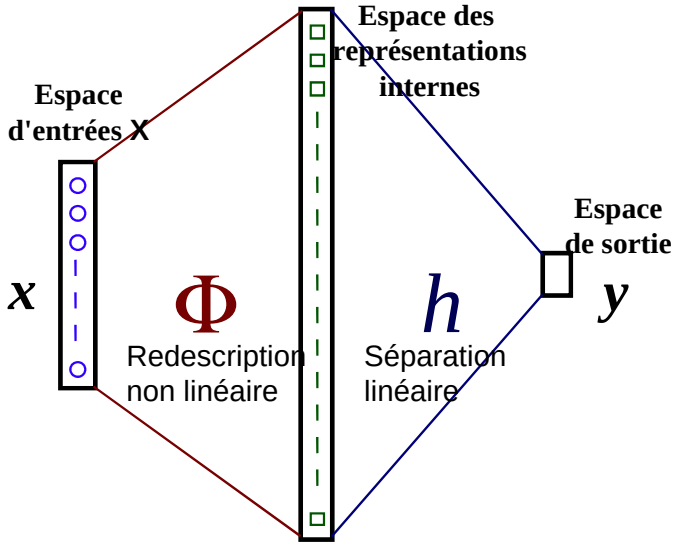
Brève introduction aux « Support Vector Machines » (SVM), alias « Séparateurs à Vaste Marge »

Fabien Moutarde
Centre de Robotique (CAOR)
MINES ParisTech (ENSMP)

`Fabien.Moutarde@mines-paristech.fr`
`http://perso.mines-paristech.fr/fabien.moutarde`

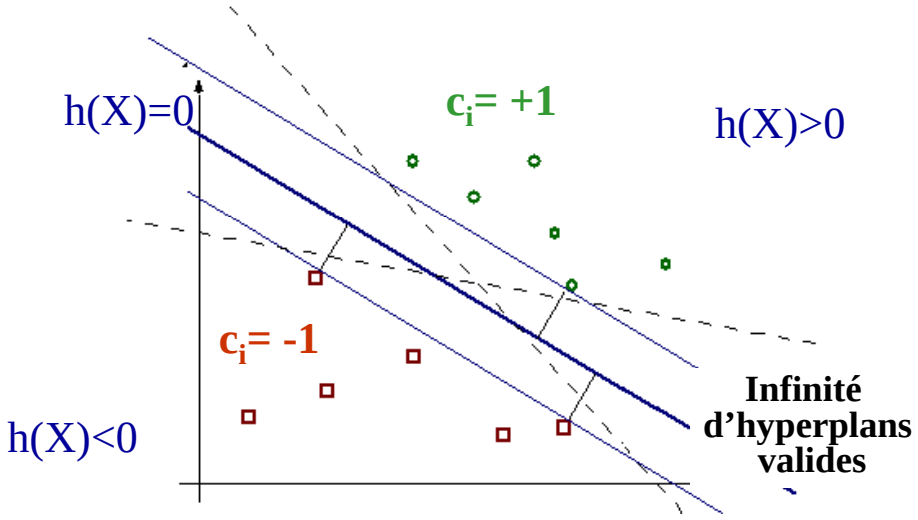
Principe essentiel des SVM



Passer (*indirectement*) dans un espace de plus grande dimension pour y faire séparation linéaire *optimale*...

Séparation linéaire

- **Soient les exemples $\{(X_i, c_i), i=1,\ldots, m\}$ d'un problème de classification, avec $X_i \in X \subset \Re^d$, et $c_i \in \{-1,+1\}$**



- **Une séparation linéaire est la partition en 2 par un hyperplan d'équation h(X) = w.X+b = 0**

Maximisation de la « marge »

- **La distance d'un point p à l'hyperplan est** $d(p)=\frac{|w.p+b|}{\|w\|}$

- **On veut l'hyperplan tel que sa distance aux points les plus proches (=« marge ») soit maximale.**

  Maximiser cette marge revient donc à minimiser $\|w\|$ sous la contrainte que l'hyperplan reste séparateur :

$$\begin{cases} \min \|w\|^2 \\ \forall i \;\; c_i(w.X_i+b) \geq 1 \end{cases}$$

C'est un problème *convexe* d'optimisation

Résolution de l'optimisation sous contrainte

- **Soit par méthode directe d'optimisation quadratique, possible en pratique uniquement si d « petite »**

- **Soit (le plus souvent) par méthode des multiplicateurs de Lagrange**

$$\begin{cases} L(w,b,\alpha) = \|w\|^2 - \sum_{i=1}^{m} \alpha_i \{(X_i.w+b)c_i - 1\} \\ \forall i \;\; \alpha_i \geq 0 \end{cases}$$

Là où L est minimum, $\frac{\partial L}{\partial w} = 0 \;\Rightarrow\; w^* = \sum_{i=1}^{m} \alpha_i c_i x_i$

De plus, conditions de Karush-Kuhn-Tucker (KKT) :

$\forall i, \alpha_i \left[c_i\left(wx_i + b\right) - 1\right] = 0 \;\Rightarrow$ **seuls les α_i *sur* marge peuvent être non nuls**

Résolution par passage au problème dual

$$\begin{cases} L(\mathbf{w},b,\alpha) = \|\mathbf{w}\|^2 - \sum_{i=1}^{m} \alpha_i \{(X_i.\mathbf{w}+b)c_i - 1\} \\ \forall i \;\; \alpha_i \geq 0 \end{cases}$$

se ramène au problème dual ci-dessous

$$\begin{cases} \max_{\alpha} \sum_{i=1}^{m} \alpha_i - \frac{1}{2} \sum_{i=1}^{m} \sum_{j=1}^{m} \alpha_i \alpha_j c_i c_j (X_i.X_j) \\ \forall i \;\; \alpha_i \geq 0 \\ \sum_{i=1}^{l} \alpha_i c_i = 0 \end{cases}$$

dont résolution est en O(m) au lieu O(d)

Solution du problème dual

$$\begin{cases} h(\mathbf{X}) = (\mathbf{w}^*.\mathbf{X} + b^*) \\ \mathbf{w}^* = \sum_{i=1}^{m} \alpha_i^* c_i X_i \\ b^* = c_s - \sum_{i=1}^{m} \alpha_i^* c_i (X_i.X_s) \end{cases}$$

- **La solution s'exprime explicitement en fonction des exemples de la base d'apprentissage**
- **Seuls les α_i des points les plus proches de l'hyperplan sont non-nuls : ce sont les « points de supports ».**

Variante SVM avec « marge douce »

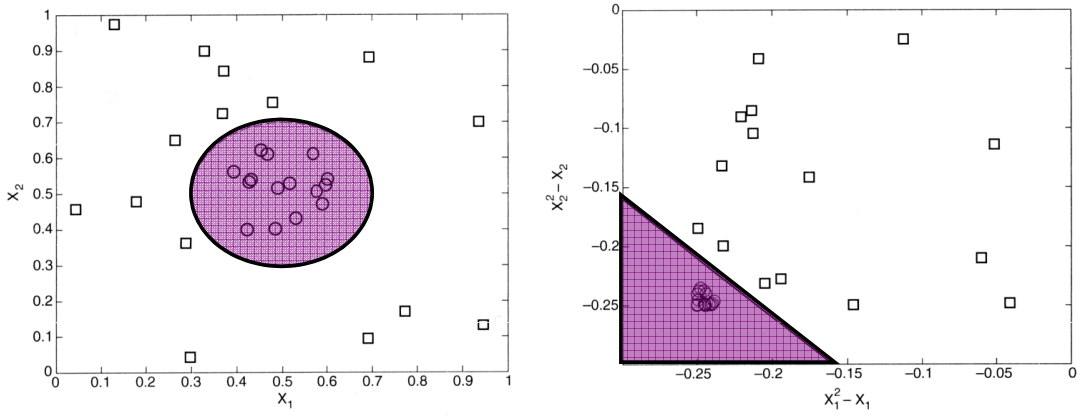
- **Pour tolérer quelques exemple non linéairement séparables, on relâche la contrainte de séparation :**

$$\forall i \;\; c_i(w.X_i+b) \geq 1-\xi_i$$

Ceci revient à minimiser $\|w\|^2 + C\sum_{i=1}^{m} \xi_i$

On retrouve exactement le même problème dual que dans cas d'une marge « stricte », mais avec contrainte $0 \leq \alpha_i \leq C$

Idée du « changement de variable » pour « linéariser » un problème



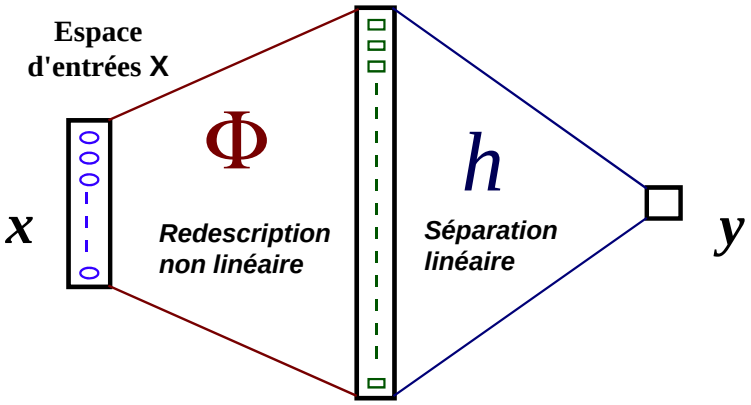
(a) Decision boundary in the original two-dimensional space.

(b) Decision boundary in the transformed space.

- **En passant de l'espace (x_1,x_2) à (x_1^2,x_2^2,x_1,x_2), on a rendu le problème linéairement séparable !!**

Application SVM aux problèmes non-linéairement séparables

- **Si $\{(X_i,c_i), i=1,\ldots, m\}$ non linéairement séparable, chercher une transformation $\Phi : X \rightarrow F$ telle que les exemples transformés $\{(\Phi(X_i),c_i), i=1,\ldots, m\}$ soient linéairement séparables dans F**



Pour chaque transormation Φ, on sait trouver dans F le classifieur optimal en terme de « marges »

Trouver la transformation ϕ : l'astuce du noyau

- **Pour tout « mapping » ϕ de X → F, on peut poser**

$$\forall \boldsymbol{x}, \boldsymbol{z} \in \mathcal{X} : \quad k(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{z}) = \langle \phi(\boldsymbol{x}), \phi(\boldsymbol{z}) \rangle$$

- **La séparation linéaire optimale dans F est alors la solution de :**

$$\begin{cases} \max_{\alpha} \sum_{i=1}^{m} \alpha_i - \frac{1}{2} \sum_{i=1}^{m} \sum_{j=1}^{m} \alpha_i \alpha_j c_i c_j k(X_i, X_j) \\ \forall i \;\; 0 \le \alpha_i \le C \\ \sum_{i=1}^{m} \alpha_i c_i = 0 \end{cases}$$

qui est : $h(X) = \sum_{i=1}^{N_S} \alpha_{s(i)} c_{s(i)} k(X_{s(i)}, X) + b$

où $X_{s(i)}$ sont les N_s « points de support »

Tout ça peut être calculé en connaissant k(X,Z) uniquement (i.e. sans connaître ϕ !!)

➔ Chercher ϕ revient donc à trouver le bon « noyau » k

Notion de noyau

Condition de Mercer :

pour toute fonction k(X,Z) symétrique ET vérifiant $\int k(X,Z) f(X) f(Z) dX dZ \geq 0$ **pour toute fonction f L2-intégrable (i.e. tq** $\int f(X)^2 dX$ **soit finie), il existe une fonction ϕ telle que ∀ X,Z k(X,Z)=ϕ(X). ϕ(Z)**

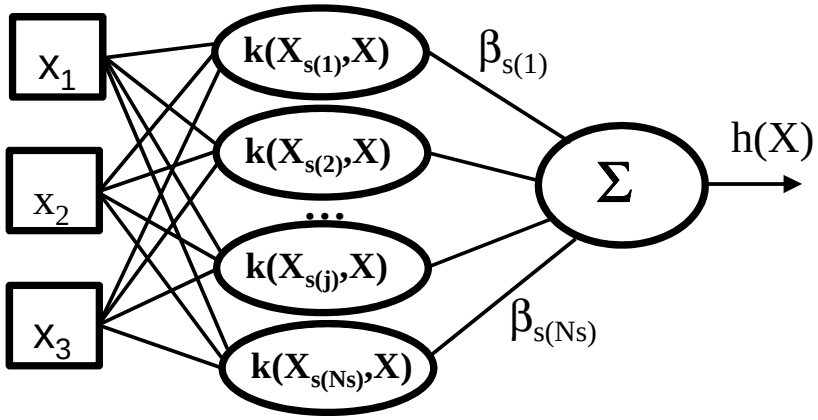
Noyaux usuels :

- **Polynomiaux** $k(X,Z) = (X.Z + 1)^q$
- **RBF** $k(X,Z) = e^{-\frac{\|X-Z\|^2}{2\sigma^2}}$
- **sigmoïde** $k(X,Z) = \tanh(aX.Z - b)$

Forme « neuronale » d'un classifieur SVM

$$h(X) = \sum_{i=1}^{N_S} \beta_{s(i)} k(X_{s(i)}, X) + b \qquad \text{(avec } \beta_{s(i)} = \alpha_{s(i)} c_{s(i)} \text{)}$$

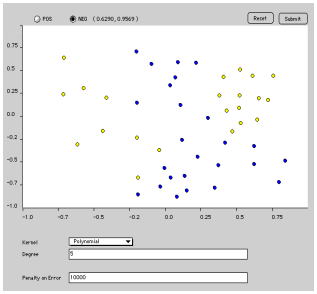
Peut se mettre sous forme d'un réseau neuronal avec une couche cachée de Ns neurones type « noyau » (avec poids respectifs = vecteurs-support) et une sortie linéaire :

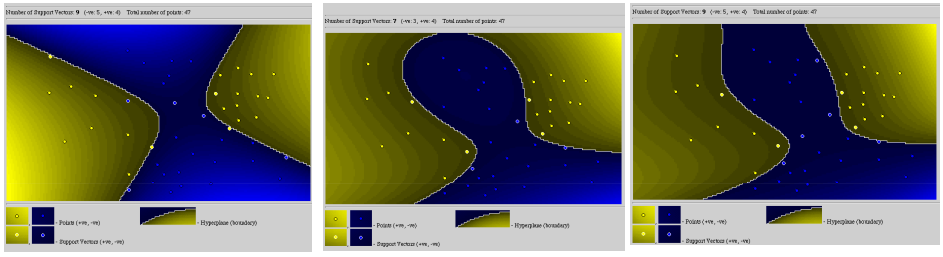


Ns = nb de « vecteurs-support » $X_{s(j)}$

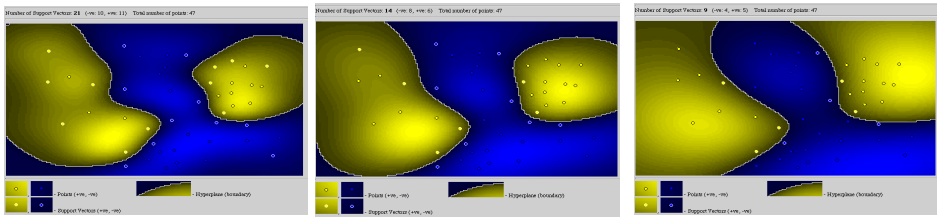
Les SVM en pratique

1. **Choisir type et paramètres du noyau k**
2. **Choisir éventuellement paramètre de tolérance C (cas d'une « marge douce »)**





Noyaux polynomiaux de degrés respectifs 2, 5, 8



Noyaux RBF gaussiens avec σ = 2, 5, 10

Les SVM en pratique (2)

- **Le choix des paramètres doit généralement se faire par méthode empirique rigoureuse type « validation croisée »**

- **Validation croisée :**
  - **Découper ensemble d'exemples en k sous-ensembles disjoints de taille m/k**
  - **Apprendre sur union de k-1 des parties**
  - **Calculer erreur sur k-ième partie**
  - **Erreur finale = moyenne des k erreurs**

  Comparaison erreurs moyennes obtenues avec divers noyaux et paramètres ➔ choix meilleure combinaison

[Démo SVM]

QUELQUES REFERENCES SUR LES SVMs

- ***Learning with kernels:support vector machines, regularization, optimization, and beyond*, Bernard Scholkopf & Alexander J. Smola, The MIT Press, 2002.**

- ***Support Vector Machines and other kernel-based learning methods*, John Shawe-Taylor & Nello Cristianini, Cambridge University Press, 2000**

`http://www.kernel-machines.org/`