

# MVA "Kernel methods in machine learning"

## Homework 1

Souhaib Attaiki

March 2019

### Exercise 1. Kernels

**Question 1** on a:

$$\begin{aligned}K(x, y) &= \cos(x - y) \\&= \cos(x)\cos(y) + \sin(x)\sin(y) \\&= \langle \phi(x), \phi(y) \rangle_{\mathbb{R}^2}\end{aligned}$$

avec  $\phi(x) = (\cos(x), \sin(x))$ , un mapping de  $\mathcal{X}$  vers l'espace de Hilbert  $\mathbb{R}^2$ , donc en appliquant le théorème d'Aronszajn,  $K$  est un kernel défini positif.

**Question 2** on a,  $\forall x, y \in \mathcal{X}$ :

$$\begin{aligned}K(x, y) &= \frac{1}{1 - x^\top y} \\&= \sum_{k=0}^{\infty} (x^\top y)^k \\&= \lim_{n \rightarrow \infty} \sum_{k=0}^n (x^\top y)^k \\&= \lim_{n \rightarrow \infty} K_n(x, y)\end{aligned}$$

parce que:  $|x^\top y| \leq \|x\|_2 \|y\|_2 \leq 1$  (en utilisant Cauchy-Schwartz). Or, chaque  $K_n$  est une somme et produit de kernel linéaire, Donc  $K_n$  est un kernel défini positif. Donc  $K$  est un kernel défini positif comme limite simple de suite de kernels définis positifs.

**Question 3** On définit, pour  $A \in \mathcal{A}$ ,  $\phi(A) = \mathbb{1}_A - \mathbb{E}(A) \in \mathbb{L}^2(\Omega, \mathcal{A}, \mathcal{P})$  (L'ensemble des variables aléatoires de carré intégrable) Donc,  $\forall A, B \in \mathcal{A}$ , on a:

$$\begin{aligned} K(A, B) &= P(A \cap B) - P(A)P(B) \\ &= \mathbb{E}(\mathbb{1}_A \mathbb{1}_B) - \mathbb{E}(\mathbb{1}_A) \mathbb{E}(\mathbb{1}_B) \\ &= \mathbb{E}[(\mathbb{1}_A - \mathbb{E}(A)) \cdot (\mathbb{1}_B - \mathbb{E}(B))] \\ &= \mathbb{E}[\phi(A) \phi(B)] \\ &= \langle \phi(A) | \phi(B) \rangle_{\mathbb{L}^2(\Omega, \mathcal{A}, \mathcal{P})} \end{aligned}$$

donc en appliquant le théorème d'Aronszajn, K est un kernel défini positif.

**Question 4** Soient  $x, y \in \mathcal{X}$ , on a:

$$K(x, y) = \min(f(x)g(y), f(y)g(x)) = g(x)g(y) \min\left(\frac{f(x)}{g(x)}, \frac{f(y)}{g(y)}\right) = K_1(x, y)K_2(x, y)$$

avec:

$$K_1(x, y) = g(x)g(y) = \langle \phi_1(x), \phi_1(y) \rangle_{\mathbb{R}}$$

avec  $\phi_1(x) = g(x)$ , donc selon le théorème d'Aronszajn,  $K_1$  est un kernel défini positif. et:

$$K_2(x, y) = \min\left(\frac{f(x)}{g(x)}, \frac{f(y)}{g(y)}\right) = \int_0^{+\infty} \mathbb{1}_{[0, \frac{f(x)}{g(x)}]} \mathbb{1}_{[0, \frac{f(y)}{g(y)}]} = \langle \phi_2(x), \phi_2(y) \rangle_{\mathbb{L}^2(\mathbb{R}^+)}$$

avec  $\phi_2(x) = \mathbb{1}_{[0, \frac{f(x)}{g(x)}]} \in \mathbb{L}^2(\mathbb{R}^+)$ , donc selon le théorème d'Aronszajn,  $K_2$  est un kernel défini positif. Donc  $K$  est kernel défini positif comme produit de deux kernel définis positifs.

**Question 5** On note  $N = |E|$ . Par abus de notation, on peut désigner par  $A \in \mathcal{X}$  aussi le vecteur  $A \in \mathbb{R}^N$  tel que  $A_i = \mathbb{1}_A(x_i)$ , le i-eme élément de E. soient  $A, B \in \mathcal{X}$ , on a:

$$\begin{aligned} K(A, B) &= \frac{|A \cap B|}{|A \cup B|} \\ &= \frac{\sum_{x \in E} \mathbb{1}_A(x) \mathbb{1}_B(x)}{\sum_{x \in E} \mathbb{1}_E(x) - (\mathbb{1}_E(x) - \mathbb{1}_A(x))(\mathbb{1}_E(x) - \mathbb{1}_B(x))} \\ &= A^\top B \times \frac{1}{N \frac{1 - (\mathbb{1} - A)^\top (\mathbb{1} - B)}{\sqrt{N}}}} \text{ avec } \mathbb{1} = (1, 1, \dots, 1) \\ &= \frac{1}{N} \langle \phi(A) | \phi(B) \rangle_{\mathbb{R}^N} \times \sum_{k=0}^{\infty} \left( \left( \frac{\mathbb{1} - A}{\sqrt{N}} \right)^\top \frac{\mathbb{1} - B}{\sqrt{N}} \right)^k \\ &= K_1(A, B)K_2(A, B) \end{aligned}$$

avec:  $K_1(A, B) = \frac{1}{N} \langle \phi(A) | \phi(B) \rangle_{\mathbb{R}^N}$  et  $\phi : \mathcal{X} \rightarrow \mathbb{R}^N, A \rightarrow A$ , donc  $K_1$  est un kernel défini positif comme résultat du théorème d'Aronszajn et produit d'un kernel et une constante positive. Et:

$$K_2(A, B) = \sum_{k=0}^{\infty} \left( \left( \frac{\mathbb{1} - A}{\sqrt{N}} \right)^\top \frac{\mathbb{1} - B}{\sqrt{N}} \right)^k = \lim_{n \rightarrow \infty} \sum_{k=0}^n \left( \left( \frac{\mathbb{1} - A}{\sqrt{N}} \right)^\top \frac{\mathbb{1} - B}{\sqrt{N}} \right)^k = \lim_{n \rightarrow \infty} K_n(A, B)$$

Or, chaque  $K_n$  est une somme et produit du kernel  $K'(A, B) = \left(\frac{1-A}{\sqrt{N}}\right)^\top \frac{1-B}{\sqrt{N}} = \langle \phi'(A), \phi'(B) \rangle_{\mathbb{R}^N}$  qui est un kernel selon le théorème d'Aronszajn, Donc  $K_n$  est un kernel défini positif. Donc  $K_2$  est un kernel défini positif comme limite simple de suite de kernels définis positifs.

D'où  $K$  est un kernel défini positif comme produit de deux kernel définis positifs ( $K_1$  et  $K_2$ ).

## Exercice 2. RKHS

**Question 1** Montrons que  $\alpha K_1 + \beta K_2$  est un kernel positif défini. La symétrie est évidente et découle de la symétrie de  $K_1$  et de  $K_2$ . Et on a,  $\forall n \in \mathbb{N}, \{a_i\}_{1 \leq i \leq n} \in \mathbb{R}, \{x_i\}_{1 \leq i \leq n} \in \mathcal{X}$ ,

$$\begin{aligned} \sum_{i,j=1}^n a_i a_j K(a_i, a_j) &= \sum_{i,j=1}^n a_i a_j (\alpha K_1(a_i, a_j) + \beta K_2(a_i, a_j)) \\ &= \alpha \sum_{i,j=1}^n a_i a_j K_1(a_i, a_j) + \beta \sum_{i,j=1}^n a_i a_j K_2(a_i, a_j) \geq 0 \end{aligned}$$

parce que  $\alpha, \beta \geq 0$  et  $K_1$  et  $K_2$  sont des kernels défini positif. Donc  $\alpha K_1 + \beta K_2$  est un kernel défini positif.

Soient  $H_1$  (resp.  $H_2$ ) le RKHS de  $K_1$  (resp.  $K_2$ ). Montrons que  $H = \alpha H_1 + \beta H_2 = \{\alpha f + \beta g \mid f \in H_1, g \in H_2\}$  est le RKHS de  $\alpha K_1 + \beta K_2$ .

Soit l'espace  $E = H_1 \times H_2$  qui est muni du produit scalaire  $\langle (f_1, g_1), (f_2, g_2) \rangle_E = \alpha \langle f_1, f_2 \rangle_{H_1} + \beta \langle g_1, g_2 \rangle_{H_2}$  est un espace hilbertien (résultat classique).

On a l'application  $s$

$$\begin{aligned} s : E &\rightarrow H \\ (f, g) &\rightarrow \alpha f + \beta g \end{aligned}$$

est une surjection entre  $E$  et  $H$ . Considérons  $N = s^{-1}(\{0\})$ .  $N$  est un ensemble fermé. En effet, soit  $(f_n, -f_n)$  une suite d'éléments de  $N$  qui converge dans  $E$  vers  $(f, g)$ . Par définition de la norme, on a  $(f_n)$  converge dans  $H_1$  vers  $f$  et  $(-f_n)$  converge dans  $H_2$  vers  $g$ . Puisque la convergence dans le RKHS implique convergence ponctuel, on a  $f = -g$  et donc  $(f, g) \in N$ , Donc  $N$  est fermé. Donc  $E = N \oplus N^\perp$ . Donc  $\hat{s}$ , la restriction de  $s$  à  $N^\perp$  est une bijection. Donc  $H$  est un espace de Hilbert pour le produit scalaire qu'on définit.

Et on a  $\forall x \in \mathcal{X}, \alpha K_1(x, \cdot) + \beta K_2(x, \cdot) \in H$ . Il reste donc juste à vérifier la propriété de reproduction.

Soit  $x \in \mathcal{X}$  et  $f \in H$ . On a  $f = \hat{s}(f_1, f_2)$  et  $K_x = \hat{s}(A_x, B_x)$  où  $K_x = \alpha K_{1,x} + \beta K_{2,x}$  et  $(f_1, f_2)$  et  $(A_x, B_x)$  sont des éléments de  $N^\perp$ . On a :

$$\langle f | K_x \rangle_H = \langle (f_1, f_2) | (A_x, B_x) \rangle_E = \langle (f_1, f_2) | (K_{1,x}, K_{2,x}) \rangle_E = \alpha \langle f_1 | A_x \rangle_{H_1} + \beta \langle f_2 | B_x \rangle_{H_2} = \alpha f(x) + \beta g(x) = f(x)$$

et puisque  $(A_x - K_{1,x}, B_x - K_{2,x})$  est orthogonal à chaque élément de  $N^\perp$ , on conclut que

$$\langle f | K_x \rangle_H = \langle (f_1, f_2) | (K_{1,x}, K_{2,x}) \rangle_E = \alpha f(x) + \beta g(x) = f(x)$$

d'où le résultat. On a montré que  $H = \alpha K_1 + \beta K_2$  muni du produit scalaire  $\langle f | g \rangle_H = \langle \hat{s}^{-1}(f) | \hat{s}^{-1}(g) \rangle_E$  est un RKHS de  $\alpha K_1 + \beta K_2$ .

**Question 2** Le kernel  $K$  vérifie les conditions du théorème d'Aronszajn, donc  $K$  est un kernel défini positif.

### Exercise 3. Sobolev spaces

**Question 1** Montrons que  $\mathcal{H} = \{f : [0, 1] \rightarrow \mathbb{R}, \text{absolument continue}, f' \in L^2([0, 1]), f(0) = 0\}$  muni de la forme bilinéaire  $\langle f, g \rangle_{\mathcal{H}} = \int_0^1 f'(u)g'(u)du$ , est un RKHS, et que  $K(x, y) = \min(x, y)$  est son kernel reproduisant.

- $\mathcal{H}$  est un espace de pré-hilbertien. En effet,  $\mathcal{H}$  est un espace vectoriel de fonctions, et la forme bilinéaire  $\langle f, g \rangle_{\mathcal{H}}$  est symétrique, et positive (évident). De plus, on a

$$\forall f \in \mathcal{H}, \forall x \in [0, 1] : f(x) = f(0) + \int_0^x f'(u)du = \int_0^x f'(u)du$$

car  $f$  est absolument continue et  $f(0) = 0$ . donc:

$$|f(x)| = \left| \int_0^x f'(u)du \right| \leq \sqrt{x} \left( \int_0^1 f'(u)^2 du \right)^{\frac{1}{2}} = \sqrt{x} \langle f, f \rangle_{\mathcal{H}}^{\frac{1}{2}} \quad (1)$$

donc  $\langle f, f \rangle_{\mathcal{H}} = 0 \Rightarrow f(x) = 0, \forall x \in [0, 1] \Rightarrow f = 0$ , donc  $\langle \cdot, \cdot \rangle_{\mathcal{H}}$  est un produit scalaire, donc  $\mathcal{H}$  est un espace pré-hilbertien.

- $\mathcal{H}$  est complet. En effet, soit  $(f_n)_{n \in \mathbb{N}}$  est suite de Cauchy dans  $\mathcal{H}$ . Par définition de la norme dans  $\mathcal{H}$  ( $\|f\|_{\mathcal{H}} = \|f'\|_{L^2}$ ),  $(f'_n)_{n \in \mathbb{N}}$  est une suite de Cauchy dans  $L^2[0, 1]$ , donc converge vers une limite  $g \in L^2[0, 1]$  car  $L^2[0, 1]$  est complet. Or, en utilisant l'équation 1, on a que  $(f(x)_n)_{n \in \mathbb{N}}$  est une suite de Cauchy dans  $\mathbb{R}, \forall x \in [0, 1]$ , donc elle converge vers  $f(x)$  car  $\mathbb{R}$  est complet. Et on a:

$$f(x) = \lim_n f_n(x) = \lim_n \int_0^x f'_n(u)du = \int_0^x g(u)du \quad (2)$$

en utilisant le théorème de convergence dominée, la domination est assuré par le fait que les fonctions sont continue sur un compact, donc elles sont bornées.

L'équation 2 montre que  $f$  est absolument continue, que  $f' = g$  presque partout, de plus,  $f' \in L^2[0, 1]$ . Finalement, on a:  $f(0) = \lim_n f_n(0) = 0$ , ainsi  $f \in \mathcal{H}$ , et

$$\lim_n \|f_n - f\|_{\mathcal{H}} = \lim_n \|f'_n - g\|_{L^2[0,1]} = 0$$

donc  $\lim_n f_n = f$ . Donc  $\mathcal{H}$  est complet, d'où le résultat.

- On a  $\forall x, y \in [0, 1]$ :

$$K_x(y) = K(x, y) = \min(x, y) = \begin{cases} y & \text{si } 0 \leq y \leq x \\ x & \text{si } x \leq y \leq 1 \end{cases}$$

Donc  $K_x$  est différentiable presque partout, sa dérivé  $\in L^2[0, 1]$ , et  $K_x(0) = 0$  pour tout  $x \in [0, 1]$ , donc  $K_x \in \mathcal{H}, \forall x \in [0, 1]$ .

- Soit  $x \in [0, 1]$ , et  $f \in \mathcal{H}$ , on a:

$$\langle f, K_x \rangle_{\mathcal{H}} = \int_0^1 f'(u) K'_x(u) du = \int_0^x f'(u) du = f(x)$$

donc  $\forall f \in \mathcal{H}, \forall x \in [0, 1] : \langle f, K_x \rangle_{\mathcal{H}} = f(x)$ .

D'où  $\mathcal{H}$  est un RKHS, et son kernel reproduisant est  $K(x, y) = \min(x, y)$ .

**Question 2** Montrons que  $\mathcal{H} = \{f : [0, 1] \rightarrow \mathbb{R}, \text{absolument continue}, f' \in L^2([0, 1]), f(0) = f(1) = 0\}$  muni de la forme bilinéaire  $\langle f, g \rangle_{\mathcal{H}} = \int_0^1 f'(u)g'(u)du$ , est un RKHS, et que  $K(x, y) = \min(x, y) - xy$  est son kernel reproduisant.

- On a  $\mathcal{H}$  est une espace pré-hilbertien (démonstration similaire au cas précédent)
- La démonstration de  $\mathcal{H}$  est complet est similaire au cas précédent, il suffit d'ajouter le fait que  $f(1) = \lim_n f_n(1) = 0$ .
- On a  $\forall x, y \in [0, 1]$ :

$$K_x(y) = K(x, y) = \min(x, y) - xy = \begin{cases} y - xy & \text{si } 0 \leq y \leq x \\ x(1 - y) & \text{si } x \leq y \leq 1 \end{cases}$$

Donc  $K_x$  est différentiable presque partout, sa dérivée  $\in L^2[0, 1]$ , et  $K_x(0) = K_x(1) = 0$  pour tout  $x \in [0, 1]$ , donc  $K_x \in \mathcal{H}, \forall x \in [0, 1]$ .

- Soit  $x \in [0, 1]$ , et  $f \in \mathcal{H}$ , on a:

$$\begin{aligned} \langle f, K_x \rangle_{\mathcal{H}} &= \int_0^1 f'(u) K'_x(u) du \\ &= \int_0^x f'(u)(1 - x) du + \int_x^1 f'(u)(-x) du \\ &= (1 - x)(f(x) - f(0)) - x(f(1) - f(x)) \\ &= (1 - x + x)f(x) \text{ ( car } f(0) = f(1) = 0 \text{ )} \\ &= f(x) \end{aligned}$$

donc  $\forall f \in \mathcal{H}, \forall x \in [0, 1] : \langle f, K_x \rangle_{\mathcal{H}} = f(x)$ .

- Pour trouver la forme du kernel, on résout l'équation suivante:

$$f(x) = \langle f, K_x \rangle = \int_0^1 f'(u) K'_x(u) du$$

sous contrainte que  $K_x(0) = K_x(1) = 0$ . On trouve que le kernel de la question précédente permet de reproduire  $f$ , et pour forcer  $K_x(1) = 0$ , on ajoute le terme  $-xy$ .

D'où  $\mathcal{H}$  est un RKHS, et son kernel reproduisant est  $K(x, y) = \min(x, y) - xy$ .

**Question 3** Montrons que  $\mathcal{H} = \{f : [0, 1] \rightarrow \mathbb{R}, \text{absolument continue}, f' \in L^2([0, 1]), f(0) = f(1) = 0\}$  muni de la forme bilinéaire  $\langle f, g \rangle_{\mathcal{H}} = \int_0^1 (f'(u)g'(u) + f(u)g(u)) du$ , est un RKHS, et que  $K(x, y) = \frac{\min(\sinh(x)\sinh(1-y), \sinh(1-x)\sinh(y))}{\sinh(1)}$  est son kernel reproduisant.

- Pour montrer que  $\mathcal{H}$  est un espace pré-hilbertien, il suffit de montrer que  $\langle f, g \rangle_{\mathcal{H}}$  est un produit scalaire (le reste au similaire qu'avant). On a  $\langle f, g \rangle_{\mathcal{H}}$  est symétrique et positive (évident). Et comme avant, on a:

$$\begin{aligned} |f(x)| &= \left| \int_0^x f'(u) du \right| \\ &\leq \sqrt{x} \left( \int_0^1 f'(u)^2 du \right)^{\frac{1}{2}} \\ &\leq \sqrt{x} \left( \int_0^1 (f'(u)^2 + f(u)^2) du \right)^{\frac{1}{2}} \\ &= \sqrt{x} \langle f, f \rangle_{\mathcal{H}}^{\frac{1}{2}} \end{aligned} \quad (3)$$

donc  $\langle f, f \rangle_{\mathcal{H}} = 0 \Rightarrow f(x) = 0, \forall x \in [0, 1] \Rightarrow f = 0$ , donc  $\langle \cdot, \cdot \rangle_{\mathcal{H}}$  est un produit scalaire, donc  $\mathcal{H}$  est un espace pré-hilbertien.

- $\mathcal{H}$  est complet. En effet, soit  $(f_n)_{n \in \mathbb{N}}$  est suite de Cauchy dans  $\mathcal{H}$ . On a

$$\|f\|_{\mathcal{H}} = \left( \int_0^1 (f'(u)^2 + f(u)^2) du \right)^{\frac{1}{2}} = \left( \|f'\|_{\mathbb{L}^2}^2 + \|f\|_{\mathbb{L}^2}^2 \right)^{\frac{1}{2}}$$

donc  $\|f'\|_{\mathbb{L}^2} \leq \|f\|_{\mathcal{H}}$  et  $\|f\|_{\mathbb{L}^2} \leq \|f\|_{\mathcal{H}}$ , donc  $(f_n)_{n \in \mathbb{N}}$  est une suite de Cauchy dans  $L^2[0, 1]$ , et converge vers une limite  $f \in L^2[0, 1]$ , et  $(f'_n)_{n \in \mathbb{N}}$  est une suite de Cauchy dans  $L^2[0, 1]$ , et converge vers une limite  $g \in L^2[0, 1]$ . Par ailleurs, la convergence dans  $L^2$  implique la convergence dans  $\mathcal{D}'[0, 1]$  (l'espace vectoriel des distributions sur  $[0, 1]$ ), donc

$$f_n \rightarrow f \text{ dans } \mathcal{D}'$$

et

$$f'_n \rightarrow g \text{ dans } \mathcal{D}'$$

De la première assertion, on tire que

$$f'_n \rightarrow f' \text{ dans } \mathcal{D}'$$

Par unicité de la limite dans  $\mathcal{D}'[0, 1]$ , on trouve que  $f' = g \in L^2$ . Et comme  $f'_n \rightarrow f'$  dans  $L^2$ , il s'en suit que  $f_n \rightarrow f$  dans  $\mathcal{H}$ .

En outre, en utilisant l'inéquation  $|f(x)| \leq \|f\|_{\mathcal{H}}, \forall x \in [0, 1]$ , on a que  $(f(x)_n)_{n \in \mathbb{N}}$  est une suite de Cauchy dans  $\mathbb{R}, \forall x \in [0, 1]$ , donc elle converge vers  $h(x)$  car  $\mathbb{R}$  est complet. Et on a:

$$h(x) = \lim_n f_n(x) = \lim_n \int_0^x f'_n(u) du = \int_0^x g(u) du \quad (4)$$

en utilisant le théorème de convergence dominée comme avant.

L'équation 4 montre que  $h' = g = f'$  presque partout, donc  $f(x) - f(0) = h(x) - h(0)$ . De plus, on a:  $h(0) = \lim_n f_n(0) = 0$ , donc  $f(0) = 0$ , de même pour  $f(1) = 0$ .

- On a  $\forall x, y \in [0, 1]$ :

$$K_x(y) = K(x, y) = \begin{cases} \frac{\sinh(1-x)\sinh(y)}{\sinh(1)} & \text{si } 0 \leq y \leq x \leq 1 \\ \frac{\sinh(x)\sinh(1-y)}{\sinh(1)} & \text{si } 0 \leq x \leq y \leq 1 \end{cases}$$

Donc  $K_x$  est différentiable presque partout, sa dérivé  $\in L^2[0, 1]$ , et  $K_x(0) = K_x(1) = 0$  pour tout  $x \in [0, 1]$ , donc  $K_x \in \mathcal{H}, \forall x \in [0, 1]$ .

- Soit  $x \in [0, 1]$ , et  $f \in \mathcal{H}$ , on a:

$$\begin{aligned} \int_0^1 f'(u)K'_x(u)du &= \int_0^x f'(u)\frac{\sinh(1-x)\cosh(u)}{\sinh(1)}du - \int_x^1 f'(u)\frac{\sinh(x)\cosh(1-u)}{\sinh(1)}du \\ &= \frac{\sinh(1-x)}{\sinh(1)} \left( [f(u)\cosh(u)]_0^x - \int_0^x f(u)\sinh(u)du \right) \\ &\quad - \frac{\sinh(x)}{\sinh(1)} \left( [f(u)\cosh(1-u)]_x^1 - \int_x^1 f(u)\sinh(1-u)du \right) \\ &= \frac{f(x)\sinh(1-x)\cosh(x)}{\sinh(1)} + \frac{f(x)\sinh(x)\cosh(1-x)}{\sinh(1)} - \int_0^1 f(u)K_x(u)du \end{aligned}$$

Donc

$$\begin{aligned} \langle f, K_x \rangle_{\mathcal{H}} &= f(x) \left[ \frac{\sinh(1-x)\cosh(x)}{\sinh(1)} + \frac{\sinh(x)\cosh(1-x)}{\sinh(1)} \right] \\ &= f(x) \end{aligned}$$

donc  $\forall f \in \mathcal{H}, \forall x \in [0, 1] : \langle f, K_x \rangle_{\mathcal{H}} = f(x)$ .

- Pour trouver la forme du kernel, on résout l'équation suivante:

$$\begin{aligned} f(x) &= \int_0^1 f'(u)K'(x, u)du + \int_0^1 f(u)K(x, u)du \\ &\text{en intégrant par partie, en supposant une discontinuité en } u = x \\ &\text{et en prenant en compte } f(0)=f(1)=0 \\ &= \int_0^1 f(u)K(x, u)du - \int_0^1 f(u)K''(x, u)du + f(x)(K(x, x^-) - K(x, x^+)) \end{aligned}$$

Donc on cherche à résoudre l'équation différentielle suivante:  $K''(x, u) = K(x, u), \forall x, u$ , avec les conditions suivantes:  $\frac{\partial K(x, u)}{\partial u}|_{u=x^-} = \alpha(x), \frac{\partial K(x, u)}{\partial u}|_{u=x^+} = \beta(x), K_x(0) = K_x(1) = 0$ , et  $\alpha(x) - \beta(x) = 1$ . En résolvant cette équation, on trouve la forme du kernel mentionnée plus haut.

## Exercice 4. Duality

**Question a** On veut résoudre le problème d'optimisation suivant:

$$\min_{f \in \mathcal{H}_K} \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n \ell_{y_i}(f(x_i)) \text{ such that } \|f\|_{\mathcal{H}_K} \leq B \quad (5)$$

Son lagrangien s'écrit sous la forme suivante:

$$\mathcal{L}(f, \Lambda) = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n \ell_{y_i}(f(x_i)) + \Lambda(\|f\|_{\mathcal{H}_K} - B)$$

Puisque  $\ell_y$  est convexe, alors le problème 5 est un problème d'optimisation convexe, et pour lequel la dualité forte est vérifiée en utilisant les conditions de Slater (évident), donc le problème 5 est équivalent au problème suivant:

$$\min_{f \in \mathcal{H}_K} \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n \ell_{y_i}(f(x_i)) + \lambda(\|f\|_{\mathcal{H}_K}^2 - B^2)$$

qui est équivalent aussi à (parce qu'on veut minimiser sur f):

$$\min_{f \in \mathcal{H}_K} \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n \ell_{y_i}(f(x_i)) + \lambda\|f\|_{\mathcal{H}_K}^2 \quad (6)$$

avec  $\lambda \geq 0$ , la solution optimale du problème dual de 5. Le problème 6 vérifie les conditions du "Representer theorem", donc en utilisant ce dernier, on peut écrire que toute solution du problème s'écrit sous la forme:

$$\hat{f}(x) = \sum_{i=1}^n \alpha_i \mathbf{K}(x_i, x_j)$$

avec  $\mathbf{K}$  la matrice de Gram. Et on a:

$$\left( \hat{f}(x_1), \dots, \hat{f}(x_n) \right)^\top = \mathbf{K} \boldsymbol{\alpha}$$

et

$$\|\hat{f}\|_{\mathcal{H}}^2 = \boldsymbol{\alpha}^\top \mathbf{K} \boldsymbol{\alpha}$$

Donc le problème 6 est équivalent à:

$$\min_{\boldsymbol{\alpha} \in \mathbb{R}^n} \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n \ell_{y_i}(\mathbf{K} \boldsymbol{\alpha}_i) + \lambda \boldsymbol{\alpha}^\top \mathbf{K} \boldsymbol{\alpha}$$

et donc à:

$$\min_{\boldsymbol{\alpha} \in \mathbb{R}^n} R(\mathbf{K} \boldsymbol{\alpha}) + \lambda \boldsymbol{\alpha}^\top \mathbf{K} \boldsymbol{\alpha} \quad (7)$$

avec  $R(u) = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n \ell_{y_i}(u_i)$ .

**Question b** On a d'abord que pour  $c > 0$ :

$$\sup_{x \in \mathbb{R}^n} x^\top u - cf(x) = \sup_{x \in \mathbb{R}^n} c \left( x^\top \frac{u}{c} - f(x) \right) = c \sup_{x \in \mathbb{R}^n} x^\top \frac{u}{c} - f(x) = cf^*\left(\frac{u}{c}\right)$$



et on a:

$$\begin{aligned}
R^*(u) &= \sup_{x \in \mathbb{R}^n} x^\top u - R(x) \\
&= \sup_{x \in \mathbb{R}^n} x^\top u - \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n \ell_{y_i}(u_i) \\
&= \sup_{x \in \mathbb{R}^n} \sum_{i=1}^n x_i u_i - \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n \ell_{y_i}(u_i) \\
&= \sum_{i=1}^n \sup_{x_i \in \mathbb{R}} x_i u_i - \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n \ell_{y_i}(u_i) \text{ (Car les différents termes sont indépendants)} \\
&= \sum_{i=1}^n \frac{1}{n} \ell_{y_i}^*(nu_i)
\end{aligned}$$

D'où le résultat.

**Question c** Le lagrangien du problème:

$$\min_{\alpha, u \in \mathbb{R}^n} R(u) + \lambda \alpha^\top K \alpha \text{ such that } u = K \alpha \quad (8)$$

s'écrit de la façon suivante:

$$\mathcal{L}(\alpha, u, \mu) = R(u) + \lambda \alpha^\top K \alpha + \mu^\top (K \alpha - u)$$

la fonction dual s'écrit donc sous la forme:

$$\begin{aligned}
g(\mu) &= \inf_{\alpha, u} \mathcal{L} \\
&= \inf_{\alpha, u} R(u) + \lambda \alpha^\top K \alpha + \mu^\top (K \alpha - u) \\
&= \inf_{\alpha, u} (R(u) - \mu^\top u) + (\lambda \alpha^\top K \alpha + \mu^\top K \alpha) \\
&= \inf_u (R(u) - \mu^\top u) + \inf_{\alpha} (\lambda \alpha^\top K \alpha + \mu^\top K \alpha) \\
&= -R^*(\mu) + \inf_{\alpha} h(\alpha) \\
&= -R^*(\mu) - \frac{\mu^\top K \mu}{4\lambda}
\end{aligned}$$

avec  $\inf_{\alpha} h(\alpha)$  est obtenu en prenant la dérivé de  $h$  égal à zéro, et on trouve que:  $\alpha = \frac{-\mu}{2\lambda}$ . Donc le problème dual s'écrit sous la forme:

$$\max_{\mu \in \mathbb{R}^n} -R^*(\mu) - \frac{\mu^\top K \mu}{4\lambda}$$

On peut trouver une solution du problème 8 en utilisant la relation qu'on a trouvé lors de la dérivation de  $h$ :  $\alpha^* = \frac{-\mu^*}{2\lambda}$ .

### Question d

- Pour la fonction de coût logistique  $\ell_y(u) = \log(1 + e^{-yu})$ , on a:

$$\begin{aligned}
\ell_y^*(u) &= \sup_{x \in \mathbb{R}} xu - \ell_y(x) \\
&= \sup_{x \in \mathbb{R}} xu - \log(1 + e^{-yx}) \\
&= \sup_{x \in \mathbb{R}} \log(e^{xu}) - \log(1 + e^{-yx}) \\
&= \sup_{x \in \mathbb{R}} \log\left(\frac{e^{xu}}{1 + e^{-yx}}\right) \\
&= \sup_{x \in \mathbb{R}} \log\left(\frac{1}{e^{-xu} + e^{-(y+u)x}}\right) \\
&= - \inf_{x \in \mathbb{R}} \log(e^{-xu} + e^{-(y+u)x}) \\
&= - \log\left(\inf_{x \in \mathbb{R}} e^{-xu} + e^{-(y+u)x}\right) \text{ parce que log est croissant} \\
&= - \log\left(\inf_{x \in \mathbb{R}} e^{xy(-uy)} + e^{xy(-1-uy)}\right) \text{ parce que } y^2 = 1 \\
&= - \log\left(\inf_{t \in \mathbb{R}^+} t^a + t^{a-1}\right) \text{ avec } t = e^{xy} \geq 0 \text{ et } a = -uy \\
&= - \log\left(\begin{cases} \frac{1}{a^a(1-a)^{1-a}} & \text{si } 0 < a < 1 \\ 0 & \text{sinon} \end{cases}\right) \text{ en utilisant (*) en bas} \\
&= \begin{cases} a \log(a) + (1-a) \log(1-a) & \text{si } 0 < a < 1 \\ +\infty & \text{sinon} \end{cases}
\end{aligned}$$

avec (\*)

$$\inf_{x \geq 0} y(x) = x^a + x^{a-1} = \begin{cases} \frac{1}{a^a(1-a)^{1-a}} & \text{si } 0 < a < 1 \\ 0 & \text{sinon} \end{cases}$$

Ce résultat est facile à démontrer, il suffit juste de séparer les cas et voir que  $y(x) \geq 0, \forall x \geq 0$ . Pour  $a \leq 0$  et donc  $a - 1 \leq -1$ , on a  $y \xrightarrow{x \rightarrow +\infty} 0$ . Pour  $a \geq 1$  et donc  $a - 1 \geq 0$ , on a  $y \xrightarrow{x \rightarrow 0} 0$ . Et pour  $0 < a < 1$ , en cherchant le point d'annulation de la dérivée, on trouve qu'il est égal à  $x = \frac{1-a}{a}$ , ce qui donne le résultat.

Le problème dual s'écrit donc sous la forme:

$$\max_{u \in \mathbb{R}^n} -\frac{1}{n} \sum_{i=1}^n (-nu_i y_i \log(-nu_i y_i) + (1 + nu_i y_i) \log(1 + nu_i y_i)) - \frac{u^\top K u}{4\lambda}$$

sous contrainte que  $-\frac{1}{n} < u_i y_i < 0, i = 0, \dots, n$

- Pour le squared hinge loss  $\ell_y(u) = \max(0, 1 - yu)^2$ , on a:

$$\begin{aligned}
\ell_y^*(u) &= \sup_{x \in \mathbb{R}} xu - \ell_y(x) \\
&= \sup_{x \in \mathbb{R}} xu - \max(0, 1 - yx)^2 \\
&= \begin{cases} xu - (1 - yx)^2 & \text{si } yx \leq 1 \\ xu & \text{si } yx \geq 1 \end{cases} \\
&= \begin{cases} \xrightarrow{x \rightarrow \infty} \infty & \text{si } u > 0 & \text{si } u \geq 0 \text{ et } y = 1 \\ -u + \frac{u^2}{4} \text{ (par derivation et s\'eparation des cas)} & \text{si } u \geq 0 \text{ et } y = -1 \\ u + \frac{u^2}{4} \text{ (par derivation et s\'eparation des cas)} & \text{si } u \leq 0 \text{ et } y = 1 \\ \xrightarrow{x \rightarrow -\infty} \infty & \text{si } u < 0 & \text{si } u \leq 0 \text{ et } y = -1 \end{cases} \\
&= \begin{cases} yu + \frac{u^2}{4} & \text{si } yu \leq 0 \\ +\infty & \text{si } yu > 0 \end{cases}
\end{aligned}$$

Donc le probl\eme dual s'\'ecrit donc sous la forme:

$$\max_{u \in \mathbb{R}^n} -\frac{1}{n} \sum_{i=1}^n \left( ny_i u_i + \frac{(nu_i)^2}{4} \right) - \frac{u^\top K u}{4\lambda}$$

sous contrainte que  $u_i y_i \leq 0, i = 0, \dots, n$