Objectif

"La raison d'être des statistiques, c'est de vous donner raison." — Abe Burrows

Algorithmes à noyaux :

- One class SVM (estimation du support d'une densité)
- SVM pour la regression
- Kernel PCA (KPCA)

Applications :

- Classes d'images
- Détection des objets

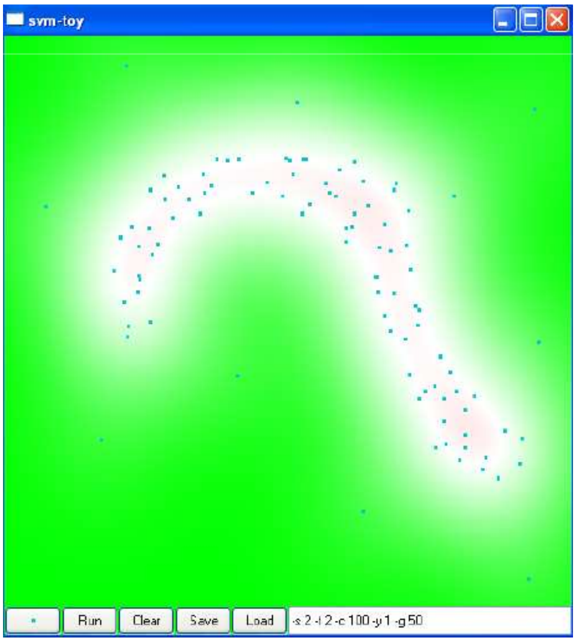
Plan du cours

Estimation du support d'une densité

Estimation du support d'une densité :

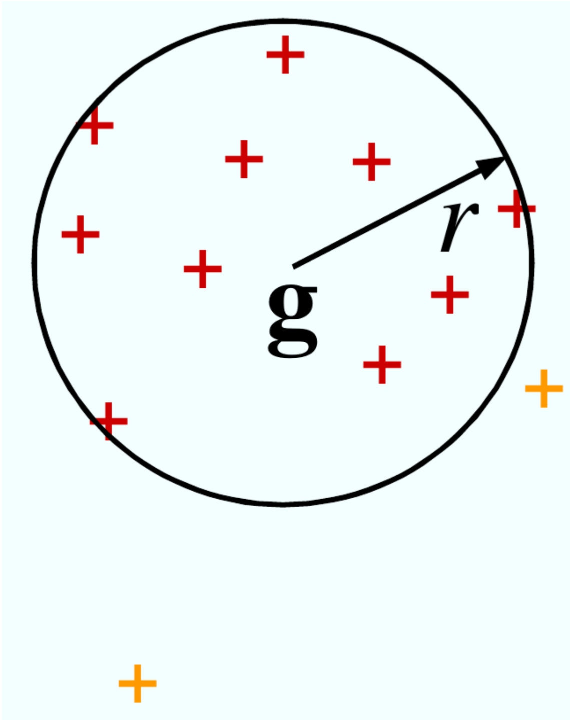
- Les données d'apprentissage $D = \{x_1, x_2, \ldots, x_n \in \mathcal{X}\}$, issues de variables i.i.d. suivant la densité de probabilité $p(x)$ inconnue.
- Pas d'étiquettes de classe y_i
- Le problème consiste à décider si une nouvelle observation x est proche ou non de cet ensemble T, c.t.d. s'il est tiré de la même distribution.
- On cherche donc à estimer le support de cette densité $\leftarrow$ moins de difficultés que pour l'estimation de la densité

Estimation du support d'une densité



Exemple avec noyau RBF : intensité de la couleur proportionnelle à l'éloignement de la frontière

Estimation du support d'une densité



Approche SVDD (Support Vector Data Description, Tax & Duin 2004) : trouver dans l'espace d'arrivée $\mathcal{H}$ la plus petite hypersphère englobant les données

Support Vector Data Description (SVDD)

Support Vector Data Description (SVDD) :

$$\begin{cases} \min\limits_{R,g} R^2 + C\sum_{i=1}^n \xi_i \\ avec : \\ ||x_i - g||^2 \leq R^2 + \xi_i, i = 1, \ldots, n \\ \xi_i \geq 0, i = 1, \ldots, n \end{cases}$$

- g le centre
- R le rayon
- $C = \frac{1}{\nu n}$ permet de régler la proportion ν de points que l'on désire maintenir en dehors de la boule (outliers).

Support Vector Data Description (SVDD)

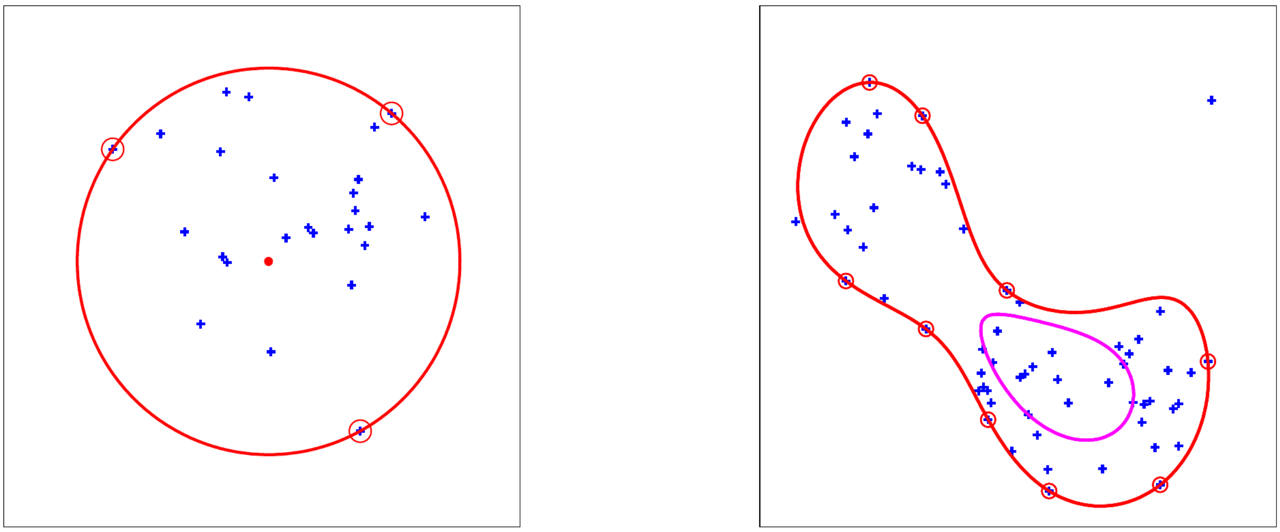
SVDD : Le problème dual

$$\begin{cases} \min_{\alpha} \frac{1}{2}\alpha^T K\alpha - \frac{1}{2}\alpha^T diag(K) \\ avec : \\ e^t\alpha = 1 \\ 0 \leq \alpha_i <= C, i = 1, \ldots, n \end{cases}$$

- K est la matrice de Gramm $K_{ij} = k(x_i, x_j)$
- $g = \sum_{i=1}^{n} \alpha_i \phi(x_i)$
- Un nouveau point x appartient au support si $||\phi(x) - g|| \leq R^2$, ou :

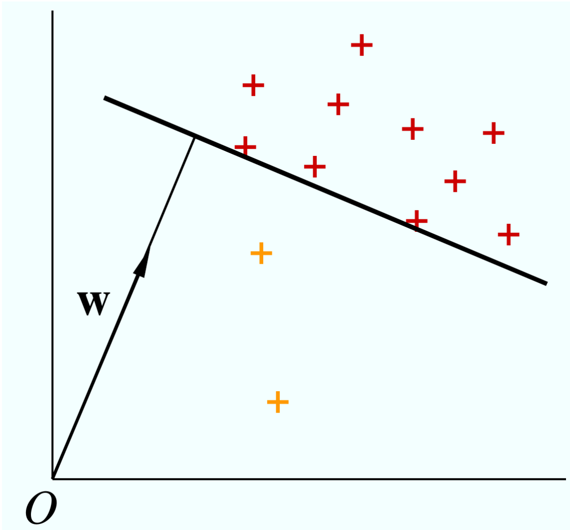
$$K(x,x) - 2\sum_{i=1}^{n} \alpha_i K(x_i, x) + \sum_{i,j=1}^{n} \alpha_i\alpha_j K(x_i, x_j) \leq R^2$$

Support Vector Data Description (SVDD)



Exemple SVDD : linéaire (à gauche) et noyau gaussien (à droite). A droite, le calcul a été fait pour deux valeurs de C. Le point en haut à droite est un outlier (il est placé en dehors de l'enveloppe calculée).

Estimation du support d'une densité



Approche OCSVM (One Class SVM, Schölkopf et al. 2001) trouver dans l'espace d'arrivée $\mathcal{H}$ l'hyperplan le plus éloigné de l'origine, qui sépare les données de l'origine

One Class SVM (OCSVM)

One Class SVM (OCSVM) :

$$\begin{cases} \min\limits_{w,\xi_i,\rho} \frac{1}{2}||w||^2 + C\sum_{i=1}^n \xi_i - \rho \\ \textit{avec} : \\ w \cdot x_i \geq \rho - \xi_i, i = 1, \ldots, n \\ \xi_i \geq 0, i = 1, \ldots, n \end{cases}$$

- Fonction de décision : $f(x) = \operatorname{sign}(\langle w, \phi(x)\rangle - \rho)$
- ρ : distance à l'origine
- $C = \frac{1}{\nu n}$ paramètre de régularisation qui permet de contrôler le nombre de outliers.

One Class SVM (OCSVM)

Le dual est le même que celui des SVDD avec le terme linéaire de la fonction cout en moins :

$$\begin{cases} \min\limits_{\alpha} \frac{1}{2}\alpha^T K\alpha \\ avec : \\ e^t\alpha = 1 \\ 0 \leq \alpha_i <= C, i = 1, \dots, n \end{cases}$$

- K est la matrice de Gramm $K_{ij} = k(x_i\,, x_j)$
- Fonction de décision :

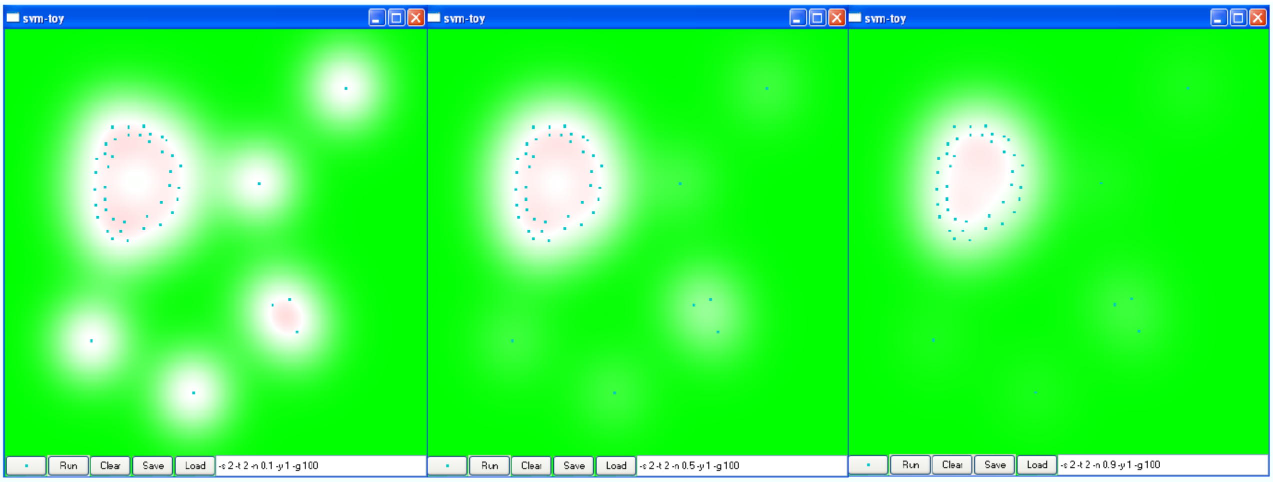
$$f(x) = \text{sign}\left(\langle w, \phi(x)\rangle - \rho\right) = \text{sign}(\sum_{i=1}^{n} \alpha_i K(x_i, x) - \rho)$$

  avec $\rho = \langle w\,, \phi(x_s)\rangle = \sum_{i=1}^n \alpha_i K(x_i\,, x_s)$
- $C = \frac{1}{\nu n}$ paramètre de régularisation qui permet de contrôler le nombre de outliers.

One Class SVM (OCSVM)

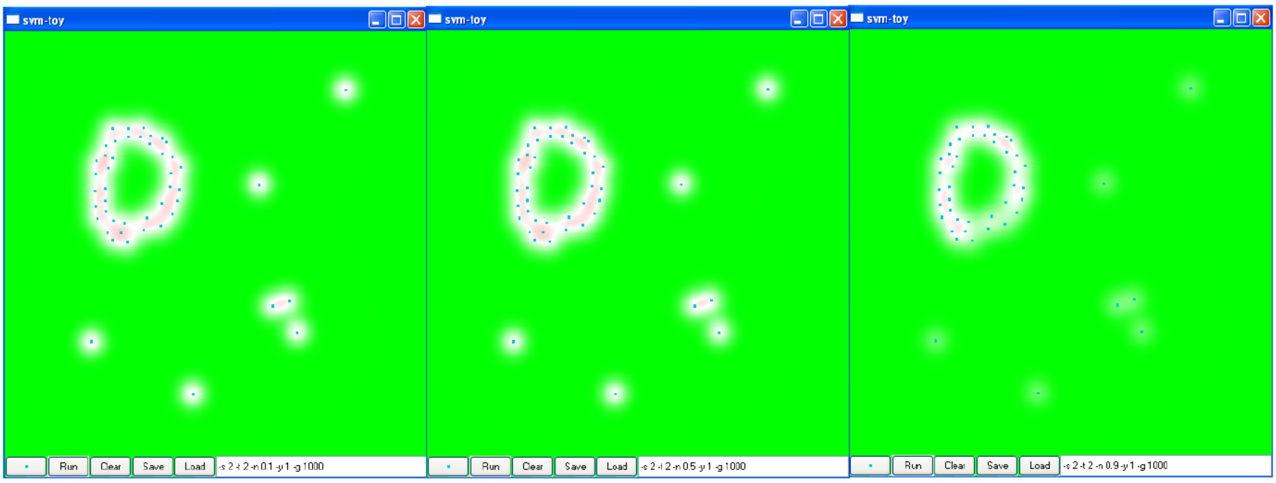
- Dans les deux formulations $\nu \in (0\,, 1]$ et $\nu n = 1/C$ est :
  - Une borne supérieure pour la fraction de outliers
  - Une borne inférieure pour la fraction de vecteurs de support
- Bornes de généralisation : la probabilité pour que de nouveaux exemples (tirages i.i.d. suivant la densité $p(x)$) soient en dehors d'une région un peu plus grande que le support déterminé ne sera pas supérieure de beaucoup à la fraction de outliers dans les données d'apprentissage

One Class SVM (OCSVM)



Noyau RBF avec γ=100 : ν=0,1, ν=0,5, ν=0,9

One Class SVM (OCSVM)



Noyau RBF avec γ=1000 : ν=0,1, ν=0,5, ν=0,9

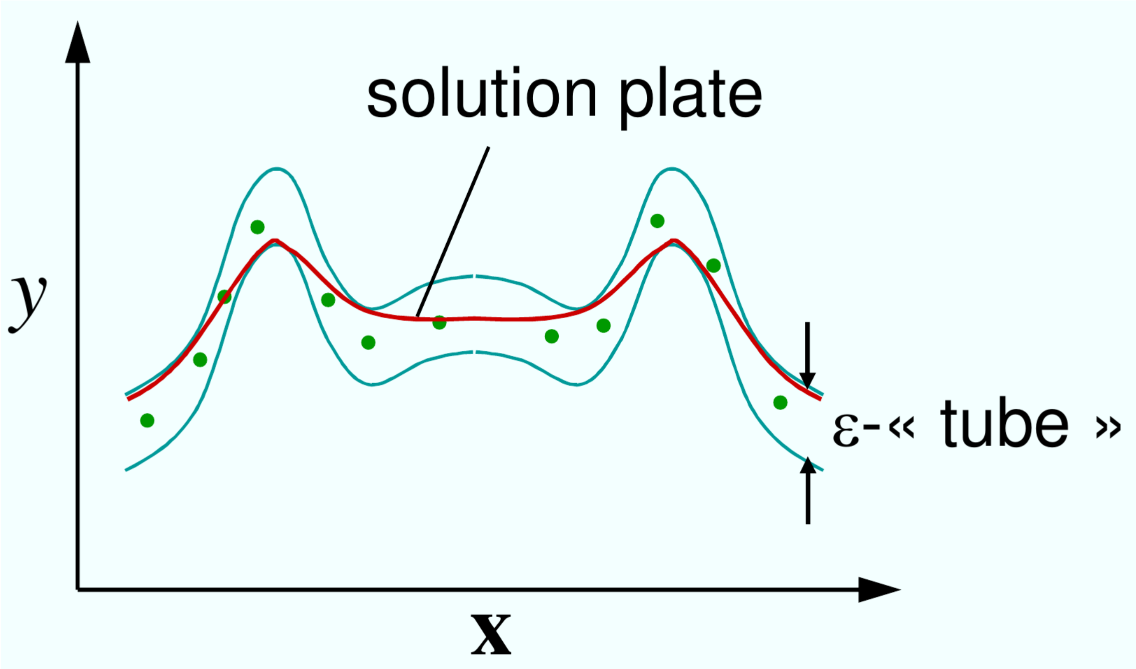
Plan du cours

SVM pour la régression (SVR)

SVM pour la régression (SVR) :

- Données d'apprentissage $\mathcal{D} = \{(x_i, y_i); i = 1, \ldots, n\}$
- $x_i \in \mathcal{X}, y_i \in R$
- En régression ϵ-SV on cherche une fonction $f : \mathcal{X} \to R$ aussi "plate" que possible et $|f(x_i) - y_i| < \epsilon$
- On cherchera des solutions de la forme $f(x) = \langle w, \phi(x) \rangle + b$ dans l'espace $\mathcal{H}$ d'arrivée.
- La condition d'aplatissement se traduit par la minimisation de $||w||^2 = \langle w, w \rangle$

SVM pour la régression

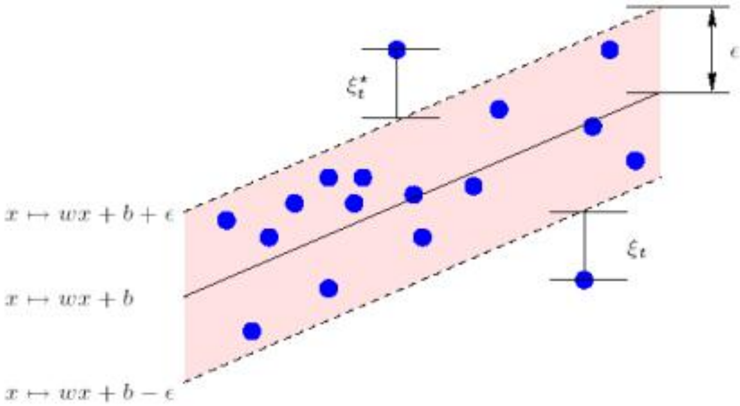


SVM pour la régression : on cherche une solution aussi plate que possible sans s'éloigner trop des points d'apprentissage (en vert).

SVM pour la régression

La régression ϵ-SV correspond à l'utilisation de la fonction de coût ϵ-insensible :

$$|\xi|_\epsilon = \begin{cases} 0 \text{ si } |\xi| < \epsilon \\ |\xi| - \epsilon \text{ sinon} \end{cases}$$



SVM pour la régression

Comme en discrimination, on accepte quelques erreurs au-delà de ϵ et on introduit les « variables d'assouplissement ξ_i , ξ_i^*

Le problème d'optimisation sera :

$$\begin{cases} \min\limits_{w,b} \frac{1}{2}||w||^2 + C\sum_{i=1}^{n}(\xi_i + \xi_i^*) \\ avec : \\ y_i - \langle w, \phi(x_i)\rangle - b \leq \epsilon + \xi_i, i = 1, \ldots, n \\ \langle w, \phi(x_i)\rangle + b - y_i \leq \epsilon + \xi_i^*, i = 1, \ldots, n \\ \xi_i, \xi_i^* \geq 0, i = 1, \ldots, n \end{cases}$$

- La constante $C > 0$ permet de choisir le point d'équilibre entre l'aplatissement de la solution et l'acceptation d'erreurs au-delà de ϵ

SVM pour la régression

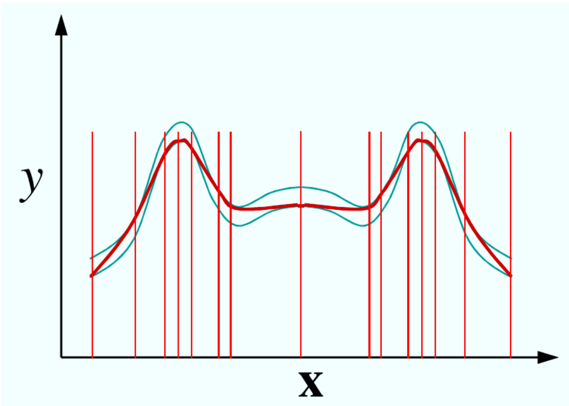
Avec les multiplicateurs de Lagrange on obtient le problème dual :

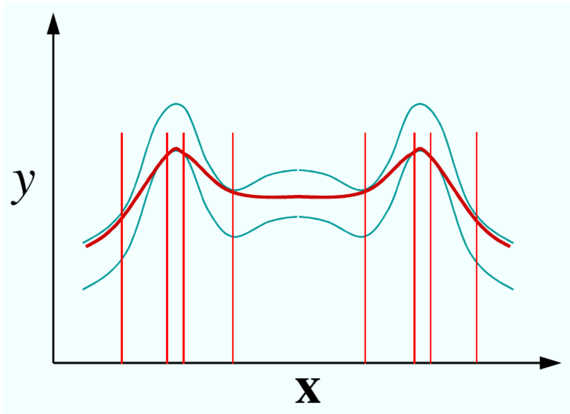
$$\begin{cases} \min\limits_{\alpha,\alpha^*} \frac{1}{2}\sum_{i,j=1}^{n}(\alpha_i - \alpha_i^*)(\alpha_j - \alpha_j^*)K(x_i, x_j) + \epsilon\sum_{1=1}^{n}(\alpha_i + \alpha_i^*) - \sum_{1=1}^{n} y_i(\alpha_i - \alpha_i^*) \\ avec : \\ 0 \leq \alpha_i, \alpha_j \leq C,\ i,j = 1, \ldots, n \\ \sum_{1=1}^{n}(\alpha_i - \alpha_i^*) = 0 \end{cases}$$

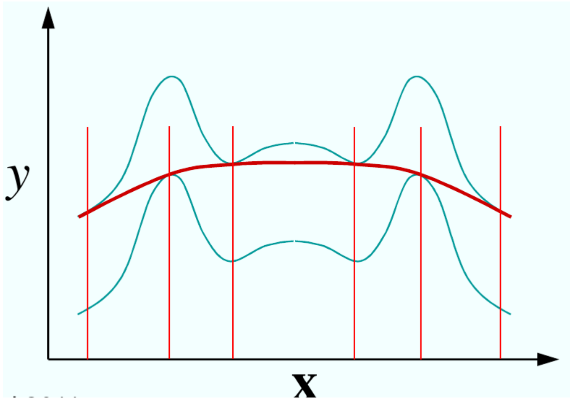
- Tous les points d'apprentissage à l'intérieur du $\epsilon - tube$ ont $\alpha_i = \alpha_i^* = 0$. Les point qui ont α_i , $\alpha_i^* \neq 0$ sont appelés vecteurs de support.
- Comme $w = \sum_{1=1}^{n}(\alpha_i - \alpha_i^*)\phi(x_i)$, la fonction recherchée sera :

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

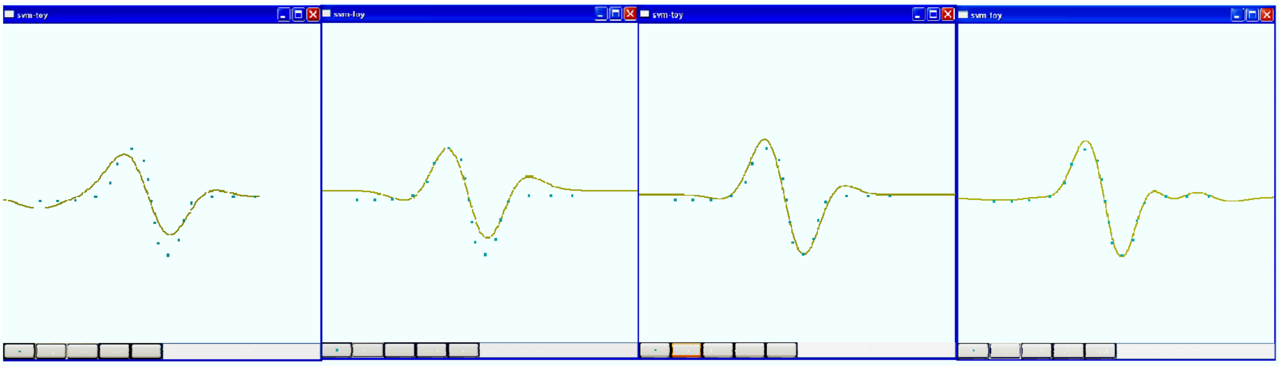
SVM pour la régression



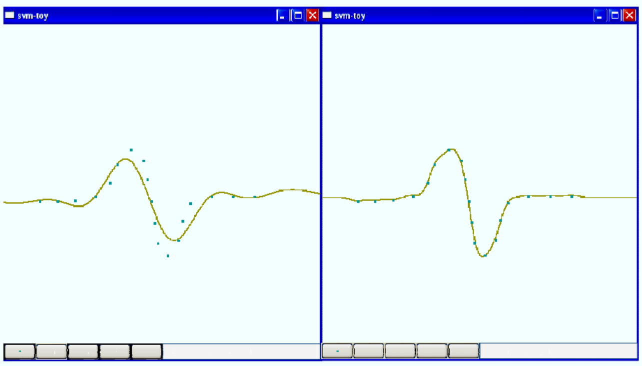




SVM pour la régression



Noyau RBF avec γ=100 : ν=0,1 et ε=0,1, ν=0,9 et ε=0,1, ν=0,1 et ε=0,01, ν=0,9 et ε=0,01



Noyau RBF avec γ=40 (gauche) et avec γ=1000 (ν=0,9 et ε=0,01 dans les deux cas)

Algorithmes à noyaux

Algorithmes à noyaux :

- Kernel PCA (Principal Component Analysis) Scholkopf et al. 2001
- Kernel CCA (Cannonical Correlation Analysis) Hardoon et al. 2003
- Kernel FDA (Factorial Discriminant Analysis) Roth et al. 2000
- Tout algorithme qui utilise des produits scalaires entre les échantillons peut etre non-linéarisé par le "truc à noyaux"

Plan du cours

Applications

- Finance (évolution des prix, valeurs en bourse, etc.)
- Structure des protéines (Protein Folding)
- Génomique (microarray gene expression data)
- Reconnaissance de visage
- Détections des catastrophes, forecasting
- Images satellite et surveillance
- Diagnostic médical (cancer du sein)
- En physique ; example : Particle and Quark-Flavour Identification in
- High Energy Physics (Classifying LEP Data with Support Vector Algorithms by Schölkopf et al. AIHENP'99)

Références

Livres, articles, web :

- Steinwart, Christmann, *Support Vector Machines*, Springer 2008
- Scholkopf, Smola, *Learning with Kernels*, The MIT Press, 2001
- Hastie, Tibshirani, Friedman, *The elements of statistical learning : Data mining, inference, and prediction*, New York, Springer Verlag, 2006
- —, *Machines à vecteurs supports (WikiStat)*, http ://wikistat.fr
- Tax and Duin, *Support Vector Data Description*, Machine Learning, 54(1), 2004
- Hardoon, Szedmak, Shawe-Taylor, *Canonical correlation analysis ; an overview with application to learning methods*, Tech. Rep., University of London, 2003.
- Roth, Steinhage, *Nonlinear discriminant analysis using kernel functions*, Advances in Neural Information Processing Systems, 2000.