

Apprentissage Automatique

Régularisation / SVM

Stéphane Herbin

`stephane.herbin@onera.fr`

Rappel des cours précédents

Généralités

- Programmation orientée données
- Démarche globale: base de données, analyse préliminaire, sélection de l'approche, optimisation, évaluation

Apprentissage supervisé

- Plusieurs approches classiques: kNN, bayésien naïf, arbres de décision, méthodes ensemblistes

Aujourd'hui

- Approfondissement:
 - Régularisation
 - Un algorithme efficace: Support Vector Machines (SVM)
 - Multiclasse
- TD:
 - SVM: étude de l'influence des paramètres
 - Validation croisée

Apprentissage supervisé

- On veut construire une fonction de décision F à partir d'exemples
- On dispose d'un **ensemble d'apprentissage** \mathcal{L} sous la forme de paires $\{x_i, y_i\}$ où x_i est la donnée à classer et y_i est la classe vraie:

$$\mathbf{D} = \{(\mathbf{x}_i, y_i)\}_{i=1\dots n}$$

- L'apprentissage consiste à identifier cette fonction de classification dans un certain espace **paramétrique** W optimisant un certain **critère** L :

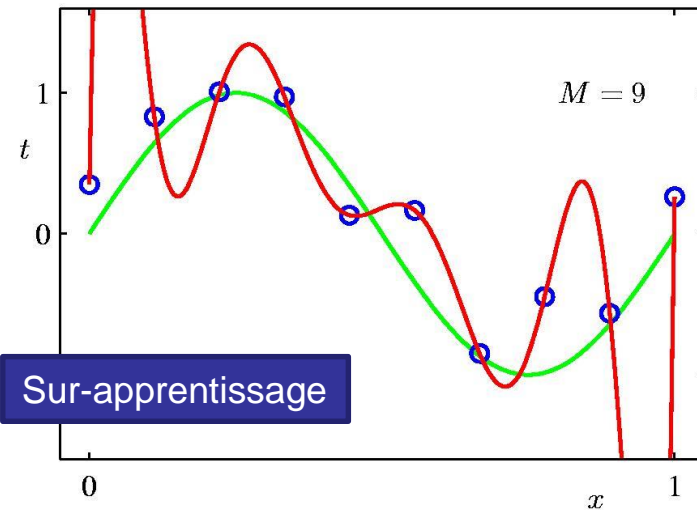
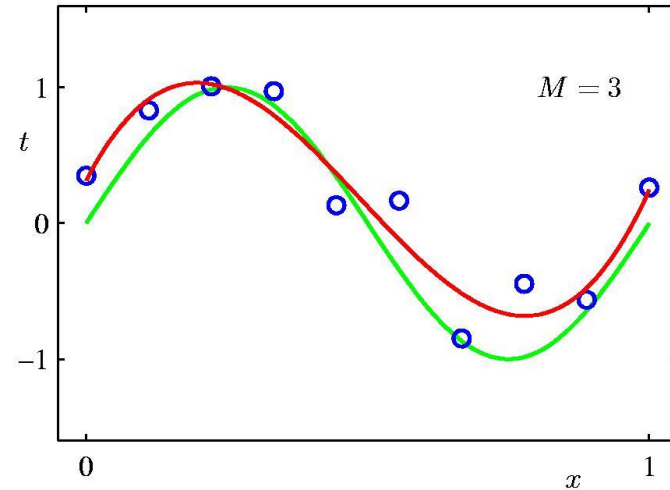
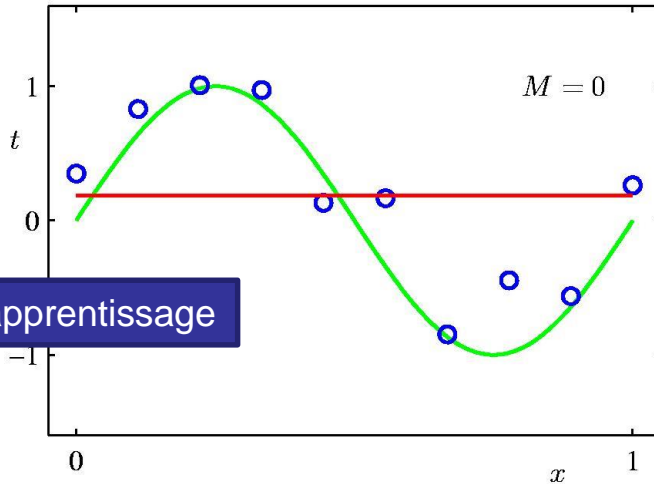
$$\mathbf{W} = \arg \min_{W'} L(\mathbf{D}, W')$$

- On l'applique ensuite à de nouvelles données.

$$y = F(\mathbf{x}; \mathbf{W})$$

Régularisation

Retour sur le sur-apprentissage



	$M = 0$	$M = 1$	$M = 3$	$M = 9$
w_0^*	0.19	0.82	0.31	0.35
w_1^*		-1.27	7.99	232.37
w_2^*			-25.43	-5321.83
w_3^*			17.37	48568.31
w_4^*				-231639.30
w_5^*				640042.26
w_6^*				-1061800.52
w_7^*				1042400.18
w_8^*				-557682.99
w_9^*				125201.43

Coefficients des polynômes

Très grandes valeurs!

Moindre carrés régularisés

Idée: on rajoute une pénalisation des grandes valeurs des paramètres à la fonction de coût:

$$L(\mathbf{W}) = \sum_{i=1}^N (F(\mathbf{x}_i, \mathbf{W}) - y_i)^2 + \lambda \|\mathbf{W}\|^2$$

Coût d'attache
aux données



Paramètre de
régularisation

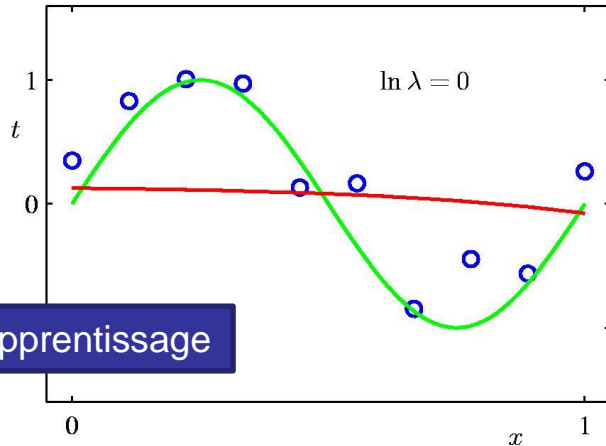


Dont l'optimum exact est alors:

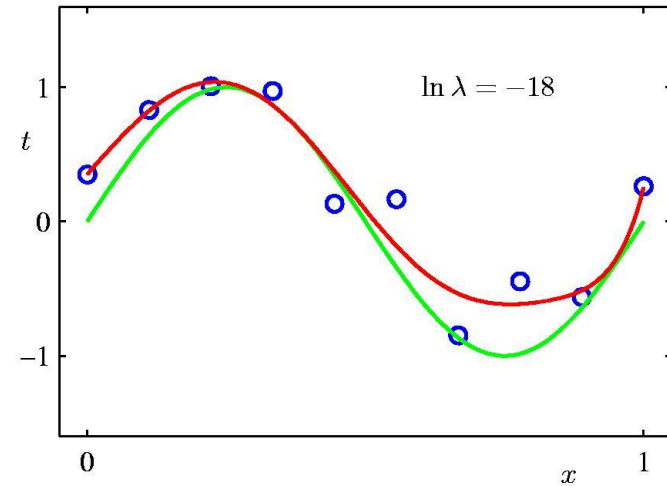
$$\mathbf{w} = \left(\lambda \mathbf{I} + \Phi^T \Phi \right)^{-1} \Phi^T \mathbf{t}.$$

Si on pénalise les grandes valeurs des coefficients du polynôme, on obtient une fonction moins « zigzagante »

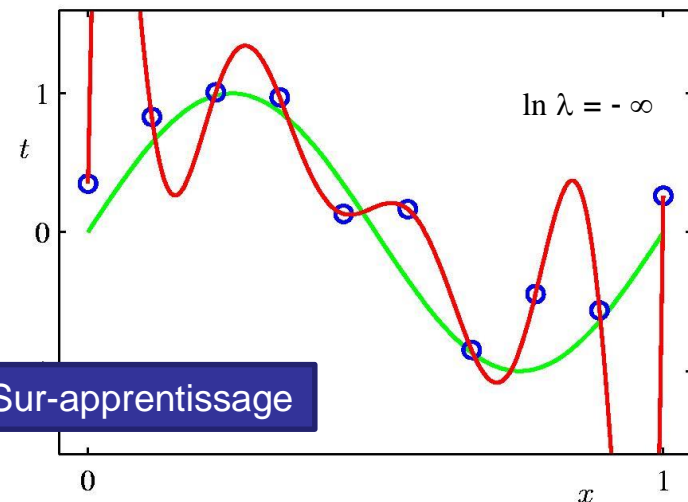
Effet de la régularisation



Sous-apprentissage



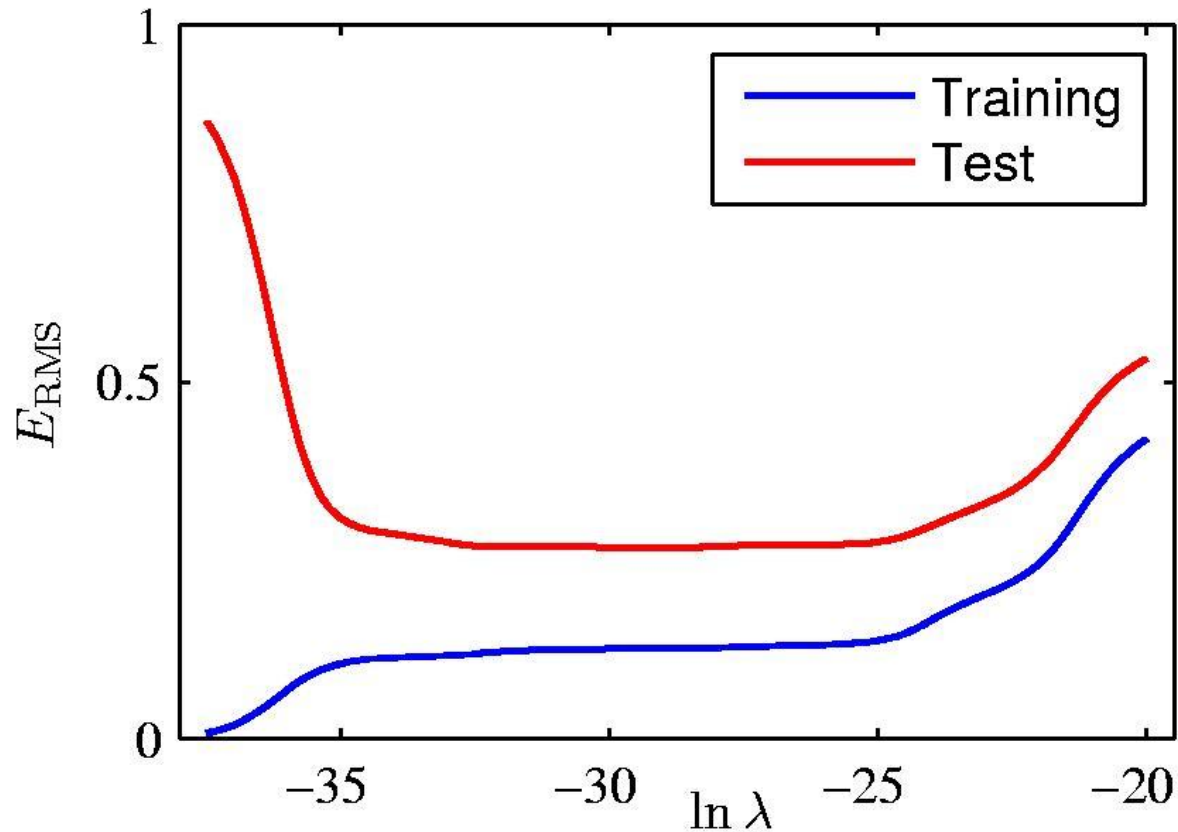
	$\ln \lambda = -\infty$	$\ln \lambda = -18$	$\ln \lambda = 0$
w_0^*	0.35	0.35	0.13
w_1^*	232.37	4.74	-0.05
w_2^*	-5321.83	-0.77	-0.06
w_3^*	48568.31	-31.97	-0.05
w_4^*	-231639.30	-3.89	-0.03
w_5^*	640042.26	55.28	-0.02
w_6^*	-1061800.52	41.32	-0.01
w_7^*	1042400.18	-45.95	-0.00
w_8^*	-557682.99	-91.53	0.00
w_9^*	125201.43	72.68	0.01



Sur-apprentissage

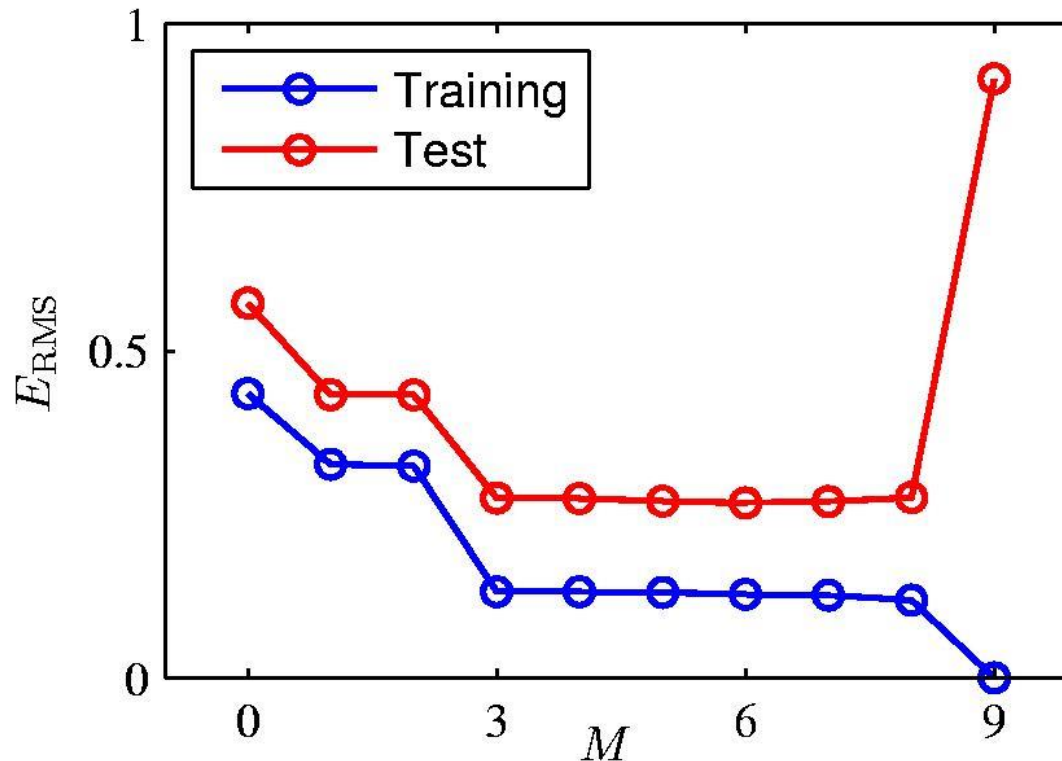
Régularisation: \mathcal{E}_{RMS} vs. $\ln(\lambda)$

$$\mathcal{E}_{\text{RMS}}(\mathbf{w}) = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^N (F(\mathbf{x}_i, \mathbf{w}) - y_i)^2$$



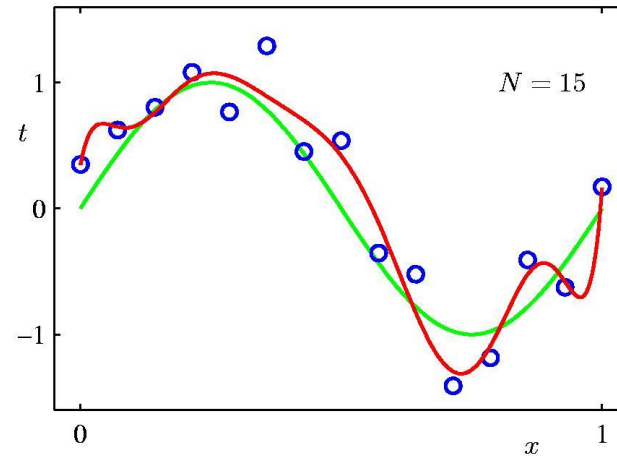
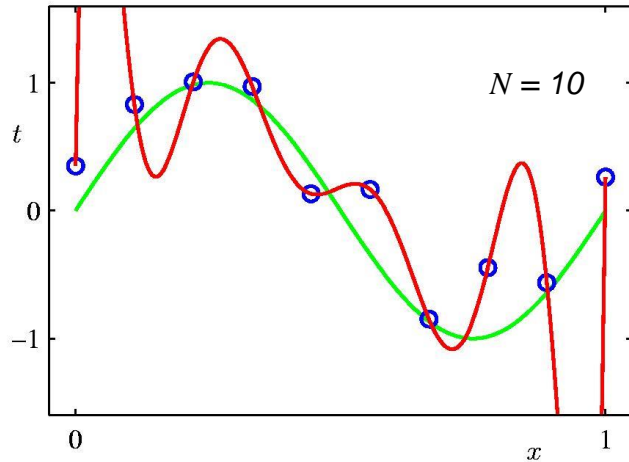
Régularisation: \mathcal{E}_{RMS} vs. M

$$\mathcal{E}_{\text{RMS}}(\mathbf{w}) = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^N (F(\mathbf{x}_i, \mathbf{w}) - y_i)^2$$

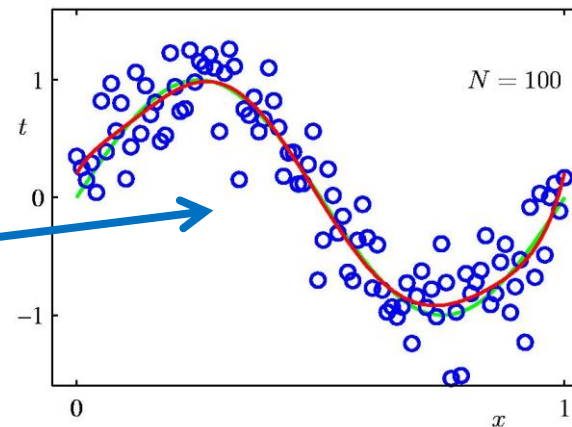


Influence de la quantité de données

Polynôme d'ordre 9



C'est aussi un moyen de
contrôler la régression

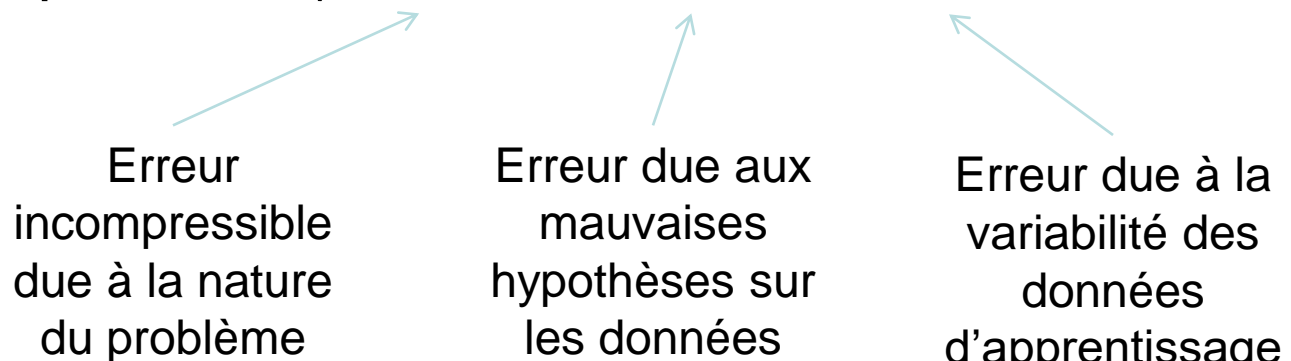


Compromis Biais-Variance (rappel)

On peut montrer:

$$E(\text{erreur prédiction}) = \text{bruit}^2 + \text{biais}^2 + \text{variance}$$

Erreur
incompressible
due à la nature
du problème



Erreur due aux
mauvaises
hypothèses sur
les données

Erreur due à la
variabilité des
données
d'apprentissage

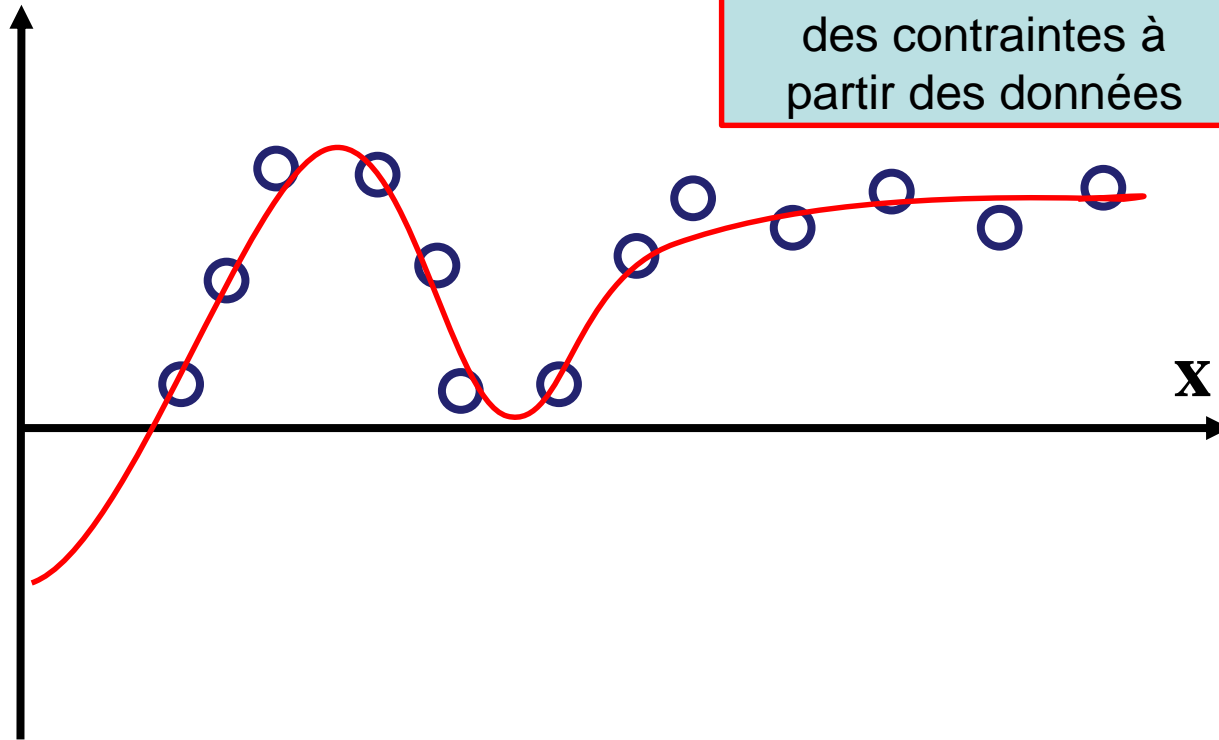
L'erreur de généralisation est un compromis entre bonnes hypothèses sur les données et qualité des données d'apprentissage

Erreur de généralisation (rappel)

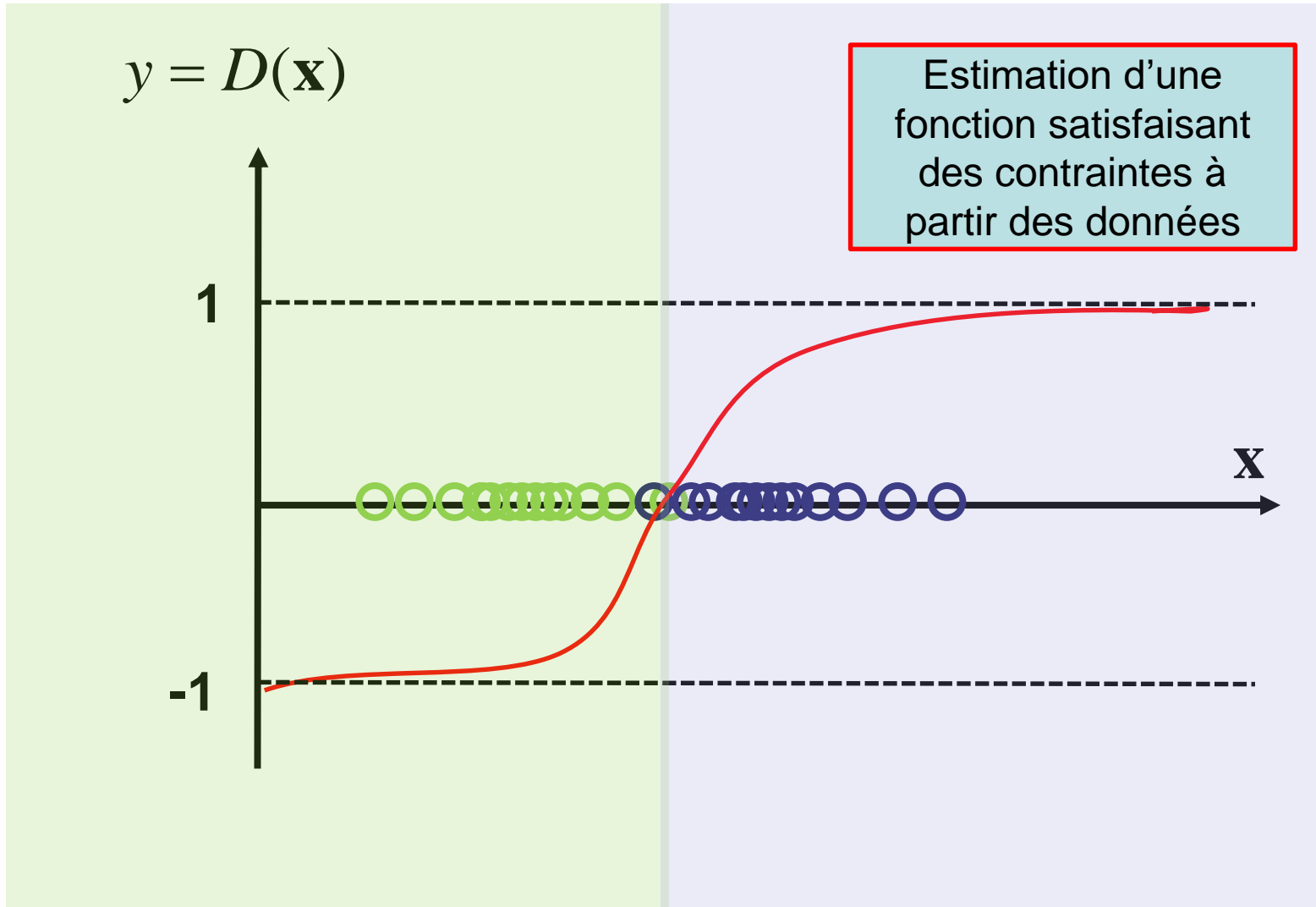
- Structure
 - **Biais:** écart entre hypothèse de modèle et « vraie » distribution des données
 - **Variance:** écarts générés par différents jeux d'apprentissage.
- Deux phénomènes à contrôler
 - **Simplisme:** modélisation trop grossière pour rendre compte de la variété des données
 - Biais++, Var –
 - Erreur d'apprentissage et de test grandes
 - **Sur-apprentissage (« Overfitting »):** modèle trop complexe se spécialisant sur les données d'apprentissage
 - Biais--, Var++
 - Ecart entre erreur d'apprentissage et erreur de test

Classification et Régression

$$y = R(\mathbf{x})$$



Classification et Régression



Trois critères à ne pas confondre

- Risque ou erreur empirique

$$\mathcal{E}_{\text{train}}(\mathbf{w}, \mathcal{D}) = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \{F(\mathbf{x}_i, \mathbf{w}) \neq y_i\}$$

- Erreur de généralisation (ou de test, ou idéale...)

$$\mathcal{E}(\mathbf{w}) = E_{\mathbf{x}, Y} [\{F(\mathbf{x}, \mathbf{w}) \neq y\}]$$

- Critère à optimiser (forme assez générique)

$$L(\mathbf{w}, \mathcal{D}) = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N l(F(\mathbf{x}_i, \mathbf{w}), y_i) + r(\mathbf{w})$$

Adéquation aux données

Régularisation

Validation croisée

Validation croisée

- Permet **d'estimer l'erreur de généralisation** à partir des données d'apprentissage (« astuce »)
- Principe:
 - Division des données en k sous ensembles (« fold »)
 - Choix d'une partie comme ensemble de **validation** fictif, les autres comme *train*
 - Apprentissage sur l'ensemble *train*
 - Estimation des erreurs sur *validation*
- On fait tourner l'ensemble de *validation* sur chacune des parties
- L'erreur de généralisation estimée est la **moyenne** des erreurs sur chaque ensemble de *validation*

Stratégies de partitionnement

- k-fold



- Leave-one-out



Validation croisée: pour quoi faire?

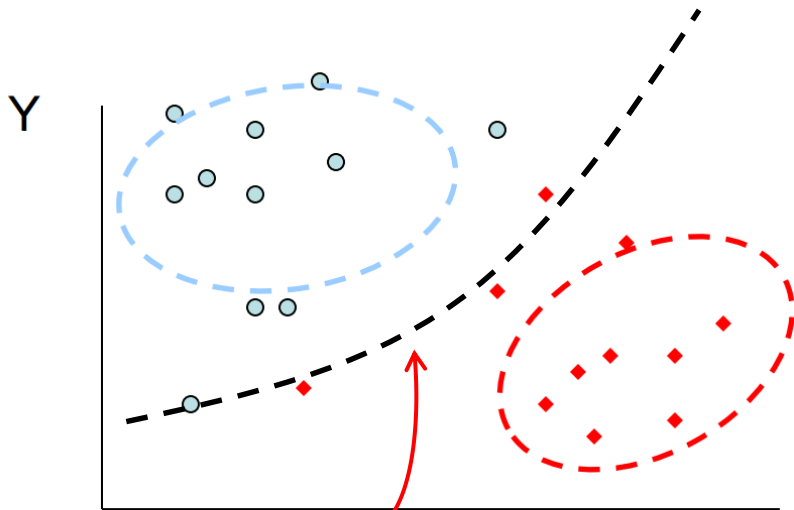
- Estimer la « vraie » erreur de prédiction (généralisation)
- Estimer la variance d'apprentissage (mais pas le biais)
- Réglage des « hyper-paramètres » (par ex. le coefficient de régularisation)
 - Recherche exhaustive ou par dichotomie (à voir en TD)
- Attention! il y a d'autres sources d'aléatoire qui ne relèvent pas de la validation croisée
 - Random forrests, Bagging
 - Initialisation et optimisation des réseaux de neurones (gradient stochastique)

« Support Vector Machines »

Deux types d'approches: génératives vs. discriminatives

Objectif = modéliser les distributions de données puis les exploiter

Generative model

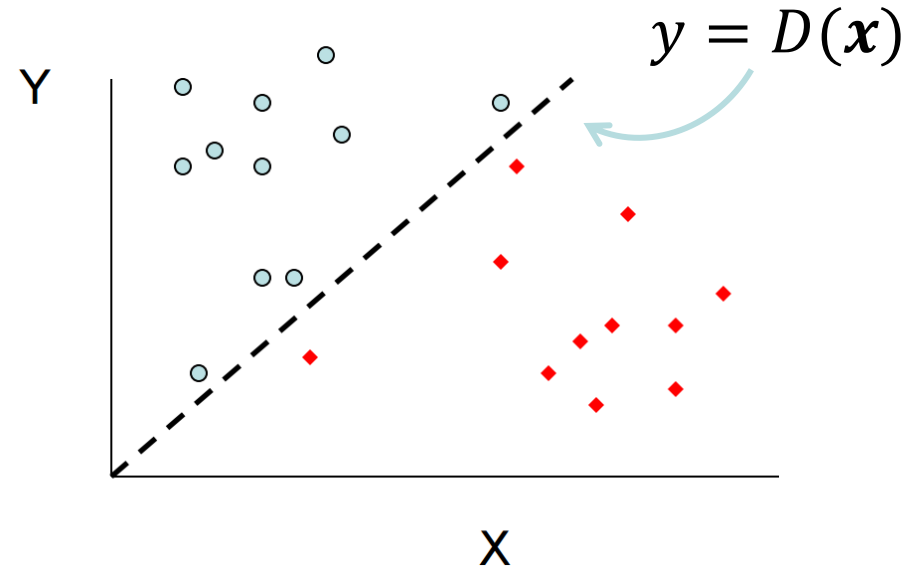


On calcule la frontière à partir des modèles

Le premier cours

On estime directement

Discriminative model



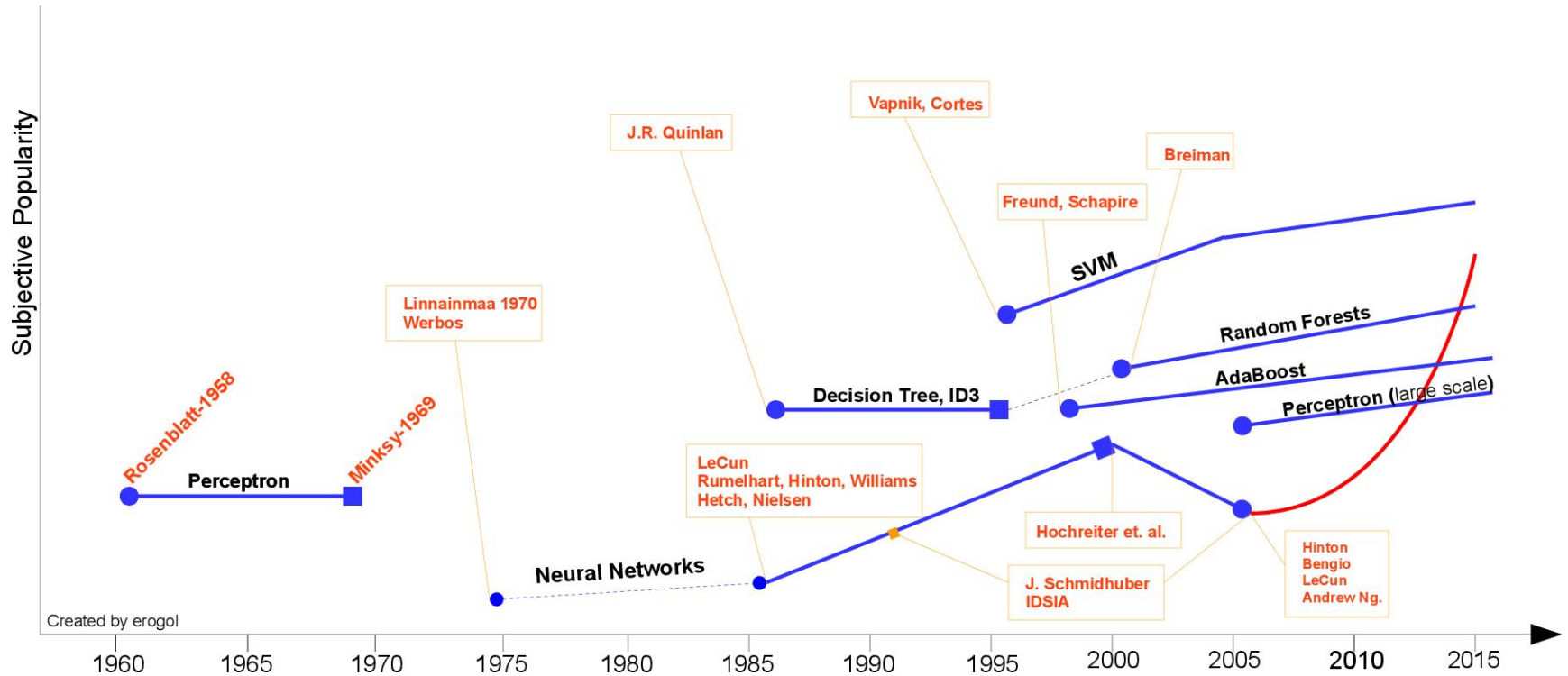
Objectif = construire les meilleures frontières

Aujourd'hui

Support Vector Machines

- Historique
- Principe: maximiser la marge de séparation d'un hyperplan
- Le cas séparable
- Le cas non séparable: les fonctions de perte (« hinge loss »)
- L'extension au cas non linéaire: les noyaux
- Parcimonie
- Les paramètres de contrôle

Historique du Machine Learning

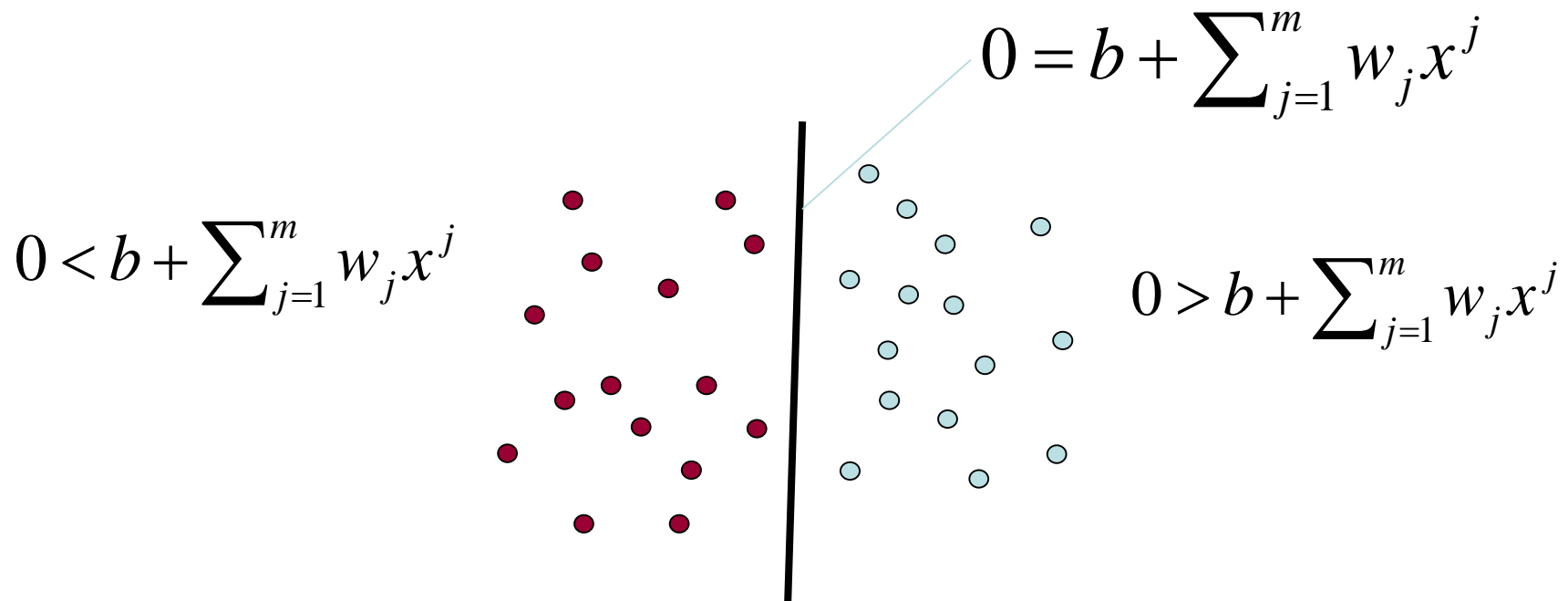


Created by erogol

Modèles linéaires de décision

Hypothèse = les données sont linéairement séparables.

- En 2D, par une droite
- En ND, par un hyperplan.



Classifieur linéaire

- Equation de l'hyperplan séparateur

$$b + \mathbf{w} \cdot \mathbf{x} = 0$$

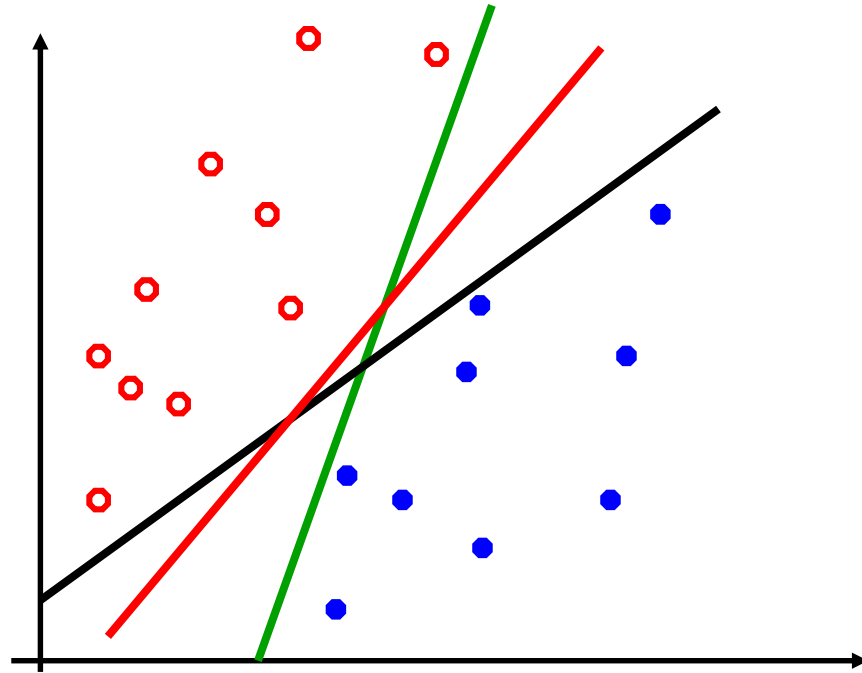
- Expression du classifieur linéaire (pour y_i valant -1 et 1)

$$F(\mathbf{x}; \mathbf{w}) = \text{sign}(b + \mathbf{w} \cdot \mathbf{x})$$

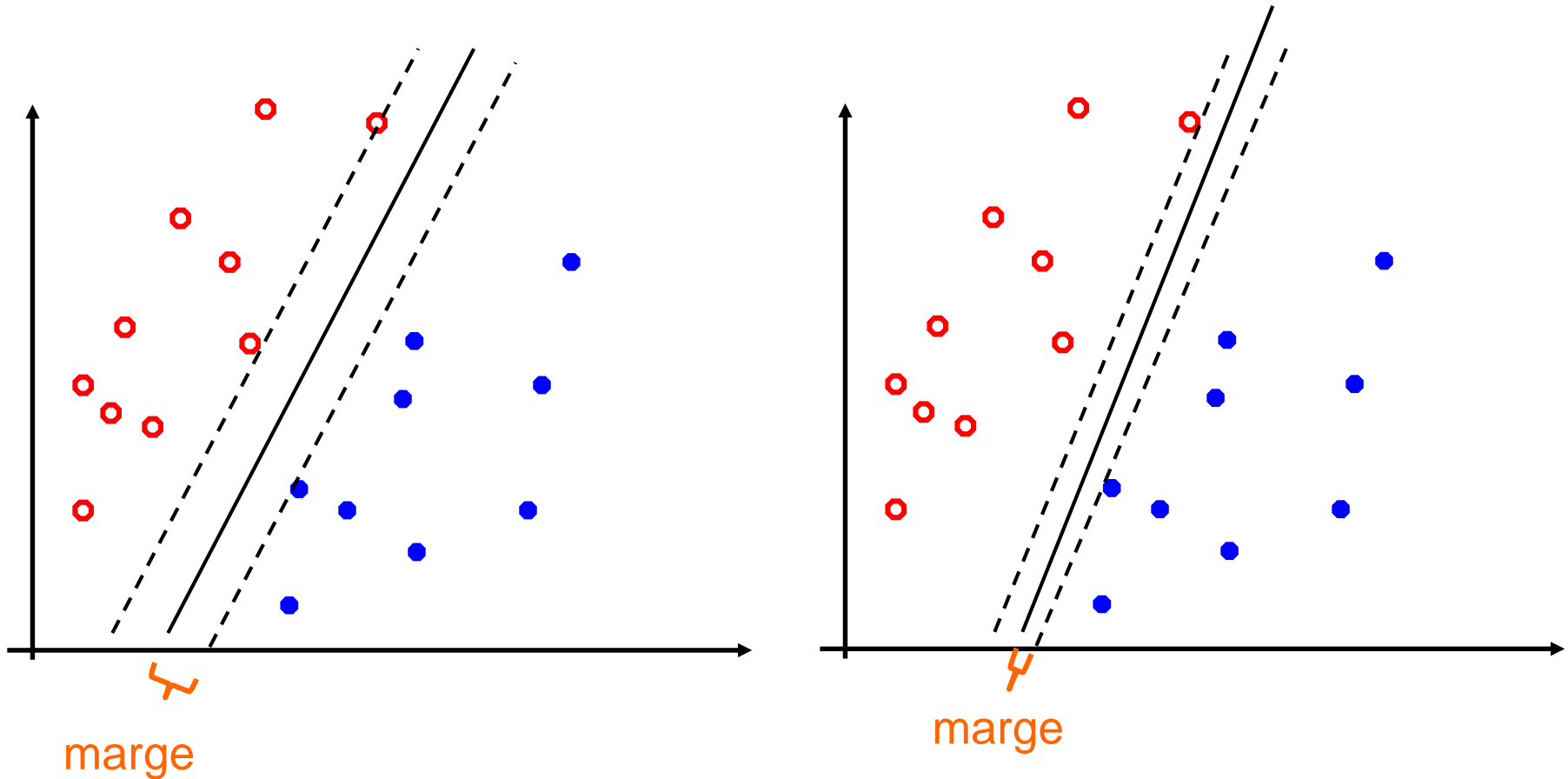
- Erreur

$$\mathcal{E}_{test}(\mathbf{w}, \mathcal{L}) = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \{y_i \cdot \text{sign}(b + \mathbf{w} \cdot \mathbf{x}_i) < 0\}$$

Quel hyperplan choisir?



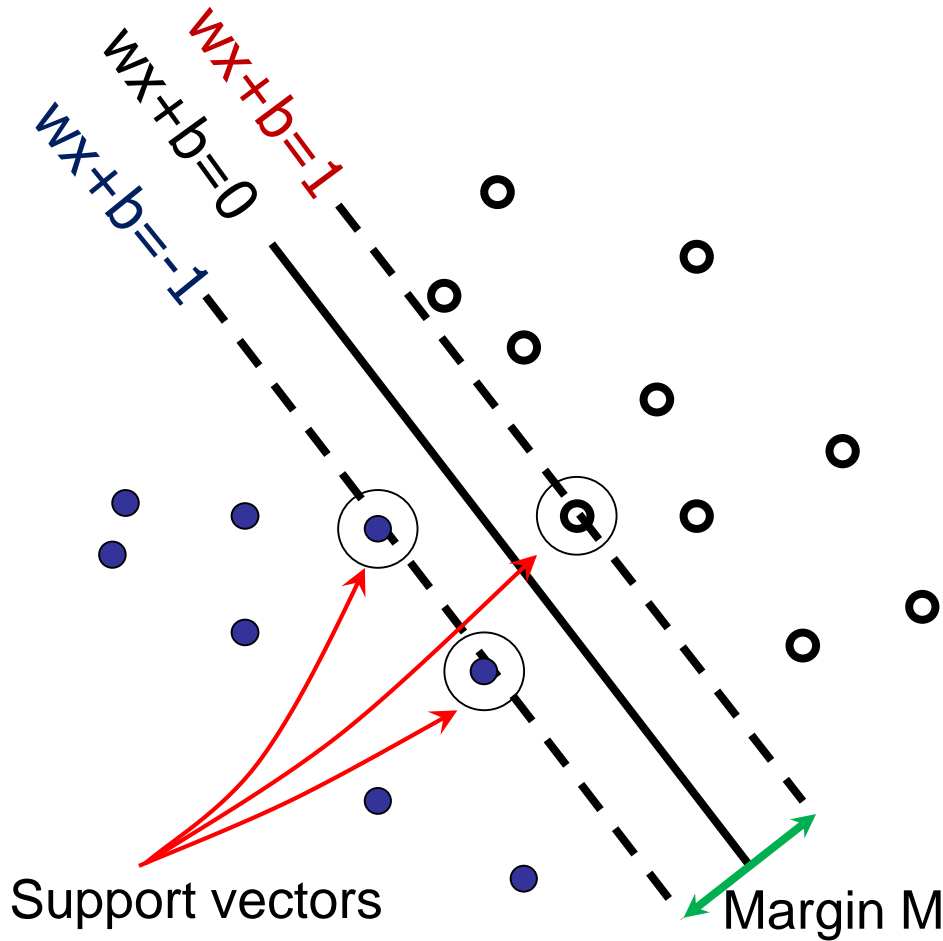
Classifieur « Large margin »



Choisir l'hyperplan qui maximise la distance aux points les plus proches

Support Vector Machines

- On cherche l'hyperplan qui maximise la marge.



$$\mathbf{x}_i \text{ positif } (y_i = 1): \quad \mathbf{x}_i \cdot \mathbf{w} + b \geq 1$$

$$\mathbf{x}_i \text{ négatif } (y_i = -1): \quad \mathbf{x}_i \cdot \mathbf{w} + b \leq -1$$

Pour les vecteurs de support, $\mathbf{x}_i \cdot \mathbf{w} + b = \pm 1$

Distance entre point et hyperplan: $\frac{|\mathbf{x}_i \cdot \mathbf{w} + b|}{\|\mathbf{w}\|}$

Pour les « support vectors »:

$$\frac{\mathbf{w}^T \mathbf{x} + b}{\|\mathbf{w}\|} = \frac{\pm 1}{\|\mathbf{w}\|} \quad M = \left| \frac{1}{\|\mathbf{w}\|} - \frac{-1}{\|\mathbf{w}\|} \right| = \frac{2}{\|\mathbf{w}\|}$$

Principe du SVM (Large Margin)

- Maximiser la marge = distance des vecteurs à l'hyperplan séparateur des vecteurs de supports

$$\max \frac{1}{\|\mathbf{w}\|^2}$$

- Sous contraintes

$$y_i (\mathbf{w} \cdot \mathbf{x}_i + b) \geq 1 \quad \forall i$$

- Les vecteurs de support vérifiant:

$$y_i (\mathbf{w} \cdot \mathbf{x}_i + b) = 1$$

Le 1 est conventionnel.
N'importe quelle constante >0 est valable.

Formulation du SVM

$$\min_{w,b} \|w\|^2$$

Tel que:

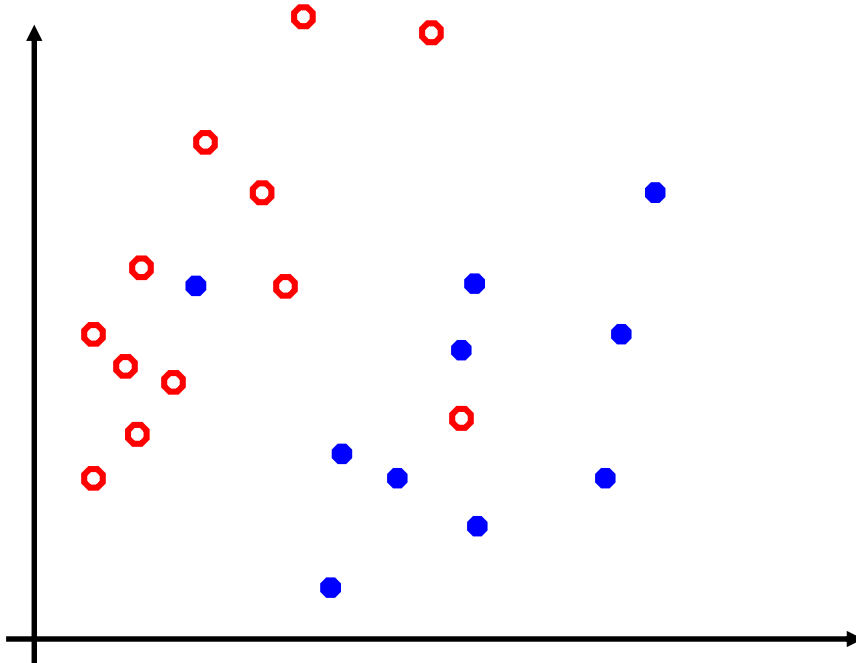
$$y_i (w \cdot x_i + b) \geq 1 \quad \forall i$$

Si les données sont séparables
Problème d'optimisation quadratique
Avec contraintes linéaires

Problème d'optimisation quadratique classique

Mais avec beaucoup de contraintes! (autant que d'exemples d'apprentissage)

Classification « Soft Margin »



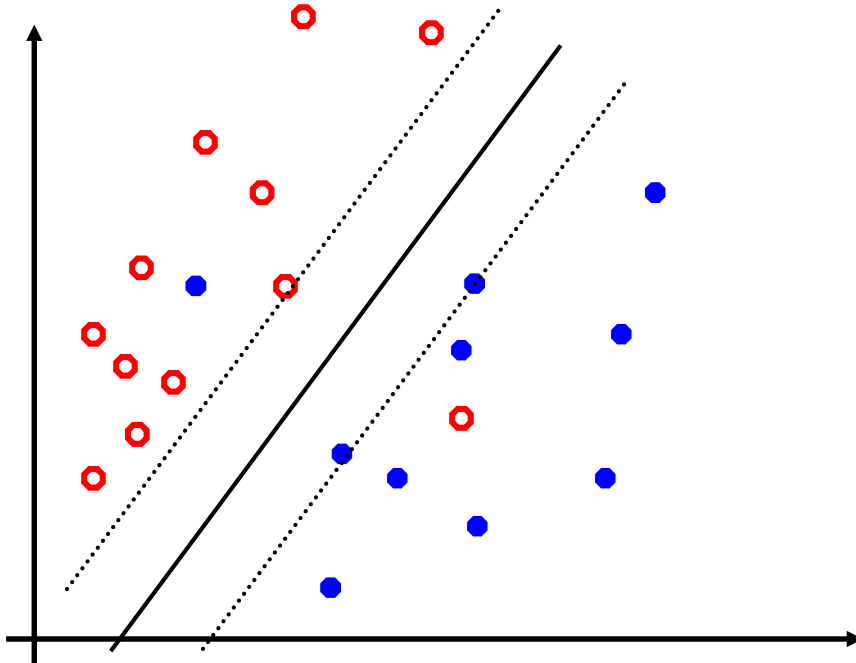
$$\min_{w,b} \|w\|^2$$

Tel que:

$$y_i (w \cdot x_i + b) \geq 1 \quad \forall i$$

Comment traiter le cas non linéairement séparable?

Classification « Soft Margin »



$$\min_{w,b} \|w\|^2$$

Tel que:

$$y_i (w \cdot x_i + b) \geq 1 \quad \forall i$$

On aimerait obtenir une séparation robuste à quelques données non séparées

Idée: « Slack variables »

$$\min_{w,b} \|w\|^2$$

tq:

$$y_i(w \cdot x_i + b) \geq 1 \quad \forall i$$



$$\min_{w,b} \|w\|^2 + C \sum_i \zeta_i$$

tq:

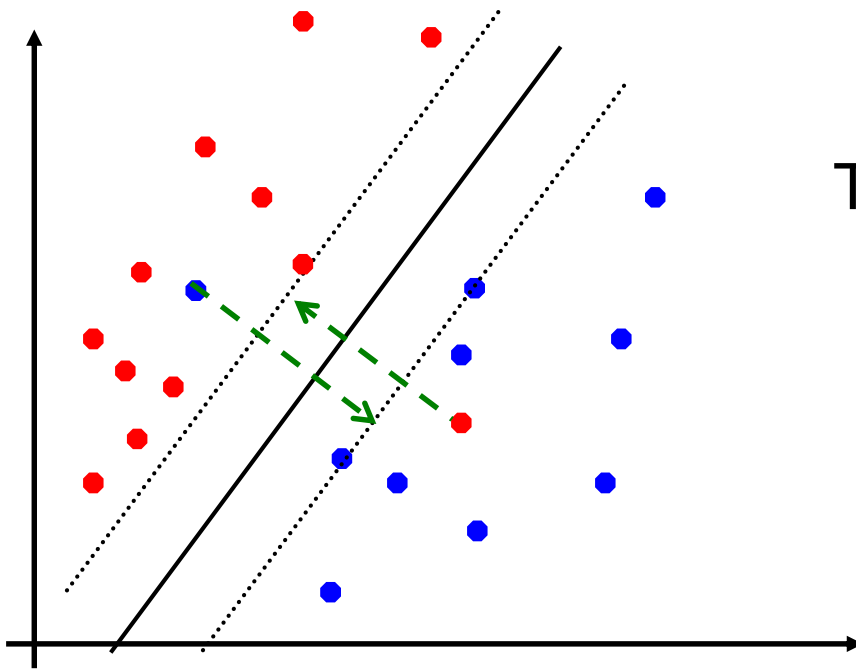
$$y_i(w \cdot x_i + b) \geq 1 - \zeta_i \quad \forall i$$

$$\zeta_i \geq 0$$

Permet de relacher la contrainte de séparabilité pour chaque exemple.

slack variables
(une par exemple)

« Slack variables »



$$\min_{w,b} \|w\|^2 + C \sum_i \zeta_i$$

Tel que:

$$y_i (w \cdot x_i + b) + \zeta_i \geq 1 \quad \forall i$$

$$\zeta_i \geq 0$$

Relâchement de la contrainte

Utilisation des « Slack variables »

marge

Compromis entre marge et pénalisation de la contrainte

$$\min_{w,b} \|w\|^2 + C \sum_i \zeta_i$$

Valeur du relâchement de la contrainte

tq

$$y_i (w \cdot x_i + b) \geq 1 - \zeta_i \quad \forall i$$
$$\zeta_i \geq 0$$

Contrainte autorisée à être relâchée

Soft margin SVM

$$\min_{w,b} \|w\|^2 + C \sum_i \zeta_i$$

Tel que

$$y_i (w \cdot x_i + b) \geq 1 - \zeta_i \quad \forall i$$

$$\zeta_i \geq 0$$

On garde un problème quadratique!

Mais avec un très grand nombre de variables+contraintes

Autre formulation

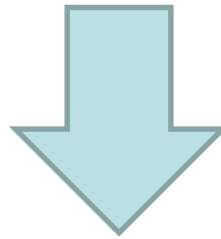
$$\min_{w,b} \|w\|^2 + C \sum_i \zeta_i$$

tq:

$$y_i(w \cdot x_i + b) \geq 1 - \zeta_i \quad \forall i$$

$$\zeta_i \geq 0$$

$$\zeta_i = \max(0, 1 - y_i(w \cdot x_i + b))$$



$$\min_{w,b} \|w\|^2 + C \sum_i \max(0, 1 - y_i(w \cdot x_i + b))$$

Problème d'optimisation non contraint

→ Autres méthodes d'optimisation (descente de gradient)

Interprétation du « Soft Margin SVM »

$$\min_{w,b} \|w\|^2 + C \sum_i \max(0, 1 - y_i (w \cdot x_i + b))$$

On retrouve la formulation:

$$\text{Loss}(\mathbf{w}, \mathcal{D}) = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N l(F(\mathbf{x}_i, \mathbf{w}), y_i) + r(\mathbf{w})$$

Avec

$$r(\mathbf{w}) = \frac{1}{C} \|\mathbf{w}\|^2$$

$$l(F(\mathbf{x}_i, \mathbf{w}), y_i) = \max(0, 1 - y_i (\mathbf{w} \cdot \mathbf{x}_i + b))$$

**Le SVM est un cas particulier du formalisme:
« erreur empirique + régularisation »**

Autres Fonctions de coût

0/1 loss:

$$l(y, y') = 1[yy' \leq 0]$$

$$\text{Hinge: } l(y, y') = \max(0, 1 - yy')$$

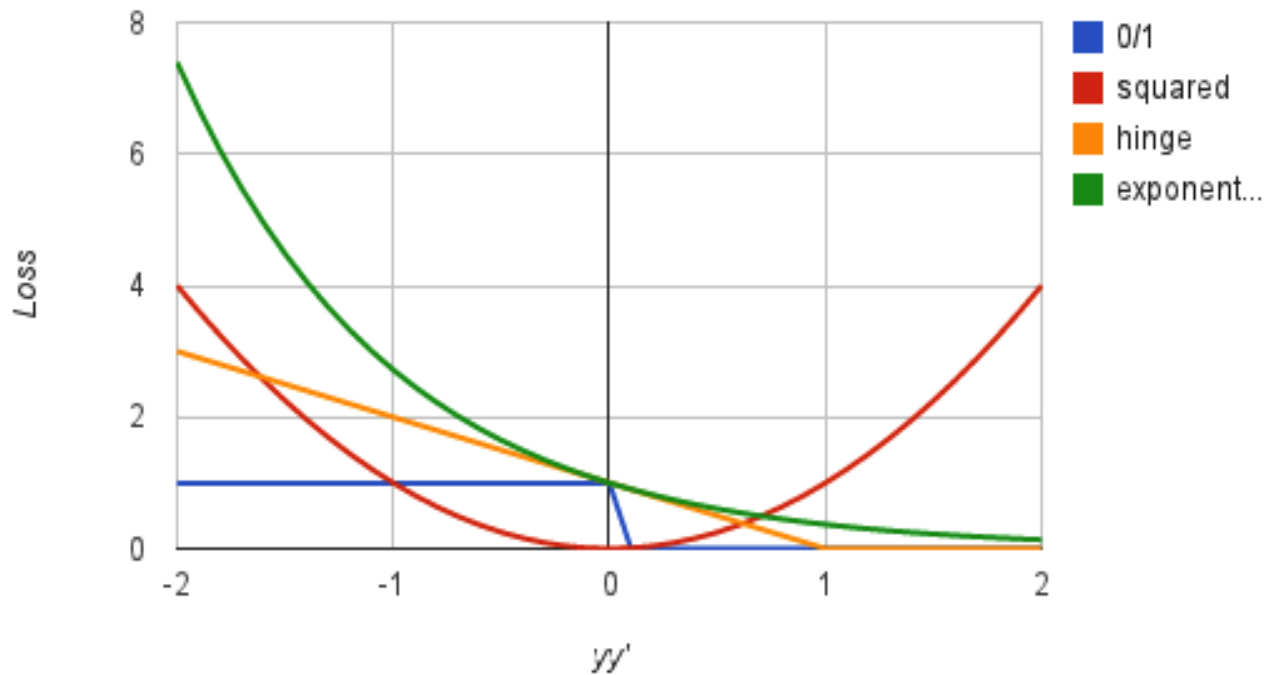
Squared loss:

$$l(y, y') = (y - y')^2$$

Exponential:

$$l(y, y') = \exp(-yy')$$

Surrogate loss functions



Forme duale du SVM

- Problème d'optimisation sous contrainte

Pour simplifier l'expression des calculs

Primal

$$\operatorname{argmin}_{\mathbf{w}} \frac{\|\mathbf{w}\|^2}{2} + C \sum_i \xi_i \quad \text{Multiplicateurs de Lagrange}$$

$$s. t. \quad \forall i, y_i(\mathbf{w} \cdot \mathbf{x}_i + b) \geq 1 - \xi_i \quad \alpha_i$$

$$\xi_i \geq 0 \quad \beta_i$$

Dual (Lagrangien)

$$L(\mathbf{w}, \xi, \alpha, \beta)$$

$$= \frac{\|\mathbf{w}\|^2}{2} + \sum_i (C\xi_i - \alpha_i(y_i(\mathbf{w} \cdot \mathbf{x}_i + b) - 1 + \xi_i) - \beta_i\xi_i)$$

$$s. t. \quad \forall i, \alpha_i \geq 0, \beta_i \geq 0$$

Forme duale du SVM

- Lagrangien

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

Maximisation dans le dual!

$$s. t. \forall i, 0 \leq \alpha_i \leq C$$

On garde un pb. quadratique

Dual des contraintes « slack »

Solution optimale (conditions de Kuhn-Tucker): $\alpha_i (y_i w^T x_i - 1 + \xi_i) = 0$

Interprétation: $\alpha_i = 0$ si la contrainte est satisfaite (bonne classification)

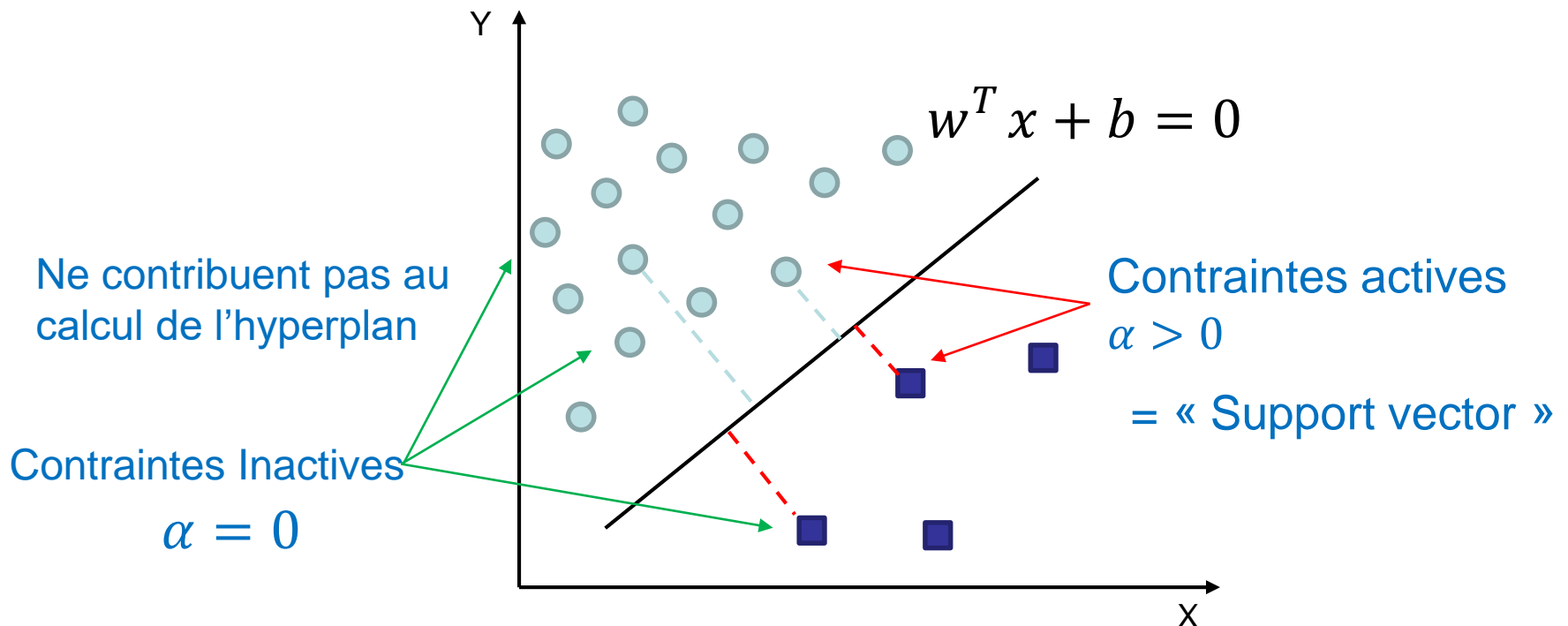
$\alpha_i > 0$ si la contrainte n'est pas satisfaite (mauvaise classification)

Parcimonie du SVM

- Seuls certains α sont non nuls = autre manière de définir les vecteurs de support.

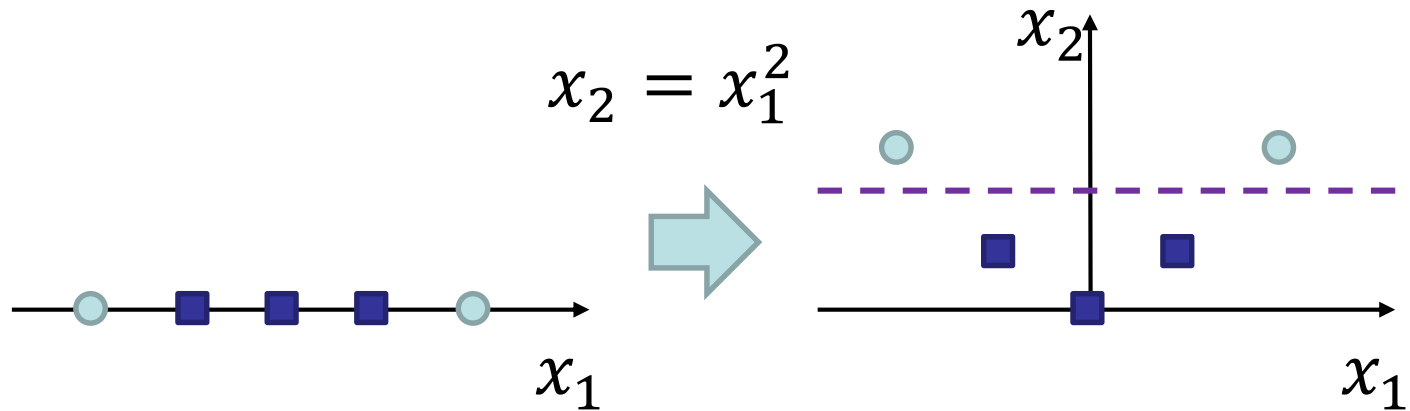
$$\text{Optimalité} = \alpha_i (y_i w^T x_i - 1 + \xi_i) = 0$$

$$\text{Direction de l'hyperplan séparateur } \mathbf{w} = \sum_i \alpha_i y_i \mathbf{x}_i$$



Données non linéairement séparables

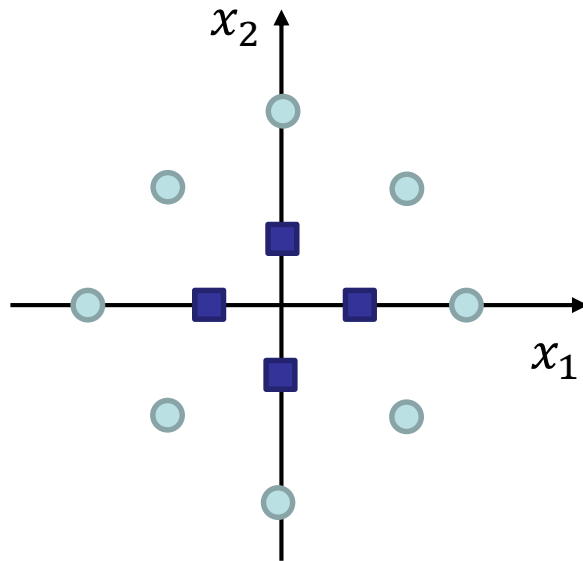
- Transformation non linéaire $\phi(x)$ pour séparer linéairement les données d'origine



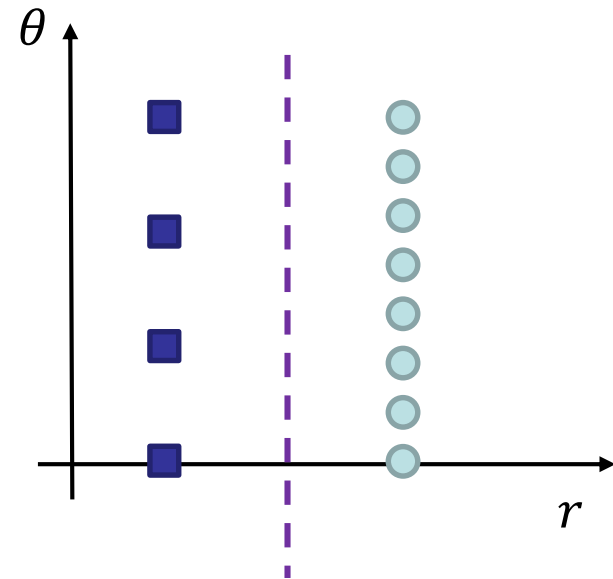
$\phi(x)$ = Transformation polynomiale

Données non linéairement séparables

- Transformation non linéaire $\phi(x)$ pour séparer linéairement les données d'origine



Coordonnées polaires



$\phi(x) =$ Transformation polaire

Retour sur la formulation duale du SVM

Lagrangien

$$\max_{\alpha} \sum_i \alpha_i - \frac{1}{2} \sum_{i,j} \alpha_i \alpha_j y_i y_j \mathbf{x}_i \mathbf{x}_j$$

$$\text{tq } \forall i, 0 \leq \alpha_i \leq C$$

**Produit scalaire
uniquement**



« Kernel trick »

$$\max_{\alpha} \sum_i \alpha_i - \frac{1}{2} \sum_{i,j} \alpha_i \alpha_j y_i y_j K(\mathbf{x}_i, \mathbf{x}_j)$$

tq $\forall i, 0 \leq \alpha_i \leq C$

Noyau

Le noyau K est un produit scalaire dans l'espace transformé:

$$K(\mathbf{x}_i, \mathbf{x}_j) = \phi(\mathbf{x}_i)^T \phi(\mathbf{x}_j)$$

Il est uniquement nécessaire de connaître la similarité entre données pour introduire la non linéarité dans le problème (avec des conditions...)

Utilisation de noyaux dans les SVM

- Permet d'introduire des mesures de similarités propres au domaine étudié et sans avoir à gérer la complexité de la transformation
- Permet de séparer modélisation = noyau de la classification et SVM (optimisation)
- Définit la fonction de classification à partir de noyaux « centrés » sur les vecteurs de support

$$F(\mathbf{x}, \mathbf{w}) = b + \sum_i \alpha_i y_i \mathbf{K}(\mathbf{x}_i, \mathbf{x})$$

Noyaux courants

- Polynômes de degrés supérieurs à d

$$K(\mathbf{x}, \mathbf{y}) = (\mathbf{x} \cdot \mathbf{y} + 1)^d$$

- Noyau gaussien

$$K(\mathbf{x}, \mathbf{y}) = \exp\left(-\frac{(\mathbf{x} - \mathbf{y})^T (\mathbf{x} - \mathbf{y})}{2\sigma^2}\right)$$

Paramètres à définir
= degré de liberté
supplémentaire

- Intersection d'histogrammes

$$K(\mathbf{x}, \mathbf{y}) = \sum_i \min(x^i, y^i)$$

Résumé sur SVM

- Une formulation optimale quadratique du problème de classification binaire:
 - Primal: optimisation d'un critère empirique + régularisation
 - Dual: permet d'introduire parcimonie et « kernel trick »→ plusieurs manières d'optimiser

- Les solutions s'expriment comme des combinaisons linéaires éparses de noyaux:

$$F(\mathbf{x}) = b + \sum_i \alpha_i y_i \mathbf{K}(\mathbf{x}_i, \mathbf{x})$$

où $\alpha_i > 0$ seulement pour les vecteurs de support, 0 sinon.

- En pratique, ce qu'il faut régler:
 - Le coefficient de régularisation: C
 - Le type de noyau et ses caractéristiques
 - Les paramètres de l'optimiseur

Multiclasse

Différents types de classification

- Binaire

$$\mathcal{A} = \{-1, 1\}$$

- Multi classe

$$\mathcal{A} = \{1, 2 \dots L\}$$

- Détection (quoi et où)

$$\mathcal{A} = \{1, 2 \dots L\} \times R^4$$

- Caractérisation des données:

- Rejet
- Anomalie

$$\mathcal{A} = \{1, 2 \dots L, \text{ambigu}, \text{inconnu}\}$$

Hypothèses multiples

- Toutes les classes/hypothèses ne se valent pas
 - Classes plus rares que d'autres (non équilibrées)
 - Coût d'une erreur de classification dépend des classes (Zèbre vs. Gazelle vs. Lion)
- Deux stratégies:
 - Optimiser un critère multi-hypothèse dans l'apprentissage
 - Par exemple entropie dans arbre de décision, softmax dans réseaux de neurones...
 - Utiliser un ensemble de classifieurs binaires
 - SVM, adaboost, perceptron...

Multiclasse à partir de classifieurs

- Comment passer d'une classification binaire à N classes?
- Plusieurs techniques:
 - One vs Rest
 - One vs One (ou All vs All)
- OVO:
 - On apprend autant de classifieurs que de **paires de classes** ($N(N-1)/2$)
 - Classification = choix de la classe ayant le plus de **votes**
 - **Pb**: peut être indécidable dans certains cas
- OVR:
 - On apprend **un classifieur par classe**
 - Classification = choix de la classe ayant **le meilleur score**
 - **Pb**: déséquilibre des données entre classe cible et « reste »

Evaluation du multi-classe

- Erreur globale:

$$Err = \frac{\text{nombre d'échantillons mal classés}}{\text{nombre d'échantillons testés}}$$

- Matrice de confusion:

$\text{conf}(i, j)$ = probabilité de classer comme i | vraie classe est j
estimée sur données de test

- Risque ou coût moyen

$$R = \sum_j \sum_i \lambda(i, j) \text{conf}(i, j) p(j)$$

où $\lambda(i, j)$ est le coût de décider i lorsque j est vrai

A retenir

- Régularisation
 - Un moyen de contrôler le compromis biais-variance
- SVM
 - Un algorithme optimal et flexible qui permet de traiter un grand nombre de configurations de données (en dimension raisonnable)
- Validation croisée
 - Un moyen empirique d'estimer l'erreur de généralisation
 - Une technique pour optimiser les hyper-paramètres (par ex. ceux du SVM)
- Multi-classe
 - Un problème qui peut s'exprimer et se résoudre de différentes manières