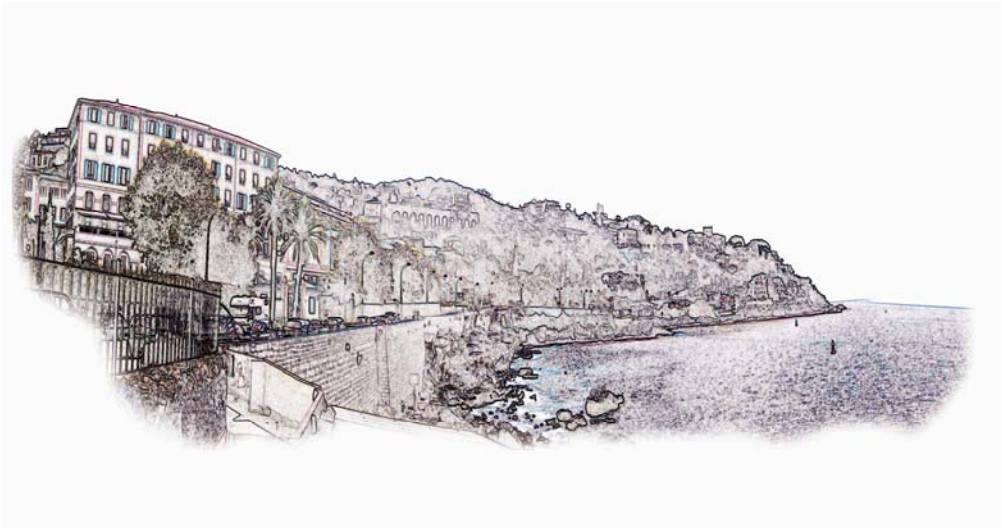
Plate-forme AFIA / Nice, du 30 mai au 3 juin 2005

JOURNEE & TUTORIEL :

Apprentissage Pro-Actif



Olivier Bousquet
Manuel Davy
Michèle Sebag

pertinence
simple solutions for complex processes

www.pertinence.com

SVM, noyaux, régularisation
quelques idées récentes en Machine Learning

30 mai 2005
Olivier Bousquet
olivier.bousquet@pertinence.com

> Plan de l'exposé

- **Contexte**
- **Illustration en 2 dimensions**
- **Anciennes idées**
- **Nouvelles idées**
  - Optimisation convexe
  - Régularisation
  - Espaces Hilbertiens et noyaux
  - SVM / Boosting

> Contexte

- **Simplifions le problème à l'extrême**
- **Données**
  - Exemples $x_1, x_2, \ldots, x_n \in X$
  - Etiquettes $y_1, y_2, \ldots, y_n \in \{-1, +1\}$
- **Résultat attendu**
  - Fonction $f : X \to \{-1, +1\}$
  - Telle que f(x) approche y, au moins sur les données, mais si possible aussi « en dehors »

> Fondements

- **Si on veut espérer faire quelque chose, il faut des hypothèses**
- **Les données futures sont « similaires » aux données d'apprentissage**
- **Deux points « proches » sont susceptibles d'avoir la même classe**
- **Sans ces hypothèses, on ne peut rien faire**

Apprentissage local

Étant donnée une distance d « pertinente »

- **On utilise les k plus proches voisins**
- **Ou l'apprentissage local :**
  - fonction de similarité

$$k(x,x') = e^{-d^2(x,x')/\sigma^2}$$

  - vote de tous les points en fonction de leur distance au nouveau point

$$f(x) = \sum_{i=1}^{n} y_i k(x, x_i)$$

  - rééquilibrage des classes

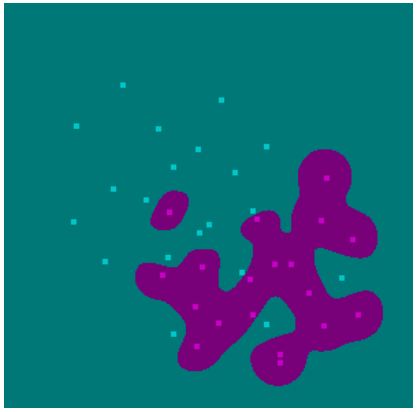
$$f(x) = \frac{1}{n_+}\sum_{i\in+} k(x,x_i) - \frac{1}{n_-}\sum_{i\in-} k(x,x_i)$$

Normalisation

- **Seul le signe compte, on peut aussi choisir un décalage**
- **moyenne sur les positifs = -moyenne sur les négatifs = 1**

$$g(x) = \frac{f(x)+b}{a} = \frac{f(x) - \frac{1}{2}\left(\frac{1}{n^+}\sum_{i\in+} f(x_i) + \frac{1}{n^-}\sum_{i\in-} f(x_i)\right)}{\frac{1}{2}\left(\frac{1}{n^+}\sum_{i\in+} f(x_i) - \frac{1}{n^-}\sum_{i\in-} f(x_i)\right)}$$

Exemple



Sigma très petit

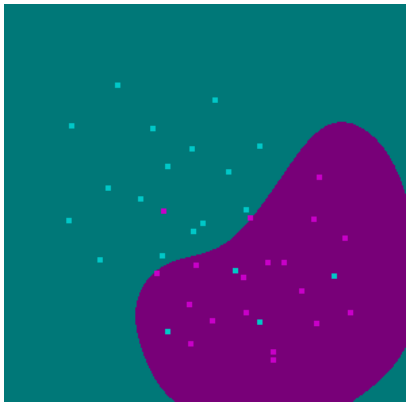
- **k(x,x') = 1 si x=x'**
- **k(x,x') = 0 sinon**

$$f(x_i) = y_i / n_\pm$$
$$f(x) = 0$$
$$g(x_i) = y_i$$
$$g(x) = 0$$

Sigma augmente

pertinence
simple solutions for complex processes

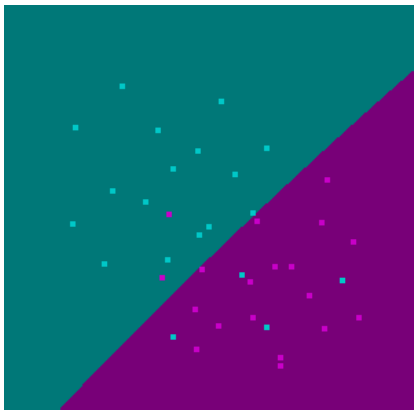
pertinence
simple solutions for complex processes



pertinence
simple solutions for complex processes

pertinence
simple solutions for complex processes

Sigma très grand



pertinence

Sigma très grand

$$k(x,x') \approx 1 - \frac{d^2(x,x')}{\sigma^2}$$

$$f(x) \approx 0$$

$$g(x) \approx \frac{d^2(x,x_-) - d^2(x,x_+)}{d^2(x_+,x_-)}$$

- g(x) = classifieur linéaire entre les centres

pertinence

Conclusion de l'exemple

- Le paramètre sigma permet de choisir un niveau de « localité »
- Théorie: pour sigma fixé, pas de consistance
- pour sigma qui décroit vers 0 (pas trop vite), consistance
- Sigma doit être adapté à la densité des points

pertinence

Poids sur les exemples

- réécriture : alpha = 1/n+ ou 1/n-

$$f(x) = \sum_{i=1}^{n} \alpha_i y_i k(x_i, x)$$

$$g(x) = \frac{\sum_{i=1}^{n} \alpha_i y_i k(x_i, x) - \frac{1}{2} \sum_{i,j=1}^{n} \alpha_i \alpha_j y_i k(x_i, x_j)}{\frac{1}{2} \sum_{i,j=1}^{n} \alpha_i \alpha_j y_i y_j k(x_i, x_j)}$$

pertinence

Choix des poids

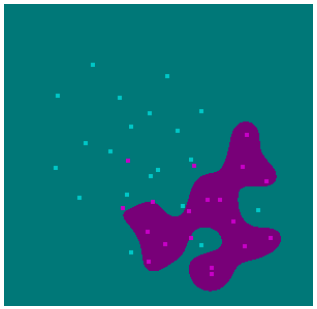
- **Poids qui somment à 1 sur chaque classe**

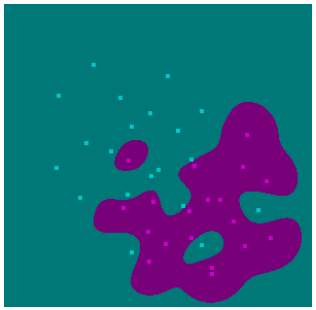
$$\sum_{i=1}^{n} \alpha_i = 2 \qquad \sum_{i=1}^{n} y_i \alpha_i = 0$$

- **Idée: on donne plus de poids aux exemples mal classés**

pertinence

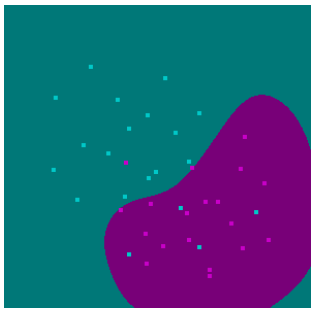
Utilisation des poids



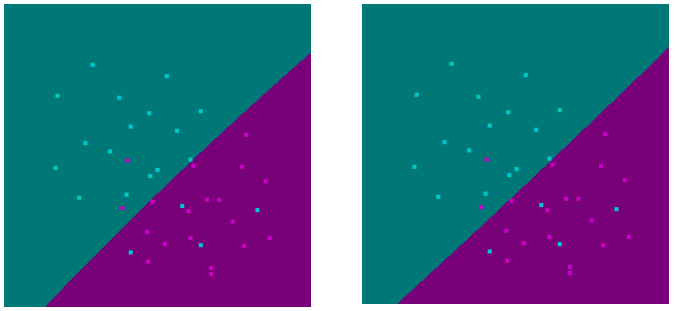


pertinence

pertinence



pertinence



Algorithme possible

- **Exemple mal classés**

$$y_i f(x_i) \leq 0$$

- **Algorithme**

$$\min \sum_{i=1}^{n} \alpha_i y_i f_\alpha(x_i)$$

$$\sum_{i=1}^{n} \alpha_i = 2 \qquad \sum_{i=1}^{n} y_i \alpha_i = 0$$

Limitation des poids

- **On peut introduire une contrainte sur les poids**
- **Contrainte maximale: poids égaux**
- **Contrainte minimale: des poids vont pouvoir s'annuler au profit d'autres**

Pourquoi cela fonctionne-t-il ?

- **Tout est dans la distance (hypothèse fondamentale)**
- **et dans la souplesse offerte par les paramètres.**
- **La localité peut être adaptée (en fonction de la qualité de la distance et du nombre de points)**
- **On peut trouver le juste compromis entre adaptation aux données et complexité (poids)**

pertinence

Contexte

- **Simplifions le problème à l'extrême**
- **Données**
  - Exemples $x_1, x_2, ..., x_n \in X$
  - Etiquettes $y_1, y_2, ..., y_n \in \{-1, +1\}$
- **Résultat attendu**
  - Fonction $f : X \to \{-1, +1\}$
  - Telle que f(x) approche y, au moins sur les données, mais si possible aussi « en dehors »

pertinence

Anciennes idées (1)

- **Il est clair qu'il faut restreindre l'espace de recherche de f**
- **Donc apprendre c'est faire une recherche dans un espace en minimisant l'erreur sur les données**
- **On peut introduire un biais d'apprentissage (sous la forme d'heuristiques)**
- **La recherche est algorithmiquement complexe**

pertinence

Anciennes idées (2)

- **Remplacer l'optimisation combinatoire par une optimisation régulière: réseaux de neurones**

$$\min \sum_{i=1}^{n} (f(x_i) - y_i)^2$$

$$f(x) = s\left(\sum_{j=1}^{d} \beta_j s(...\phi(x)) \right)$$

- **Mais la combinatoire subsiste (optimas locaux)**

pertinence

Nouvelles idées (1)

- **Optimisation : quels sont les problèmes faisables ?**
  - Ce ne sont pas seulement les problèmes linéaires ou les problèmes avec peu de variables
- **Ce sont les problèmes convexes**
- **Un problème est convexe si son objectif est une fonction convexe pour le bon paramétrage et l'espace de recherche est convexe**

pertinence

Nouvelles idées (2)

- **Se ramener à un problème convexe**
- **Relaxation d'un problème combinatoire ou régulier mais non convexe**

pertinence

Avantages

- **On ne parle plus d'heuristiques mais de critères**
- **Pas de questions sur l'algorithme**
- **Propriétés de dualité**

pertinence

Fonction d'erreur convexe

- **Problème initial (combinatoire)**

$$\min_{f \in F} \sum_{i=1}^{n} I_{\{y_i f(x_i) \leq 0\}}$$

- **On remplace la fonction indicatrice par une fonction convexe plus grande**

$$\min_{f \in F} \sum_{i=1}^{n} \left(1 - y_i f(x_i)\right)_+$$

pertinence

Espace de recherche convexe

- Pour que le problème soit convexe, il faut aussi que l'espace de recherche soit convexe
- On peut prendre un espace vectoriel

$$F = \left\{ \sum_{j=1}^{m} \beta_j \phi_j(x) \right\}$$

pertinence

Paramétrage convexe

- Il faut aussi que le paramétrage soit adapté
- Convexité par rapport à la variable (qui ici est une fonction)
- On peut en général considérer que f(x) est une fonction linéaire en f

pertinence

Problème linéaire inverse

- On doit résoudre quelque chose comme
- (f(x1), f(x2),…, f(xn)) = (y1, y2, …, yn)
- que l'on peut représenter comme

Af = Y

- avec A une matrice, f et Y des vecteurs (f représentée par les coefficients beta).

- C'est un problème linéaire inverse: on voudrait inverser A (mais ce n'est pas toujours possible)

pertinence

Nouvelles idées (3)

- Régularisation: technique pour résoudre les problèmes inverses mal posés
- Deux solutions possibles
  - Pénalisation: min ||Af – Y|| + ||f||
  - Itération: min ||Af – Y|| dans un sous espace de faible dimension

pertinence

Interprétation

- **Régularisation: introduction de régularité, donc généralisation**
- **Permet de compenser le manque de données**
- **Besoin d'un paramètre pour faire un compromis entre régularité et adaptation aux données**
  - Ce paramètre doit s'adapter à la quantité de données

pertinence

Régularisation

- **Minimisation de l'erreur pénalisée**

$$\min_{f \in F} \sum_{i=1}^{n} (1 - y_i f(x_i))_+ + \lambda \|f\|^2$$

- **Intuitivement (formulation précise plus tard)**

$$f(x) = \langle f \,|\, \delta_x \rangle$$

- **Formulation équivalente (cf calculs de sous-gradients)**

$$f(x) = \sum_{i=1}^{n} \alpha_i y_i \delta_i \qquad \max \sum_{i=1}^{n} \alpha_i - \sum_{i,j=1}^{n} \alpha_i y_i \alpha_j y_j \langle \delta_i \,|\, \delta_j \rangle$$

pertinence

Régularisation

- **Supposons que**

$$\langle \delta_i \,|\, \delta_j \rangle = k(x_i, x_j)$$

- **on retrouve (à la normalisation près) l'algorithme présenté en exemple**
- **Donc la dualité permet de faire le lien entre**
  - un algorithme local avec pondération des exemples proches de la frontière
  - un algorithme de minimisation d'une erreur convexe régularisée dans un espace de fonctions

pertinence

Régularisation

- **On a utilisé la dualité**
  - on change d'espace : primal (F) dual (R^n)
  - on change de paramétrisation : au lieu de fonctions on a un vecteur de paramètres
  - mais le problème reste le même
- **On gagne (potentiellement) en nombre de variables**
  - Une variable duale par contrainte (par exemple d'apprentissage)

pertinence

Espaces de fonctions

- **Existe-t-il des espaces de fonctions qui se comportent comme des espaces vectoriels euclidiens ?**
  - Oui: espaces de Hilbert (munis d'un produit scalaire)
  - Exemple: L2
- **Dans lesquels on peut identifier f(x) avec un produit scalaire ?**
  - Impossible dans L2
- **Dans lesquels le produit scalaire de deux évaluations est une fonction de similarité ?**

Exemple

- **Exemple: S1**
- **Considérons l'ensemble des fonctions absolument continues sur [0,1] (nulles en 0)**
- **muni du produit scalaire**

$$\langle f | g \rangle = \int_0^1 f'(t) g'(t) dt$$

- **sa norme est une notion de régularité (une fonction qui varie peu a une petite norme)**
- **on peut représenter l'évaluation**

$$\langle f | \min(x,.) \rangle = \int_0^1 f'(t) \min'(x,t) dt = f(x)$$

Propriétés

- **Si on note k(x,x')=min(x,x')**
- **on a**

$$f(x) = \langle k(x,.) | f \rangle$$

$$\langle k(x,.) | k(x',.) \rangle = k(x,x')$$

Retour sur l'algorithme

- **Quand est-ce que le problème est convexe ?**
  - Primal: quand on a une norme et que l'évaluation est « dérivable »
  - Dual: quand la dérivée seconde est positive. Dans le cas vectoriel, il faut un Hessien (matrice des dérivées secondes) défini positif. La condition est donc que la matrice
- **Noyau défini positif**
  - Une fonction symétrique de deux variables est définie positive si pour chaque ensemble de points et de coefficients on a

$$\sum_{i,j=1}^{n} \alpha_i \alpha_j k(x_i, x_j) \geq 0$$

  - Ceci est équivalent au fait que la matrice Hessienne soit définie positive donc le problème convexe
  - Ceci est équivalent au fait qu'il existe un espace associé avec une évaluation « dérivable » (qui correspond à un produit scalaire)

Espaces de Hilbert à noyau reproduisant

- **Etant donné un noyau défini positif, on peut définir un espace de fonction en formant toutes les combinaisons linéaires**
- **Cet espace peut être muni d'un produit scalaire**
- **C'est un espace de Hilbert à noyau reproduisant**
- **La norme est généralement une mesure de la régularité**

pertinence

Feature space

- **Une autre interprétation possible:**
  - Si k est un noyau défini positif,
  - il existe une transformation telle que $k(x,x') = \langle \phi(x) | \phi(x') \rangle$
- **Mais la transformation n'est pas explicite**
- **La bonne vision est la vision fonctionnelle (régularisation)**
- **ou la vision duale où on pondère les exemples**
- **En effet les solutions sont des combinaisons linéaires de noyaux calculés aux points d'apprentissage**

pertinence

Boosting

- **Le boosting présente les mêmes ingrédients:**
  - Fonction d'erreur convexe (généralement exponentielle)
  - Régularisation (mais en norme L1 au lieu de L2)
  - Feature space: l'image d'un point par tous les apprenant faibles (au lieu de la similarité avec tous les autres points)
  - Dualité: poids sur les points plus importants sur les points frontière
  - Régularisation par arrêt prématuré (dans Adaboost) plutôt que par pénalisation

pertinence

Messages

- **Optimisation convexe: algorithmes simples**
- **Régularisation: nécessaire pour la généralisation**
- **SVM: somme pondérée de noyaux en chaque point, avec un point plus important sur les points proches de la frontière**
- **Noyau: mesure de similarité**
- **Noyau défini positif: condition suffisante pour la convexité du problème d'optimisation**

pertinence

Messages pratiques

- **Tout est dans le noyau (i.e. dans la représentation des données)**
- **Deux façons d'envisager le traitement d'un problème:**
  - Construire une représentation (vectorielle) des points (individuels)
  - Construire une distance (ou un noyau) entre paires de points

pertinence
simple solutions for complex processes

Avantages et inconvénients

- **Représentation vectorielle**
  - On peut utiliser quasiment tous les algorithmes
  - On peut utiliser des algorithmes qui sélectionnent naturellement les attributs (e.g. moindres généralisés, arbres…)
- **Utilisation de distance**
  - On peut utiliser tous les algorithmes à base de distance
  - Parfois plus naturel que de construire les vecteurs
  - Parfois plus efficace à calculer que les vecteurs
  - Dans les bons cas on a un noyau défini positif ce qui donne des propriétés de convexité et on peut alors utiliser tous les algorithmes à base de noyaux (classification, régression,…)
  - Mais il est souvent difficile qu'une fonction de similarité vérifie la condition ad hoc.
  - Le résultat est difficilement interprétable (pas de sélection d'attributs mais plutôt combinaison)

pertinence
simple solutions for complex processes

Noyaux vs vecteurs

- **Pour toute représentation vectorielle, on peut construire un noyau (produit scalaire des vecteurs)**
- **Pour toute fonction de similarité définie positive, il existe des vecteurs associés**

pertinence
simple solutions for complex processes