Techniques avancées pour l'apprentissage — cours 2

CES Data Scientist, Télécom ParisTech

Aurélien Bellet

Inria Lille

March 12, 2016

Menu d'aujourd'hui

1. Le perceptron revisité
2. Support Vector Machines linéaires
3. Cas non linéaire et noyaux
4. Support Vector Regression

LE PERCEPTRON REVISITÉ

APPRENTISSAGE SUPERVISÉ : CADRE PROBABILISTE ET STATISTIQUE

- X : variable explicative, vecteur aléatoire dans $\mathcal{X} = \mathbb{R}^p$
- Y : variable à prédire, aléatoire dans $\mathcal{Y} = \{1, \ldots, C\}$ (classification) ou $\mathcal{Y} = \mathbb{R}$ (régression)
- P : loi de probabilité jointe de (X, Y), fixée mais **inconnue**
- $\mathcal{S} = \{(x_i, y_i) \in \mathcal{X} \times \mathcal{Y}\}_{i=1}^n$: échantillon i.i.d. tiré selon la loi P
- $\mathcal{H}$: collection de classifieurs / modèles, $h \in \mathcal{H}$
- L : perte mesurant les erreurs d'un classifieur / modèle
  - Exemple (classification) : $L(y, h(x)) = \begin{cases} 1 & \text{si } h(x) \neq y \\ 0 & \text{sinon} \end{cases}$
  - Exemple (régression) : $L(y, h(x)) = (y - h(x))^2$
- **Objectif** : déterminer à partir de $\mathcal{S}$ la fonction $h \in \mathcal{H}$ qui minimise $R(h) = \mathbb{E}_{(X,Y)\sim P}[L(Y, h(X)]$

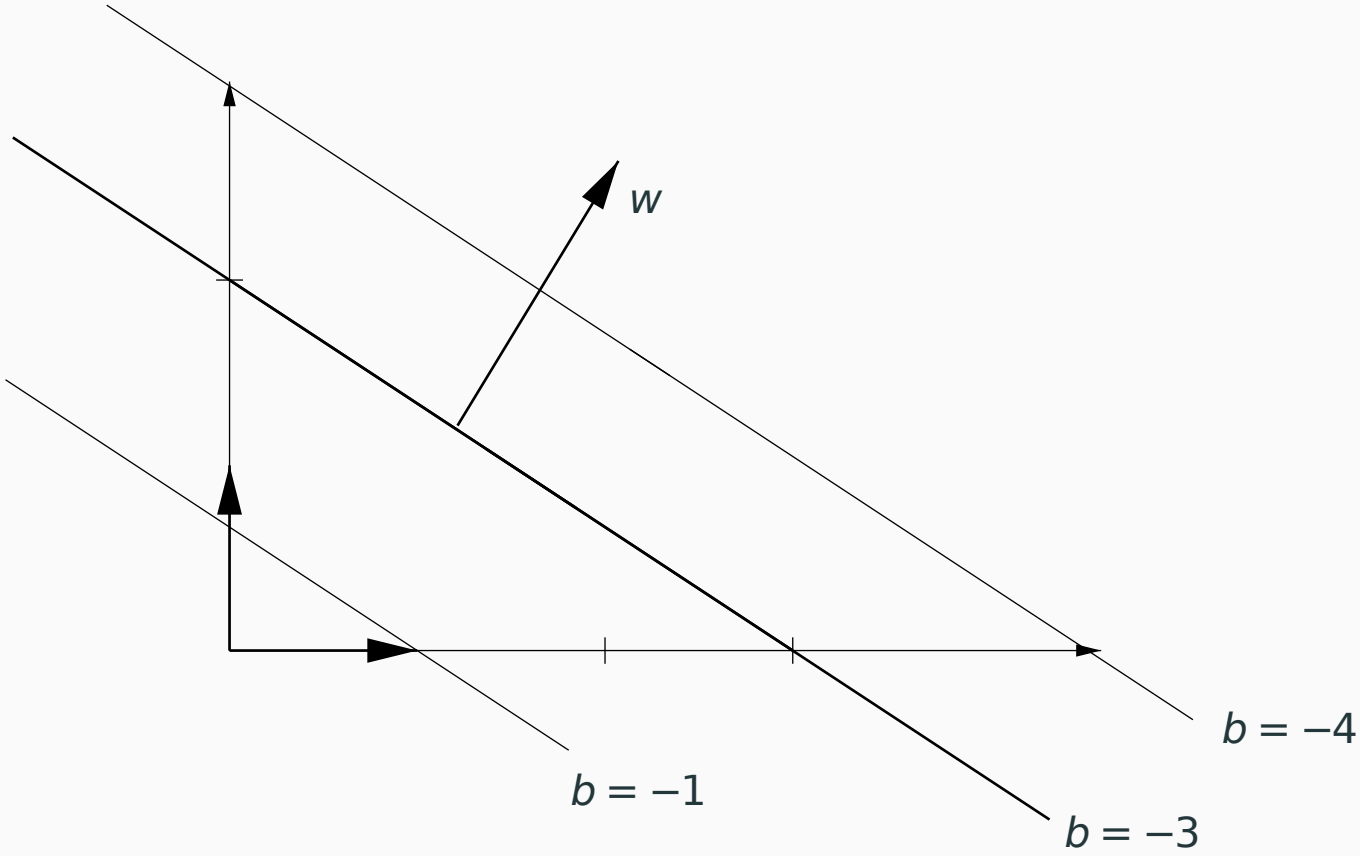
CLASSIFIEURS LINÉAIRES

- Classification binaire : $\mathcal{Y} = \{-1, 1\}$
- On choisit $\mathcal{H}$ comme étant la classe des séparateurs linéaires dans $\mathcal{X} = \mathbb{R}^p$
- Un séparateur linéaire $h \in \mathcal{H}$ est défini par un vecteur de poids $w \in \mathbb{R}^p$ et un biais $b \in \mathbb{R}$:

$$\begin{aligned} h(x) &= \text{sign}(w^T x + b) \\ &= \text{sign}\left(\sum_{i=1}^{p} w^i x^i + b\right) \end{aligned}$$

CLASSIFIEURS LINÉAIRES

- $h \in \mathcal{H}$ définit un hyperplan d'équation $w^T x + b = 0$ séparant $\mathbb{R}^p$ en deux régions
- Exemple avec $w = [1, 3/2]^T$ et différentes valeurs de b :



PERCEPTRON

- On a $p + 1$ paramètres à apprendre (w et b)
- Un algorithme classique : le perceptron de Rosenblatt

Algorithme du perceptron

entrée : Ensemble d'apprentissage $\mathcal{S}$
Initialiser $w = [0, \ldots, 0], b = 0, R = \max_{1 \leq i \leq n} \|x_i\|_2$
tant que il y a au moins une erreur **faire**
  pour $i = 1, 2, \ldots, n$ **faire**
    si $y_i(w^T x_i + b) \leq 0$ **alors**
      $w = w + y_i x_i$
      $b = b + y_i R^2$
    fin si
  fin pour
fin tant que
retourner (w, b)

- L'algorithme s'arrête si $\mathcal{S}$ est linéairement séparable

NOTION DE MARGE

- Marge de l'observation (x_i, y_i) par rapport à un séparateur linéaire

$$\gamma_i = y_i(w^T x_i + b)$$

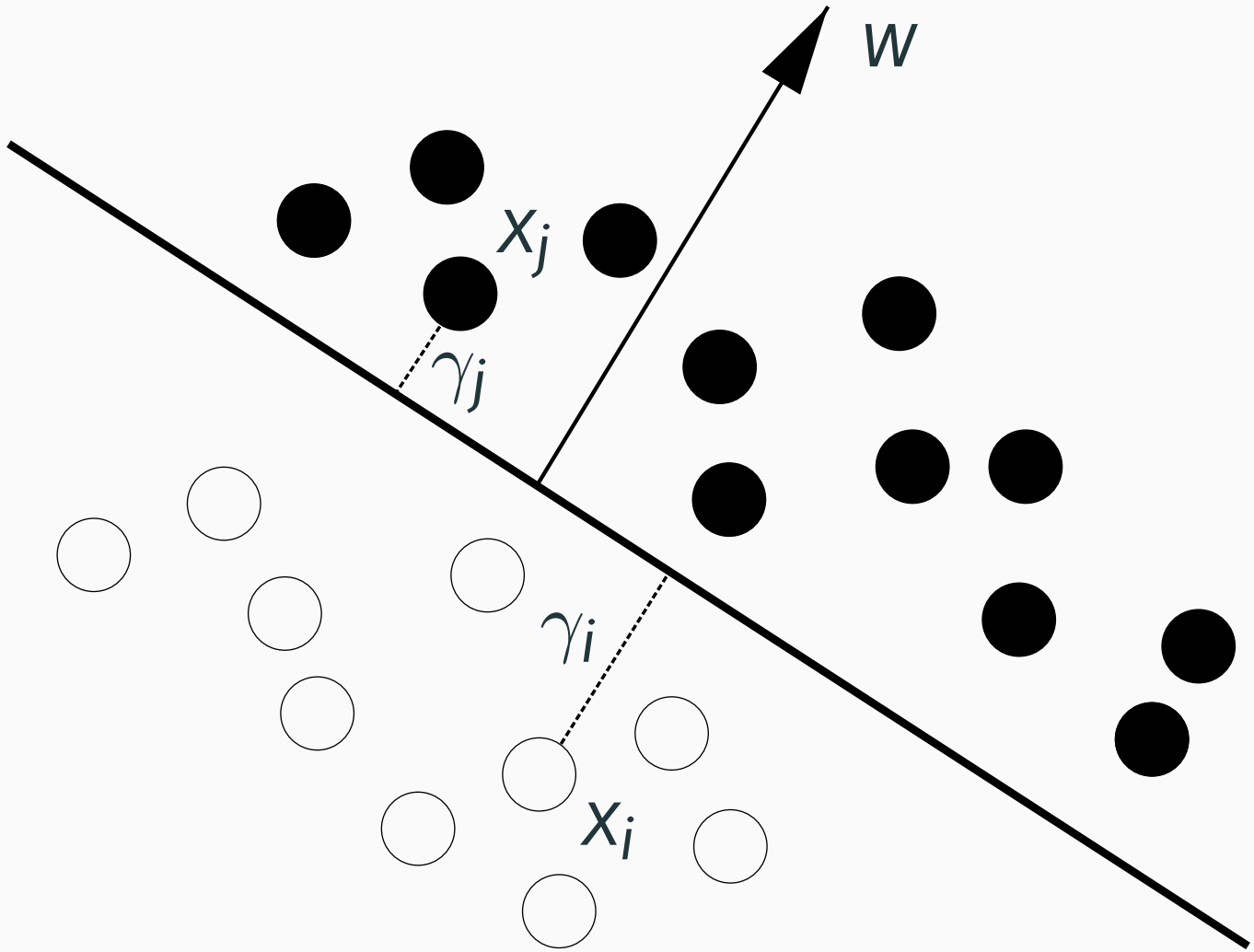
- Si $\gamma_i > 0$, (x_i, y_i) est bien classifié
- Marge du séparateur par rapport à un ensemble $\mathcal{S}$

$$\gamma = \min_{1 \leq i \leq n} \gamma_i$$

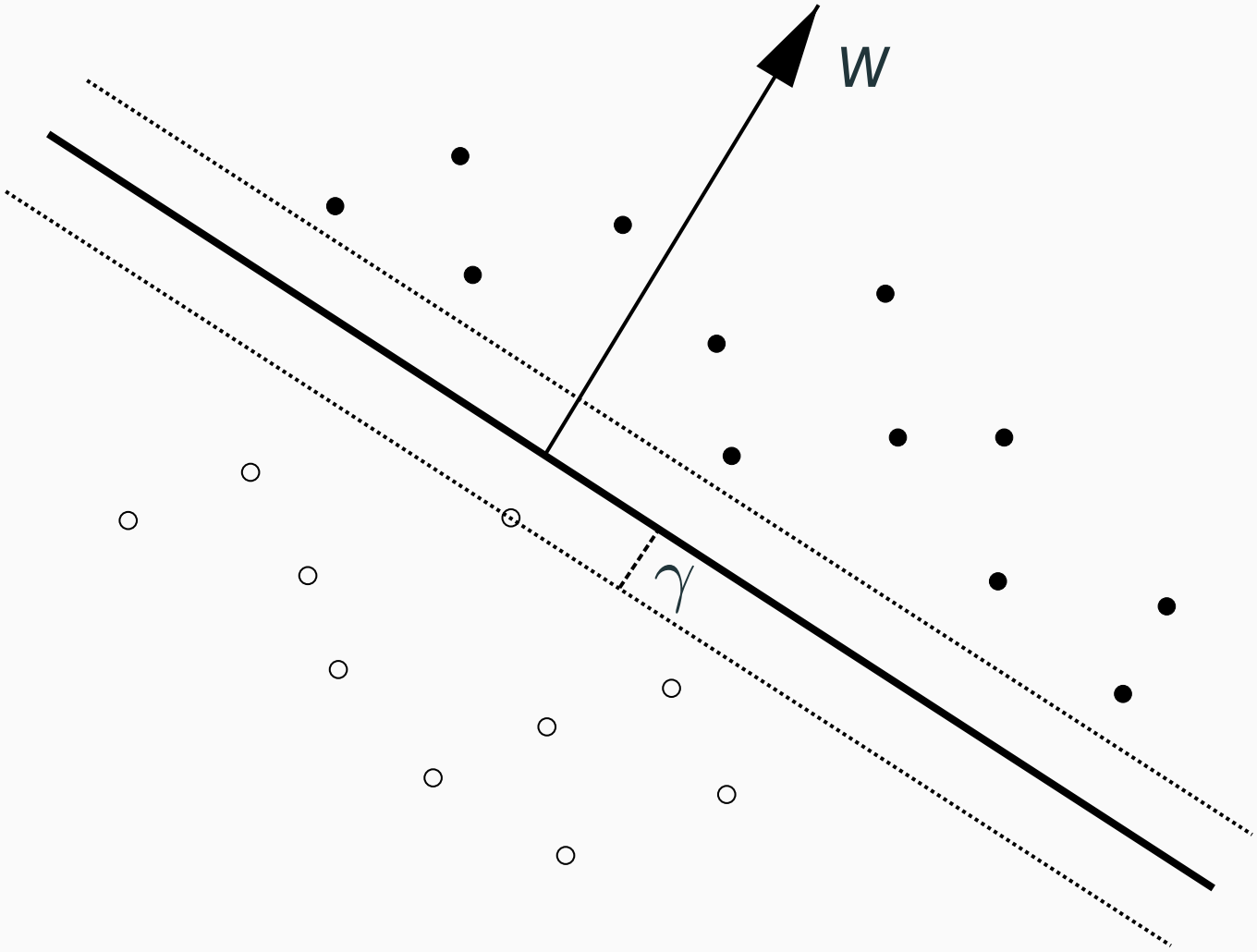
- Les marges correspondent aux marges géométriques (distance Euclidienne entre les observations et le séparateur) quand on considère le séparateur normalisé

$$w = \frac{1}{\|w\|_2} w, \quad b = \frac{1}{\|w\|_2} b$$

NOTION DE MARGE



NOTION DE MARGE



Convergence de l'algorithme du perceptron

Soit $R = \max_{1 \leq i \leq n} \|x_i\|_2$. S'il existe un hyperplan (w, b) tel que

$$\|w\| = 1,$$
$$y_i(w^T x_i + b) \geq \gamma \quad \forall i \in \{1, \ldots, n\},$$

alors l'algorithme du perceptron fait au plus $(2R/\gamma)^2$ erreurs.

FORME DUALE DU PERCEPTRON

- L'algorithme du perceptron forme w en ajoutant (resp. retirant) itérativement du vecteur initial les observations positives (resp. négatives) mal classées
- On a ainsi une représentation dans un autre espace (dit dual) du classifieur appris

$$h(x) = \text{sign}\left(\underbrace{\sum_{i=1}^{n} \alpha_i y_i x_i^T}_{w} x + b\right)$$

- α_i est positif et proportionnel au nombre de fois où x_i a été mal classifié $\rightarrow$ les exemples "difficiles" ont un α_i élevé

FORME DUALE DU PERCEPTRON

- Algorithme équivalent apprenant α directement

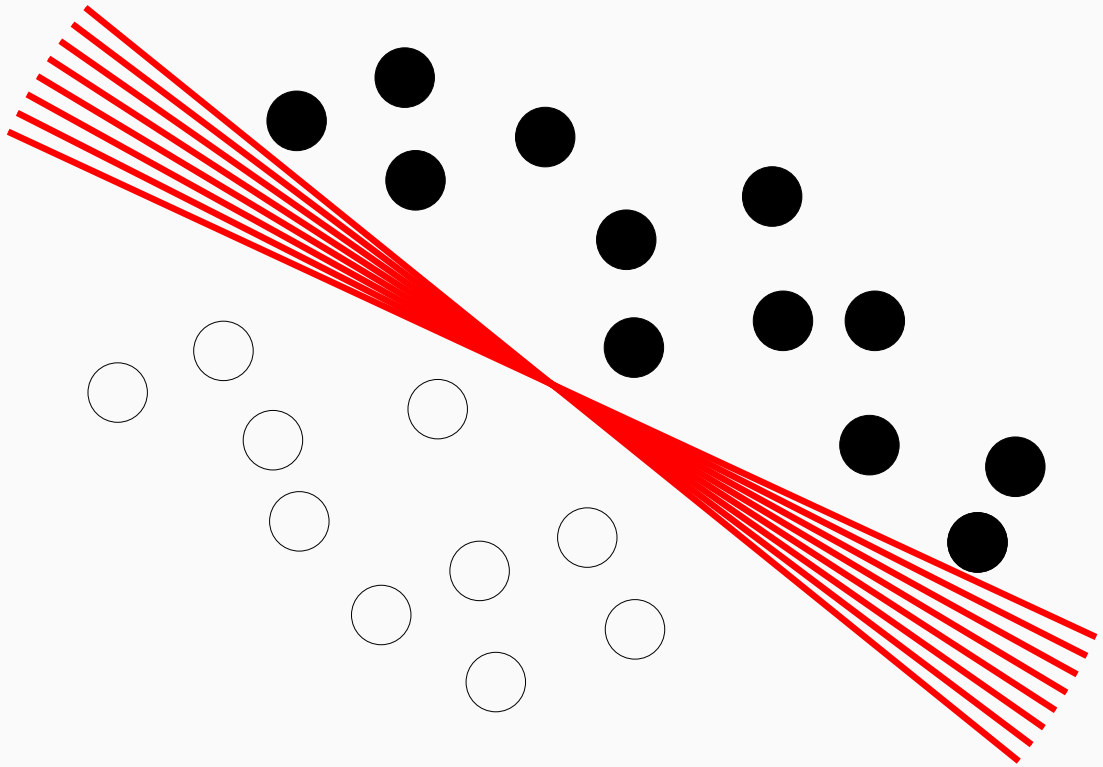
Algorithme dual du perceptron

entrée : Ensemble d'apprentissage $\mathcal{S}$
Initialiser $\alpha = [0, \ldots, 0], b = 0, R = \max_{1 \leq i \leq n} \|x_i\|_2$
tant que il y a au moins une erreur **faire**
  pour $i = 1, 2, \ldots, n$ **faire**
    si $y_i(\sum_{j=1}^{n} \alpha_i y_i x_i^T x_j + b) \leq 0$ **alors**
      $\alpha_i = \alpha_i + 1$
      $b = b + y_i R^2$
    fin si
  fin pour
fin tant que
retourner (w, b)

SVM LINÉAIRES

CHOIX DU SÉPARATEUR LINÉAIRE

- Pour l'instant, supposons que $\mathcal{S}$ est linéairement séparable
- Quel hyperplan séparateur choisir ?



MAXIMISATION DE LA MARGE

- Principe : fixer la marge fonctionnelle à 1 et maximiser la marge géométrique
- Une marge fonctionnelle à 1 pour un exemple positif x^+ et un exemple négatif x^- signifie

$$\begin{cases} w^T x^+ + b &= 1 \\ -(w^T x^- + b) &= 1 \end{cases} \iff \begin{cases} w^T x^+ &= 1 - b \\ w^T x^- &= -b - 1 \end{cases}$$

- La marge géométrique est alors

$$\begin{cases} \gamma &= \frac{1}{\|w\|_2} w^T x^+ + \frac{1}{\|w\|_2} b \\ \gamma &= -\frac{1}{\|w\|_2} w^T x^- - \frac{1}{\|w\|_2} b \end{cases} \implies \gamma = \frac{1}{\|w\|_2}$$

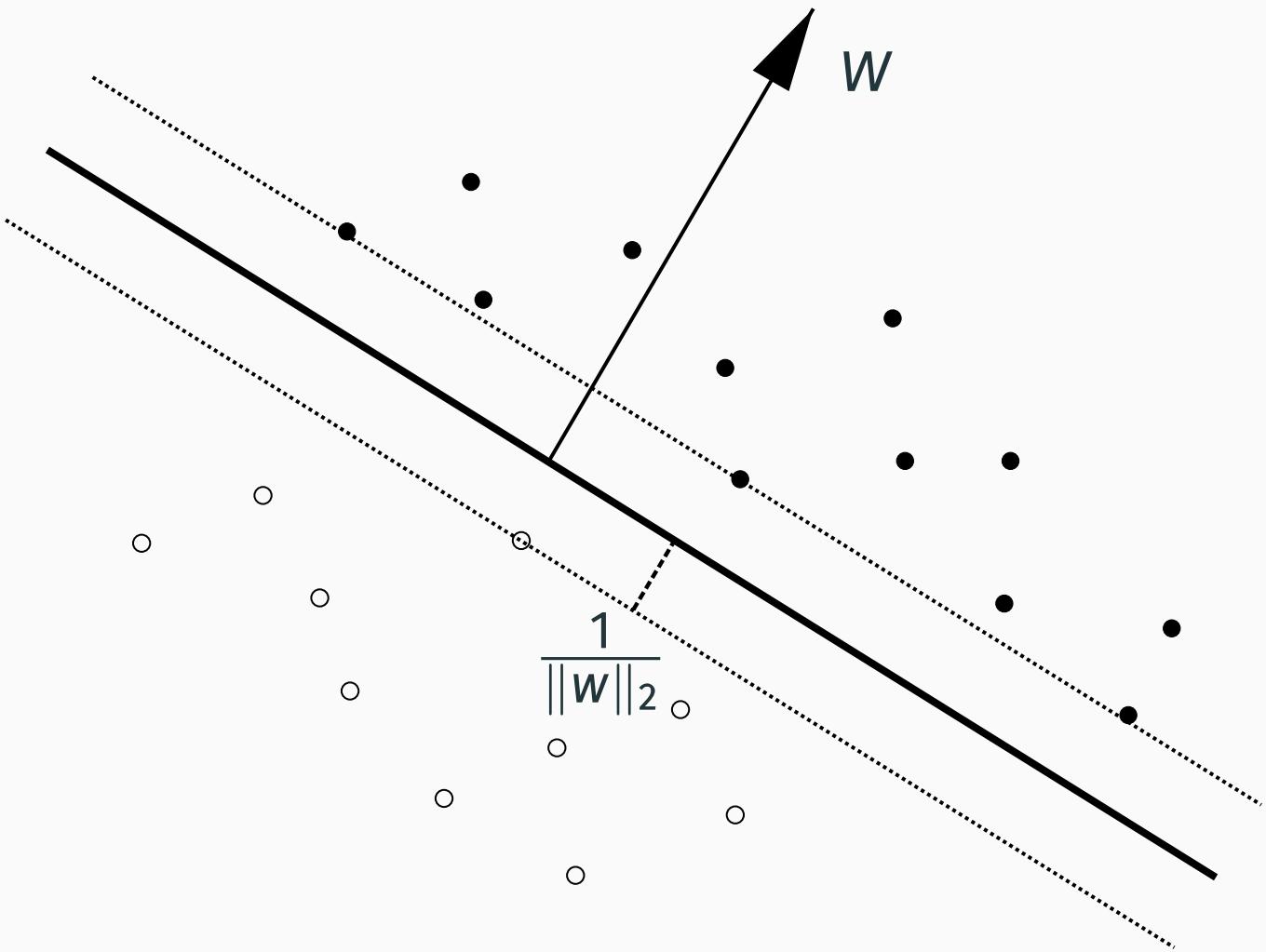
SVM linéaire : cas séparable

Formulation primale du SVM linéaire (cas séparable)

$$\begin{aligned} \min_{w \in \mathbb{R}^p, b \in \mathbb{R}} \quad & \frac{1}{2}\|w\|_2^2 \\ \text{s.t.} \quad & y_i(w^T x_i + b) \geq 1 \quad \forall i \in \{1, \dots, n\} \end{aligned}$$

- Assure une solution unique : il s'agit du séparateur maximisant la marge géométrique

SVM LINÉAIRE : CAS SÉPARABLE

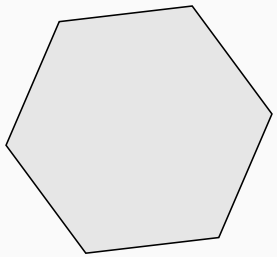


Définition : ensemble convexe

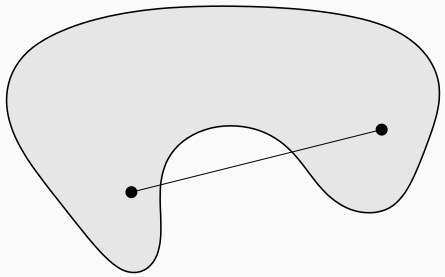
Un ensemble C est *convexe* C s'il contient le segment reliant tout couple de points de C :

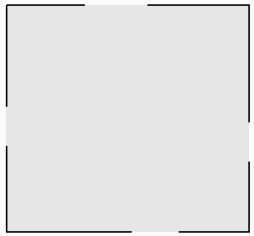
$$x_1, x_2 \in C, \quad 0 \leq \alpha \leq 1 \quad \Longrightarrow \quad \alpha x_1 + (1-\alpha)x_2 \in C$$

Convexe



Non convexe

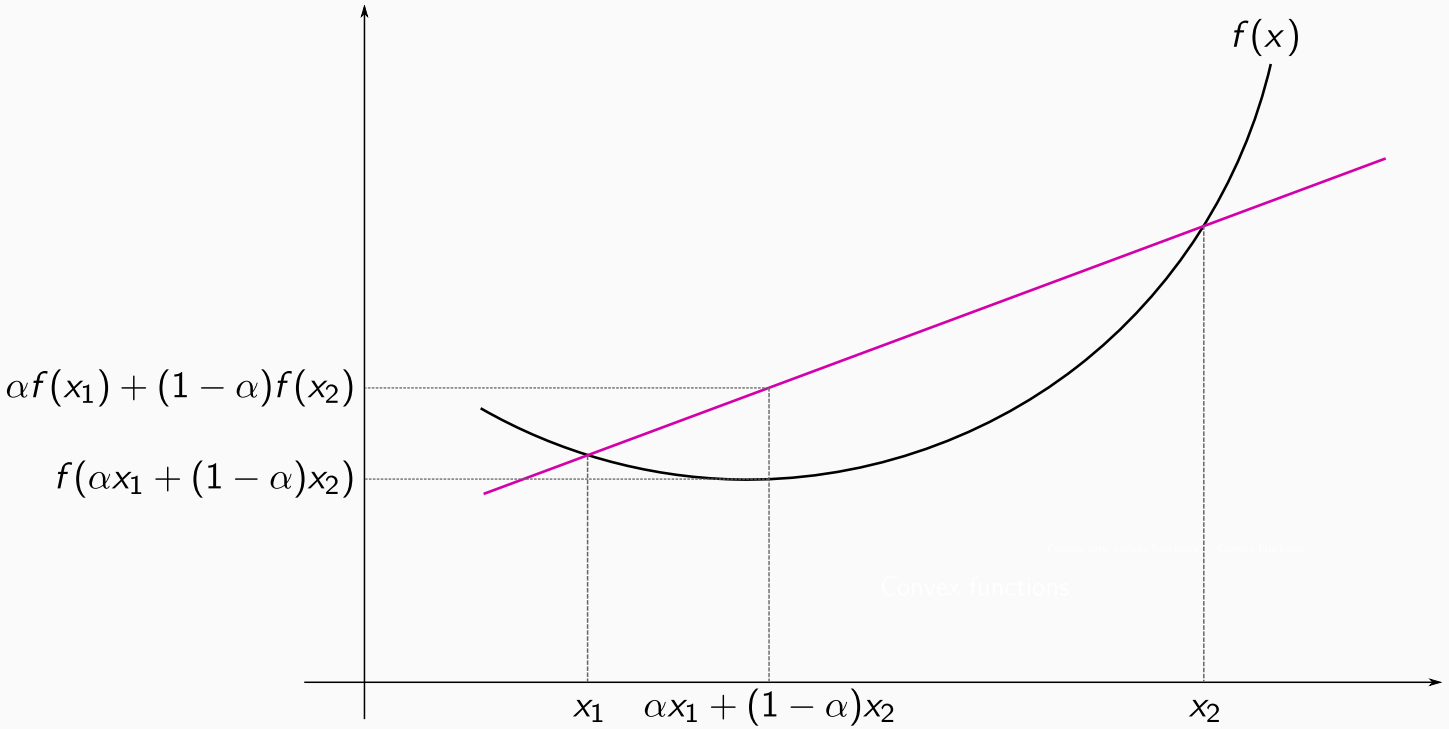




Définition : fonction convexe

La fonction $f : \mathbb{R}^p \to \mathbb{R}$ est *convexe* si

$$x_1, x_2 \in \mathbb{R}^p, \quad 0 \leq \alpha \leq 1 \quad \Longrightarrow \quad f(\alpha x_1 + (1-\alpha)x_2) \leq \alpha f(x_1) + (1-\alpha) f(x_2)$$



Formulation primale du SVM linéaire (cas séparable)

$$\begin{aligned} \min_{w \in \mathbb{R}^p, b \in \mathbb{R}} \quad & \frac{1}{2}\|w\|_2^2 \\ \text{s.t.} \quad & y_i(w^T x_i + b) \geq 1 \quad \forall i \in \{1, \dots, n\} \end{aligned}$$

- La fonction objective est quadratique et convexe en w
- Les contraintes sont linéaires en w et b
- C'est ce que l'on appelle un problème d'optimisation quadratique convexe
- Il existe beaucoup d'algorithmes d'optimisation numérique permettant de résoudre efficacement cette classe de problème

VERS UNE FORMULATION DUALE

- Lagrangien du problème convexe $\min_x f(x)$ s.t. $g(x) \leq 0$

$$L(x, \alpha) = f(x) + \alpha g(x), \quad \alpha \geq 0$$

- Problème dual équivalent au primal

$$\max_{\alpha \geq 0} \inf_x L(x, \alpha)$$

- Dans notre cas, on a

$$L(w, b, \alpha) = \frac{1}{2}\|w\|_2^2 + \sum_{i=1}^{n} \alpha_i [1 - y_i(w^T x_i + b)], \quad \alpha_1, \ldots, \alpha_n \geq 0$$

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

Au point extremum, on a

1. $\frac{\partial L(w,b,\alpha)}{\partial w} = w - \sum_{i=1}^{n} y_i \alpha_i x_i = 0$
2. $\frac{\partial L(w,b,\alpha)}{\partial b} = \sum_{i=1}^{n} y_i \alpha_i = 0$
3. $\alpha_i \geq 0, \quad \forall i \in \{1, \ldots, n\}$
4. $\alpha_i [1 - y_i (w^T x_i + b)] = 0, \quad \forall i \in \{1, \ldots, n\}$

- On obtient le problème dual en remplaçant la valeur de w donnée par (KKT 1) dans le Lagrangien L, en développant puis en utilisant (KKT 2)

Formulation duale (cas séparable)

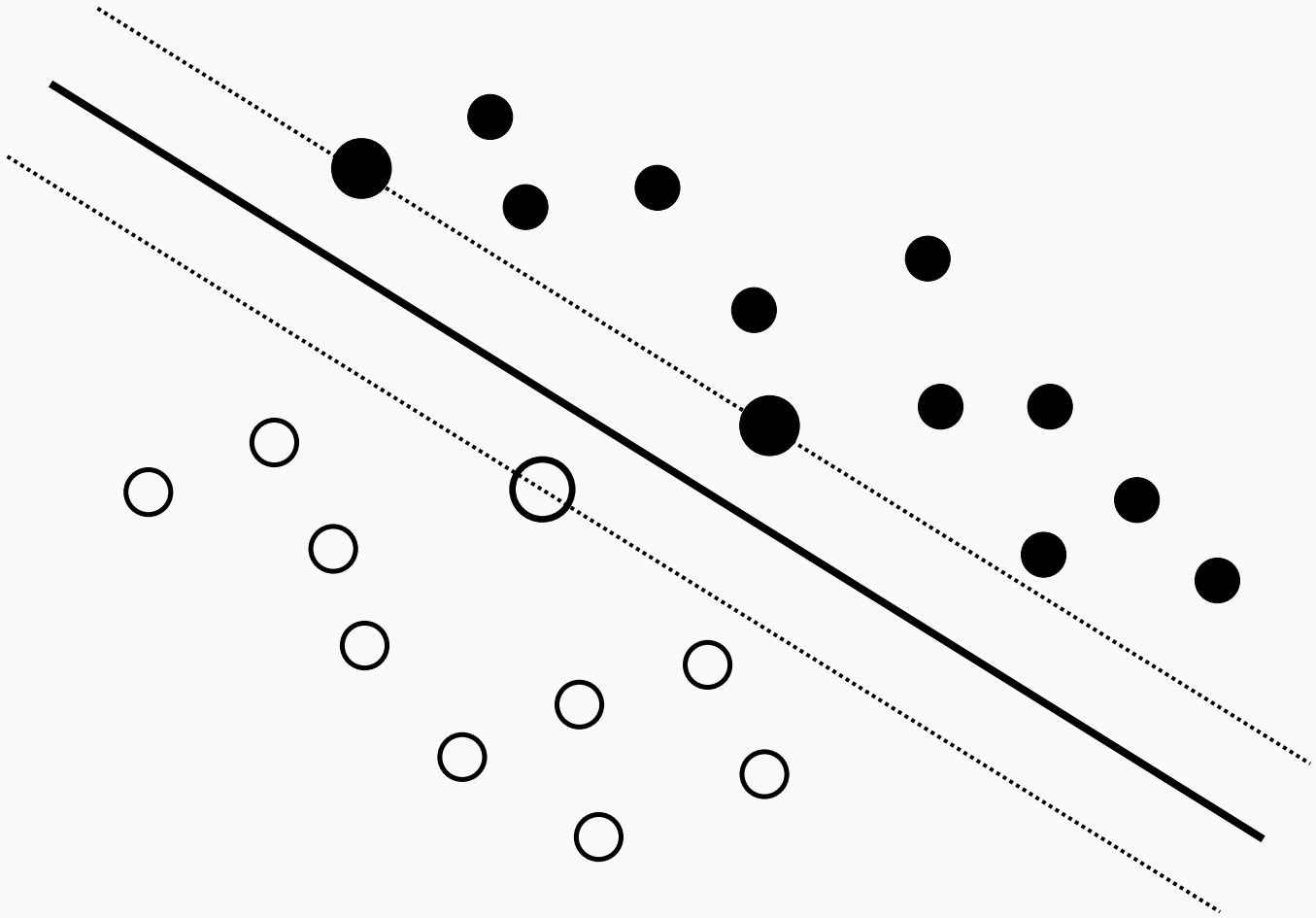
Formulation duale du SVM linéaire (cas séparable)

$$\max_{\alpha \in \mathbb{R}_+^n} \quad \sum_{i=1}^{n} \alpha_i - \frac{1}{2} \sum_{i,j=1}^{n} \alpha_i \alpha_j y_i y_j x_i^T x_j$$

$$\text{s.t.} \quad \sum_{i=1}^{n} \alpha_i y_i = 0$$

- C'est encore un problème quadratique convexe
- Le vecteur de poids optimal a la forme $w = \sum_{i=1}^{n} \alpha_i y_i x_i$ (KKT 1)
- Pour $1 \leq i \leq n$, on remarque par (KKT 4)
  - Cas 1 : $y_i(w^T x_i + b) > 1 \Rightarrow x_i$ n'est pas sur la marge et $\alpha_i = 0$
  - Cas 2 : $y_i(w^T x_i + b) = 1 \Rightarrow \alpha_i \neq 0$ et on en déduit b
- Le w optimal est défini par les points sur la marge : ce sont les fameux vecteurs supports

SVM LINÉAIRE : CAS SÉPARABLE



SVM LINÉAIRE : CAS NON SÉPARABLE

- Comment traiter le cas non séparable ?
- Autoriser la violation des contraintes de marge, mais infliger une pénalité quand cela arrive

Formulation primale du SVM linéaire (cas non séparable)

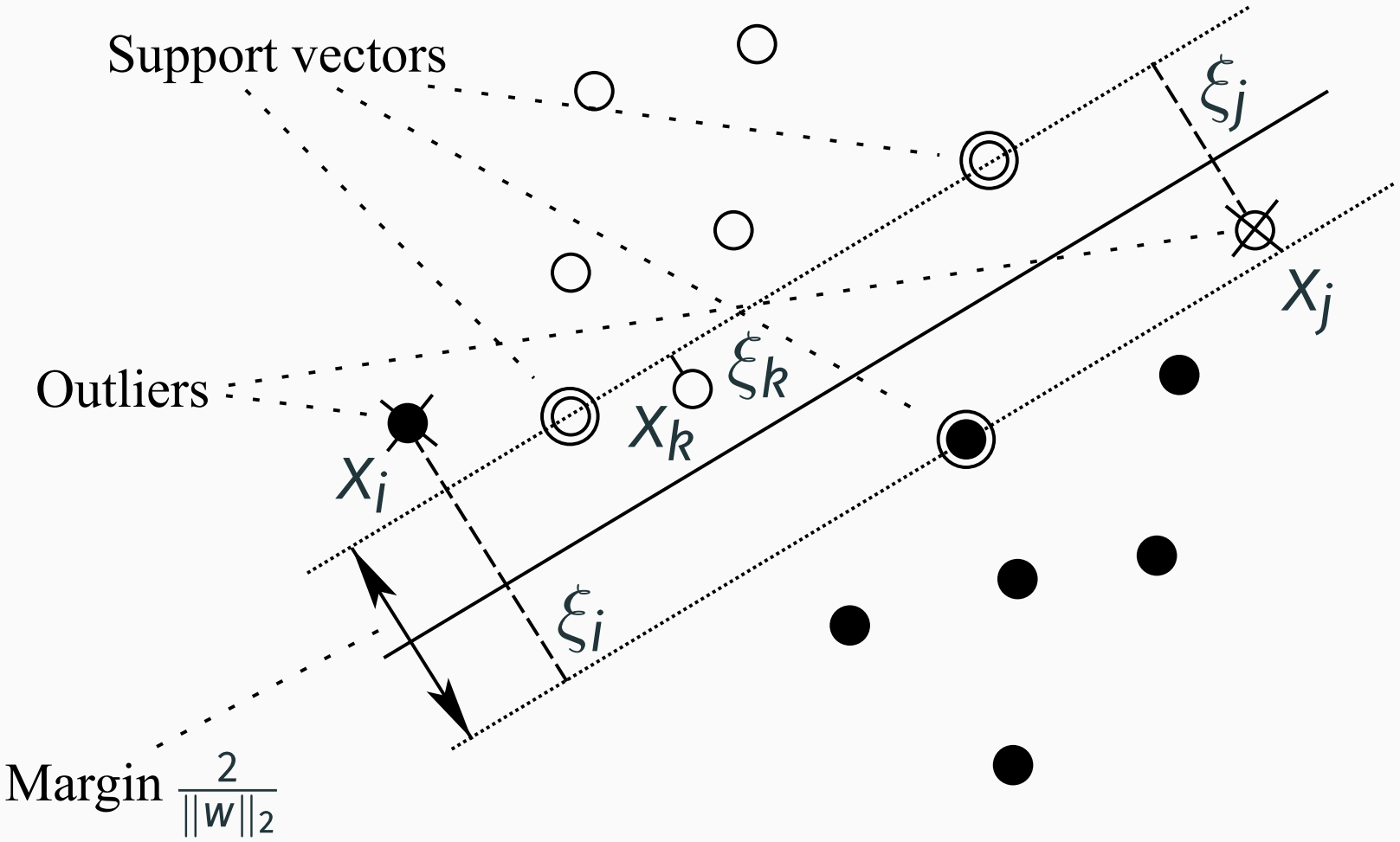
$$\min_{w \in \mathbb{R}^p, b \in \mathbb{R}, \xi \in \mathbb{R}^n} \quad \frac{1}{2}\|w\|_2^2 \quad + \quad C \sum_{i=1}^{n} \xi_i$$

$$\text{s.t.} \quad y_i(w^T x_i + b) \geq 1 - \xi_i \quad \forall i \in \{1, \dots, n\}$$

$$\xi_i \geq 0 \quad \forall i \in \{1, \dots, n\}$$

- L'hyperparamètre C permet de régler le compromis entre maximiser la marge (régularisation) et minimiser les violations
- $C = +\infty$ permet de retrouver la formulation des marges strictes

SVM LINÉAIRE : CAS NON SÉPARABLE



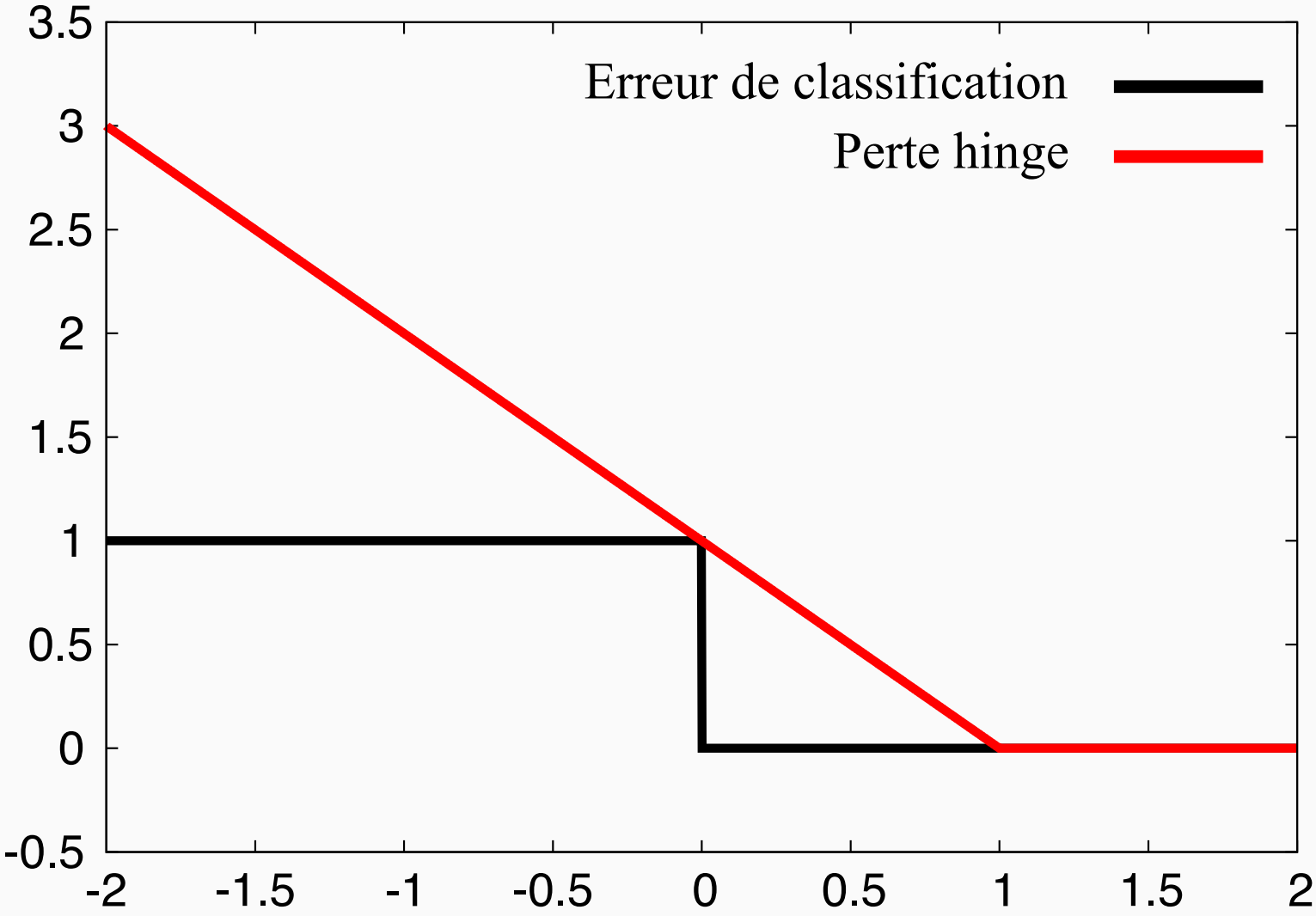
SVM LINÉAIRE : CAS NON SÉPARABLE

Formulation primale équivalente du SVM linéaire (non séparable)

$$\min_{w \in \mathbb{R}^p, b \in \mathbb{R}} \quad \frac{1}{2}\|w\|_2^2 \quad + \quad C \sum_{i=1}^{n} \left[y_i (w^T x_i + b) \right]_+$$

- La fonction $[a]_+ = \max(0, 1 - a)$ est la perte hinge
- Note : cette formulation sans contrainte se prête à un algorithme d'optimisation de type gradient stochastique adapté au cas où n est grand

PERTE HINGE


Erreur de classification
Perte hinge
3.5
3
2.5
2
1.5
1
0.5
0
-0.5
-2
-1.5
-1
-0.5
0
0.5
1
1.5
2

Formulation duale (cas non séparable)

Formulation duale du SVM linéaire (cas non séparable)

$$\max_{\alpha \in \mathbb{R}^n} \quad \sum_{i=1}^{n} \alpha_i - \frac{1}{2} \sum_{i,j=1}^{n} \alpha_i \alpha_j y_i y_j x_i^T x_j$$

$$\text{s.t.} \quad \sum_{i=1}^{n} \alpha_i y_i = 0$$

$$0 \leq \alpha_i \leq C \quad \forall i \in \{1, \ldots, n\}$$

- La forme duale est presque la même que dans le cas séparable
- Intuition pour la nouvelle contrainte : elle empêche de mettre trop de poids sur un exemple difficile pour bien le classifier

CAS NON LINÉAIRE ET NOYAUX

AU DELÀ DES MODÈLES LINÉAIRES

- En pratique, on a souvent affaire à des données qui ont une structure non linéaire
- Une solution serait de travailler avec une classe de modèles plus complexes
- Mais on perdra la simplicité des modèles linéaires
  - Simples et efficaces à entraîner
  - Prédiction rapide
  - Robustesse au sur-apprentissage
- Approche SVM : apprendre un classifieur linéaire dans un espace obtenu par projection non linéaire !

EXEMPLE DE PROJECTION UTILE

- La loi de la gravitation universelle de Newton

$$f(m_1, m_2, r) = G\frac{m_1 m_2}{r^2}$$

où m_1, m_2 sont les masses, r la distance entre le centre des masses, et G la constante de gravitation

- Cette fonction est non linéaire : on ne peut donc pas l'apprendre avec une machine linéaire
- Changement de coordonnées avec la projection non linéaire ϕ

$$\phi([m_1, m_2, r]) = [\log m_1, \log m_2, \log r]^T = [x, y, z]^T$$

- On a alors une fonction linéaire de x, y, z

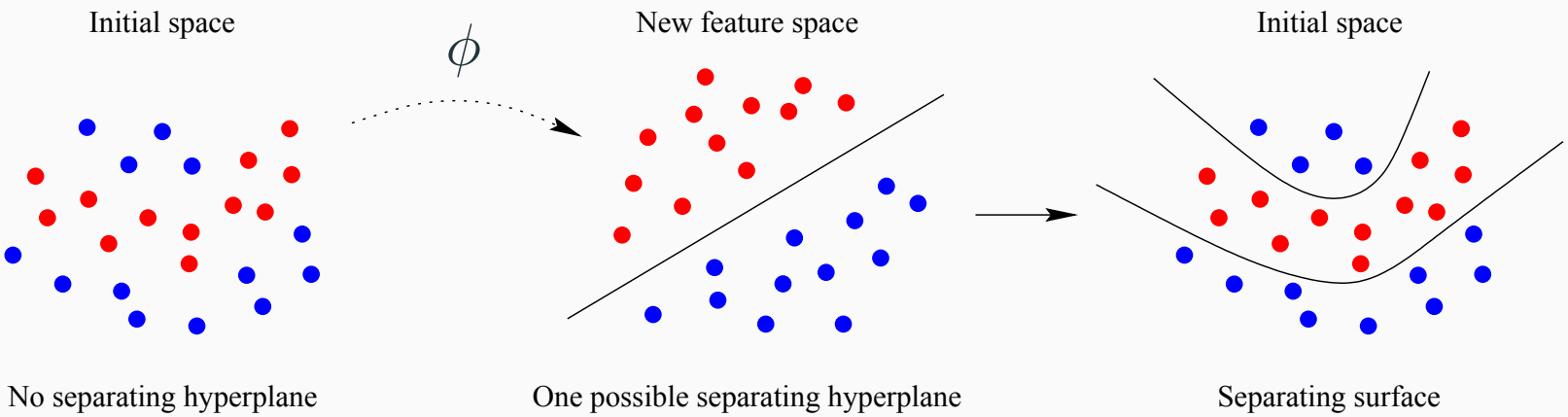
$$\begin{aligned} g(x, y, z) &= \log f(\phi([m_1, m_2, r])) \\ &= \log G + \log m_1 + \log m_2 - 2\log r = C + x + y - 2z \end{aligned}$$

SÉPARATEUR LINÉAIRE APRÈS PROJECTION NON LINÉAIRE

- Considérons le classifieur linéaire dans l'espace $\mathcal{F}$ induit par la projection $\phi : \mathcal{X} \to \mathcal{F}$

$$\begin{aligned} h(x) &= \text{sign}(w^T \phi(x) + b) \\ &= \text{sign}\left(\sum_{i=1}^{|\mathcal{F}|} w^i \phi^i(x) + b\right) \end{aligned}$$

- Celui-ci correspond à un classifieur non linéaire dans $\mathcal{X}$

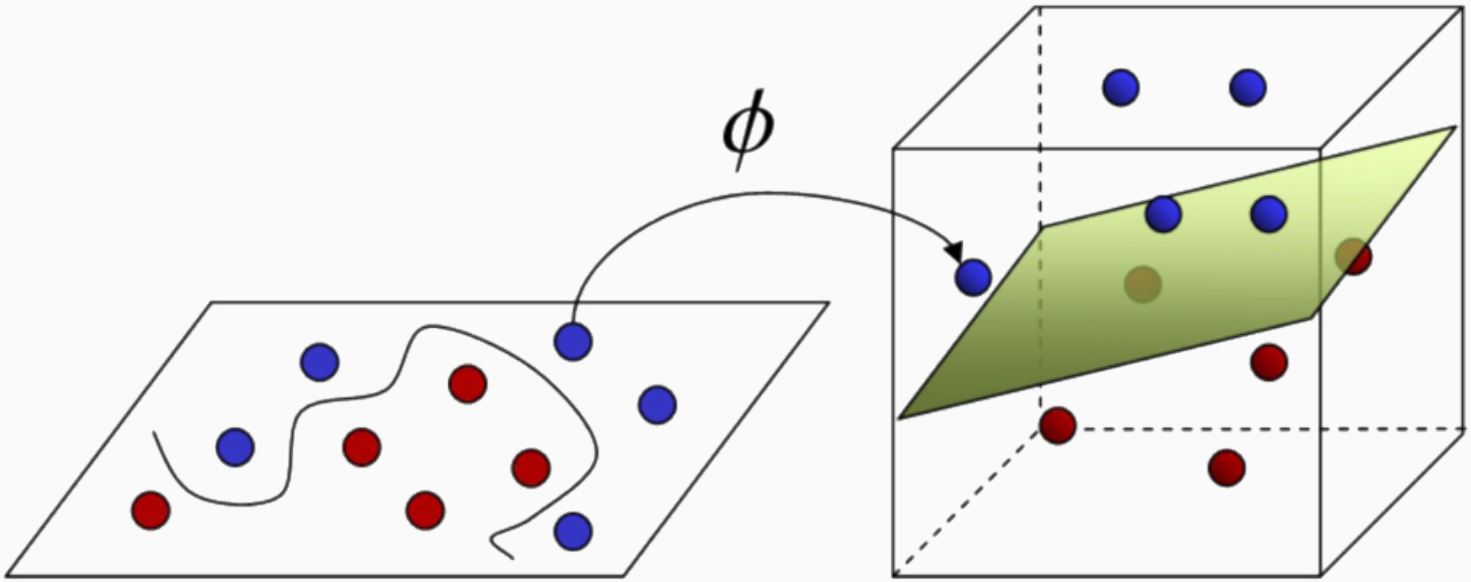


AUGMENTER LA DIMENSION

- Un simple changement de coordonnées peut ne pas suffire pour rendre les données linéairement séparables
- On peut projeter les données dans un espace de plus grande dimension
- Par exemple, supposons que $\mathcal{X} = \mathbb{R}^2$ mais que des connaissances sur notre problème nous disent que l'on peut l'apprendre parfaitement avec des monômes de degré 2
- C'est alors une bonne idée de travailler dans $\mathcal{F} = \mathbb{R}^3$ plutôt que $\mathcal{X} = \mathbb{R}^2$ en utilisant la transformation

$$\phi([x^1, x^2]) = (x^1x^1, x^2x^2, x^1x^2)$$

AUGMENTER LA DIMENSION



MALÉDICTION DE LA DIMENSION

- Et si on a besoin de davantage de dimensions, par exemple de monômes de plus grand degré ?
- Nombre de monômes de degré d à partir de p variables

$$\binom{p+d-1}{d}$$

  - $p = 5, d = 5 \rightarrow$ need 126 dimensions
  - $p = 10, d = 5 \rightarrow$ need 11628 dimensions
  - $p = 20, d = 10 \rightarrow$ need 20030010 dimensions

- Malédiction de la dimension : l'apprentissage devient très coûteux en temps de calcul si la dimension est trop grande

Formulation duale du SVM linéaire (cas non séparable)

$$\max_{\alpha \in \mathbb{R}^n} \quad \sum_{i=1}^{n} \alpha_i - \frac{1}{2} \sum_{i,j=1}^{n} \alpha_i \alpha_j y_i y_j \phi(x_i)^T \phi(x_j)$$

$$\text{s.t.} \quad \sum_{i=1}^{n} \alpha_i y_i = 0$$

$$0 \leq \alpha_i \leq C \quad \forall i \in \{1, \dots, n\}$$

- Contrairement à la formulation primale, on n'a pas besoin de manipuler explicitement les $\phi(x_i)$, mais seulement les produits scalaires $\phi(x_i)^T \phi(x_j)$ qui sont les entrées de la matrice de Gram G

$$G_{i,j} = \phi(x_i)^T \phi(x_j)$$

- Cette observation est valable pour les autres formulations duales étudiées (perceptron, SVM pour le cas séparable)

Definition (Fonction noyau)

Une fonction symétrique $K : \mathcal{X} \times \mathcal{X} \to \mathbb{R}$ est un *noyau* si et seulement si il existe une projection $\phi : \mathcal{X} \to \mathcal{H}$ de $\mathcal{X}$ vers un espace de Hilbert $\mathcal{H}$ telle que K s'écrit comme un produit scalaire dans $\mathcal{H}$:

$$K(x_1, x_2) = \phi(x_1)^T \phi(x_2), \quad \forall x_1, x_2 \in \mathcal{X}.$$

De manière équivalente, K est un *noyau* si et seulement si il est semi-défini positif (SDP), c'est-à-dire

$$\sum_{i=1}^{n} \sum_{j=1}^{n} c_i c_j K(x_i, x_j) \geq 0$$

pour tous les $x_1, \ldots, x_n \in \mathcal{X}$ et $c_1, \ldots, c_n \in \mathbb{R}$.

EXEMPLES DE FONCTIONS NOYAUX

- Noyau linéaire : $K(x_1, x_2) = x_1^T x_2$
  - Équivalent au cas linéaire
- Noyaux polynomiaux : $K(x_1, x_2) = (x_1^T x_2 + c)^d$ avec $c \in \mathbb{R}, d \in \mathbb{N}$
  - $\phi(x)$ contient tous les monômes de degré au plus d (voir plus bas)
- Noyau Gaussien : $K(x_1, x_2) = \exp\left(\frac{\|x_1 - x_2\|^2}{2\sigma^2}\right)$ avec $\sigma^2 \geq 0$
  - $\phi(x)$ est de dimension infinie ! C'est le plus utilisé
- Note : il existe de nombreux noyaux pour les données structurées
  - Par exemple, le noyau k-spectrum : $\phi(x)$ contient le nombre d'occurrences dans la chaîne de caractères x de chaque sous-séquence possible de taille k

CONSTRUCTION DE NOYAUX

- On peut combiner plusieurs noyaux de manière à obtenir un nouveau noyau valide
- Par exemple, si K_1 et K_2 sont des noyaux alors les fonctions suivantes sont aussi des noyaux :
  - $K(x_1, x_2) = K_1(x_1, x_2) + K_2(x_1, x_2)$
  - $K(x_1, x_2) = aK_1(x_1, x_2)$ pour $a \geq 0$
  - $K(x_1, x_2) = K_1(x_1, x_2)K_2(x_1, x_2)$
  - $K(x_1, x_2) = x_1^T B x_2$ pour $B \in \mathbb{R}^{p \times p}$ semi-définie positive

NOYAU POLYNOMIAL HOMOGÈNE DE DEGRÉ 2

- Considérons tout d'abord le noyau polynomial homogène de degré 2 : $K(x_1, x_2) = (x_1^T x_2)^2$

$$\begin{aligned} K(x_1, x_2) &= \left(\sum_{i=1}^{p} x_1^i x_2^i \right)^2 = \left(\sum_{i=1}^{p} x_1^i x_2^i \right) \left(\sum_{j=1}^{p} x_1^j x_2^j \right) \\ &= \sum_{i,j=1}^{p} x_1^i x_2^i x_1^j x_2^j = \sum_{i,j=1}^{p} (x_1^i x_1^j)(x_2^i x_2^j) \end{aligned}$$

- K est donc un noyau avec $\phi(x) = [x^i x^j]_{i,j=1}^{p}$, un vecteur de dimension $\binom{p+1}{2}$ contenant tous les monômes de degré 2

Noyau polynomial non-homogène de degré 2

- Pour le noyau polynomial non-homogène de degré 2 : $K(x_1, x_2) = (x_1^T x_2 + c)^2$

$$\begin{aligned} K(x_1, x_2) &= \left(\sum_{i=1}^{p} x_1^i x_2^i + c \right) \left(\sum_{j=1}^{p} x_1^j x_2^j + c \right) \\ &= c^2 + \sum_{i,j=1}^{p} (x_1^i x_1^j)(x_2^i x_2^j) + \sum_{i=1}^{p} \sqrt{2c} x_1^i \sqrt{2c} x_2^i \end{aligned}$$

- K est donc un noyau avec $\phi(x)$ correspondant au vecteur de dimension $1 + \binom{p+1}{2} + p$ contenant tous les monômes de degré au plus 2, avec des poids contrôlés par c

NOYAUX POLYNOMIAUX DE DEGRÉ d

- Le raisonnement peut être généralisé pour tout degré $d \in \mathbb{N}$
  - $K(x_1, x_2) = (x_1^T x_2)^d$: les attributs sont les $\binom{d+p-1}{d}$ monômes de degré d
  - $K(x_1, x_2) = (x_1^T x_2 + c)^d$: les attributs sont les $\binom{d+p}{d}$ monômes de degré au plus d
- Note : on peut aussi montrer la validitié de ces noyaux par construction

L'astuce du noyau

- L'astuce du noyau (kernel trick en anglais) consiste à remplacer les $x_i^T x_j$ dans les formulations duales par $\phi(x)_i^T \phi(x)_j = K(x_1, x_j)$
- On réécrit la forme du classifieur linéaire dans l'espace dual

$$\begin{aligned} h(x) &= \text{sign}\left(\underbrace{\sum_{i=1}^{n} \alpha_i y_i \phi(x_i)^T}_{w} \phi(x) + b\right) \\ &= \text{sign}\left(\sum_{i=1}^{n} \alpha_i y_i K(x_i, x) + b\right) \end{aligned}$$

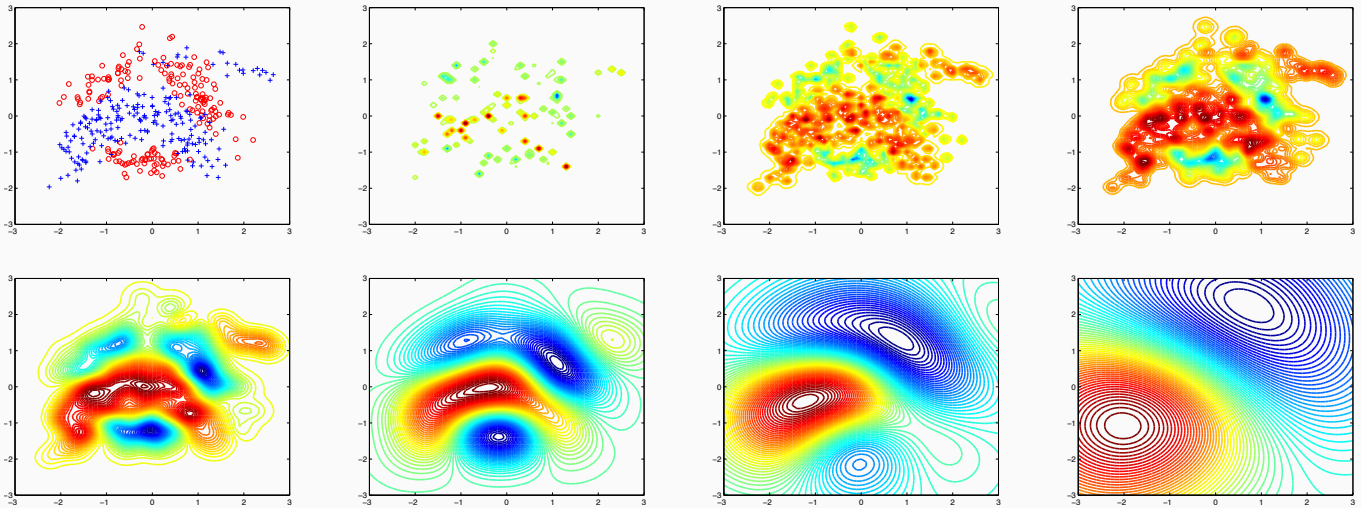
- Avantages
  - Pas besoin de représenter $\phi(x)$ explicitement
  - Pas d'influence de la dimension de $\phi(x)$ sur le nombre de paramètres à apprendre (on apprend n paramètres)
  - Pas d'influence de la dimension de $\phi(x)$ sur l'évaluation de h (on a besoin au plus de n évaluations de la fonction noyau)
  - En fait, pas besoin de connaître ϕ : la projection peut être implicite

L'astuce du noyau : visualisation

- Pour le noyau polynomial, voir par exemple

  `http://www.youtube.com/watch?v=3liCbRZPrZA`

- Pour le noyau Gaussien et $\sigma \in [0.01, 0.05, 0.1, 0.2, 0.5, 1, 2]$



- Démo graphique de LibSVM

  `https://www.csie.ntu.edu.tw/~cjlin/libsvm/`

CHOIX DU NOYAU

- Le choix du noyau a une influence primordiale sur la performance du modèle
- Quelques règles générales :
  - Pour des données en grande dimension, un noyau linéaire est souvent suffisant
  - Pour des données en grande dimension et creuses (ex : sacs de mots en texte), essayer le noyau polynomial
  - Le noyau Gaussien donne généralement de très bonnes performances
- Règle d'or : utiliser les principes de sélection de modèles pour le choix du noyau et de ses paramètres !
- Multiple Kernel Learning (MKL) : permet d'apprendre une bonne combinaison de noyaux de base

Theorem (Vapnik)

Soit $\mathcal{S} = \{(x_i, y_i)\}_{i=1}^n$ un échantillon i.i.d. tiré selon la loi P. Soit h le classifieur appris sur $\mathcal{S}$ avec une marge géométrique γ. Pour $i = 1, \ldots, n$, on note $\xi_i = \max(0, \gamma - y_i h(x_i))$. On suppose $\|x\|_2 \leq R$ pour tout x tiré selon P. Alors on a avec probabilité au moins $1 - \delta$:

$$\underbrace{\mathbb{E}_{(X,Y)\sim P}\left[\mathbb{I}\{h(X) \neq Y\}\right]}_{\text{erreur en généralisation}} \leq \frac{1}{n} \underbrace{\sum_{i=1}^{n} \mathbb{I}\{\xi_i > 0\}}_{\#\text{ violations dans } \mathcal{S}} + O\left(\sqrt{\frac{R^2 \log n + \log(1/\delta)}{\gamma^2 n}}\right).$$

- On voit que l'erreur en généralisation dépend du nombre d'exemple d'apprentissage, de la taille de la marge et des violations de marge, mais pas du nombre d'attributs
- C'est donc une validation théorique des deux principes des SVMs : maximisation de marge + astuce du noyau
- Pour en savoir plus sur ce type de bornes, voir par exemple

  `http://www.cs.cmu.edu/~guestrin/Class/10701-S05/slides/pac-vc.pdf`

SUPPORT VECTOR REGRESSION

VASTE MARGE POUR LA RÉGRESSION

- Dans le cas de la régression, on a $\mathcal{Y} = \mathbb{R}$
- On cherche un modèle linéaire : pour $w \in \mathbb{R}^p, b \in \mathbb{R}$

$$h(x) = w^T x + b$$

- Fonctions de perte classique en régression
  - Moindre carrés : $(h(x) - y)^2$
  - Valeur absolue : $|h(x) - y|$
- Dans les SVMs pour la régression, on utilise la perte ϵ-insensible

$$|h(x) - y|_\epsilon = \max(0, |h(x) - y| - \epsilon)$$

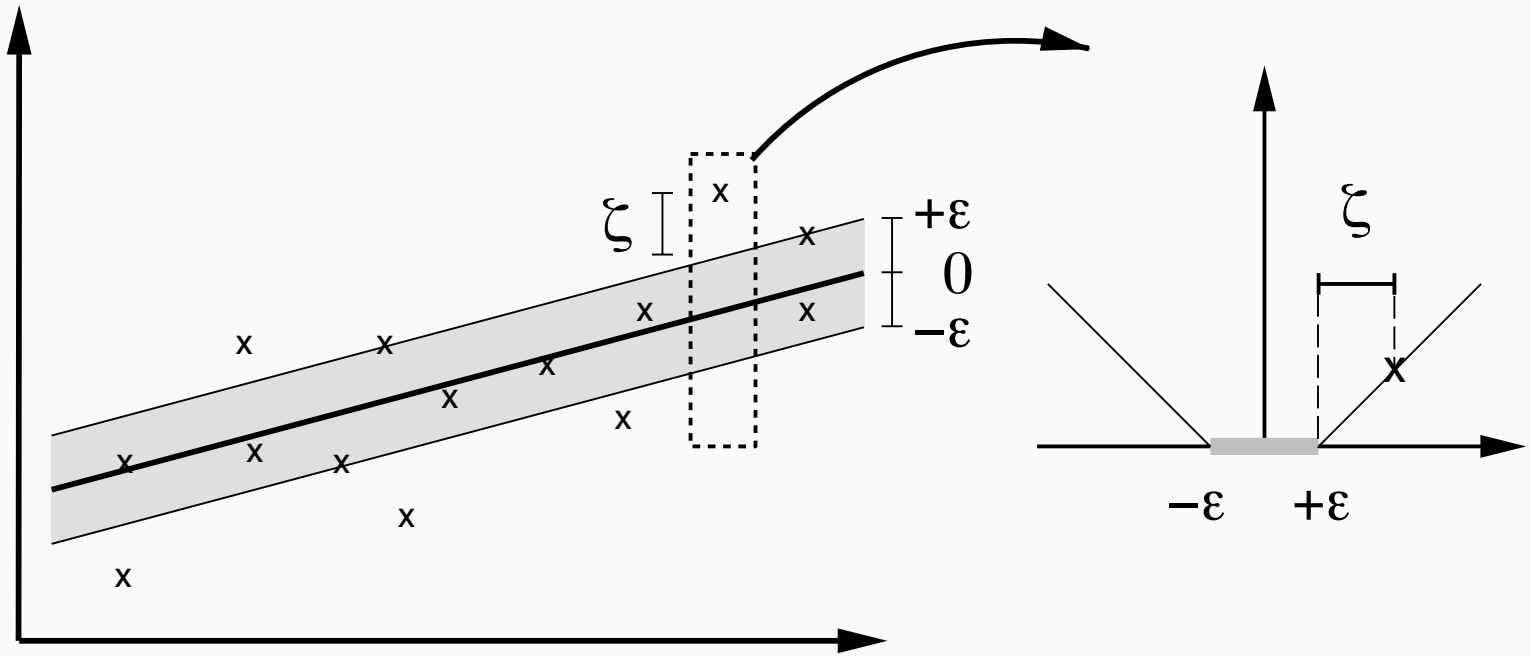
Formulation primale du SVR linéaire

$$\begin{aligned} \min_{w\in\mathbb{R}^p, b\in\mathbb{R}, \xi\in\mathbb{R}^n, \xi'\in\mathbb{R}^n} \quad & \frac{1}{2}\|w\|_2^2 \quad + \quad C\sum_{i=1}^{n}(\xi_i + \xi_i') \\ \text{s.t.} \quad & w^T x_i + b - y_i \leq \epsilon + \xi_i \quad \forall i \in \{1,\dots,n\} \\ & y_i - w^T x_i + b \leq \epsilon + \xi_i' \quad \forall i \in \{1,\dots,n\} \\ & \xi_i, \xi_i' \geq 0 \quad \forall i \in \{1,\dots,n\} \end{aligned}$$

Formulation primale équivalente du SVR linéaire

$$\min_{w\in\mathbb{R}^p, b\in\mathbb{R}} \quad \frac{1}{2}\|w\|_2^2 \quad + \quad C\sum_{i=1}^{n}|w^T x_i + b - y_i|_\epsilon$$

VASTE MARGE POUR LA RÉGRESSION



Formulation duale du SVR linéaire

$$\min_{\alpha,\alpha' \in \mathbb{R}^n} \quad \sum_{i,j=1}^{n} (\alpha_i - \alpha'_i)(\alpha_j - \alpha'_j) x_i^T x_j + \epsilon \sum_{i=1}^{n} (\alpha_i + \alpha'_i) - \sum_{i=1}^{n} y_i (\alpha_i - \alpha'_i)$$

$$\text{s.t.} \quad \sum_{i=1}^{n} (\alpha_i - \alpha'_i) = 0$$

$$0 \leq \alpha_i, \alpha'_i \leq C \quad \forall i \in \{1, \dots, n\}$$

- Le modèle se réécrit sous la forme $h(x) = \underbrace{\sum_{i=1}^{n} (\alpha_i - \alpha'_i) x_i^T}_{w} x + b$
- La formulation duale n'implique que les produits scalaires $x_i^T x_j$. On peut donc appliquer l'astuce du noyau !

RÉFÉRENCES

- Article : **A Tutorial on Support Vector Machines for Pattern Recognition** (C. Burges, Data Mining and Knowledge Discovery 1998)
- Livre : **An introduction to Support Vector Machines and Others Kernel-Based Learning Methods** (N. Cristianini and J. Shawe-Taylor, 2000)
- Livre : **Learning with Kernels: Support Vector Machines, Regularization, Optimization and Beyond** (B. Scholkopf and A. Smola, 2002)
- Article : **A tutorial on support vector regression** (A. Smola & B. Schölkopf, Statistics and Computing 2004)