Apprentissage statistique : théorie et méthodes
M1MINT

Agathe Guilloux

Plan

Plan

Le problème de classification binaire

On a des données d'apprentissage (learning data) pour des individus $i = 1, \ldots, n$. Pour chaque individu i :

- on a un vecteur de covariables (features) $x_i \in \mathcal{X} \subset \mathbb{R}^d$
- la valeur de son label $y_i \in \{-1, 1\}$.
- on suppose que les couples (X_i, Y_i) sont des copies i.i.d. de (X, Y) de loi inconnue et que l'on observe leurs réalisations (x_i, y_i) $(i = 1, \ldots, n)$.

But

- On veut, pour un nouveau vecteur X_+ de features, prédire la valeur du label Y_+ par $\hat{Y}_+ \in \{-1, 1\}$
- Pour cela, on utilise les données d'apprentissage $\mathcal{D}_n = \{(x_1, y_1), \ldots, (x_n, y_n)\}$ pour construire un **classifieur** $\hat{c}$ de telle sorte que

$$\hat{Y}_+ = \hat{c}(X_+).$$

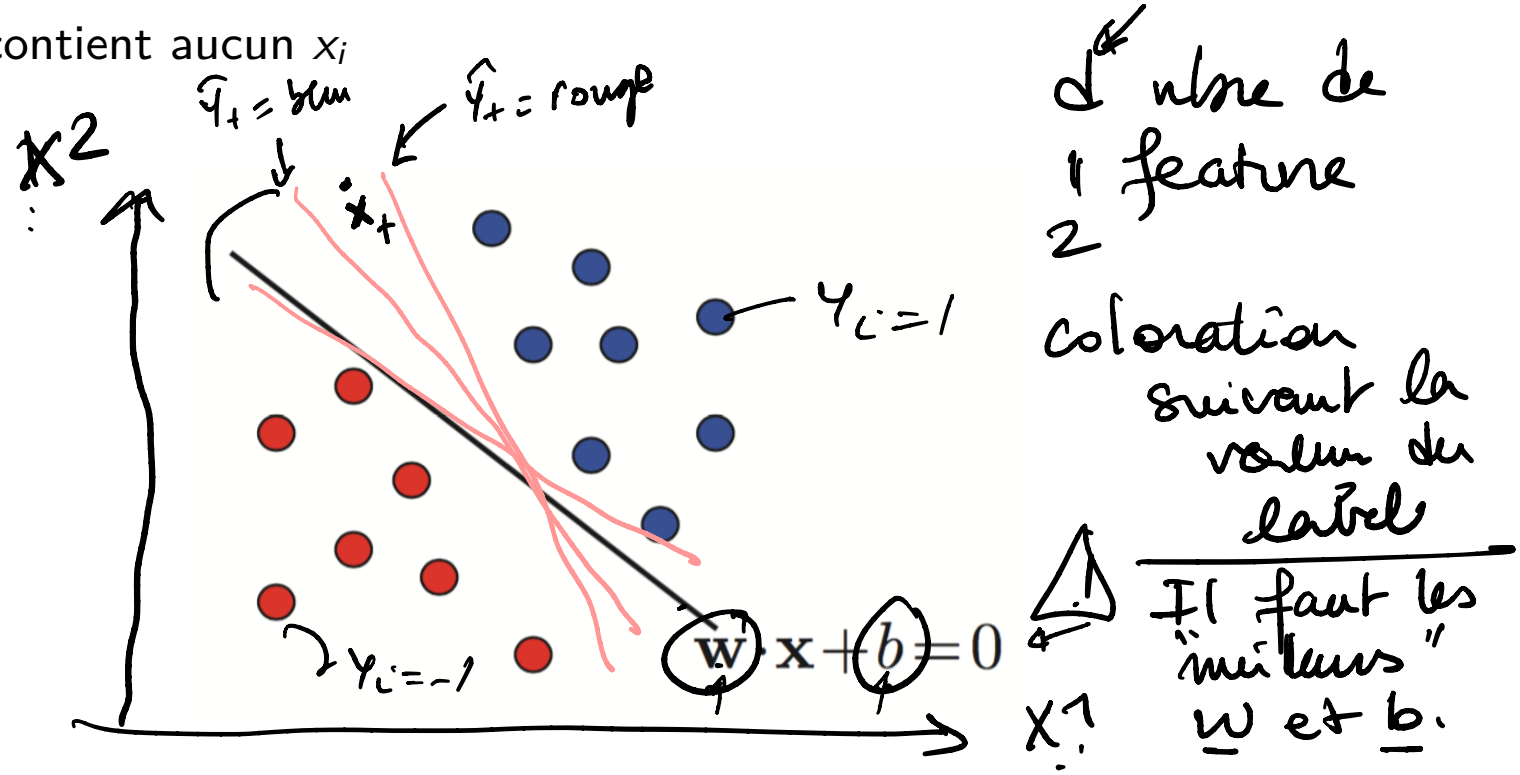
et $\hat{Y}$ est proche de Y_+ (dans un sens à préciser).

SVM : support vector machine.

Linéairement séparable

Un jeu de données est **linéairement séparable** si on peut trouver un hyperplan affine H tel que

- les points $x_i \in \mathbb{R}^d$ tels que $y_i = 1$ sont d'un côté de H
- les points $x_i \in \mathbb{R}^d$ tels que $y_i = -1$ sont de l'autre côté
- H ne contient aucun x_i

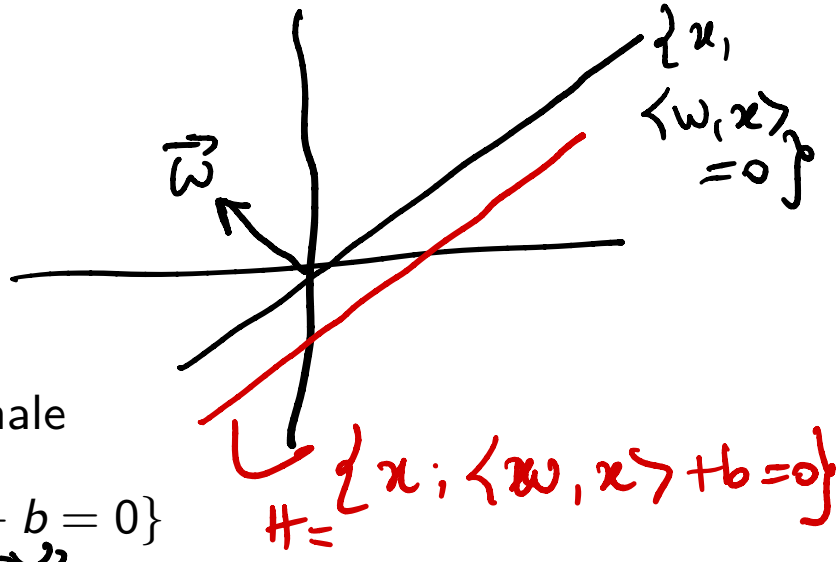


d nbre de features

2 coloration suivant la valeur du label

Il faut les "meilleurs" w et b.

Rappel



Hyperplan affine

L'hyperplan affine défini par son équation normale

$$H = \{x \in \mathbb{R}^d : \langle w, x \rangle + b = 0\}$$

est une translation de b de l'ensemble de vecteur orthogonaux à w où

- $w \in \mathbb{R}^d$ est un vecteur non-nul normal
- $b \in \mathbb{R}$.

Par définition, H est invariant par multiplication de l'équation normale par un scalaire non-nul.

$\forall \kappa \in \mathbb{R}^*$ $\quad \langle w, x \rangle + b = 0$

$\Rightarrow \kappa \langle w, x \rangle + \kappa b = 0$

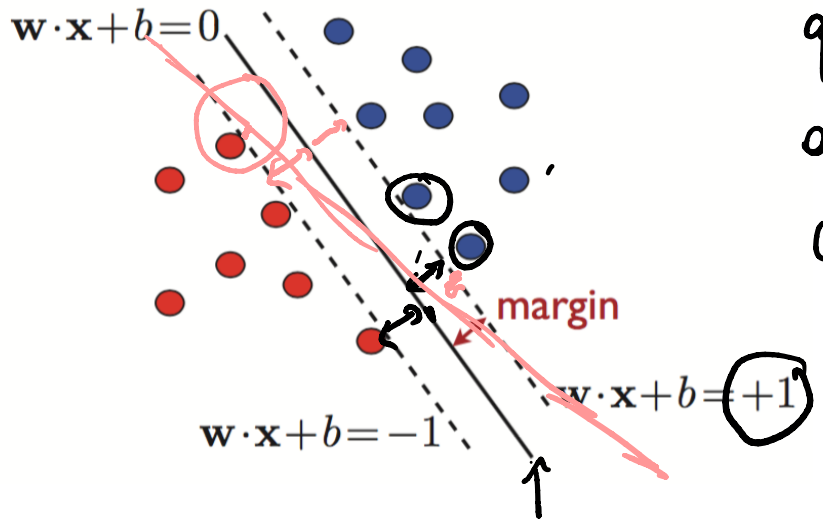
$\Rightarrow \langle \kappa w, x \rangle + \kappa b = 0$

$\rightarrow$ l'équation normale n'est pas unique.

Cas linéairement séparable

Comme ici aucun x_i n'est dans H, on peut choisir w et b de telle sorte que

$$\min_{i=1,\dots,n} |\langle w, x_i \rangle + b| = 1$$



Parmi tous les w et b qui définissent H, on peut choisir ceux tels que $\min_{i=1,\dots,n} |\langle w, x_i \rangle + b| = 1$

On parlera d'hyperplan **canonique**.

Point correctement classifié

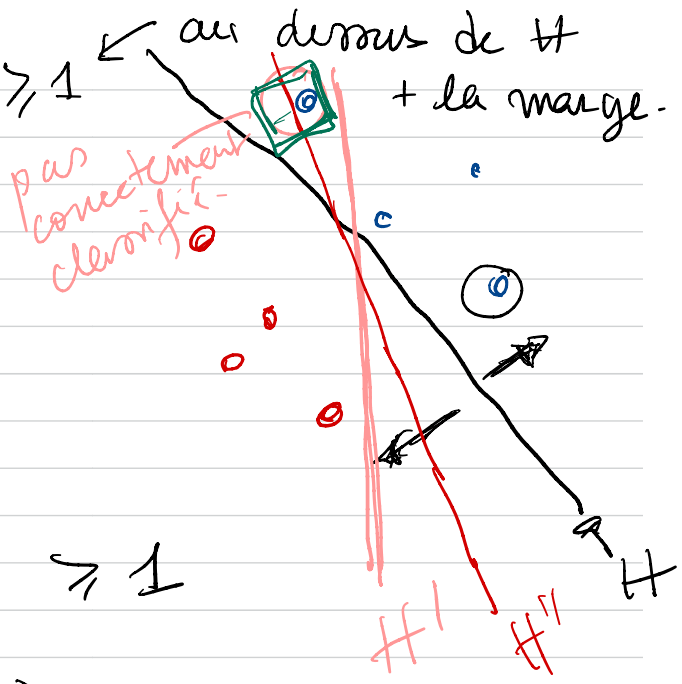
x_i est correctement classifié si

$$y_i(\langle w, x_i \rangle + b) \geq 1.$$

points bleus $y_i = 1$ $\langle w, x_i \rangle + b \geq 1$ ← au dessus de H + la marge.

points rouges $y_i = -1$

$$\langle w, x_i \rangle + b \leq -1$$



donc $y_i (\langle w, x_i \rangle + b)$

bleus $1 \underbrace{(\langle w, x_i \rangle + b)}_{\geq 1} \geq 1$

rouges $-1 \underbrace{(\langle w, x_i \rangle + b)}_{\leq -1} \geq 1$.

Le point est correctement classifié si

$$y_i (\langle w, x_i \rangle + b) \geq 1. \quad \blacksquare$$

Remarque: il existe un hyperplan tel que tous les points sont correctement classifiés.

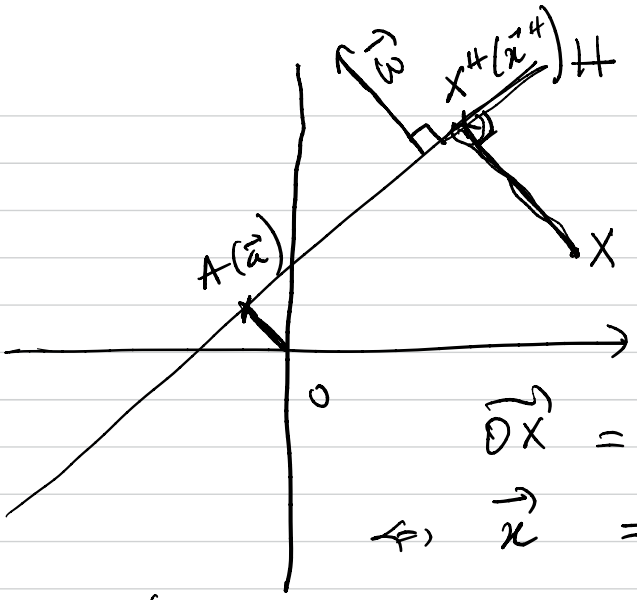
Marge

La distance de tout point $x' \in \mathbb{R}^d$ à H est donnée par

$$\frac{|\langle w, x' \rangle + b|}{\|w\|}.$$

Quand H est l'hyperplan canonique, sa **marge** est donnée par

$$\min_{i \in 1,\ldots,n} \frac{|\langle w, x_i \rangle + b|}{\|w\|} = \frac{1}{\|w\|}.$$



Distance de X à H est donnée par $\|XX^H\|$.

$$\overrightarrow{OX} = \overrightarrow{OA} + \overrightarrow{AX^H} + \overrightarrow{X^HX}$$

$$\Leftrightarrow \vec{x} = \vec{a} + \overrightarrow{AX^H} + \overrightarrow{X^HX}$$

on a donc :

$$\langle \vec{x}, \vec{w} \rangle = \langle \vec{a}, \vec{w} \rangle + \underbrace{\langle \overrightarrow{AX^H}, \vec{w} \rangle}_{\in H \ \in H} + \langle \overrightarrow{X^HX}, \vec{w} \rangle$$

$\overrightarrow{X^HX} \perp H$ par construction $\Rightarrow \overrightarrow{X^HX} \parallel \vec{w}$

$\underbrace{\langle \overrightarrow{AX^H}, \vec{w} \rangle}_{=0}$

De plus : $A \in H$ donc $\langle \vec{w}, \vec{a} \rangle + b = 0$ ← équation de H

on peut écrire $\overrightarrow{X^HX} = d\vec{w}$.

$$\langle \vec{x}, \vec{w} \rangle = -b + 0 + \langle d\vec{w}, \vec{w} \rangle$$

$$\Leftrightarrow \langle \vec{x}, \vec{w} \rangle + b = d \underbrace{\langle \vec{w}, \vec{w} \rangle}_{\|\vec{w}\|_2^2}$$

$$\Leftrightarrow d = \frac{\langle \vec{x}, \vec{w} \rangle + b}{\|\vec{w}\|_2^2} \quad \Leftrightarrow \quad \underbrace{d\|\vec{w}\|}_{\text{norme de } \overrightarrow{X^HX}} = \frac{\langle \vec{x}, \vec{w} \rangle + b}{\|\vec{w}\|}$$

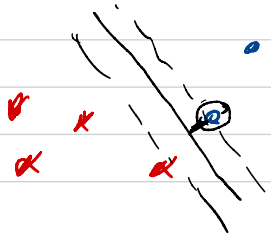
Pour l'hyperplan canonique, celui pour lequel

$$\min_{1 \le i \le n} |\langle \vec{w}, x_i \rangle + b| = 1$$

la distance minimale des x_i à H est donnée par

$$\min_{1 \le i \le n} \frac{|\langle x_i, \vec{w} \rangle + b|}{\|\vec{w}\|} = \min_{1 \le i \le n} \frac{|\langle x_i, \vec{w} \rangle + b|}{\|\vec{w}\|} = \frac{1}{\|\vec{w}\|}$$

c'est la marge



→ on va définir le meilleur hyperplan canonique séparateur des points comme celui avec la + gd marge.

SVM linéaire dans le cas séparable

On veut donc resoudre le problème suivant

- maximiser la marge
- en classifiant correctement les observations

$\max_w \frac{1}{\|w\|} \Leftrightarrow \min_w \|w\| \Leftrightarrow \min_w \|w\|_2^2$

$\forall i \quad y_i(\langle w, x_i \rangle + b) \geq 1$

c'est équivalement à

$$\min_{w \in \mathbb{R}^d, b \in \mathbb{R}} \frac{1}{2}\|w\|_2^2$$

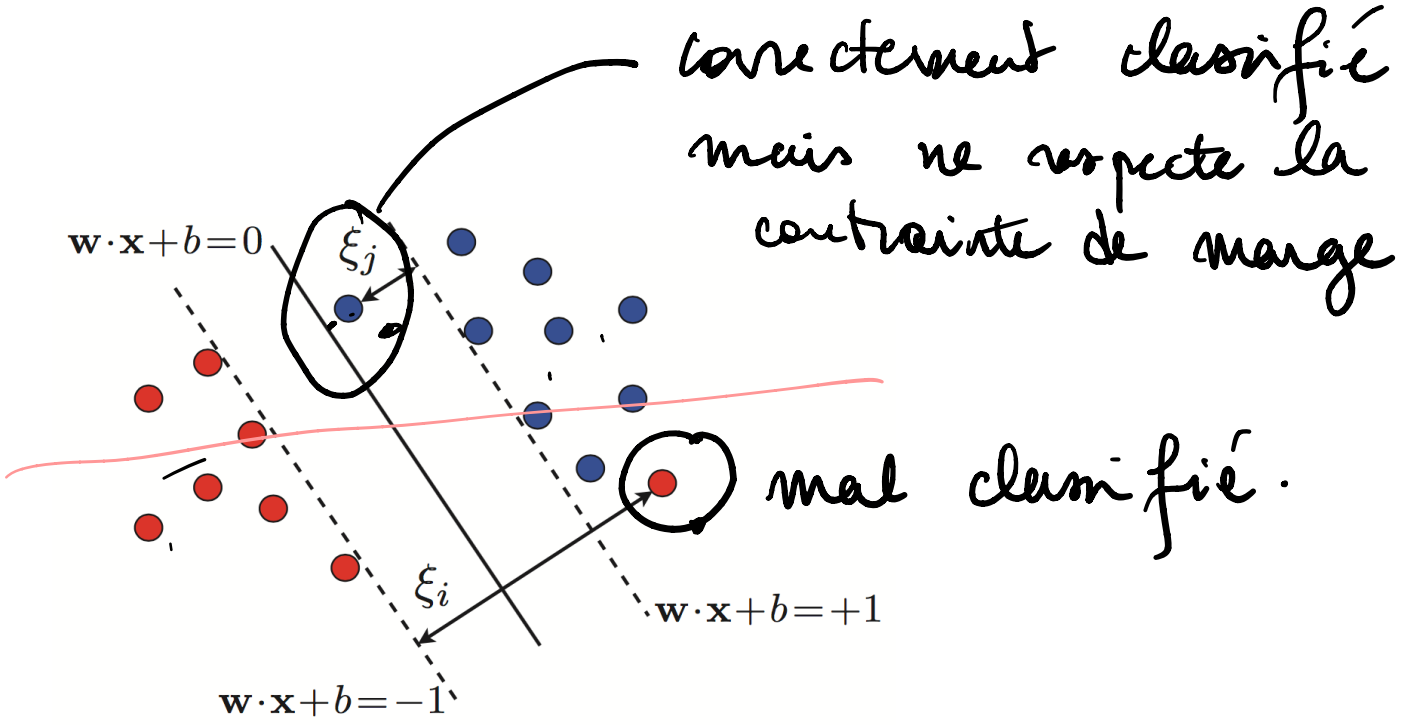
sous contrainte $y_i(\langle w, x_i \rangle + b) \geq 1$ pour tout $i = 1, \ldots, n$.

En pratique, ce n'est pas raisonnable de supposer que le jeu de données est linéairement séparable !

→ problème d'optimisation sous contraintes linéaires que l'on sait résoudre numériquement.

Plan

SVM linéaire dans le cas non-séparable (1)



On va remplacer les contraintes

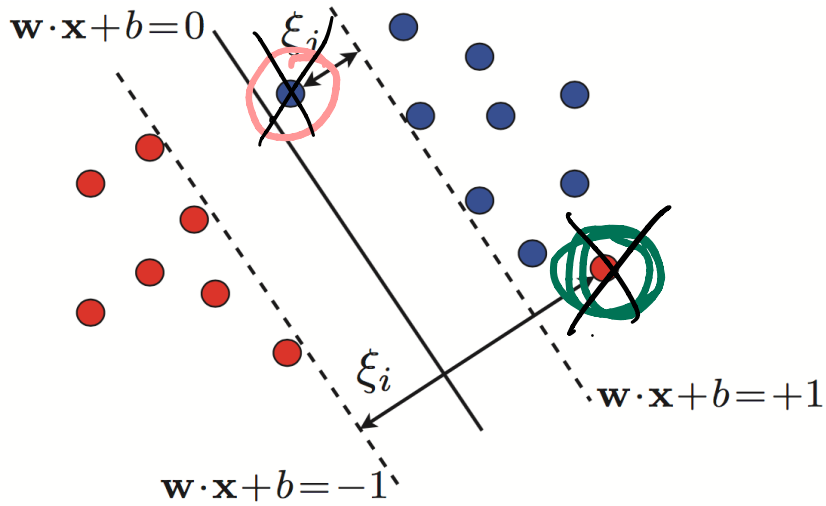
$$y_i(\langle w, x_i\rangle + b) \geq 1 \quad \text{pour tout} \quad i = 1, \ldots, n,$$

par des contraintes plus souples (relaxées).

Marge souple (soft margin)

on relâche la contrainte de bonne classification

$y_i(\langle w, x_i \rangle + b) \geq 1 - s_i$ pour tout $i = 1, \ldots, n$, avec $s_1, \ldots, s_n \geq 0$



- Le "slack" $s_i \geq 0$ mesure la distance par laquelle x_i viole l'inégalité
- Si $s_i = 0$ alors i est correctement classifié. (et respecte la distance à la marge)
- $s_i \in]0, 1]$ alors i est correctement classifié mais est un outlier.
- Si $s_i > 1$ alors i n'est pas correctement classifié.
- Si on enlève les i pour lesquels $s_i > 0$, on se ramène au problème séparable.

$$\min_{w,b} \frac{1}{2}\|w\|_2^2 \quad \text{s.c.} \quad \forall i=1,\dots,n \quad y_i(\langle w, x_i\rangle + b) \geq 1 - s_i$$

$$\text{et} \quad \forall i = 1,\dots,n \quad s_i \geqslant 0$$

mais on veut aussi que les s_i soient les + petits possibles.

dans le sens où on veut que le + possible soient nuls. $\begin{pmatrix} s_1 \\ \vdots \\ s_n \end{pmatrix}$ $\longrightarrow$ on pénalise par la norme 1 de $\begin{pmatrix} s_1 \\ \vdots \\ s_n \end{pmatrix}$

$$\longrightarrow \min_{w,b} \frac{1}{2}\|w\|_2^2 + C \left\| \begin{matrix} s_1 \\ \vdots \\ s_n \end{matrix} \right\|_1 \quad \text{s.c.} \quad \forall i = 1,\dots,n$$

$$\begin{cases} y_i(\langle w, x_i\rangle + b) \geqslant 1 - s_i \\ s_i \geqslant 0. \end{cases}$$

$$\sum_{i=1}^{n} |s_i| = \sum_{i=1}^{n} s_i$$

SVM linéaire dans le cas non-séparable (2)

On remplace donc le problème de minimisation par

$$\min_{w\in\mathbb{R}^d, b\in\mathbb{R}, s\in\mathbb{R}^n} \frac{1}{2}\|w\|_2^2 + C\sum_{i=1}^{n} s_i$$

sous contrainte $y_i(\langle w, x_i\rangle + b) \geq 1 - s_i$ et $s_i \geq 0$ pour tout $i = 1, \ldots, n$

où $C > 0$ est le "goodness-of-fit strength".

- Ce problème admet une solution unique.
- La constante C doit être choisie par cross-validation.

Plan

Écriture lagrangienne

$$L(w, b, s, \alpha, \beta) = \frac{1}{2}\|w\|_2^2 + C\sum_{i=1}^{n} s_i + \sum_{i=1}^{n} \alpha_i\big(1 - s_i - y_i(\langle w, x_i\rangle + b)\big) - \sum_{i=1}^{n} \beta_i s_i$$

A l'optimum, on va écrire les conditions KKT et la condition complémentaire.

$$L(w,b,s,\alpha,\beta) = \frac{1}{2}\|w\|_2^2 + C\sum_{i=1}^{n} s_i + \sum_{i=1}^{n}\alpha_i\left(1 - s_i - y_i(\langle w, x_i\rangle + b)\right) - \sum_{i=1}^{n}\beta_i s_i .$$

Conditions KKT

$$\nabla_w L(w,b,s,\alpha,\beta) = w + 0 - \sum_{i=1}^{n}\alpha_i y_i x_i + 0$$

$$\nabla_b L(w,b,s,\alpha,\beta) = 0 + 0 - \sum_{i=1}^{n}\alpha_i y_i$$

$$\nabla_s L(w,b,s,\alpha,\beta) = 0 + \begin{pmatrix} C \\ \vdots \\ C \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} \alpha_1 \\ \vdots \\ \alpha_n \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} \beta_1 \\ \vdots \\ \beta_n \end{pmatrix}$$

A l'optimum ces gradients doivent nuls.

$$w^* = \sum_{i=1}^{n}\alpha_i^* y_i x_i$$

$$\sum \alpha_i^* y_i = 0$$

$$\forall i = 1,\dots,n \quad C = \alpha_i^* + \beta_i^*$$

Condition supplémentaire.

$\forall i = 1,\dots,n \quad \alpha_i^*\left(1 - s_i - y_i(\langle w^*, x_i\rangle + b^*)\right) = 0$

$\forall i = 1,\dots,n \quad \beta_i^* s_i^* = 0.$

$\Leftrightarrow \beta_i^* = 0$ ou $s_i^* = 0$ dans

$\Leftrightarrow \alpha_i^* = 0$ ou $1 - s_i = y_i(\langle w^*, x_i\rangle + b^*)$ pour i $\alpha_i^* = 0$ pour les autres $\alpha_i^* \neq 0$

On remarque que $w^* = \sum_{i=1}^{n}\alpha_i^* y_i x_i$ ne tient pas en compte que les i pour lesquels $\alpha_i^* \neq 0$. On appelle vecteurs supports (support vectors) les x_i pour lesquels $\alpha_i^* \neq 0$.
Pour ces supports, on sait que $y_i(\langle w^*, x_i\rangle + b^*) = 1 - s_i^*$ ils sont à la limite de la contrainte.
on a 2 cas :

Soit $s_i^* = 0$ dans ce cas $y_i(\langle w^*, x_i\rangle + b^*) = 1$

$s_i^* > 0$ —— $y_i(\langle w^*, x_i\rangle + b^*) = 1 - s_i < 1$

Optimum

j'ai enlevé les * à l'optimum.

Conditions KKT

$$\nabla_w L(w, b, s, \alpha, \beta) = w - \sum_{i=1}^{n} \alpha_i y_i x_i = 0 \quad \text{i.e.} \quad w = \sum_{i=1}^{n} \alpha_i y_i x_i$$

$$\nabla_b L(w, b, s, \alpha, \beta) = -\sum_{i=1}^{n} \alpha_i y_i = 0 \quad \text{i.e.} \quad \sum_{i=1}^{n} \alpha_i y_i = 0$$

$$\nabla_s L(w, b, s, \alpha, \beta) = C - \alpha_i - \beta_i = 0 \quad \text{i.e.} \quad \alpha_i + \beta_i = C$$

Condition complémentaire

$$\alpha_i \big(1 - s_i - y_i(\langle w, x_i \rangle + b)\big) = 0 \text{ i.e. } \alpha_i = 0 \text{ ou } y_i(\langle w, x_i \rangle + b) = 1 - s_i$$

$$\beta_i s_i = 0 \quad \text{i.e.} \quad \beta_i = 0 \text{ ou } s_i = 0$$

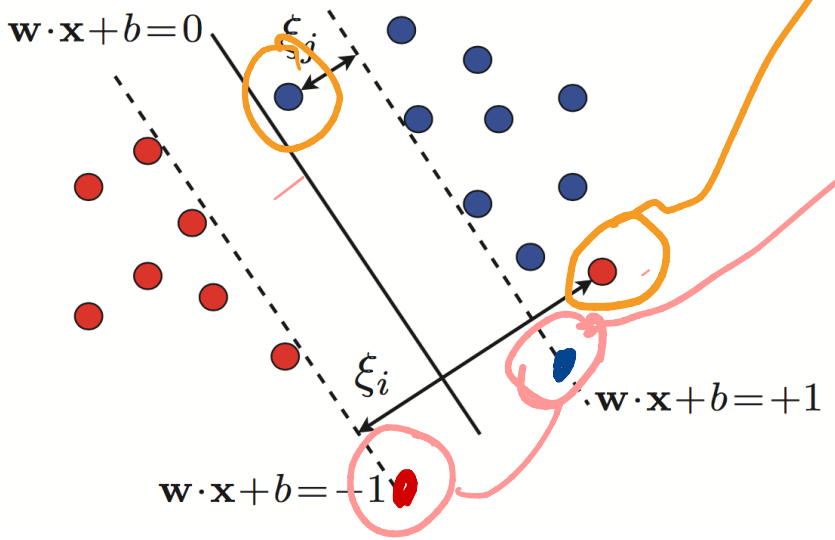
pour tout $i = 1, \ldots, n$

Optimum

On obtient

- $w = \sum_{i=1}^{n} \alpha_i y_i x_i$
- Si $\alpha_i \neq 0$, on dit que x_i est un vecteur de support ("support vector") et $y_i(\langle w, x_i \rangle + b) = 1 - s_i$
  - Si $s_i = 0$ alors x_i appartient à l'hyperplan marginal
  - Si $s_i \neq 0$ alors x_i est un outlier et $\beta_i = 0$ et donc $\alpha_i = C$

Les "support vectors" appartiennent soit à l'hyperplan marginal, ou sont des outliers avec $\alpha_i = C$.



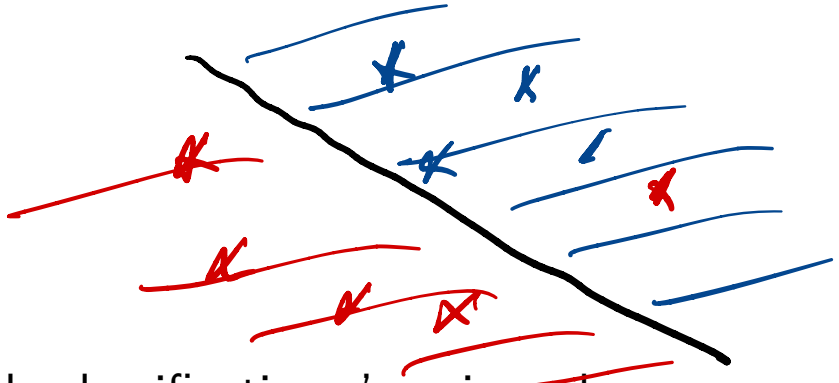
À faire calculer b^* pour $\underline{i}$ dont x_i est vecteur support.

Montrer que $b^* = y_i - \langle x_i, \sum_{j=1}^{n} \alpha_j^* y_j x_j \rangle$

$= y_i - \sum_{j=1}^{n} \alpha_j^* y_j \langle x_i, x_j \rangle$.

Plan

Classifieur



$$\hat{y}_+ = \text{signe}(\langle w^*, x_+ \rangle + b^*)$$

La règle de classification s'exprime alors comme

$$x \mapsto \text{signe}(\langle w^*, x \rangle + b^*) = \text{signe}\left(\sum_{i=1}^{n} \alpha_i^* y_i \langle x, x_i \rangle + b^*\right)$$

L'intercept b peut s'exprimer pour un "support vector" x_i tel que $0 < \alpha_i < C$ comme

$$b^* = y_i - \sum_{j=1}^{n} \alpha_j^* y_j \langle x_i, x_j \rangle .$$

Lien avec le "hinge loss"

On peut récrire le problème

$$\min_{w\in\mathbb{R}^d, b\in\mathbb{R}, s\in\mathbb{R}^n} \frac{1}{2}\|w\|_2^2 + C\sum_{i=1}^n s_i$$

$$\text{s.c.} \quad y_i(\langle w, x_i\rangle + b) \geq 1 - s_i \quad \text{et} \quad s_i \geq 0 \quad \text{pour tout} \quad i = 1, \ldots, n$$

comme

$$\operatorname*{argmin}_{w\in\mathbb{R}^d, b\in\mathbb{R}} \frac{1}{2}\|w\|_2^2 + C\sum_{i=1}^n \underbrace{\max\Big(0, 1 - y_i(\langle w, x_i\rangle + b)\Big)}_{\text{Hinge loss}}.$$

$$\min \frac{1}{2}\|w\|^2 + C\sum_{i=1}^{n} \xi_i \quad \text{s.c.} \begin{cases} y_i\left(\langle w, x_i\rangle + b\right) \geq 1 - \xi_i \\ \xi_i \geq 0 \end{cases} \quad \forall i = 1, \dots, n.$$

Si i est tel que $\xi_i = 0$: il est correctement classifié et à l'extérieur des marges.

on a $y_i\left(\langle w, x_i\rangle + b\right) \geq 1$

$\Leftrightarrow 1 - y_i\left(\langle w, x_i\rangle + b\right) \leq 0$

Sinon. $\xi_i > 0$ $\quad y_i\left(\langle w, x_i\rangle + b\right) < 1$

$\Leftrightarrow 1 - y_i\left(\langle w, x_i\rangle + b\right) > 0.$

$$\max\left(0, 1 - y_i\left(\langle w, x_i\rangle + b\right)\right) = \begin{cases} 0 = \xi_i & \text{si } \xi_i = 0 \\ 1 - y_i\left(\langle w, x_i\rangle + b\right) = \xi_i \end{cases}$$

On peut réécrire le problème :

$$\min \frac{1}{2n}\|w\|^2 + \frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n} \max\left(0, 1 - y_i\left(\langle w, x_i\rangle + b\right)\right)$$

Hinge loss.

pénalité ridge

$\geq 0 \rightarrow \xi_i \geq 0$

on a aussi l'inégalité $\xi_i \geq 1 - y_i\left(\langle w, x_i\rangle + b\right)$

Plan

Problème dual (1)

A l'optimum, j'ai enlevé les *.

- Si on remplace w par $\sum_{i=1}^{n} \alpha_i y_i x_i$ dans $L(w, b, s, \alpha, \beta)$, on obtient

$$\sum_{i=1}^{n} \alpha_i - \frac{1}{2} \sum_{i,j=1}^{n} \alpha_i \alpha_j y_i y_j \langle x_i, x_j \rangle$$

- avec les contraintes

$$\alpha_i \geq 0, \quad \beta_i \geq 0, \quad \sum_{i=1}^{n} \alpha_i y_i = 0, \alpha_i + \beta_i = C$$

ce qui se réécrit

$$0 \leq \alpha_i \leq C, \quad \sum_{i=1}^{n} \alpha_i y_i = 0$$

pour tout $i = 1, \ldots, n$.

Problème dual (2)

$$w^* = \sum \alpha_i^* y_i x_i$$

$$b^* = y_i - \sum \alpha_j^* y_i \langle x_i, x_j \rangle$$

On obtient alors le problème dual

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

sous contrainte $0 \leq \alpha_i \leq C$ et $\sum_{i=1}^{n} \alpha_i y_i = 0$ pour tout $i = 1, \ldots, n$

Une remarque très importante

Le problème dual

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

sous la contrainte $0 \leq \alpha_i \leq C$ et $\sum_{i=1}^{n} \alpha_i y_i = 0$ pour tout $i = 1, \ldots, n$

et le classifieur

$$x \mapsto \text{signe}(\langle w, x \rangle + b) = \text{signe}(\sum_{i=1}^{n} \alpha_i y_i \langle x_i, x \rangle + b)$$

ne dépendent que des features x_i via les produits scalaire $\langle x_i, x_j \rangle$!

Plan

Feature engineering

- A partir des $x_1, \ldots, x_n \in \mathbb{R}^d$, on peut construire de **nouvelles** features
- Par exemple, en considérant des polynômes d'ordre 2

$$x_{i,j}^2, \quad x_{i,j} \times x_{i,k} \qquad \text{pour tout} \quad 1 \leq j, k \leq d$$

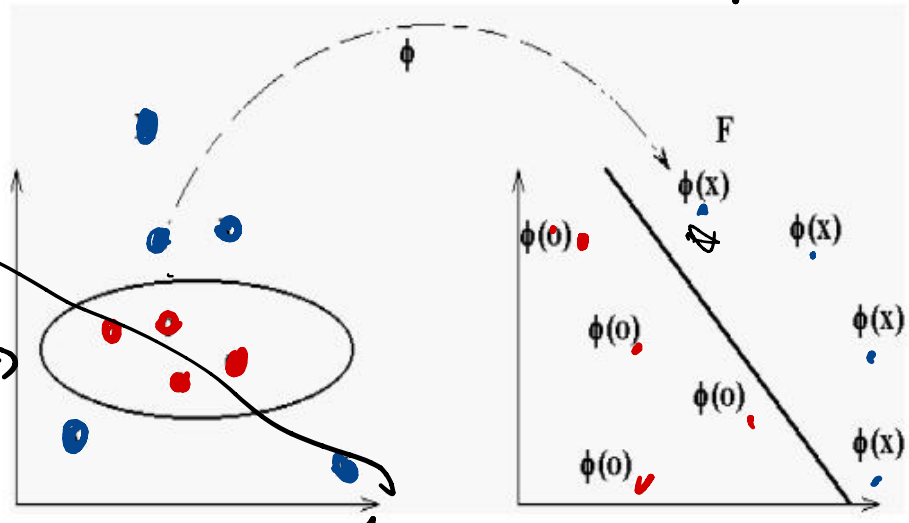
- Cela grandit la dimension du problème (dimension de w).

$$2d + \frac{d}{2}^2$$

Feature map / transformation de feature

- Considérons une tranformation $\varphi : \mathbb{R}^d \to \mathbb{F}$
- $\mathbb{F}$ est un espace de Hilbert (qui peut être de dimension infinie), muni du produit scalaire $\langle \cdot, \cdot \rangle_{\mathbb{F}}$, qu'on appelle **feature space**.
- La frontière de décision $\{x : \langle w, \varphi(x) \rangle + b = 0\}$ n'est plus un hyperplan (mais $\{\varphi(x) :\to \langle w, \varphi(x) \rangle + b = 0\}$ l'est)

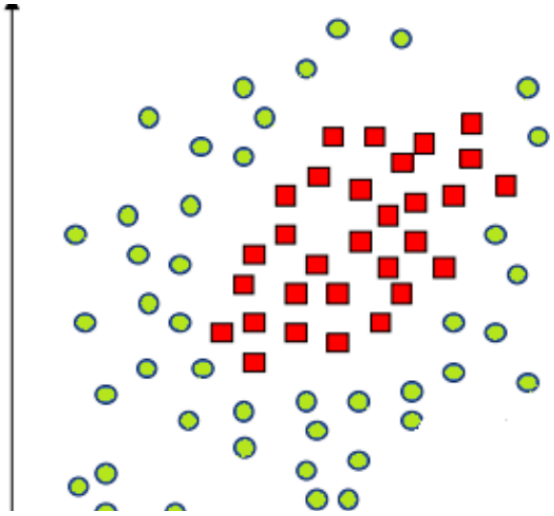
espoir : trouver un autre espace F dans les images $\phi(x_i)$ sont séparables linéairement.



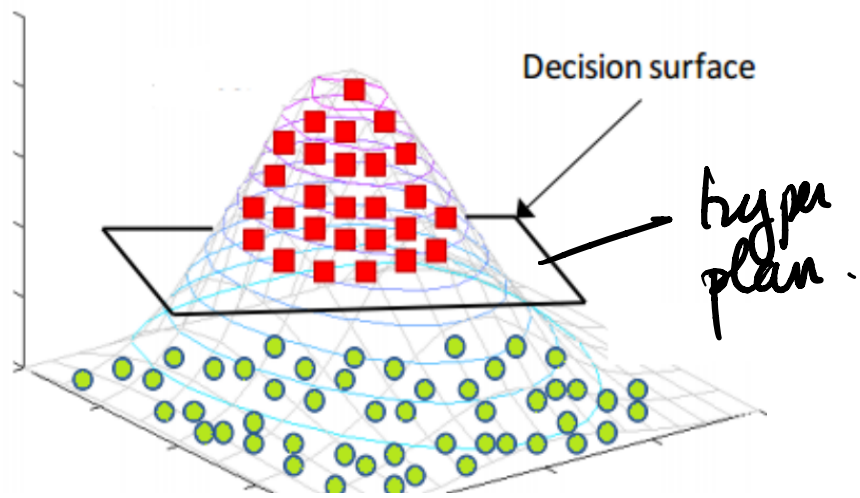
les points sont séparables (via l'ellipse) mais pas linéairement

$\mathbb{R}^d$

transformation



kernel



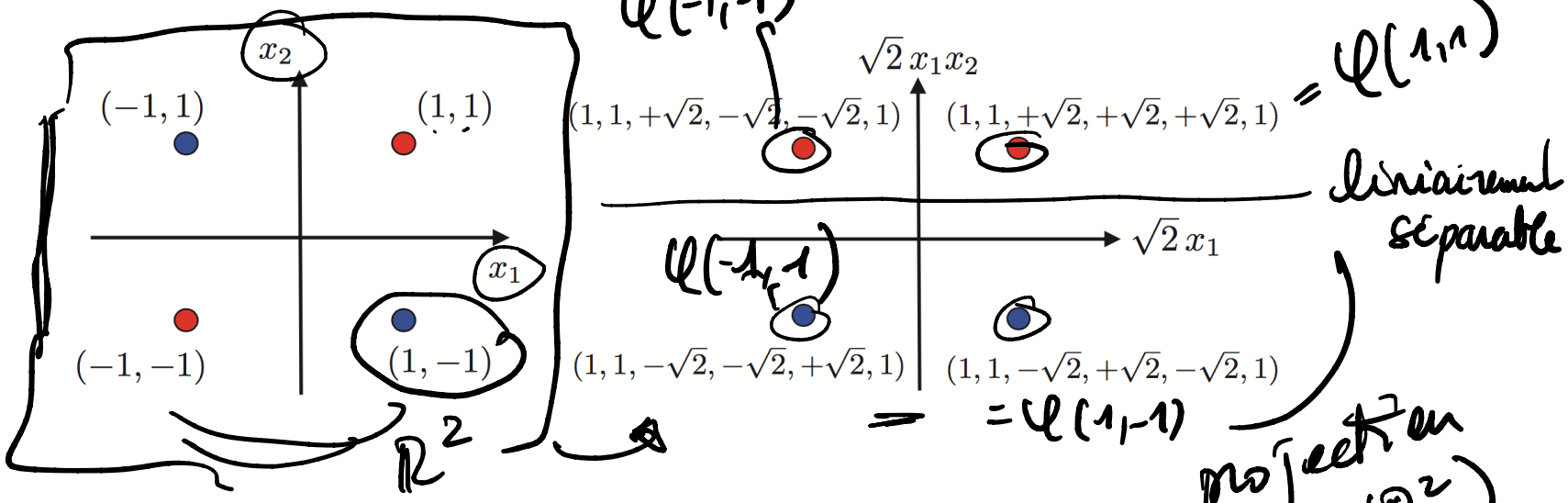
dans l'espace de départ
les points ne sont pas
linéairement séparables

Transformation polynomiale d'ordre 2 (1)

La transformation polynomiale $\varphi : \mathbb{R}^2 \to \mathbb{R}^6$ pour $x = (x_1, x_2) \in \mathbb{R}^2$

$$\varphi(x) = (x_1^2, x_2^2, \sqrt{2}x_1x_2, \sqrt{2}x_1, \sqrt{2}x_2, 1)$$

résoud le problème de classification XOR (Exclusive OR).



XOR : y_i est bleu ssi une des coordonnées de x_i vaut 1.

$\varphi(1,1) = (1,1,\sqrt{2},\sqrt{2},\sqrt{2},1)$

$\varphi(1,-1) = (1,1,-\sqrt{2},\sqrt{2},-\sqrt{2},1)$

Transformation polynomiale d'ordre 2 (2)

Il faut remarquer que pour $x, x' \in \mathbb{R}^2$ nous avons

$$\langle \varphi(x), \varphi(x') \rangle = \left\langle \begin{bmatrix} x_1^2 \\ x_2^2 \\ x_2^2 \\ \sqrt{2}x_1x_2 \\ \sqrt{2}x_1 \\ \sqrt{2}x_2 \\ 1 \end{bmatrix}, \begin{bmatrix} x_1'^2 \\ x_2'^2 \\ x_2'^2 \\ \sqrt{2}x_1'x_2' \\ \sqrt{2}x_1' \\ \sqrt{2}x_2' \\ 1 \end{bmatrix} \right\rangle$$

$$= (x_1x_1' + x_2x_2' + 1)^2$$

$$= (\langle x, x' \rangle + 1)^2$$

Noyau polynomial

Cela motive la définition de

$$K(x, x') = \langle \varphi(x), \varphi(x') \rangle = (\langle x, x' \rangle + c)^q$$

où $q \in \mathbb{N}^\star$ et $c > 0$. K est alors appelé **noyau polynomial** de degré q.

Noyau

Soit un espace de feature $\mathcal{X}$ (sous $\mathcal{X} = \mathbb{R}^d$), une fonction

$$K : \mathcal{X} \times \mathcal{X} \to \mathbb{R}$$

est appelée un **noyau** sur $\mathcal{X}$.

Noyau symétrique

On dit que le noyau K est **symétrique** quand

$$K(x, x') = K(x', x)$$

pour tout $x, x' \in \mathcal{X}$

Plan

PDS kernel

PDS kernel / noyau symétrique défini positif

On dit qu'un noyau K est PDS ssi

- il est symétrique
- pour tout $N \in \mathbb{N}$ et tout $\{x_1, \dots x_N\} \subset \mathcal{X}$ on a

$$\mathbb{K} = [K(x_i, x_j)]_{1 \leq i,j \leq N} \succeq 0$$

$\mathbb{K}$ est une matrice symétrique définie positive, ou de façon équivalente que

$$u^\top \mathbb{K} u = \sum_{1 \leq i,j \leq N} u_i u_j K(x_i, x_j) \geq 0$$

pour $u \in \mathbb{R}^N$, toutes les valeurs propres de $\mathbb{K}$ sont strictement positive.

Intérêt des noyaux PDS

- L'intérêt des noyaux positifs c'est qu'il est possible de leur associer un produit scalaire dans un espace $\mathcal{F}$ de features.
- Pour un échantillon $x_1, \ldots, x_n$ on nomme $\mathbb{K} = [K(x_i, x_j)]_{1 \leq i,j \leq n}$ la **matrice de Gram** ou la **matrice de similarité.** On peut imaginer définir des similarités dans des cas où les x_i de départ sont des données plus complexes (pas dans $\mathbb{R}^d$) : images, séquences d'ADN, graphes, etc
- Tout cela est associé à la théorie des espaces de Hilbert à noyau reproduisant (RKHS : Reproducing kernel Hilbert space).

Propriété d'un noyau PDS

Produit d'Hadamard

$\mathbb{A} \odot \mathbb{B}$ entre les matrices $\mathbb{A}$ et $\mathbb{B}$ de même dimension est donné par

$$(\mathbb{A} \odot \mathbb{B})_{i,j} = \mathbb{A}_{i,j} \odot \mathbb{B}_{i,j}$$

Théorème

La somme, le produit, la composition par une série de puissance $\sum_{n \geq 0} a_n x^n$ avec $a_n \geq 0$ pour tout $n \geq 0$ préserve la propriété PDS.

Noyau polynomial

Pour $c > 0$ et $q \in \mathbb{N} - \{0\}$ on définit le noyau polynomial

$$K(x, x') = (\langle x, x' \rangle + c)^q.$$

C'est un noyau PDS.

Preuve. C'est une puissance du noyau PDS $(x, x') \mapsto \langle x, x' \rangle + b$.

Nous avons déjà calculé la transformation associée $\varphi(x)$

Noyaux RBF (Radial basis function) et tanh

Noyau RBF

Pour $\gamma > 0$ il est donné par

$$K(x, x') = \exp(-\gamma \|x - x'\|_2^2)$$

C'est un noyau PDS.

Noyau tanh

Il est aussi appelé le noyau sigmoïde et est défini par

$$K'(x, x') = \tanh(a\langle x, x'\rangle + c) = \frac{e^{a\langle x,x'\rangle+c} - e^{a\langle x,x'\rangle+c}}{e^{a\langle x,x'\rangle+c} + e^{a\langle x,x'\rangle+c}}$$

pour $a, c > 0$.

C'est aussi un noyau PDS.

Plan

Rappel de la remarque avec les features brutes

Le problème dual

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

sous la contrainte $0 \leq \alpha_i \leq C$ et $\sum_{i=1}^{n} \alpha_i y_i = 0$ pour tout $i = 1, \ldots, n$

et le classifieur

$$x \mapsto \text{signe}(\langle w, x \rangle + b) = \text{signe}(\sum_{i=1}^{n} \alpha_i y_i \langle x_i, x \rangle + b)$$

ne dépendent que des features x_i via les produits scalaire $\langle x_i, x_j \rangle$!

Remarque dans l'espace des features transformées $\mathbb{F}$

- Le problème dual est donné par

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

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

sous la contrainte $0 \leq \alpha_i \leq C$ et $\sum_{i=1}^{n} \alpha_i y_i = 0$ pour tout $i = 1, \ldots, n$

- Le classifieur s'écrit

$$x \mapsto \text{signe}(\langle w, \varphi(x) \rangle + b)$$

$$= \text{signe}(\sum_{i=1}^{n} \alpha_i y_i \langle \varphi(x_i), \varphi(x) \rangle + b) = \text{signe}(\sum_{i=1}^{n} \alpha_i y_i K(x_i, x) + b)$$

Ils ne dépendent que des features $\varphi(x_i)$ via le noyau K.

Kernel trick

Pour entrainer un SVM à noyau, on n'a pas besoin de calculer les $\varphi(x_i)$.

Exemple avec un noyau gaussien (1)

On reprend le problème

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

sous la contrainte $0 \leq \alpha_i \leq C$ et $\sum_{i=1}^{n} \alpha_i y_i = 0$ pour tout $i = 1, \ldots, n$

et la prédiction

$$x \mapsto \text{signe}\left(\sum_{i=1}^{n} \alpha_i y_i K(x, x_i) + b \right)$$

avec l'intercept

$$b = y_i - \sum_{j=1}^{n} \alpha_j y_j K(x_j, x_i)$$

pour tout i tel que $0 < \alpha_i < C$.

K noyau gaussien

Exemple avec un noyau gaussien (2)

Le classifieur est donc donné par

$$\hat{c}(x) = \text{signe}\left(\sum_{i=1}^{n} \alpha_i y_i K(x_i, x) + b\right),$$

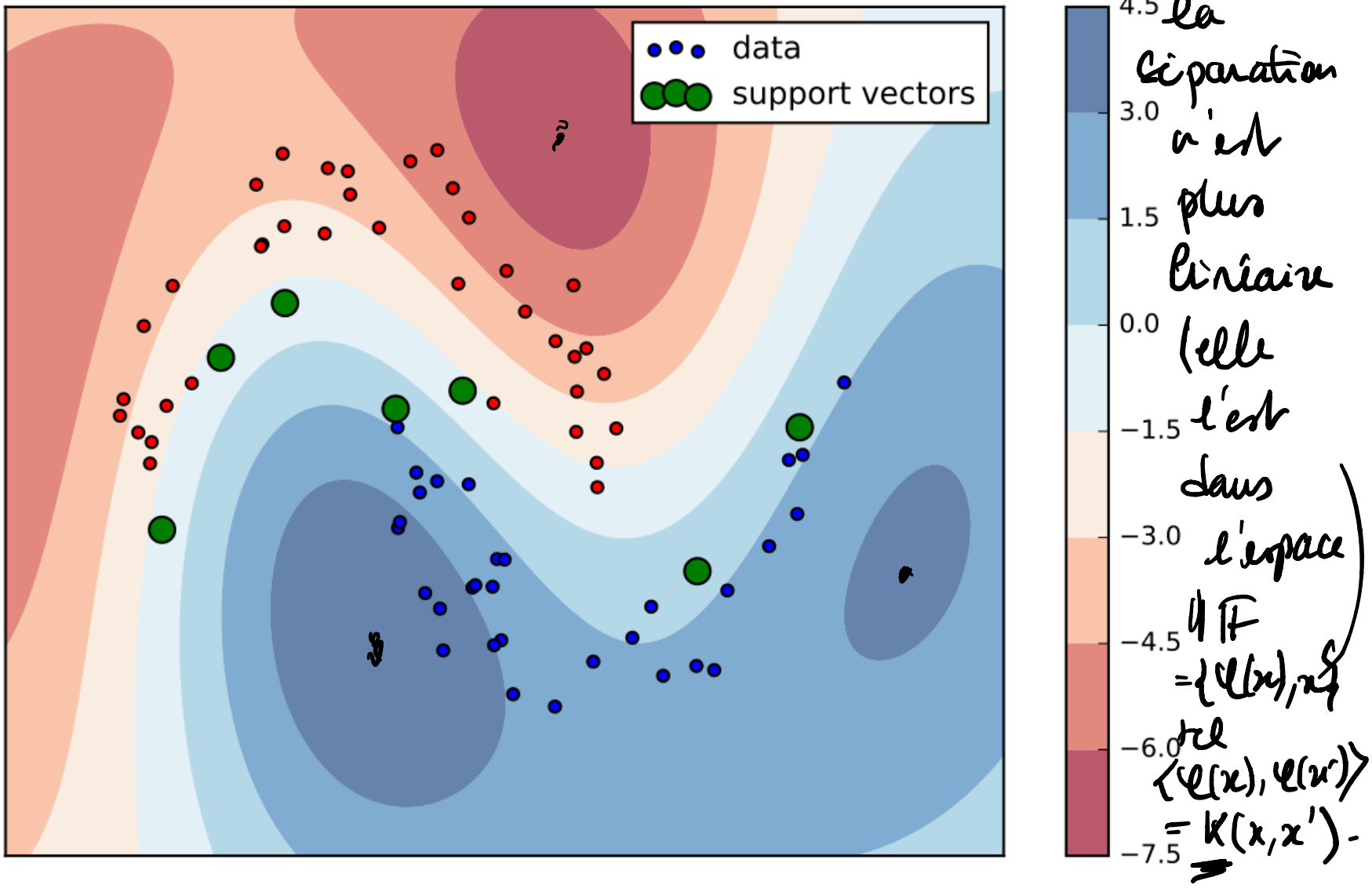
c'est une combinaison des $K(x_i, \cdot)$ où x_i sont les vecteurs de support

Pour le noyau gaussien, la fonction de décision est donnée par

$$x \mapsto \sum_{i:\alpha_i \neq 0} \alpha_i y_i \exp\left(-\gamma \|x - x_i\|_2^2\right) + b$$

c'est un mélange de "densités" gaussiennes.

$$x \mapsto \sum_{i:\alpha_i \neq 0} \alpha_i y_i \exp\left(-\gamma \|x - x_i\|_2^2\right) + b$$



dans l'espace des features de départ la séparation n'est plus linéaire (elle l'est dans l'espace $\mathcal{H}$ $= \{\varphi(x), x\}$ tel $\langle \varphi(x), \varphi(x') \rangle = k(x, x')$.