Basics of Machine Learning

SD 210 - P3

Lecture 3 - Support Vector Machines

Florence d'Alché-Buc

Contact: florence.dalche@telecom-paristech.fr,
2A Filière SD, Télécom ParisTech,Université of Paris-Saclay, France

Outline

Classification binaire supervisée

Cadre probabiliste et statistique 1/2

- Soit X un vecteur aléatoire de $\mathcal{X} = \mathbb{R}^p$
- Y une variable aléatoire discrète $\mathcal{Y} = \{-1, 1\}$
- Soit $\mathbb{P}$ la loi de probabilité jointe de (X,Y)
- Soit $\mathcal{S}_n = \{(x_1, y_1), \ldots, (x_n, y_n)\}$, i.i.d. sample from $\mathbb{P}$.

Cadre probabiliste et statistique 2/2

- Soit $f: \mathbb{R}^p \to \{-1, +1\}$ une fonction de classification binaire: $f(x) = \mathrm{sign}(h(x))$ avec $h: \mathbb{R}^p \to \mathbb{R} \in \mathcal{H}$
- Soit $\ell : \{-1, +1\} \times \mathbb{R} \to \mathbb{R}$ une fonction de perte
- Risque empirique $R_n(h) = \frac{1}{n} \sum_i \ell(y_i, h(x_i))$ et un terme régularisateur $\Omega(h)$ qui mesure la *complexité* de h.
- On cherche : $\hat{h} = \arg\min_{h \in \mathcal{H}} R_n(h) + \lambda \Omega(h)$

Et en pratique, comment fait-on ?

Méthodologie pour développer une approche discriminante

- Définir
  - l'**espace de représentation** des entrées

Et en pratique, comment fait-on ?

Méthodologie pour développer une approche discriminante

- Définir
  - l'**espace de représentation** des entrées
  - la **classe des fonctions** de classification binaire considérées

Et en pratique, comment fait-on ?

Méthodologie pour développer une approche discriminante

- Définir
    - l'**espace de représentation** des entrées
    - la **classe des fonctions** de classification binaire considérées
    - la **fonction de coût** à minimiser pour obtenir le meilleur classifieur dans cette classe

Et en pratique, comment fait-on ?

Méthodologie pour développer une approche discriminante

- Définir
  - l'**espace de représentation** des entrées
  - la **classe des fonctions** de classification binaire considérées
  - la **fonction de coût** à minimiser pour obtenir le meilleur classifieur dans cette classe
  - l'**algorithme de minimisation** de cette fonction de coût

Et en pratique, comment fait-on ?

Méthodologie pour développer une approche discriminante

- Définir
  - l'**espace de représentation** des entrées
  - la **classe des fonctions** de classification binaire considérées
  - la **fonction de coût** à minimiser pour obtenir le meilleur classifieur dans cette classe
  - l'**algorithme de minimisation** de cette fonction de coût
  - une **méthode de sélection de modèle** pour définir les hyperparamètres

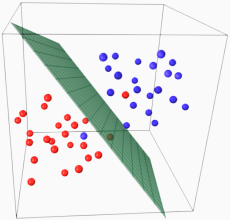
Outline

Définition

Soit $\mathbf{x} \in \mathbb{R}^p$

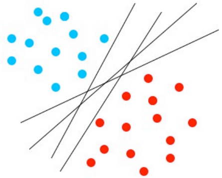
$h(\mathbf{x}) = \text{signe}(\mathbf{w}^T\mathbf{x} + b)$

L'équation : $\mathbf{w}^T\mathbf{x} + b = 0$ définit un hyperplan dans l'espace euclidien $\mathbb{R}^p$



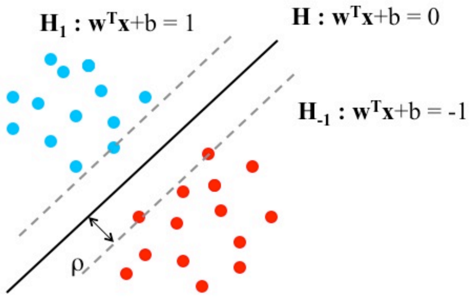
Exemple: données d'apprentissage en 3D et séparateur linéaire

Cas de données linéairement séparables



Exemple en 2D: quelle droite choisir ?

Critère de marge



Critère de marge

Notion de marge géométrique

- Pour séparer les données, on considère un triplet d'hyperplans:
  - H: $\mathbf{w}^T\mathbf{x} + b = 0$, $H_1 : \mathbf{w}^T\mathbf{x} + b = 1$, $H_{-1} : \mathbf{w}^T\mathbf{x} + b = -1$
- On appelle *marge géométrique*, $\rho(\mathbf{w})$ la plus petite distance entre les données et l'hyperplan H, ici donc la moitié de la distance entre H_1 et H_{-1}
- Un calcul simple donne : $\rho(\mathbf{w}) = \frac{1}{||\mathbf{w}||}$.

Nouvelle fonction de coût à optimiser

Comment déterminer w et b ?

- Maximiser la marge $\rho(\mathbf{w})$ tout en séparant les données de part et d'autre de H_1 et H_{-1}
- Séparer les données bleues $(y_i = 1)$: $\mathbf{w}^T\mathbf{x}_i + b \geq 1$
- Séparer les données rouges $(y_i = -1)$: $\mathbf{w}^T\mathbf{x}_i + b \leq -1$

SVM linéaire: cas séparable

Optimisation dans l'espace primal

$$\begin{aligned} \underset{\mathbf{w},b}{\text{minimiser}} \quad & \frac{1}{2}\|\mathbf{w}\|^2 \\ \text{sous la contrainte} \quad & y_i(\mathbf{w}^T\mathbf{x}_i + \mathrm{b}) \geq 1,\ i = 1, \ldots, n. \end{aligned}$$

Référence

Boser, B. E.; Guyon, I. M.; Vapnik, V. N. (1992). "A training algorithm for optimal margin classifiers". Proceedings of the fifth annual workshop on Computational learning theory - COLT '92. p. 144.

Programmation quadratique sous contraintes inégalités

Problème du type (attention les notations changent !)

- un problème d'optimisation ($\mathcal{P}$) est défini par

$$\begin{array}{rl} \text{minimiser sur } \mathbb{R}^n & J(\mathbf{x}) \\ \text{avec} & h_i(\mathbf{x}) = 0\,,\, 1 \leq i \leq p \\ & g_j(\mathbf{x}) \leq 0\,,\, 1 \leq j \leq q \end{array}$$

- rappel de vocabulaire :
  - les h_i sont les **contraintes d'égalité** (notées $\mathbf{h}(\mathbf{x}) = 0$)
  - les g_j sont les **contraintes d'inégalité** (notées $\mathbf{g}(\mathbf{x}) \leq 0$)
  - l'**ensemble des contraintes** est

$$\mathcal{C} = \{\mathbf{x} \in \mathbb{R}^n | h_i(\mathbf{x}) = 0\,,\, 1 \leq i \leq p \text{ et } g_j(\mathbf{x}) \leq 0\,,\, 1 \leq j \leq q\}$$

ensemble des points admissibles ou **réalisables**

Programmation quadratique sous contraintes inégalités

Problème primal:

$$\begin{array}{ll} \underset{\mathbf{w},b}{\text{minimiser}} & \frac{1}{2}\left\|\mathbf{w}\right\|^2 \\ \text{sous la contrainte} & 1 - y_i(\mathbf{w}^T\mathbf{x}_i + \mathrm{b}) \leq 0,\ i = 1, \ldots, n. \end{array}$$

Lagrangien

$$\mathcal{L}(\mathbf{w}, b, \boldsymbol{\alpha}) = \frac{1}{2}||\mathbf{w}||^2 + \sum_i \alpha_i(1 - y_i(\mathbf{w}^T\mathbf{x}_i + \mathrm{b}))$$

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

La solution qui minimise le problème primal est donnée par $\min_{\mathbf{w}} \max_{\boldsymbol{\alpha}} \mathcal{L}(\mathbf{w}, \boldsymbol{\alpha})$, un problème de point de selle. Lorsque la fonction est convexe, nous pouvons intervertir le min et le max.

Conditions de Karush-Kuhn-Tucker

En l'extremum, on a

$$\nabla_{\mathbf{w}}\mathcal{L}(\mathbf{w}) = \mathbf{w} - \sum_{i=1}^{n} \alpha_i y_i \mathbf{x}_i = 0$$

$$\nabla_b \mathcal{L}(b) = -\sum_{i=1}^{n} \alpha_i y_i = 0$$

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

$$\forall i, \alpha_i[1 - y_i(\mathbf{w}^T \mathbf{x}_i + b)] = 0$$

Obtention des α_i : résolution dans l'espace dual

$$\mathcal{L}(\alpha) = \sum_i \alpha_i - \frac{1}{2} \sum_{i,j} \alpha_i \alpha_j y_i y_j (\mathbf{x}_i^T \mathbf{x}_j)$$

- Maximiser $\mathcal{L}$ sous les contraintes $\alpha_i \geq 0$ et $\sum_i \alpha_i y_i = 0, \forall i = 1, \ldots, n$
- Faire appel à un solveur quadratique

SVM linéaires ou Optimal Margin Hyperplan

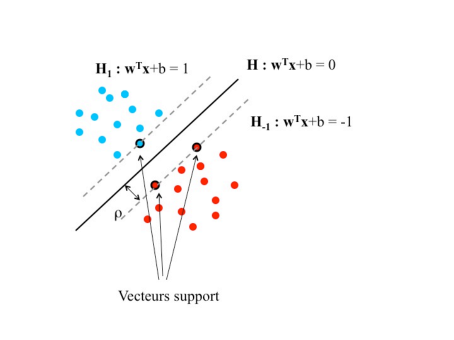
Supposons que les multiplicateurs de Lagrange α_i soient déterminés :

Equation d'un SVM linéaire

$$f(\mathbf{x}) = \text{signe}(\sum_{i=1}^{n} \alpha_i y_i \mathbf{x}_i^T \mathbf{x} + b)$$

Pour classer une donnée $\mathbf{x}$, ce classifier combine linéairement les valeurs de classe y_i des données support avec des poids du type $\alpha_i \mathbf{x}_i^T \mathbf{x}$ dépendant de la ressemblance entre $\mathbf{x}$ et les données support au sens du produit scalaire.

Vecteurs "supports"



Les données d'apprentissage $\mathbf{x}_i$ telles que $\alpha_i \neq 0$ sont sur l'un ou l'autre des hyperplans H_1 ou H_{-1}. Seules ces données dites *vecteur de support* comptent dans la définition de $\mathbf{w} = \sum_{i=1}^{n} \alpha_i y_i \mathbf{x}_i$

NB : b est obtenu en choisissant une donnée support ($\alpha_i \neq 0$)

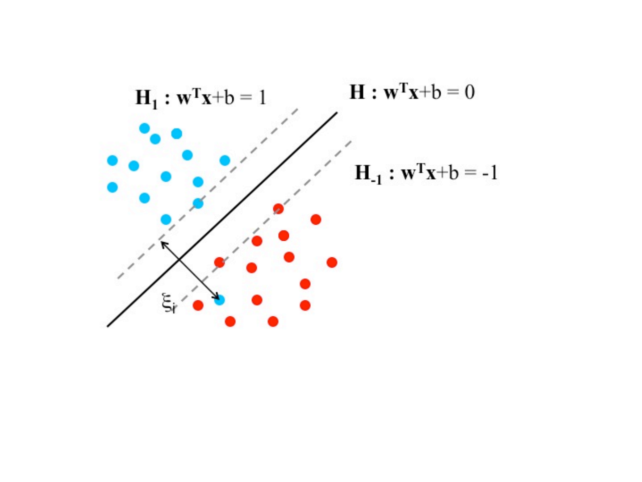
Cas réaliste: SVM linéaire dans le cas données non séparables

Introduire une variable d'écart ξ_i pour chaque donnée:

Problème dans le primal

$$
\begin{aligned}
\min_{\mathbf{w},b,\xi} \quad & \frac{1}{2}\|\mathbf{w}\|^2 + C\sum_{i=1}^{n}\xi_i \\
\text{sous les contraintes} \quad & y_i(\mathbf{w}^T\mathbf{x}_i + \mathrm{b}) \geq 1 - \xi_i \; i = 1, \ldots, n. \\
& \xi_i \geq 0 \; i = 1, \ldots, n.
\end{aligned}
$$

Cas réaliste: SVM linéaire dans le cas données non séparables



Notion de marge douce

Cas réaliste: SVM linéaire dans le cas données non séparables

Problème dans le dual

$$\begin{aligned} \max_{\alpha} \quad & \sum_i \alpha_i - \frac{1}{2} \sum_{i,j} \alpha_i \alpha_j y_i y_j \mathbf{x}_i^T \mathbf{x}_j \\ \text{sous les contraintes} \quad & 0 \leq \alpha_i \leq C \; i = 1, \ldots, n. \\ & \sum_i \alpha_i y_i \; i = 1, \ldots, n. \end{aligned}$$

Conditions de Karush-Kuhn-Tucker (KKT)

Soit α^* la solution du problème dual:

$$\forall i, [y_i f_{w^*,b^*}(x_i) - 1 + \xi_i^*] \leq 0 \tag{1}$$

$$\forall i, \alpha_i^* \geq 0 \tag{2}$$

$$\forall i, \alpha_i^* [y_i f_{w^*,b^*}(x_i) - 1 + \xi_i^*] = 0 \tag{3}$$

$$\forall i, \mu_i^* \geq 0 \tag{4}$$

$$\forall i, \mu_i^* \xi_i^* = 0 \tag{5}$$

$$\forall i, \alpha_i^* + \mu_i^* = C \tag{6}$$

$$\forall i, \xi_i^* \geq 0 \tag{7}$$

$$\mathbf{w}^* = \sum_i \alpha_i^* y_i \mathbf{x}_i \tag{8}$$

$$\sum_i \alpha_i^* y_i = 0 \tag{9}$$

$$\tag{10}$$

Différents cas de figure

Soit α^* la solution du problème dual:

- si $\alpha_i^* = 0$, alors $\mu_i^* = C > 0$ et donc, $\xi_i^* = 0$: x_i est bien classé
- si $0 < \alpha_i^* < C$ alors $\mu_i^* > 0$ et donc, $\xi_i^* = 0$: x_i est tel que : $y_i f(x_i) = 1$
- si $\alpha_i^* = C$, alors $\mu_i^* = 0$, $\xi_i^* = 1 - y_i f_{w^*,b^*}(x_i)$

NB : on calcule b^* en utilisant un i tel que $0 < \alpha_i^* < C$

Cas réaliste: SVM linéaire dans le cas données non séparables

Quelques remarques

- certaines données support peuvent donc être de l'autre côté des hyperplans H_1 ou H_{-1}
- C est un hyperparamètre qui contrôle le compromis entre la complexité du modèle et le nombre d'erreurs de classification du modèle.

SVM : approche par régularisation

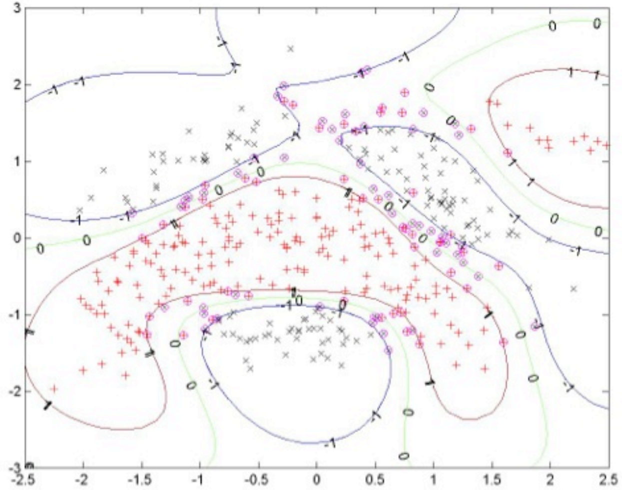
Optimisation dans l'espace primal

$$\min_{\mathbf{w},b} \quad \sum_{i=1}^{n} (1 - y_i(\mathbf{w}^T \mathbf{x}_i + b))_+ + \lambda \frac{1}{2} \|\mathbf{w}\|^2$$

Avec: $(z)_+ = max(0, z)$
$f(\mathbf{x}) = \text{signe}(h(\mathbf{x}))$
Fonction de coût: $L(\mathbf{x}, y, h(\mathbf{x})) = (1 - yh(\mathbf{x}))_+$
$yh(\mathbf{x})$ est appelée marge du classifieur

Outline

Support Vector Machine : le cas non linéaire



Remarque

Le problème de l'hyperplan de marge optimale ne fait intervenir les données d'apprentissage qu'à travers de produits scalaires.

$$\begin{aligned}
\max_{\alpha} \quad & \sum_i \alpha_i - \frac{1}{2}\sum_{i,j} \alpha_i \alpha_j y_i y_j \mathbf{x}_i^T \mathbf{x}_j \\
\text{sous les contraintes} \quad & 0 \leq \alpha_i \leq C \; i = 1, \ldots, n. \\
& \sum_i \alpha_i y_i \; i = 1, \ldots, n.
\end{aligned}$$

Remarque 1: apprentissage

Si je transforme les données à l'aide d'une fonction ϕ (non linéaire) et si je sais calculer les produits scalaires $\phi(\mathbf{x}_i)^T\phi(\mathbf{x}_j)$, je peux apprendre une fonction de séparation non linéaire.

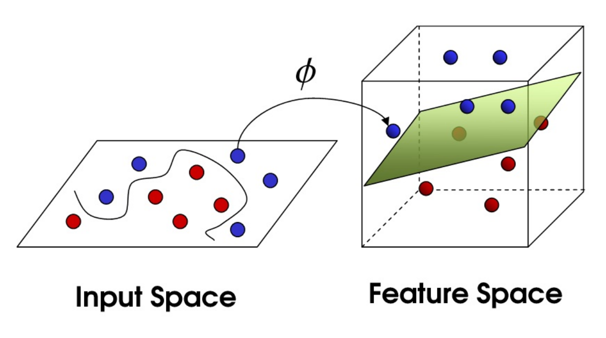
$$\begin{array}{ll} \max\limits_{\alpha} & \sum\limits_i \alpha_i - \frac{1}{2}\sum\limits_{i,j} \alpha_i\alpha_j y_i y_j \phi(\mathbf{x}_i)^T\phi(\mathbf{x}_j) \\ \text{sous les contraintes} & 0 \leq \alpha_i \leq C \; i = 1, \ldots, n. \\ & \sum\limits_i \alpha_i y_i \; i = 1, \ldots, n. \end{array}$$

Pour classer une nouvelle donné $\mathbf{x}$, je n'ai besoin que de savoir calculer $\phi(\mathbf{x})^T\phi(\mathbf{x}_i)$.

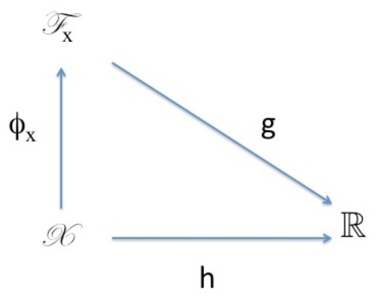
Astuce du noyau

Si je remplace $\mathbf{x}_i^T\mathbf{x}_j$ par l'image par une fonction k : $k(\mathbf{x}_i, \mathbf{x}_j)$ telle qu'il existe un espace de re-description (*feature space*) $\mathcal{F}$ et une fonction de re-description (*feature map*) $\phi : \mathcal{X} \to \mathcal{F}$ et $\forall(\mathbf{x}, \mathbf{x}') \in \mathcal{X}, k(\mathbf{x}, \mathbf{x}') = \phi(\mathbf{x})^T\phi(\mathbf{x}')$, alors je peux appliquer le même algorithme d'optimisation (résolution dans le dual) et j'obtiens :
$f(\mathbf{x}) = \text{signe}(\sum_{i=1}^{n} \alpha_i y_i k(\mathbf{x}_i, \mathbf{x}) + b)$
Des telles fonctions existent et sont appelées *noyaux*.

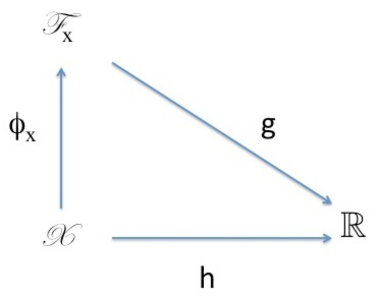
Astuce du noyau et fonction de redescription 1/2



Astuce du noyau et fonction de redescription 2/2



Astuce du noyau et fonction de redescription 2/2



Fonction h du type: $h(\mathbf{x}) = \sum_{i=1}^{n} \beta_i \phi(x)^T \phi(x_i) = \sum_{i=1}^{n} \beta_i k(x, x_i)$,

avec $k : \mathcal{X} \times \mathcal{X} \to \mathbb{R}$ un noyau positif défini.

Noyaux

Définition

Soit $\mathcal{X}$ un ensemble. Soit k:$\mathcal{X} \times \mathcal{X} \to \mathbb{R}$, une fonction symétrique. La fonction k est appelée *noyau* positif défini si et seulement si quel que soit le sous-ensemble fini $\{\mathbf{x}_1, \ldots, \mathbf{x}_m\}$ de $\mathcal{X}$ et le vecteur colonne **c** de $\mathbb{R}^m$, $\mathbf{c}^T K \mathbf{c} = \sum_{i,j=1}^m c_i c_j k(x_i, x_j) \geq 0$

N.B.: on impose donc que toute matrice construite à partir d'un nombre fini d'éléments de $\mathcal{X}$ soit semi-définie positive.

Théorème de Moore-Aronzajn

Soit K un noyau positif défini. Alors, il existe un espace de Hilbert $\mathcal{F}$, appelé *espace de redescription* et une fonction $\phi : \mathcal{X} \rightarrow \mathcal{F}$, appelée fonction de redescription (en anglais, feature map) telle que:
$\langle \phi(x), \phi(x') \rangle_{\mathcal{F}} = k(x, x')$.
N.B.: pour un noyau k, il peut exister plusieurs couples $(\mathcal{F}, \phi)$.

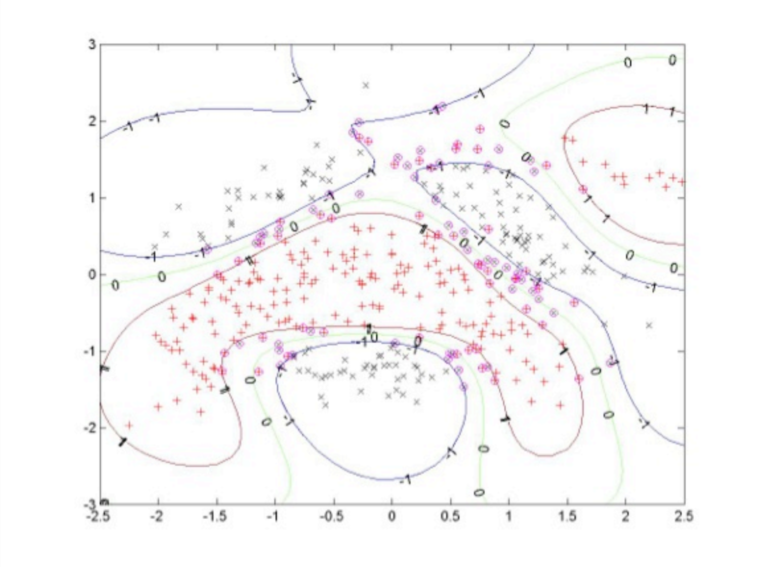
Noyaux

Noyaux entre vecteurs

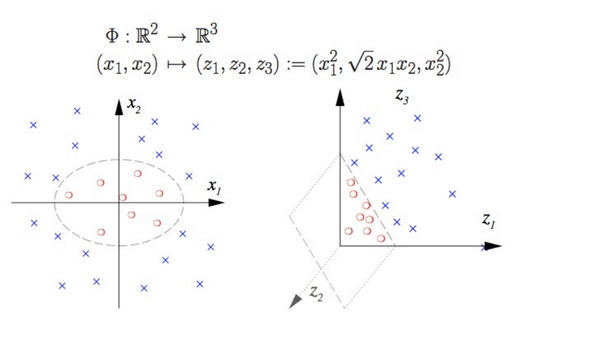
$\forall \mathbf{x}, \mathbf{x}' \in \mathbb{R}^p$

- Noyau linéaire : $k(\mathbf{x}, \mathbf{x}') = \mathbf{x}^T \mathbf{x}'$
- Noyau polynomial : $k(\mathbf{x}, \mathbf{x}') = (\mathbf{x}^T \mathbf{x}' + c)^d$
- Noyau gaussien : $k(\mathbf{x}, \mathbf{x}') = \exp(-\gamma ||\mathbf{x} - \mathbf{x}'||^2)$

Support Vector Machine : séparateur non linéaire par noyau gaussien



Exemple : noyau polynomial



Exemple : noyau polynomial

Astuce du noyau

On remarque que $\phi(\mathbf{x}_1)^T\phi(\mathbf{x}')$ peut se calculer sans travailler dans $\mathbb{R}^3$
Je peux définir $k(\mathbf{x}, \mathbf{x}') = \phi(\mathbf{x})^T\phi(\mathbf{x}') = (\mathbf{x}^T\mathbf{x}')^2$

Construction de noyaux

Propriétés de fermeture

Soient k_1 et $k_2 * deuxnoyauxsur X \times \mathcal{X}$. Soit $g : \mathcal{X} \to \mathbb{R}$. Soit $a \in \mathbb{R}$.

$$k(x, x') = k_1(x, x') + k_2(x, x')$$
$$k(x, x') = ak_1(x, x')$$
$$k(x, x') = k_1(x, x')k_2(x, x')$$
$$k(x, x') = g(x)g(x')$$
$$k(x, x') = k_1(g(x), g(x'))$$

Les fonctions k ainsi définis sont des noyaux.

Autre usage des noyaux

On peut construire des noyaux pour des données structurées : graphes, séquences, arbres et appliquer les SVM !

- Classifier des molécules
- Classifier des documents structurés
- Traiter des séquences biologiques
- ...

Kernel Design

- Use closure properties to build new kernels from existing ones
- Kernels can be defined for various objects:
    - **Structured objects**: (sets), graphs, trees, sequences, ...
    - Unstructured data with underlying structure: texts, images, documents, signal, biological objects
- **Kernel learning**:
    - Hyperparameter learning: see Chapelle et al. 2002
    - Multiple Kernel Learning: given $k_1, \ldots, k_m$, learn a convex combination $\sum_i \beta_i k_i$ of kernels (see SimpleMKL Rakotomamonjy et al. 2008, unifying view in Kloft et al. 2010)

Outline

Régression

Cadre probabiliste et statistique

Soit X un vecteur aléatoire de $\mathcal{X} = \mathbb{R}^p$

Y une variable aléatoire continue $\mathcal{Y} = \mathbb{R}$

Soit P la loi de probabilité jointe de (X,Y), loi fixée mais inconnue

Supposons que $S_{app} = \{(x_i, y_i), i = 1, \ldots, n\}$ soit un échantillon i.i.d. tiré de la loi P

Régression

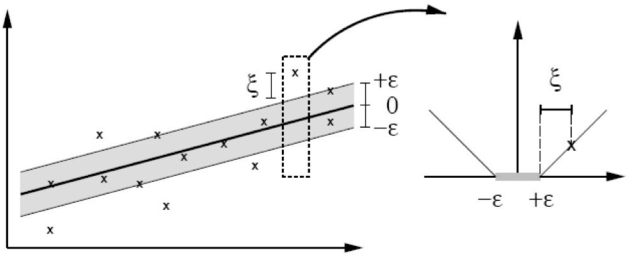
Cadre probabiliste et statistique

- A partir de S_{app}, déterminer la fonction $f \in \mathcal{F}$ qui minimise $R(f) = \mathbb{E}_P[\ell(X, Y, f(X))]$
- ℓ étant une fonction de coût local qui mesure à quel point la vraie cible et la prédiction par le classifieur sont différentes

Pb: la loi jointe n'est pas connue : on ne peut pas calculer $R(f)$

Support Vector Regression

- Extend the idea of maximal soft margin to regression
- Impose an ϵ-tube : perte ϵ-insensible $|y' - y|_\epsilon = max(0, |y' - y| - \epsilon)$



Support Vector Regression

SVR in the primal space

Given C and ϵ

$\min_{w,b,\xi} \frac{1}{2} \|\mathbf{w}\|^2 + C\sum_i(\xi_i + \xi_i^*)$

s.c.

$\forall i = 1, \dots n, y_i - f(x_i) \leq \epsilon + \xi_i$

$\forall i = 1, \dots n, f(x_i) - y_i \leq \epsilon + \xi_i^*$

$\forall i = 1, \xi_i \geq 0, \xi_i^* \geq 0$

with $f(x) = w^T\phi(x) + b$

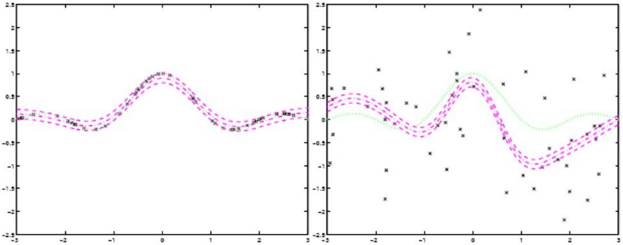
General case : ϕ is a feature map associated with a positive definite kernel k.

Solution in the dual

$\min_{\alpha,\alpha^*} \sum_{i,j}(\alpha_i - \alpha_i^*)(\alpha_j - \alpha_j^*)k(x_i, x_j) + \epsilon \sum_i(\alpha_i + \alpha_i^*) - \sum_i y_i(\alpha_i - \alpha_i^*)$
s.c. $\sum_i(\alpha_i - \alpha_i^*) = 0$ and $0 \leq \alpha_i \leq C$ and $0 \leq \alpha_i^* \leq C$
$w = \sum_{i=1}^n (\alpha_i - \alpha_i^*)\phi(x_i)$
Solution

$$f(x) = \sum_{i=1}^{n}(\alpha_i - \alpha_i^*)k(x_i, x) + b$$

Support Vector Regression: example in 1D



Identical machine parameters ($\varepsilon = 0.2$), but different amounts of noise in the data.

B. Schölkopf, Canberra, February 2002

Outline

References

- BOSER, Bernhard E., Isabelle M. GUYON, and Vladimir N. VAPNIK, 1992. A training algorithm for optimal margin classifiers. In: COLT '92: Proceedings of the Fifth Annual Workshop on Computational Learning Theory. New York, NY, USA: ACM Press, pp. 144-152.
- CORTES, Corinna, and Vladimir VAPNIK, 1995. Support-vector networks. Machine Learning, 20(3), 273–297.
- Article vraiment sympa, complet (un peu de maths) : A tutorial review of RKHS methods in Machine Learning, Hofman , Schoelkopf, Smola, 2005 (https://www.researchgate.net/publication/228827159_A_Tutorial_Review_of_RKHS_Methods_in_Machine_Learning)