Stephan Clémençon <stephan.clemencon@telecom-paris.fr>

Ekhine Irurozki@telecom-paris.fr>

EXERCICE 1. On se place dans le cadre de la classification binaire : soient un descripteur aléatoire X à valeurs dans \mathbb{R} muni de sa tribu des Boréliens, et un label aléatoire Y valant 0 ou 1.

Soit $\mathbb{G}:=\left\{g:\mathbb{R}\to\{0,1\}\right\}$ l'ensemble des classifieurs adaptés à ce contexte. L'erreur de classification est définie comme l'application $\mathcal{L}:g\in\mathbb{G}\mapsto\mathbb{P}\left(\mathbf{Y}\neq g(\mathbf{X})\right)\in[0,1]$ et on note $\mathcal{L}^*:=\inf_{g\in\mathbb{G}}\mathcal{L}(g)$.

Dans cet exercice, on s'intéresse à la famille $\mathcal G$ des classifieurs linéaires sur $\mathbb R$ de la forme :

$$g_{(x_0, y_0)}: x \in \mathbb{R} \mapsto \begin{cases} y_0 & \text{si } x \le x_0, \\ 1 - y_0 & \text{sinon,} \end{cases}$$

avec $(x_0, y_0) \in \mathbb{R} \times \{0, 1\}$. L'erreur de classification d'un tel $g_{(x_0, y_0)}$ est notée plus simplement $L(x_0, y_0)$ et on pose $L_0 := \inf_{(x_0, y_0)} L(x_0, y_0)$.

- 1) Exprimer l'erreur de classification d'un élément quelconque de \mathcal{G} en fonction des lois conditionnelles de X sachant Y. On utilisera les notations $F_y(x) := \mathbb{P}\{X \le x \mid Y = y\}$ pour $(x, y) \in \mathbb{R} \times \{0, 1\}$ et $p := \mathbb{P}(Y = 1)$.
- 2) En considérant les points $(x_0, y_0) = (-\infty, 0)$ et $(x_0, y_0) = (-\infty, 1)$, montrer que $L_0 \le \frac{1}{2}$.
- 3) Montrer que $L_0 = \frac{1}{2} \sup_x \left| p F_1(x) (1-p) F_0(x) p + \frac{1}{2} \right|$. Simplifier l'expression quand $p = \frac{1}{2}$. Indication. Pour tout $(a, b) \in \mathbb{R}^2$ on peut écrire $\min(a, b) = \frac{a + b |a b|}{2}$.
- 4) Montrer que $L_0 = \frac{1}{2}$ si et seulement si $L^* = \frac{1}{2}$.
- 5) Montrer l'inégalité de Chebychev-Cantelli : pour toute variable aléatoire réelle Z et tout $t \ge 0$,

$$\mathbb{P}\left(Z - \mathbb{E}\left(Z\right) \ge t\right) \le \frac{\mathbb{V}\left(Z\right)}{\mathbb{V}\left(Z\right) + t^{2}}.$$

6) On note respectivement m_y et σ_y^2 l'espérance et la variance de la loi conditionnelle de X sachant Y = y, avec $y \in \{0, 1\}$. Montrer que :

$$L_0 \le \left(1 + \frac{(m_0 - m_1)^2}{(\sigma_0 + \sigma_1)^2}\right)^{-1} .$$

Indication. Utiliser l'inégalité démontrée à la question précédente.

7) Discuter de la performance du minimiseur empirique pris dans la classe \mathcal{G} et des limites des classifieurs linéaires.

Solution:

1) Soit $(x, y) \in \mathbb{R} \times \{0, 1\}$, alors,

$$\begin{split} \mathbf{L}(x,y) &= \mathbb{P}(\mathbf{Y} \neq g_{(x,y)}(\mathbf{X})) = \mathbb{P}(\mathbf{Y} = y, \mathbf{X} > x) + \mathbb{P}(\mathbf{Y} = 1 - y, \mathbf{X} \leq x) \\ &= \mathbb{P}(\mathbf{X} > x \mid \mathbf{Y} = y) \mathbb{P}(\mathbf{Y} = y) + \mathbb{P}(\mathbf{X} \leq x \mid \mathbf{Y} = 1 - y) \mathbb{P}(\mathbf{Y} = 1 - y) \\ &= y \big(p(1 - \mathbf{F}_1(x)) + (1 - p)\mathbf{F}_0(x) \big) + (1 - y) \big((1 - p)(1 - \mathbf{F}_0(x)) + p\mathbf{F}_1(x) \big) \\ &= (1 - y)(\mathbf{F}_1(x)p + 1 - p - \mathbf{F}_0(x) + \mathbf{F}_0(x)p) + y(\mathbf{F}_0(x) - \mathbf{F}_0(x)p + p - \mathbf{F}_1(x)p) \\ &= (1 - y)(1 - \phi(x)) + y\phi(x). \end{split}$$

2) Soit $y \in \{0, 1\}$. D'après la question précédente, puisque F_0 et F_1 sont des fonctions de répartition, on a

$$\lim_{x \to -\infty} L(x, y) = \begin{cases} p, & \text{si } y = 1, \\ 1 - p, & \text{si } y = 0. \end{cases}$$

On en déduit que $L_0 \le p \land (1-p) \le \frac{1}{2}$.

3) Posons $\phi: x \in \mathbb{R} \mapsto (1-p)F_0(x) - pF_1(x) \in [0,1]$ et prenons $(x,y) \in \mathbb{R} \times \{0,1\}$. D'après la première question, on a

$$L(x, y) = \begin{cases} \phi(x), & \text{si } y = 1, \\ (1 - \phi(x)), & \text{si } y = 0. \end{cases}$$

Ainsi,

$$\begin{split} L_0 &= \inf_{x \in \mathbb{R}} \min((1 - \varphi(x), \varphi(x)) = \inf \frac{1 - \varphi(x) + \varphi(x) - |1 - \varphi(x) - \varphi(x)|}{2} \\ &= \inf_{x \in \mathbb{R}} \left(\frac{1}{2} - \left| \frac{1}{2} - \varphi(x) \right| \right) = \frac{1}{2} - \sup_{x \in \mathbb{R}} \left(\left| \frac{1}{2} - \varphi(x) \right| \right) \\ &= \frac{1}{2} - \sup_{x \in \mathbb{R}} \left(\left| \frac{1}{2} - (F_0(x) - F_0(x)p + p - F_1(x)) \right| \right) \\ &= \frac{1}{2} - \sup_{x \in \mathbb{R}} \left| p F_1(x) - (1 - p) F_0(x) - p + \frac{1}{2} \right| \end{split}$$

Lorsque $p = \frac{1}{2}$, cella donne

$$L_0 = \frac{1}{2} \left(1 - \sup_{x \in \mathbb{R}} |F_0(x) - F_1(x)| \right).$$

- 4) Supposons que $L^* = \frac{1}{2}$. Par définition de L^* , on a $L_0 \ge L^* = \frac{1}{2}$. Puisque L_0 est aussi majorée par $\frac{1}{2}$, d'après la question 2, on a donc bien $L_0 = \frac{1}{2}$.
 - Réciproquement, supposons que L₀ = ½.
 Puisque L₀ ≤ p ∧ (1 − p) ≤ ½ (cf. question 2), on a alors p = ½.

En utilisant le dernier résultat de la question 3, on obtient ensuite $\sup_{x \in \mathbb{R}} |F_0(x) - F_1(x)| = 0$, ce qui signifie que $F_0 = F_1$ (i.e. $X \mid Y = 0$ a la même loi que $X \mid Y = 1$).

On en déduit que pour tout $g \in \mathbb{G}$,

$$\begin{split} L(g) &= \mathbb{P}(Y \neq g(X)) = \mathbb{P}(g(X) = 0 \mid Y = 1) \mathbb{P}(Y = 1) + \mathbb{P}(g(X) = 1 \mid Y = 0) \mathbb{P}(Y = 0) \\ &= \frac{1}{2} \left(\mathbb{P}(g(X) = 0 \mid Y = 1) + \mathbb{P}(g(X) = 1 \mid Y = 1) \right) = \frac{1}{2}, \text{ (car } F_0 = F_1), \end{split}$$

d'où L* = $\frac{1}{2}$.

5) Soit Z une variable aléatoire de carré intégrable et $t \geq 0$. Posons $Z^* := Z - \mathbb{E}(Z)$. On remarque que

$$0 \le t = \mathbb{E}(t - Z^*) \le \mathbb{E}((t - Z^*) \mathbb{1}_{\{Z^* \le t\}}),$$

ďoù

$$t^2 \le \mathbb{E}((t - Z^*)^2)\mathbb{E}(\mathbb{1}_{\{Z^* < t\}})$$
 (Cauchy-Schwarz)
= $\mathbb{E}(t^2 + (Z^*)^2 - 2tZ^*)\mathbb{P}(Z^* < t)$

$$= (\mathbb{V}(Z^*) + t^2)\mathbb{P}(Z^* < t)$$
$$= (\mathbb{V}(Z) + t^2)\mathbb{P}(Z - \mathbb{E}(Z) < t).$$

Par conséquent,

$$\begin{split} \mathbb{P}(Z - \mathbb{E}(Z) < t) &\geq \frac{t^2}{\mathbb{V}(Z) + t^2} \\ &\iff 1 - \mathbb{P}(Z - \mathbb{E}(Z) \geq t) \geq \frac{t^2}{\mathbb{V}(Z) + t^2} \\ &\iff \mathbb{P}(Z - \mathbb{E}(Z) \geq t) \leq 1 - \frac{t^2}{\mathbb{V}(Z) + t^2} = \frac{\mathbb{V}(Z)}{\mathbb{V}(Z) + t^2}. \end{split}$$

6) Commençons par remarquer que si $m_0 = m_1$, alors l'inégalité à démontrer est $L_0 \le 1$, ce qui est toujours vrai.

Supposons maintenant que $m_0 < m_1$. On peut alors choisir deux réels $\Delta_0, \Delta_1 > 0$ tels que $m_1 - m_0 = \Delta_0 + \Delta_1$ et considérer le classifieur $g_{(\Delta_0 + m_0, 0)}$ (cf. Figure 1).

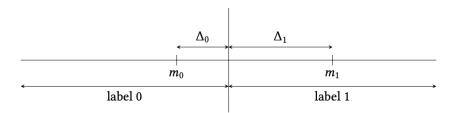


FIGURE 1 – Sketch of the classifier $g(\Delta_0 + m_0, 0)$.

D'après la question 1, en remarquant que $\Delta_0 + m_0 = m_1 - \Delta_1$, on obtient

$$\begin{split} \mathsf{L}(\Delta_0 + m_0, 0) &= p \mathsf{F}_1(\Delta_0 + m_0) + (1 - p)(1 - \mathsf{F}_0(\Delta_0 + m_0)) \\ &= p \mathbb{P}(\mathsf{X} \leq \Delta_0 + m_0 \mid \mathsf{Y} = 1) + (1 - p) \mathbb{P}(\mathsf{X} > \Delta_0 + m_0 \mid \mathsf{Y} = 0) \\ &= p \mathbb{P}(\mathsf{X} \leq m_1 - \Delta_1 \mid \mathsf{Y} = 1) + (1 - p) \mathbb{P}(\mathsf{X} > \Delta_0 + m_0 \mid \mathsf{Y} = 0) \\ &= p \mathbb{P}(-\mathsf{X} - (-m_1) \geq \Delta_1 \mid \mathsf{Y} = 1) + (1 - p) \mathbb{P}(\mathsf{X} - m_0 > \Delta_0 \mid \mathsf{Y} = 0) \\ &= p \frac{\sigma_1^2}{\sigma_1^2 + \Delta_1^2} + (1 - p) \frac{\sigma_0^2}{\sigma_0^2 + \Delta_0^2} \\ &= \frac{p}{1 + \frac{\Delta_1^2}{\sigma_1^2}} + \frac{1 - p}{1 + \frac{\Delta_0^2}{\sigma_2^2}}. \end{split}$$

En prenant
$$\Delta_0 = \frac{m_1 - m_0}{\sigma_1 + \sigma_0} \sigma_0$$
 et $\Delta_1 = \frac{\sigma_1}{\sigma_0} \Delta_0$, on trouve

$$L(\Delta_0 + m_0, 0) \le \left(1 + \frac{(m_0 - m_1)^2}{(\sigma_0 + \sigma_1)^2}\right)^{-1}$$
.

Puisque par définition $L_0 \le L(\Delta_0 + m_0, 0)$, on retombe bien sur l'inégalité recherchée.

Remarque. Le cas $m_1 < m_0$ peut être traité de la même manière en inversant tous les indices 0 et 1 des objets apparaissant dans la Figure 1.

Interprétation. Ce résultat nous dit que plus l'écart entre m_0 et m_1 est grand et plus σ_0^2 et σ_1^2 sont faibles, plus on sera à même de garantir un faible risque de classification sur G. Exprimé de manière plus grossière, mieux les classes sont séparées, plus on peut garantir une bonne classification en utilisant un simple séparateur linéaire (ce qui semble tout à fait logique). Une illustration est proposée à la Figure 2.

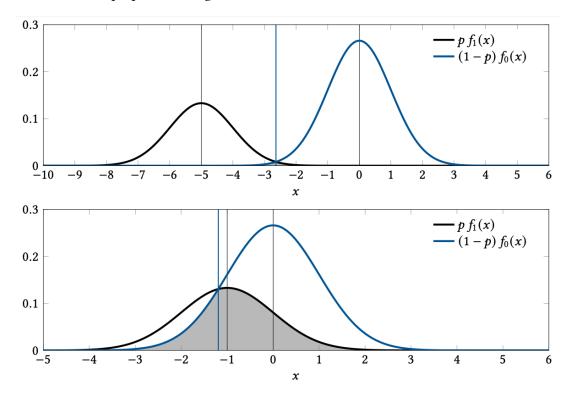


FIGURE 2 – Illustration du résultat de la question $6: p = \frac{1}{3}$, $X \mid Y = 0$ et $X \mid Y = 1$ suivent toutes deux des gaussiennes réduites, d'espérances $m_0 = 0$ et $m_1 = -5$ (haut) ou $m_1 = -1$ (bas), et de densités respectives f_0 et f_1 . Le classifieur optimal donne le label 0 à droite du séparateur (trait vertical bleu) et son risque L_0 est indiqué par la zone grisée.

7) On s'intéresse maintenant au risque empirique

$$L_n: g \in \mathbb{G} \mapsto \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n \mathbb{1}\{Y_i \neq g(X_i)\},$$

minimisé sur \mathcal{G} par $\hat{g}_n = g(\hat{x}_n, \hat{y}_n)$. Par application directe des résultats vus en cours, nous avons d'une part

$$L(\hat{g}_n) \le 2 \sup_{(x,y) \in \mathbb{R} \times \{0,1\}} |L(x,y) - L_n(x,y)| + L_0 \quad \text{p.s.}$$

puis d'autre part que pour tout $\epsilon > 0$ et tout $y \in \{0, 1\}$,

$$\mathbb{P}\left(\sup_{x\in\mathbb{R}}|\mathrm{L}(x,y)-\mathrm{L}_n(x,y)|\geq\epsilon\right)\leq 2e^{-2n\epsilon^2}.$$

On déduit de ces deux inégalités que pour tout $\epsilon > 0$,

$$\mathbb{P}(L(\hat{g}_n) - L_0 \ge \epsilon) \le \mathbb{P}\left(\sup_{(x,y)\in\mathbb{R}\times\{0,1\}} |L(x,y) - L_n(x,y)| \ge \frac{\epsilon}{2}\right)$$

$$\le \mathbb{P}\left(\sup_{x\in\mathbb{R}} |L(x,0) - L_n(x,0)| \ge \frac{\epsilon}{2}\right) + \mathbb{P}\left(\sup_{x\in\mathbb{R}} |L(x,1) - L_n(x,1)| \ge \frac{\epsilon}{2}\right)$$

$$\le 4\exp\left(-n\frac{\epsilon^2}{2}\right).$$

et ce quelle que soit la loi du vecteur (X, Y). Évidemment, contrôler ce risque relatif n'a de sens que si le risque théorique L_0 est lui-même petit. Les limites des séparateurs linéaires (ici quand X est à valeurs dans \mathbb{R}) sont aisément illustrées par l'exemple donné en Figure 3. Dans ce type de configuration, aucun séparateur linéaire ne sera à même de faire mieux qu'une labellisation purement aléatoire.

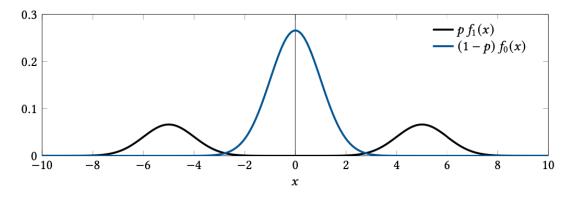


FIGURE 3 – Exemple où un séparateur linéaire n'est pas approprié : $p = \frac{1}{3}$, X|Y = 0 suit une loi Normale centrée réduite de densité f_0 , X|Y = 1 suit un mélange équilibré de deux gaussiennes réduites, la première centrée en -5 et la seconde en 5, de densité f_1 , de telle manière que $m_0 = m_1 = 0$.