Introduction to machine learning

Masters M2MO & MIDS

Stéphane Gaïffas



▲□▶ ▲□▶ ▲ 三▶ ▲ 三▶ 三三 - のへぐ

Today

- Kernels
- Kernel SVM
- Kernel regression

Supervised learning setting

- We observe a training dataset D of pairs (x_i, y_i) for i = 1, ..., n
- Features $x_i \in \mathbb{R}^d$ and labels $y_i \in \mathbb{R}$ (regression) or $y_i \in \{-1, 1\}$ (binary classification)
- Given a features vector $x \in \mathbb{R}^d$, we want to predict the label y

・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・

Features engineering

- Given raw features $x_1, \ldots, x_n \in \mathbb{R}^d$, we can construct **new** features
- For instance, we can add second order polynomials of the features

$$x_{i,j}^2, \quad x_{i,j} imes x_{i,k}$$
 for any $1 \le j,k \le d$

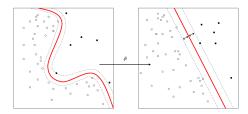
・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・

• It increases the number of features, hence the dimension of the model weights *w* learned from it

A feature map

- \bullet Consider a feature map $\varphi:\mathbb{R}^d\to\mathbb{H}$ that "adds" all these new features
- \mathbb{H} is an Hilbert space (eventually infinite dimensional), endowed with an inner product $\langle \cdot, \cdot \rangle_{\mathbb{H}}$
- The decision boundary x → ⟨w, φ(x)⟩ + b = 0 is not an hyperplane anymore (but φ(x) → ⟨w, φ(x)⟩ + b = 0 is)

A common belief: **increasing dimension** of features space makes data **almost linearly separable**

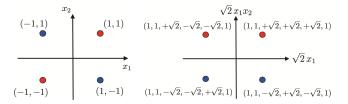


◆□▶ ◆□▶ ◆□▶ ◆□▶ → □ ─ つへで

The polynomial mapping $\varphi:\mathbb{R}^2 o\mathbb{R}^6$ for $x=(x_1,x_2)\in\mathbb{R}^2$

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

solves the XOR (Exclusive OR) classification problem



XOR : label y_i is blue iff one of the coordinates of x_i equals 1.

- Blue and red points cannot be linearly separated in \mathbb{R}^2
- But they can using the mapping φ , using the hyperplane $x_1x_2 = 0$

This mapping φ is call polynomial mapping of order 2. Note that for $x, x' \in \mathbb{R}^2$ we have

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

This motivates the definition of

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

where $q \in \mathbb{N} - \{0\}$ and c > 0. In this case K is called the polynomial **kernel** of degree q.

Given a "raw feature" space \mathcal{X} (often $\mathcal{X} = \mathbb{R}^d$), a function

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

is called a **kernel** over \mathcal{X} .

Definition. We say that a kernel K is symmetric iff

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

・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・

for any $x, x' \in \mathcal{X}$

Definition. We say that a kernel is PDS (positive definite symetric) iff

- it is symmetric
- for any $N \in \mathbb{N}$ and any $\{x_1, \ldots x_N\} \subset \mathcal{X}$ we have

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

meaning that \boldsymbol{K} is positive semi-definite (symmetric), or equivalently that

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

for any $u \in \mathbb{R}^N$, or equivalently that all eigenvalues of \boldsymbol{K} are non-negative.

For a sample x_1, \ldots, x_n we call $\mathbf{K} = [K(x_i, x_j)]_{1 \le i,j \le n}$ the **Gram** matrix of this sample.

Definition. Hadamard product $A \odot B$ between two matrices A and B (or vectors) with the same dimensions is given by

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

Theorem. The sum, product, pointwise limit and composition with a power series $\sum_{n\geq 0} a_n x^n$ with $a_n \geq 0$ for all $n \geq 0$ preserves the PDS property.

Proof. Consider two $N \times N$ Gram matrices K, K' of PDS kernels K, K' and take $u \in \mathbb{R}^N$. Observe that

$$u^{\top}(\mathbf{K} + \mathbf{K}')u = u^{\top}\mathbf{K}u + u^{\top}\mathbf{K}'u \ge 0$$

・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・

So PDS is preserved by the sum and finite sums by reccurence.

Now, to prove that the product $\mathbf{K} \odot \mathbf{K}'$ is PDS, write $\mathbf{K} = \mathbf{M}\mathbf{M}^{\top}$, where \mathbf{M} is the square-root of \mathbf{K} (which is SDP) and note that

$$u^{\top}(\boldsymbol{K} \odot \boldsymbol{K}')u = \sum_{1 \le i,j \le N} u_{i}u_{j}\boldsymbol{K}_{i,j}\boldsymbol{K}'_{i,j} = \sum_{1 \le i,j \le N} \sum_{k=1}^{N} u_{i}u_{j}\boldsymbol{M}_{i,k}\boldsymbol{M}_{k,j}\boldsymbol{K}'_{i,j}$$
$$= \sum_{k=1}^{N} z_{k}^{\top}\boldsymbol{K}'z_{k} \ge 0$$

▲□▶▲□▶▲≡▶▲≡▶ ≡ めぬぐ

with $z_k = u \odot \boldsymbol{M}_{\bullet,k}$.

This proves that finite products of PDS kernels is PDS.

Assume that $K_n \to K$ as $n \to +\infty$ pointwise, where K_n is a sequence of PDS kernels. It means that any associated sequence of Gram matrices K_n and the its limit K satisfies $K_n \to K$ entrywise, so that for any $u \in \mathbb{R}^N$ we have

 $u^{\top} \boldsymbol{K}_n u \rightarrow u^{\top} \boldsymbol{K} u$

so $u^{\top} \mathbf{K} u \geq 0$ since $u^{\top} \mathbf{K}_n u \rightarrow u$ for all n.

This proves stability of PDS property under pointwise limit.

Now, let K be a kernel such that |K(x, x')| < r for all $x, x' \in \mathcal{X}$ and $\sum_{n\geq 0} a_n x^n$ a power series with radius of convergence r. By stability under sum and product, we have that

 $\sum_{k=0}^{N} a_n K^n$

is PDS, and

$$\lim_{N\to+\infty}\sum_{n=0}^N a_n K^n = \sum_{n\geq 0} a_n K^n$$

remains PDS since PDS is kept under pointwise limit.

This concludes the proof of the theorem.

Theorem. The following inequality holds for K, K' two PDS kernels

$$K(x,x')^2 \le K(x,x)K(x',x')$$

for any $x, x' \in \mathcal{X}$. It is called the **Cauchy-Schwartz inequality** for PSD kernels.

Proof. Take $x, x' \in \mathcal{X}$ and consider the Gram matrix

$$oldsymbol{K} = egin{bmatrix} K(x,x) & K(x,x') \ K(x',x) & K(x',x') \end{bmatrix}$$

Since K is PDS, then $\mathbf{K} \succeq 0$, which entails that

$$0 \leq \det oldsymbol{K} = K(x,x)K(x',x') - K(x,x')^2$$

▲□▶ ▲□▶ ▲臣▶ ▲臣▶ 三臣 - のへで

Theorem [Reproducing kernel Hilbert space]. Let $\mathcal{K} : \mathcal{X} \times \mathcal{X} \to \mathbb{R}$ be a PDS kernel. Then, there is a Hilbert space \mathbb{H} endowed with an inner product $\langle \cdot, \cdot \rangle$ and a mapping $\varphi : \mathcal{X} \to \mathbb{H}$ such that

 $K(x,x') = \langle \varphi(x), \varphi(x') \rangle$

and such that the reproducing property holds:

 $h(x) = \langle h, K(x, \cdot) \rangle$

for any $h \in \mathbb{H}$ and $x \in \mathcal{X}$.

Proof. Available on the moodle. Think of \mathbb{H} as containing limits of functions

 $\sum_{i=1}^N a_i K(x_i, \cdot)$

for any $a_1, \ldots, a_N \in \mathbb{R}$ and $x_1, \ldots, x_N \in \mathcal{X}$.

Remark. Stresses the fact that a PDS kernel is some kind of similarity measure, since it is actually an inner product

- We say that \mathbb{H} is a **reproducting kernel Hilbert space** associated to the kernel K.
- \bullet The corresponding mapping $\varphi:\mathcal{X}\to\mathbb{H}$ is called the features mapping
- \mathbb{H} is endowed with an inner product $\langle h, h' \rangle$ for $h, h' \in \mathbb{H}$ and a norm $\|h\| = \sqrt{\langle h, h \rangle}$
- The feature space might is not unique in general

In summary

- Choose a kernel K you think relevant, if it's PDS, then there is a mapping φ and a RKHS $\mathbb H$ for it
- Feature engineernig becomes kernel engineering with kernel methods

・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・

Definition. The **normalized kernel** K' associated to a kernel K is given by

$$K'(x,x') = \frac{K(x,x')}{\sqrt{K(x,x)K(x',x')}}$$

if K(x,x)K(x',x') > 0 and K(x,x') = 0 otherwise.

Theorem. If K is a PDS kernel, its normalized kernel K' is PDS.

Remark. We have that K(x, x') is the cosine of the angle between $\varphi(x)$ and $\varphi(x')$ if K is a normalized kernel (if none is zero). Once again, K(x, x') is a similarity measure between x and x'

・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・

Proof. Let $x_1, \ldots, x_N \in \mathcal{X}$ and $c \in \mathbb{R}^N$. If $K(x_i, x_i) = 0$ or $K(x_j, x_j) = 0$ then $K(x_i, x_j) = 0$ using Cauchy-Schwartz, so $K'(x_i, x_j) = 0$.

So, we can assume $K(x_i, x_i) > 0$ for all i = 1, ..., N and write the following:

$$\sum_{1 \le i,j \le N} \frac{c_i c_j K(x_i, x_j)}{\sqrt{K(x_i, x_i) K(x_j, x_j)}} = \sum_{1 \le i,j \le N} \frac{c_i c_j \langle \varphi(x_i), \varphi(x_j) \rangle}{\|\varphi(x_i)\| \|\varphi(x_j)\|}$$
$$= \left\| \sum_{i=1}^N \frac{c_i \varphi(x_i)}{\|\varphi(x_i)\|} \right\|^2 \ge 0$$

which proves the theorem.

Remark. If K is a normalized kernel, then

$$\|\varphi(x)\| = \langle \varphi(x), \varphi(x) \rangle = K(x, x) = 1$$

for any $x \in \mathcal{X}$

The polynomial kernel. For c > 0 and $q \in \mathbb{N} - \{0\}$ we define the polynomial kernel

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

▲□▶▲□▶▲≡▶▲≡▶ ≡ めぬぐ

It is a PDS kernel

Proof. It is the power of the PDS kernel $(x, x') \mapsto \langle x, x' \rangle + b$.

We already computed its mapping $\varphi(x)$: it contains all the monomials of degree less than q of the coordinates of x

The RBF kernel (Radial Basis Function). For $\gamma > 0$ it is given by $K(x, x') = \exp(-\gamma ||x - x'||_2^2)$

Theorem. The RBF kernel is a PDS and normalized kernel. **Proof.** First remark that

$$\exp(-\gamma \|x - x'\|_2^2) = \frac{\exp(2\gamma \langle x, x' \rangle)}{\exp(\gamma \|x\|^2) \exp(\gamma \|x'\|^2)}$$
$$= \frac{K'(x, x')}{\sqrt{K'(x, x)K'(x', x')}}$$

with ${\cal K}'(x,x')=\exp(2\gamma\langle x,x'
angle)$ and that ${\cal K}'$ is PDS since

$$\mathcal{K}'(x,x') = \sum_{n\geq 0} \frac{(2\gamma\langle x,x'
angle)^n}{n!}$$

namely a series of the PDS kernel $(x, x') \mapsto 2\gamma \langle x, x' \rangle$.

The tanh kernel. Also called the sigmoid kernel

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

for a, c > 0. It is again a PDS kernel (same argument as for the RBF kernel).

Remark. By far, the RBF kernel is the most widely used: uses as a similarity measure the Euclidean norm More mathematical details are covered in the exercices.

Kernel based algorithms how to use kernels for classification and regression?

・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・

• Let's recall the primal and dual formulation of the SVM

Linear SVM. Primal problem is

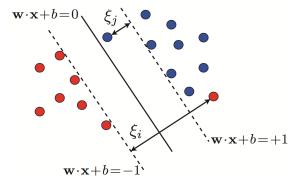
$$\begin{split} & \min_{w \in \mathbb{R}^d, b \in \mathbb{R}, s \in \mathbb{R}^n} \frac{1}{2} \|w\|_2^2 + C \sum_{i=1}^n s_i \\ & \text{subject to} \quad y_i(\langle x_i, w \rangle + b) \ge 1 - s_i \text{ and } s_i \ge 0 \text{ for all } i = 1, \dots, n \\ & \text{or equivalently} \end{split}$$

$$\underset{w \in \mathbb{R}^{d}, b \in \mathbb{R}}{\operatorname{argmin}} \frac{1}{2} \|w\|_{2}^{2} + C \sum_{i=1}^{n} \ell(y_{i}, \langle x_{i}, w \rangle + b)$$

where $\ell(y, y') = \max(0, 1 - yy') = (1 - yy')_+$ is the hinge loss Label prediction given by

 $y = \operatorname{sgn} (\langle x, w \rangle + b)$

▲□▶▲□▶▲≡▶▲≡▶ ≡ めぬぐ



Kernel SVM: replace x_i by $\varphi(x_i)$. In the primal this leads to

$$\underset{w \in \mathbb{R}^{d}, b \in \mathbb{R}}{\operatorname{argmin}} \frac{1}{2} \|w\|_{2}^{2} + C \sum_{i=1}^{n} \ell(y_{i}, \langle \varphi(x_{i}), w \rangle + b)$$

Label prediction is given by

$$y = \operatorname{sgn}(\langle \varphi(x), w \rangle + b)$$

▲□▶ ▲□▶ ▲目▶ ▲目▶ - 目 - のへで

In the primal, you need to compute $\varphi(x)$!

Dual problem is

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

subject to $0 \le \alpha_i \le C$ and $\sum_{i=1}^n \alpha_i y_i = 0$ for all $i = 1, ..., n$

and the label prediction using dual variables

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

depends only on the features x_i via their inner products $\langle x_i, x_j \rangle$

Fundamental remark. The dual problem depends only on the features via their inner products

Given some kernel K, let's replace the "raw" inner products $\langle x_i, x_j \rangle$ by the "new" inner products $K(x_i, x_j) = \langle \varphi(x_i), \varphi(x_j) \rangle$

The kernel trick. Once again, to train the SVM with a kernel, you don't need to know or compute the $\varphi(x_i)$

The kernel SVM

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

subject to $0 \le \alpha_i \le C$ and $\sum_{i=1}^n \alpha_i y_i = 0$ for all $i = 1, ..., n$

and the label prediction using dual variables

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

with the intercept given by

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

for any *i* such that $0 < \alpha_i < C$ (cf previous lecture)

This proves that the hypothesis solution writes

$$h(x) = \operatorname{sgn}\Big(\sum_{i=1}^n \alpha_i y_i K(x, x_i) + b\Big),$$

namely a combination of functions $K(x_i, \cdot)$ where x_i are the support vectors.

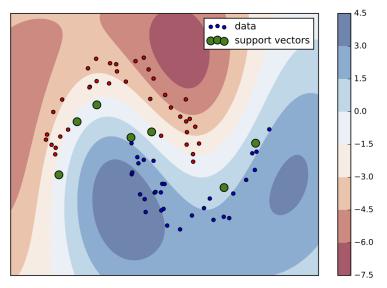
For the RBF kernel, the decision function is

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

It is a mixture of Gaussian "densities". Let's recall that the x_i with $\alpha_i \neq 0$ are the support vectors

▲□▶▲□▶▲≡▶▲≡▶ ≡ めぬぐ

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



The kernel trick is not only for the SVM

Representer theorem. If *K* is a PDS kernel and \mathbb{H} its corresponding RKHS, we have that for any increasing function *g* and any function $L: \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}$ that the optimization problem

$$\underset{h\in\mathbb{H}}{\operatorname{argmin}} g(\|h\|) + L(h(x_1),\ldots,h(x_n))$$

admits only solutions of the form

$$h=\sum_{i=1}^n \alpha_i K(x_i,\cdot).$$

▲□▶ ▲□▶ ▲三▶ ▲三▶ 三 りのぐ

Kernel ridge regression.

- Consider this time a continuous label y_i ∈ ℝ, features x_i ∈ X for i = 1,..., n and a features mapping φ : X → ℍ with PDS kernel K
- Kernel ridge regression considers the problem

$$\underset{w}{\operatorname{argmin}} \left\{ \sum_{i=1}^{n} \ell(y_i, \langle w, \varphi(x_i) \rangle) + \frac{\lambda}{2} \|w\|_2^2 \right\}$$

where λ is a penalization parameter, and $\ell(y, y') = \frac{1}{2}(y - y')^2$ is the least-squares loss

• Can be written as

 $\underset{w}{\operatorname{argmin}} F(x) \quad \text{with} \quad F(w) = \|y - \boldsymbol{X}w\|_2^2 + \lambda \|w\|_2^2$

with **X** the matrix with rows containing the $\varphi(x_i)$ and $y = [y_1 \cdots y_n] \in \mathbb{R}^n$

 This problem is strongly convex, and admits a global minimum iff

 $\nabla F(w) = 0$ namely $(\mathbf{X}^{\top}\mathbf{X} + \lambda \mathbf{I})w = \mathbf{X}^{\top}y$

- Note that X^TX + λI is always invertible. Thus kernel ridge allows admits a closed-form solution
- Requires to solve a $D \times D$ linear system, where D is the dimension of \mathbb{H}
- What if D is large ?
- Let's us the kernel trick, as we did for SVM

• Representer theorem says that we can find α such that

$$h(x) = \langle w, \varphi(x) \rangle = \sum_{i=1}^{n} \alpha_i K(x_i, x) = \sum_{i=1}^{n} \alpha_i \langle \varphi(x_i), \varphi(x) \rangle$$

for any $x \in \mathcal{X}$

This means that

$$w = \mathbf{X}^{\top} \alpha$$

Now, use the following trick: for any matrix \boldsymbol{X} , we have

$$(\boldsymbol{X}^{\top}\boldsymbol{X} + \lambda \boldsymbol{I})^{-1}\boldsymbol{X}^{\top} = \boldsymbol{X}^{\top}(\boldsymbol{X}\boldsymbol{X}^{\top} + \lambda \boldsymbol{I})^{-1}$$

This entails

$$w = (\boldsymbol{X}^{\top}\boldsymbol{X} + \lambda \boldsymbol{I})^{-1}\boldsymbol{X}^{\top}y = \boldsymbol{X}^{\top}(\boldsymbol{X}\boldsymbol{X}^{\top} + \lambda \boldsymbol{I})^{-1}y$$

which gives (note that $(\boldsymbol{X}\boldsymbol{X}^{\top})_{i,j} = \langle \varphi(x_i), \varphi(x_j) \rangle = \mathcal{K}(x_i, x_j)$)

$$\alpha = (\mathbf{K} + \lambda \mathbf{I})^{-1} \mathbf{y}$$

・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・

Proof of the trick. Note that

$$(\mathbf{X}^{\top}\mathbf{X} + \lambda \mathbf{I})\mathbf{X}^{\top} = \mathbf{X}^{\top}(\mathbf{X}\mathbf{X}^{\top} + \lambda \mathbf{I}).$$

Multiplying on the left by $(\mathbf{X}^{\top}\mathbf{X} + \lambda \mathbf{I})^{-1}$ leads to

$$\boldsymbol{X}^{\top} = (\boldsymbol{X}^{\top}\boldsymbol{X} + \lambda \boldsymbol{I})^{-1}\boldsymbol{X}^{\top} (\boldsymbol{X}\boldsymbol{X}^{\top} + \lambda \boldsymbol{I}).$$

and then on the right by $(\boldsymbol{X}\boldsymbol{X}^{ op}+\lambda\boldsymbol{I})^{-1}$ concludes with

$$(\boldsymbol{X}\boldsymbol{X}^{\top} + \lambda \boldsymbol{I})^{-1}\boldsymbol{X}^{\top} = (\boldsymbol{X}^{\top}\boldsymbol{X} + \lambda \boldsymbol{I})^{-1}\boldsymbol{X}^{\top}$$

・ロト ・ 目 ・ ・ ヨト ・ ヨ ・ うへつ

A cute trick. But let's do it like we did for the SVMs (just to be sure...)

An alternative formulation of

$$\min_{w} \sum_{i=1}^{n} (y_i - \langle w, \varphi(x_i) \rangle)^2 + \lambda \|w\|_2^2$$

is given by

$$\min_{w} \sum_{i=1}^{n} (y_i - \langle w, \varphi(x_i) \rangle)^2 \text{ subject to } \|w\|_2^2 \leq r^2$$

and also

$$\min_w \sum_{i=1}^n s_i^2$$
 subject to $\|w\|_2^2 \leq r^2$ and $s_i = y_i - \langle w, arphi(x_i)
angle$

<□ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > <

Which leads to the following Lagrangian

$$L(w, s, \alpha, \lambda) = \min_{w} \sum_{i=1}^{n} s_i^2 + \min_{w} \sum_{i=1}^{n} \alpha_i (y_i - s_i - \langle w, \varphi(x_i) \rangle) \\ + \lambda(\|w\|_2^2 - r^2)$$

so that the KKT conditions leads to the following properties:

$$\nabla_{w}L = -\sum_{i=1}^{n} \alpha_{i}\varphi(x_{i}) + 2\lambda w \Rightarrow w = \frac{1}{2\lambda}\sum_{i=1}^{n} \alpha_{i}\varphi(x_{i})$$
$$\nabla_{s_{i}}L = 2s_{i} - \alpha_{i} \Rightarrow s_{i} = \alpha_{i}/2$$

and the slackness complementary conditions:

$$lpha_i(y_i - s_i - \langle w, \varphi(x_i) \rangle) = 0$$
 and $\lambda(\|w\|_2^2 - r^2) = 0$

▲□▶ ▲□▶ ▲目▶ ▲目▶ - 目 - のへで

Plugging the expressions of w and s_i in functions of α in L gives after some algebra the dual objective

$$D(\alpha) = -\lambda \sum_{i=1}^{n} \alpha_i^2 + 2 \sum_{i=1}^{n} \alpha_i y_i - \sum_{1 \le i,j \le n} \alpha_i \alpha_j \langle \varphi(x_i), \varphi(x_j) \rangle - \lambda r^2$$

(where we replaced $2\lambda \alpha_i$ by α_i) which can be written matricially as

$$D(\alpha) = -\lambda \|\alpha\|_2^2 + 2\langle \alpha, y \rangle - \alpha^\top \mathbf{X} \mathbf{X}^\top \alpha$$
$$= 2\langle \alpha, y \rangle - \alpha^\top (\mathbf{K} + \lambda \mathbf{I}) \alpha$$

with optimum achieved for

$$\alpha = (\mathbf{K} + \lambda \mathbf{I})^{-1} \mathbf{y}$$

▲□▶ ▲□▶ ▲三▶ ▲三▶ 三 りのぐ

(same as before, of course...)

In summary

- Solving a problem in the dual benefits from the kernel trick
- Allows to construct complex non-linear decision functions
- OK if *n* is not too large... (if the *n* × *n* Gram matrix *K* fits in memory)

▲□▶ ▲□▶ ▲三▶ ▲三▶ 三 りのぐ

- Otherwise, stick to the primal! (and forget about kernels...)
- But don't forget about feature engineering (yes, again !)

Thank you!

<ロト < 回 ト < 三 ト < 三 ト 三 の < で</p>