

Techniques d'apprentissage
IFT603

Machines à vecteurs de support

Par
Pierre-Marc Jodoin
/
Hugo Larochelle

Méthode à Noyau

Au chapitre précédent, nous avons vu les méthodes à noyau

➤ Entraînement

$$\vec{a} = (\vec{K} + \lambda I_N)^{-1} \vec{t}$$

➤ Prédiction

$$y(\vec{x}) = \sum_{n=1}^N k(\vec{x}, \vec{x}_n) a_n$$

Matrice de Gram

Noyau

Malheureusement, on doit toujours avoir accès aux données d'entraînement

Comparaison entre \vec{x} et toutes les données d'entraînement $\vec{x}_n \forall n$

2

Machine à vecteur de Support

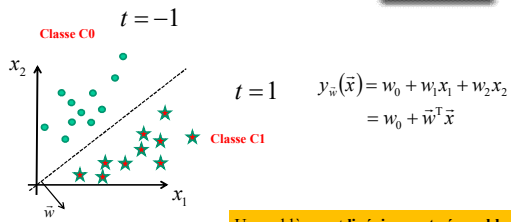
(*support vector machine*, SVM en anglais)

- Algorithme principalement dédié à la classification binaire
- Après l'entraînement, SVM seulement un **sous-ensemble des données d'entraînement**
- Plusieurs des a_n vont être à 0

3

Classification linéaire

RAPPEL



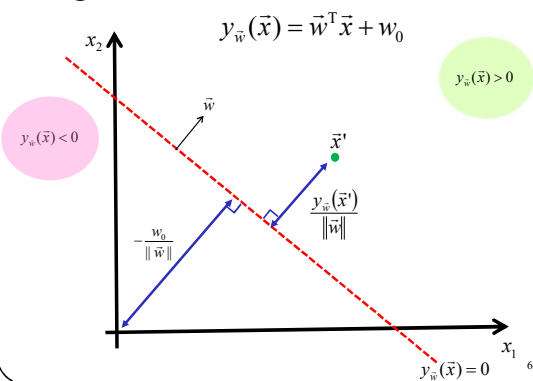
Un problème est **linéairement séparable** si on peut séparer les éléments de chaque classe avec un **hyperplan**.

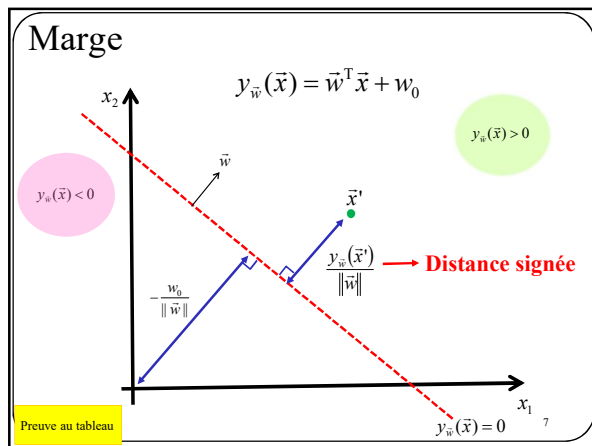
4

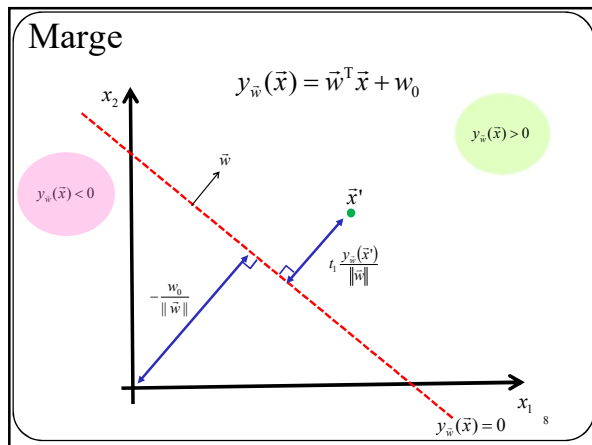
Au cœur des machines à vecteurs de support figure la notion de **marge**.

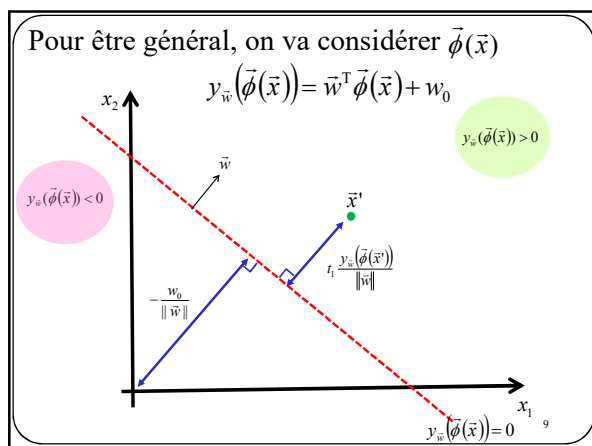
5

Marge



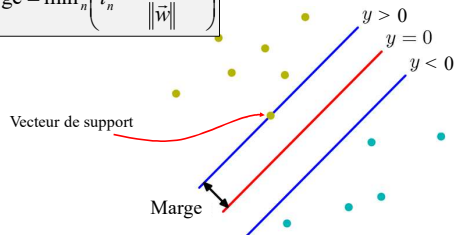






La **marge** est la plus **petite distance** entre la surface de séparation et les données d'entraînement

$$\text{marge} = \min_n \left(t_n \frac{y_w(\vec{\phi}(\vec{x}_n))}{\|\vec{w}\|} \right)$$



Classifieur à marge maximale

Un SVM cherche les paramètres \vec{w}^T et w_0 de l'hyperplan qui **maximisent la marge**

$$\begin{aligned} & \arg \max_{\vec{w}, w_0} \{ \text{marge}(\vec{w}, w_0) \} \\ &= \arg \max_{\vec{w}, w_0} \left\{ \min_n \left(t_n \frac{y_w(\vec{\phi}(\vec{x}_n))}{\|\vec{w}\|} \right) \right\} \\ &= \arg \max_{\vec{w}, w_0} \left\{ \min_n \left(t_n \frac{\vec{w}^T \vec{\phi}(\vec{x}_n) + w_0}{\|\vec{w}\|} \right) \right\} \\ &= \arg \max_{\vec{w}, w_0} \left\{ \frac{1}{\|\vec{w}\|} \min_n (t_n (\vec{w}^T \vec{\phi}(\vec{x}_n) + w_0)) \right\} \end{aligned}$$

11

Problème!



Il existe une **infinité de solutions** au problème de la page précédente!

La **marge est la même** si on multiplie \vec{w}^T et w_0 par une **constante non nulle** (a)

$$t_n \frac{\vec{w}^T \vec{\phi}(\vec{x}_n) + w_0}{\|\vec{w}\|} = t_n \frac{\cancel{\alpha} \vec{w}^T \vec{\phi}(\vec{x}_n) + \cancel{\alpha} w_0}{\cancel{\alpha} \|\vec{w}\|}$$

12

Solution!



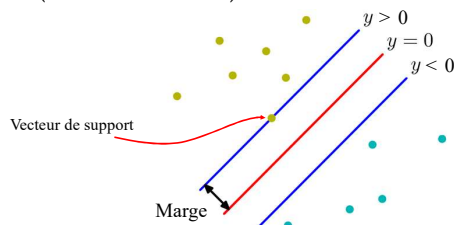
Contraindre la solution pour que les vecteurs de support

$$t_n y_{\vec{w}}(\vec{\phi}(\vec{x}_n)) = t_n (\vec{w}^T \vec{\phi}(\vec{x}_n) + w_0) = 1$$

13

Sans contrainte

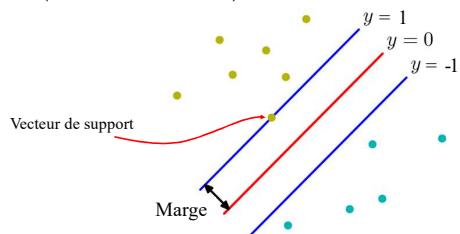
$$t_n (\vec{w}^T \vec{\phi}(\vec{x}_n) + w_0) > 0$$



14

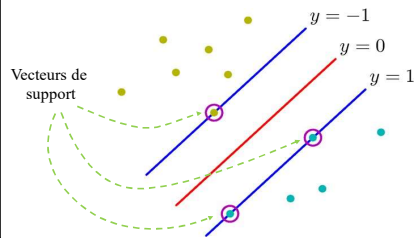
Avec contrainte

$$t_n (\vec{w}^T \vec{\phi}(\vec{x}_n) + w_0) > 1$$



15

Exemple de résultat au terme d'une optimisation SVM



16

En supposant que l'ensemble d'entraînement est linéairement séparable, on a :

$$\arg \max_{\vec{w}, w_0} \left\{ \frac{1}{\|\vec{w}\|} \min_n \left(t_n \left(\vec{w}^T \vec{\phi}(\vec{x}_n) + w_0 \right) \right) \right\}$$

2 façons de résoudre ce problème :

- Approche primale
- Approche duale

17

18

Approche primale

$$\arg \max_{\tilde{w}, w_0} \left\{ \frac{1}{\|\tilde{w}\|} \min_n \left(\tilde{w}^T \tilde{\phi}(\tilde{x}_n) + w_0 \right) \right\}$$

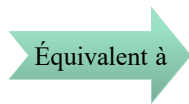
=1

19

Approche primale

$$\arg \max_{\tilde{w}, w_0} \left\{ \frac{1}{\|\tilde{w}\|} \min_n \left(\tilde{w}^T \tilde{\phi}(\tilde{x}_n) + w_0 \right) \right\}$$

=1



$$\arg \min_{\tilde{w}, w_0} \left\{ \frac{1}{2} \|\tilde{w}\|^2 \right\}$$

t.q. $\tilde{w}^T \tilde{\phi}(\tilde{x}_n) + w_0 \geq 1 \quad \forall n$

Ce problème d'optimisation est un **programme quadratique** pour lequel il existe de nombreuses bibliothèques informatiques

Approche **duale**:
inclure les noyaux dans SVM

21

Approche duale

$$\begin{aligned} & \arg \min_{\vec{w}, w_0} \left\{ \frac{1}{2} \|\vec{w}\|^2 \right\} \\ & \text{t.q. } t_n \left(\vec{w}^T \vec{\phi}(\vec{x}_n) + w_0 \right) \geq 1 \quad \forall n \end{aligned}$$

On peut enlever les contraintes en introduisant les **multiplicateurs de Lagrange** (voir Bishop, Annexe E)

$$L(\vec{w}, w_0, \vec{a}) = \frac{1}{2} \|\vec{w}\|^2 - \sum_{n=1}^N a_n \left\{ t_n \left(\vec{w}^T \vec{\phi}(\vec{x}_n) + w_0 \right) - 1 \right\} \quad \text{t.q. } a_n \geq 0$$

Approche duale

$$\begin{aligned} & \arg \min_{\vec{w}, w_0} \left\{ \frac{1}{2} \|\vec{w}\|^2 \right\} \\ & \text{t.q. } t_n \left(\vec{w}^T \vec{\phi}(\vec{x}_n) + w_0 \right) \geq 1 \quad \forall n \end{aligned}$$

On peut enlever les contraintes en introduisant les **multiplicateurs de Lagrange** (voir Bishop, Annexe E)

$$L(\vec{w}, w_0, \vec{a}) = \frac{1}{2} \|\vec{w}\|^2 - \sum_{n=1}^N a_n \left\{ t_n \left(\vec{w}^T \vec{\phi}(\vec{x}_n) + w_0 \right) - 1 \right\} \quad \text{t.q. } a_n \geq 0$$

$$L(\vec{w}, w_0, \vec{a}) = \frac{1}{2} \|\vec{w}\|^2 - \sum_{n=1}^N a_n \left\{ t_n \left(\vec{w}^T \vec{\phi}(\vec{x}_n) + w_0 \right) - 1 \right\} \quad \text{t.q. } a_n \geq 0$$

En annulant les dérivées $\frac{\partial L(\vec{w}, w_0, \vec{a})}{\partial \vec{w}} = 0 \quad \frac{\partial L(\vec{w}, w_0, \vec{a})}{\partial w_0} = 0$

$$\vec{w} = \sum_{n=1}^N a_n t_n \vec{\phi}(\vec{x}_n) \quad \sum_{n=1}^N a_n t_n = 0$$

$$L(\vec{w}, w_0, \vec{a}) = \frac{1}{2} \|\vec{w}\|^2 - \sum_{n=1}^N a_n \{ \vec{w}^T \vec{\phi}(\vec{x}_n) + w_0 - 1 \} \quad \text{t.q } a_n \geq 0$$

En annulant les dérivées $\frac{\partial L(\vec{w}, w_0, \vec{a})}{\partial \vec{w}} = 0 \quad \frac{\partial L(\vec{w}, w_0, \vec{a})}{\partial w_0} = 0$

$$\vec{w} = \underbrace{\sum_{n=1}^N a_n t_n \vec{\phi}(\vec{x}_n)}_{\text{combinaison linéaire des entrées}} \quad \sum_{n=1}^N a_n t_n = 0$$

on peut exprimer \vec{w} comme une combinaison linéaire des entrées

On peut alors réécrire $L(\vec{w}, w_0, \vec{a})$ comme suit

$$\tilde{L}(\vec{a}) = \sum_{n=1}^N a_n - \frac{1}{2} \sum_{n=1}^N \sum_{m=1}^N a_n a_m t_n t_m \overbrace{k(\vec{x}_n, \vec{x}_m)}^{\phi(\vec{x}_n)^T \phi(\vec{x}_m)}$$

où on a toujours $a_n \geq 0$ et $\sum_{n=1}^N a_n t_n = 0$

26

On peut alors réécrire $L(\vec{w}, w_0, \vec{a})$ comme suit

$$\tilde{L}(\vec{a}) = \sum_{n=1}^N a_n - \frac{1}{2} \sum_{n=1}^N \sum_{m=1}^N a_n a_m t_n t_m \overbrace{k(\vec{x}_n, \vec{x}_m)}^{\phi(\vec{x}_n)^T \phi(\vec{x}_m)}$$

où on a toujours $a_n \geq 0$ et $\sum_{n=1}^N a_n t_n = 0$

Solution par **programme quadratique**



Représentation **duale** avec l'**astuce du noyau**

27

$\phi(\tilde{x}_n)^T \phi(\tilde{x}_m)$

$$\tilde{L}(\tilde{a}) = \sum_{n=1}^N a_n - \frac{1}{2} \sum_{n=1}^N \sum_{m=1}^N a_n a_m t_n t_m k(\tilde{x}_n, \tilde{x}_m)$$

On peut démontrer que la solution à $\tilde{L}(\tilde{a})$ satisfait

$$\left. \begin{array}{l} a_n \geq 0 \\ t_n y(\tilde{x}_n) - 1 \geq 0 \\ a_n \{t_n y(\tilde{x}_n) - 1\} = 0 \end{array} \right\} \text{ Implique } \left\{ \begin{array}{l} t_n y(\tilde{x}_n) = 1 \text{ et } a_n \geq 0 \\ \text{ou} \\ t_n y(\tilde{x}_n) > 1 \text{ et } a_n = 0 \end{array} \right.$$

Lié aux conditions de Karush-Kuhn-Tucker (KKT)
(voir Bishop, annexe E)

28

$\phi(\tilde{x}_n)^T \phi(\tilde{x}_m)$

$$\tilde{L}(\tilde{a}) = \sum_{n=1}^N a_n - \frac{1}{2} \sum_{n=1}^N \sum_{m=1}^N a_n a_m t_n t_m k(\tilde{x}_n, \tilde{x}_m)$$

On peut démontrer que la solution à $\tilde{L}(\tilde{a})$ satisfait

$$\left. \begin{array}{l} a_n \geq 0 \\ t_n y(\tilde{x}_n) - 1 \geq 0 \\ a_n \{t_n y(\tilde{x}_n) - 1\} = 0 \end{array} \right\} \text{ Implique } \left\{ \begin{array}{l} t_n y(\tilde{x}_n) = 1 \text{ et } a_n \geq 0 \\ \text{ou} \\ t_n y(\tilde{x}_n) > 1 \text{ et } a_n = 0 \end{array} \right.$$

Vecteurs de support

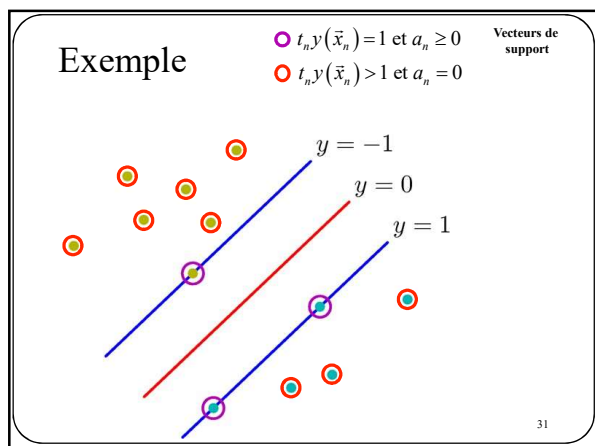
Lié aux conditions de Karush-Kuhn-Tucker (KKT)
(voir Bishop, annexe E)

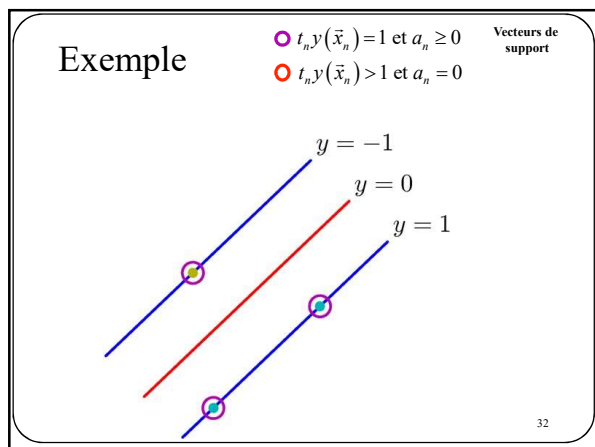
29

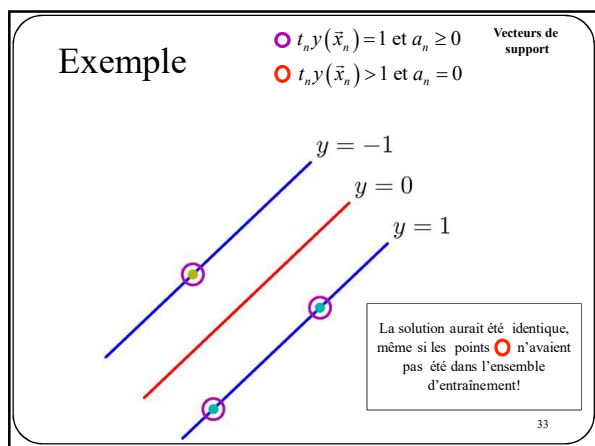
Exemple

○
 $t_n y(\tilde{x}_n) = 1 \text{ et } a_n \geq 0$
Vecteurs de support

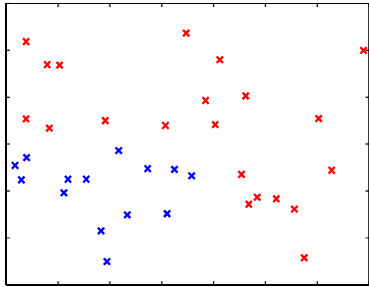
30



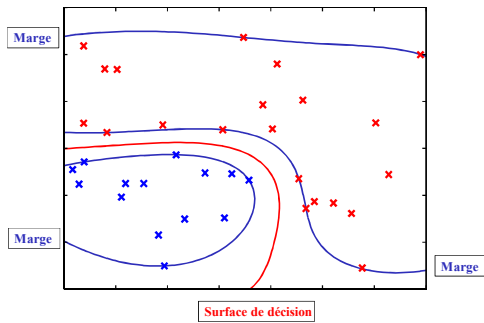




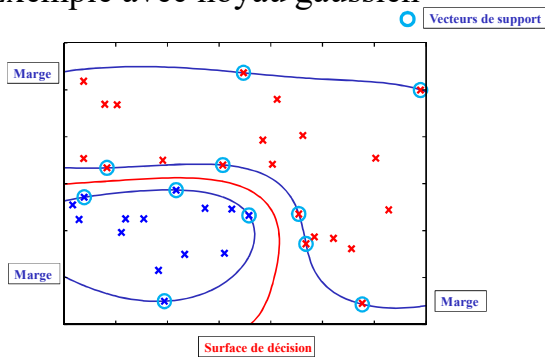
Exemple avec noyau gaussien



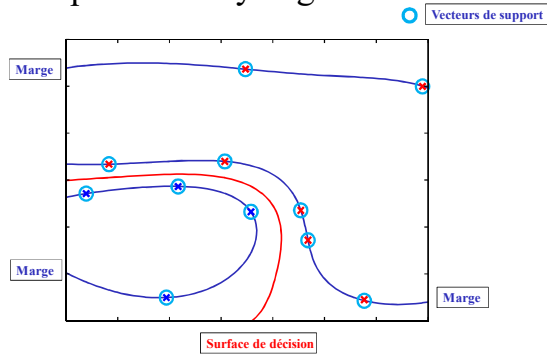
Exemple avec noyau gaussien



Exemple avec noyau gaussien



Exemple avec noyau gaussien



Prédiction avec la représentation duale

$$\begin{aligned} y_w(\vec{\phi}(\vec{x})) &= \vec{w}^T \vec{\phi}(\vec{x}) + w_0 \\ &= \left(\sum_{n=1}^N a_n t_n \vec{\phi}(\vec{x}_n) \right)^T \vec{\phi}(\vec{x}) + w_0 \\ &= \sum_{n=1}^N (a_n t_n \vec{\phi}(\vec{x}_n)^T \vec{\phi}(\vec{x})) + w_0 \\ &= \sum_{n=1}^N (a_n t_n k(\vec{x}_n, \vec{x})) + w_0 \end{aligned}$$

Seuls les vecteurs de support vont voter!

Noyau

38

Prédiction avec la représentation duale

$$\begin{aligned} y_w(\vec{\phi}(\vec{x})) &= \vec{w}^T \vec{\phi}(\vec{x}) + w_0 \\ &= \left(\sum_{n=1}^N a_n t_n \vec{\phi}(\vec{x}_n) \right)^T \vec{\phi}(\vec{x}) + w_0 \\ &= \sum_{n=1}^N (a_n t_n \vec{\phi}(\vec{x}_n)^T \vec{\phi}(\vec{x})) + w_0 \\ &= \sum_{n=1}^N (a_n t_n k(\vec{x}_n, \vec{x})) + w_0 \end{aligned}$$

Voir équation 7.18 pour calculer w_0

39



RAPPEL

Équivalent à

$$\begin{aligned} & \arg \min_{\bar{w}, w_0} \left\{ \frac{1}{2} \|\bar{w}\|^2 \right\} \\ & \text{s.t. } t_n (\bar{w}^T \bar{\phi}(\bar{x}_n) + w_0) \geq 1 \quad \forall n \end{aligned}$$

SVM : Approche primale

RAPPEL

$$\arg \max_{\vec{w}, w_0} \left\{ \frac{1}{\|\vec{w}\|} \min_n \left(t_n (\vec{w}^T \vec{\phi}(\vec{x}_n) + w_0) \right) \right\}$$

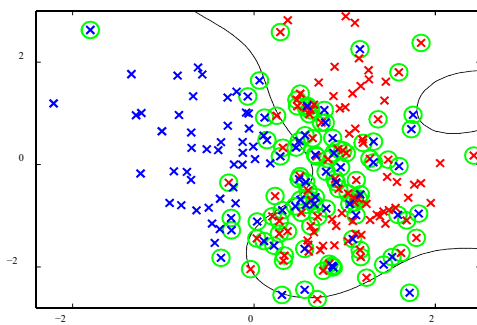
Que faire s'il y a :

- Des données aberrantes dans l'ensemble d'entraînement?
- Si les données des 2 classes se chevauchent?

$$\text{t.q. } t_n (\vec{w}^T \vec{\phi}(\vec{x}_n) + w_0) \geq 1 \quad \forall n$$

Ce problème d'optimisation est un **programme quadratique** pour lequel il existe de nombreuses bibliothèques

Exemple de classes qui se chevauchent



Variables de ressort (*slack variables*)

Permettre que certains exemples ne respectent pas la contrainte de marge

$$\arg \min_{\vec{w}, w_0} \left\{ \frac{1}{2} \|\vec{w}\|^2 \right\}$$

$$\text{t.q. } t_n y_{\vec{w}} (\vec{w}^T \vec{\phi}(\vec{x}_n)) \geq 1 \quad \forall n$$

Devient

$$\arg \min_{\vec{w}, w_0, \xi} \left\{ \frac{1}{2} \|\vec{w}\|^2 \right\} + C \sum_{n=1}^N \xi_n$$

$$\text{t.q. } t_n y_{\vec{w}} (\vec{w}^T \vec{\phi}(\vec{x}_n)) \geq 1 - \xi_n$$

$$\forall n, \xi_n \geq 0$$

Les **variables de ressort** ξ_n correspondent aux violations des contraintes de marge.

Variables de ressort (*slack variables*)

On va permettre que les exemples ne respectent pas la contrainte de marge

$$\begin{array}{l} \arg \min_{\vec{w}, w_0, \xi} \left\{ \frac{1}{2} \|\vec{w}\|^2 \right\} \\ \text{t.q. } t_n y_{\vec{w}}(\vec{\phi}(\vec{x}_n)) \geq 1 \quad \forall n \end{array} \quad \xrightarrow{\text{Devient}} \quad \begin{array}{l} \arg \min_{\vec{w}, w_0, \xi} \left\{ \frac{1}{2} \|\vec{w}\|^2 \right\} + C \sum_{n=1}^N \xi_n \\ \text{t.q. } t_n y_{\vec{w}}(\vec{\phi}(\vec{x}_n)) \geq 1 - \xi_n \\ \forall n, \xi_n \geq 0 \end{array}$$

Les **variables de ressort** ξ_n correspondent aux violations des contraintes de marge.

Variables de ressort (*slack variables*)

On va permettre que les exemples ne respectent pas la contrainte de marge

$$\begin{array}{l} \arg \min_{\vec{w}, w_0, \xi} \left\{ \frac{1}{2} \|\vec{w}\|^2 \right\} \\ \text{t.q. } t_n y_{\vec{w}}(\vec{\phi}(\vec{x}_n)) \geq 1 \quad \forall n \end{array} \quad \xrightarrow{\text{Devient}} \quad \begin{array}{l} \arg \min_{\vec{w}, w_0, \xi} \left\{ \frac{1}{2} \|\vec{w}\|^2 \right\} + C \sum_{n=1}^N \xi_n \\ \text{t.q. } t_n y_{\vec{w}}(\vec{\phi}(\vec{x}_n)) \geq 1 - \xi_n \\ \forall n, \xi_n \geq 0 \end{array}$$

Si ξ_n est plus grand que 1, la donnée est alors mal classée.

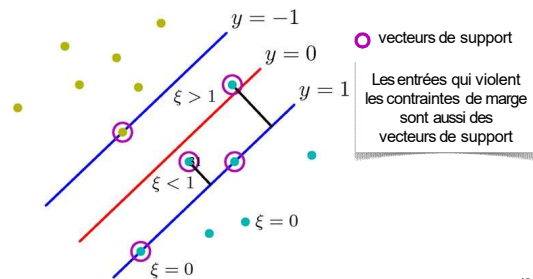
Variables de ressort (*slack variables*)

On va permettre que les exemples ne respectent pas la contrainte de marge

$$\begin{array}{l} \arg \min_{\vec{w}, w_0, \xi} \left\{ \frac{1}{2} \|\vec{w}\|^2 \right\} \\ \text{t.q. } t_n y_{\vec{w}}(\vec{\phi}(\vec{x}_n)) \geq 1 \quad \forall n \end{array} \quad \xrightarrow{\text{Devient}} \quad \begin{array}{l} \arg \min_{\vec{w}, w_0, \xi} \left\{ \frac{1}{2} \|\vec{w}\|^2 \right\} + C \sum_{n=1}^N \xi_n \\ \text{t.q. } t_n y_{\vec{w}}(\vec{\phi}(\vec{x}_n)) \geq 1 - \xi_n \\ \forall n, \xi_n \geq 0 \end{array}$$

La constante $C > 0$ est un hyper-paramètre
 • Plus C est petit, plus on permet des données mal classées

Exemple (variables de ressort)



49

Variables de ressort – représentation **duale**

On peut montrer que la représentation duale demeure la même que sans variable de ressort

$$\tilde{L}(\vec{a}) = \sum_{n=1}^N a_n - \frac{1}{2} \sum_{n=1}^N \sum_{m=1}^N a_n a_m t_n t_m k(\vec{x}_n, \vec{x}_m)$$

mais avec les contraintes $\boxed{C \geq a_n} \geq 0$ et $\sum_{n=1}^N a_n t_n = 0$

Reste un problème de **programmation quadratique**

50

Variables de ressort – représentation **primale**

$$\begin{aligned} \arg \min_{\vec{w}, w_0, \xi} & \left\{ \frac{1}{2} \|\vec{w}\|^2 \right\} + C \sum_{n=1}^N \xi_n \\ \text{t.q. } & t_n y_{\vec{w}}(\phi(\vec{x}_n)) \geq 1 - \xi_n \\ & \forall n, \xi_n \geq 0 \end{aligned}$$

51

Variables de ressort – représentation **primale**

$$\begin{aligned} \arg \min_{\vec{w}, w_0, \xi} & \left\{ \frac{1}{2} \|\vec{w}\|^2 \right\} + C \sum_{n=1}^N \xi_n \\ \text{t.q. } & \xi_n \geq 1 - t_n y_{\vec{w}}(\phi(\vec{x}_n)) \\ & \forall n, \xi_n \geq 0 \end{aligned}$$

52

Variables de ressort – représentation primale

$$\arg \min_{\vec{w}, w_0} \frac{1}{2} \|\vec{w}\|^2 + C \sum_{n=1}^N \max(0, 1 - t_n y_{\vec{w}}(\phi(\vec{x}_n)))$$

Forme similaire à celle présentée au chapitre sur la segmentation linéaire!

53

Même forme qu'au chapitre 4!

$$\arg \min_{\vec{w}, w_0} \sum_{n=1}^N \max(0, 1 - t_n y_{\vec{w}}(\phi(\vec{x}_n))) + \lambda \|\vec{w}\|^2$$

Constante
Fonction de perte (Hinge loss)
Régularisation ($\lambda = 1/2C$)

Solution obtenue par **descente de gradient**

54

Résumé (SVM sans noyau - primal)

• **Modèle:** $y_{\vec{w}}(\phi(\vec{x}_n)) = \vec{w}^T \phi(\vec{x}_n) + w_0$

• **Problème :**
$$\arg \min_{\vec{w}, w_0, \xi} \frac{1}{2} \|\vec{w}\|^2 + C \sum_{n=1}^N \xi_n$$

 t.q. $\xi_n \geq 1 - t_n y_{\vec{w}}(\phi(\vec{x}_n))$
 $\forall n, \xi_n \geq 0$

• **Hyper-paramètres:** C

• **Entraînement :** résoudre programme quadratique

Résumé (SVM sans noyau - primal)

• **Modèle:** $y_{\vec{w}}(\phi(\vec{x}_n)) = \vec{w}^T \phi(\vec{x}_n) + w_0$

• **Problème :**
$$\arg \min_{\vec{w}, w_0, \xi} \frac{1}{2} \|\vec{w}\|^2 + C \sum_{n=1}^N \xi_n$$

 t.q. $\xi_n \geq 1 - t_n y_{\vec{w}}(\phi(\vec{x}_n))$
 $\forall n, \xi_n \geq 0$

• **Hyper-paramètres:** C

• **Entraînement :** descente de gradient

$$\arg \min_{\vec{w}, w_0} \sum_{n=1}^N \max(0, 1 - t_n y_{\vec{w}}(\phi(\vec{x}_n))) + \lambda \|\vec{w}\|^2$$

Résumé (SVM avec noyau - dual)

• **Modèle:** $y_{\vec{w}}(\phi(\vec{x}_n)) = \vec{w}^T \phi(\vec{x}_n) + w_0$

• **Problème :**
$$\arg \min_{\vec{a}} \sum_{n=1}^N a_n - \frac{1}{2} \sum_{n=1}^N \sum_{m=1}^N a_n a_m t_n t_m k(\vec{x}_n, \vec{x}_m)$$

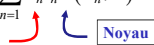
 t.q. $C \geq a_n \geq 0$ et $\sum_{n=1}^N a_n t_n = 0$ Plusieurs des a_n seront à 0

• **Hyper-paramètres:** C

• **Entraînement :** programme quadratique

• **Prédiction:** $y(\vec{x}_n) = \sum_{n=1}^N a_n t_n k(\vec{x}_n, \vec{x}) + w_0$

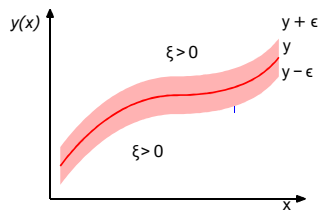
Seuls les vecteurs de support vont voter!



Noyau

Peut s'étendre à la régression

Voir section 7.1.4



58
