Apprentissage en bioinformatique et noyaux pour structures

Laurent Jacob
laurent.jacob@ensmp.fr

Center for Computational Biology
École des Mines de Paris, ParisTech

Apprentissage artificiel, 2008.

Objectifs

- Connaitre les applications de l'apprentissage en bioinformatique.
- Comprendre les principe des méthodes à noyaux, y compris pour données structurées (applications en bioinformatique et ailleurs).

Outline

Outline

Outline

1ere partie

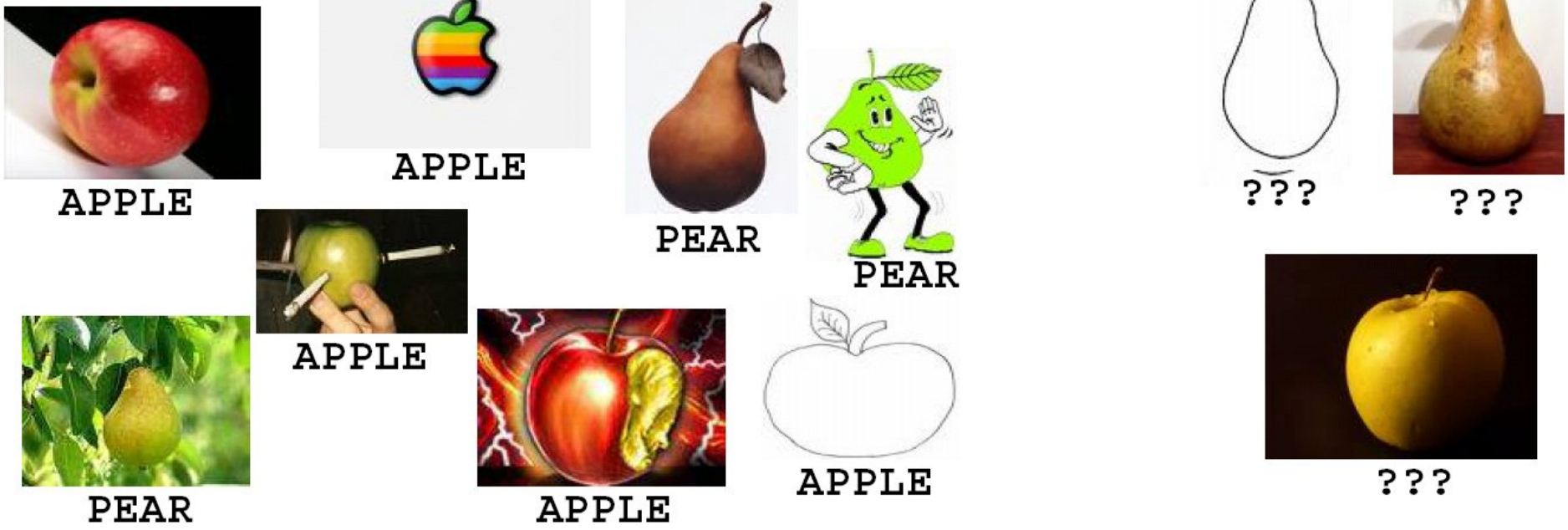
Apprentissage en bioinformatique

Outline

Contexte

- Grandes quantités de données (technologies, littérature).
- Données souvent hétérogènes et/ou très bruitées.
- Analyser ces données pour
  - comprendre un système,
  - construire des outils de diagnostic,
  - concevoir de nouvelles thérapies.

Rappel : apprentissage supervisé (classification)



Formalisation

- Variables d'entrée $\mathbf{x} \in \mathcal{X}$
- Sorties $y \in \{-1, 1\}$.

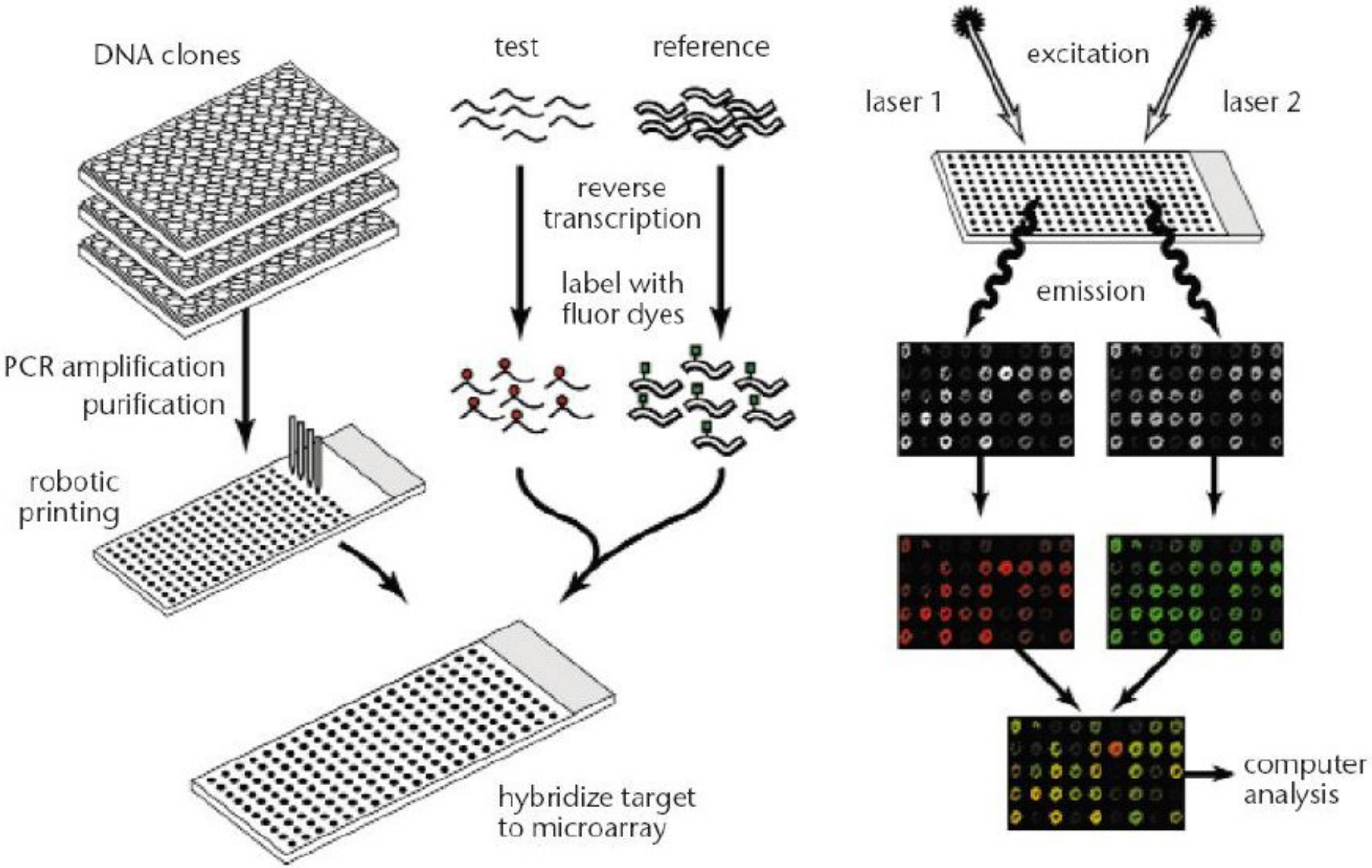
Rappel : apprentissage supervisé (classification)

Problème

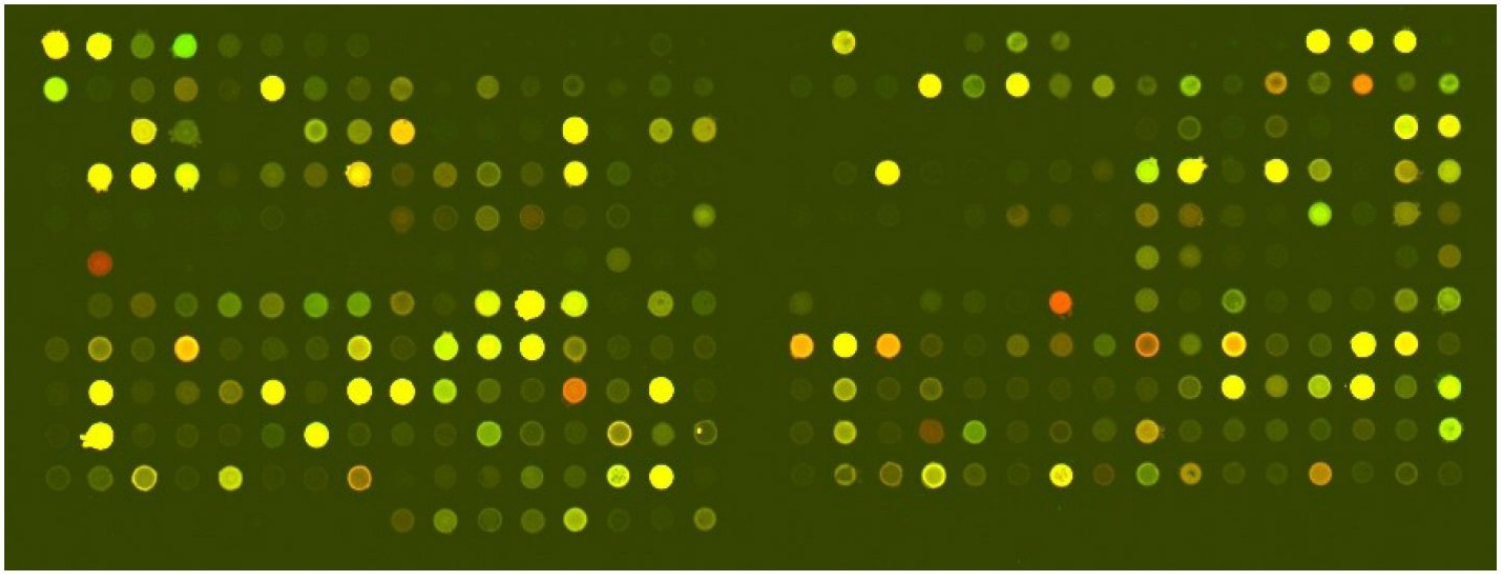
- Ensemble d'entraînement $\mathcal{S} = \{(\mathbf{x}_1, y_1), \ldots, (\mathbf{x}_n, y_n)\}$.
- Construire un classifieur f à partir de $\mathcal{S}$, tel que $\hat{y} = f(x)$ prédise la classe d'un x inconnu le plus précisément possible.

Outline

Puces à ADN : principe (cas des puces cDNA)



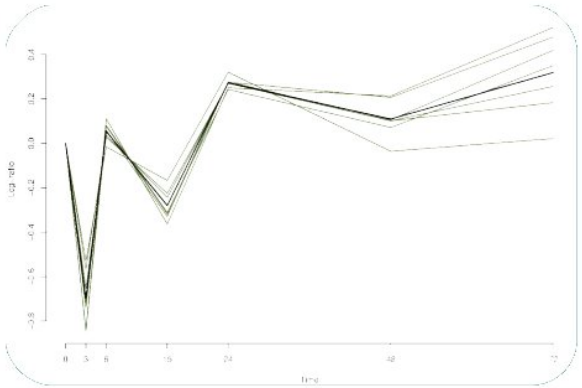
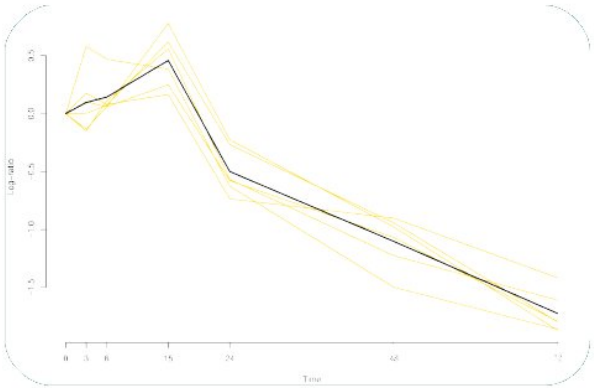
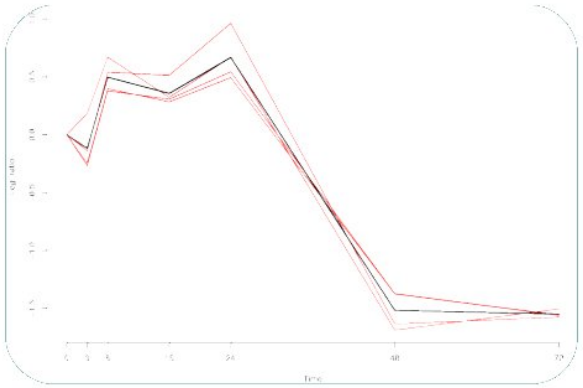
Puces à ADN : sorties



- Sortie (dans l'idéal...) : niveau d'expression de chaque gène.
- Le génome d'une cellule ne change pas avec son type ou son état, le transcriptome si.
- Observation faite à différents instants, sous différentes conditions...

$\Rightarrow$ Tendances ? Prédictions ?

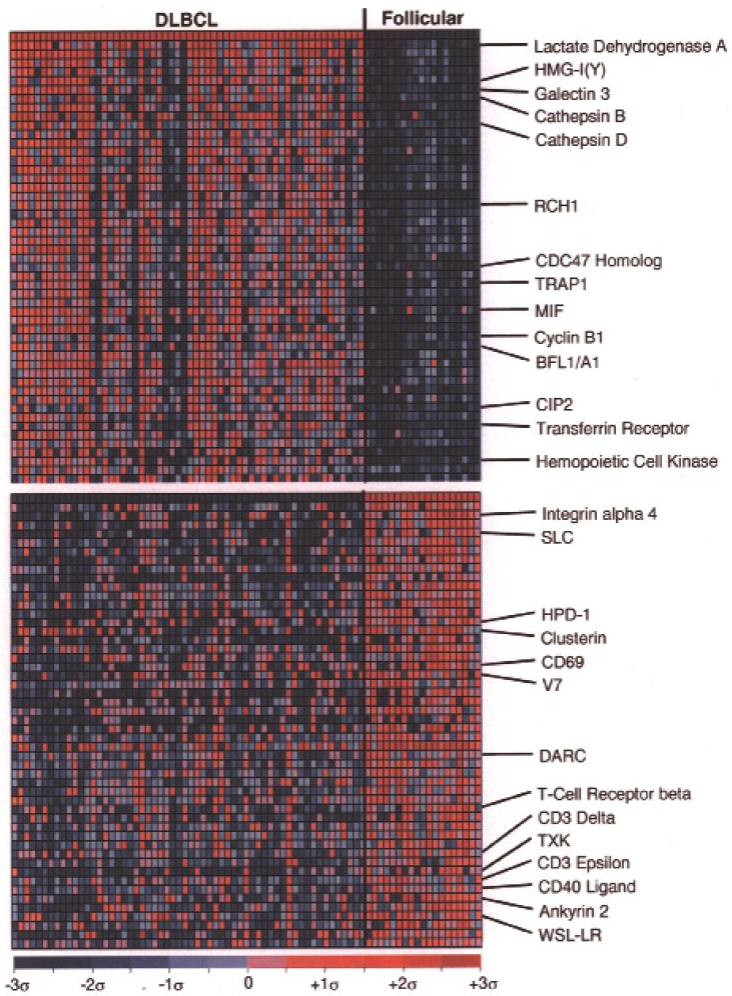
Puces à ADN : Clustering de profils d'expression de gènes

- Idée : comportement similaire dans une situation spécifique $\Rightarrow$ gènes liés fonctionnellement ?
- Base pour établir des réseaux de régulation.

$\Rightarrow$ Comprendre des systèmes...

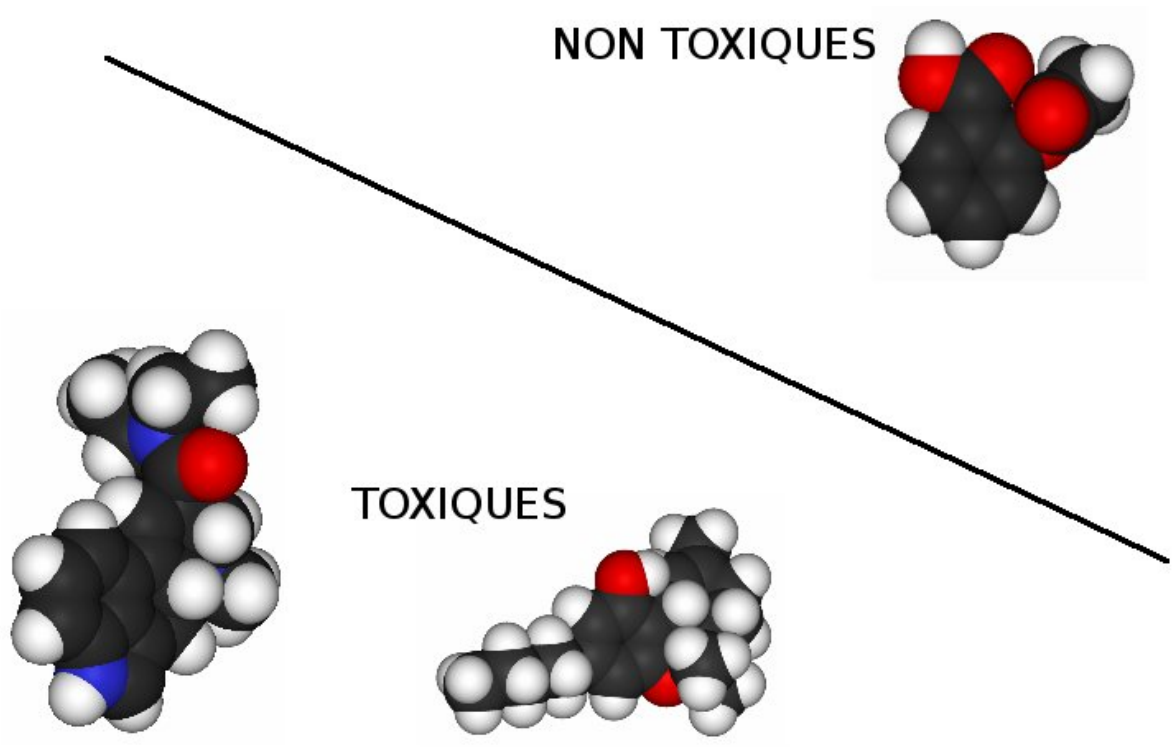
Puces à ADN : Classification de tumeur



- Idée : signature de la tumeur dans le comportement (l'expression) des gènes ?
- Savoir prédire le type de tumeur pour un nouveau patient en mesurant le transcriptome des cellules tumorales.
- Prédicteur interprétable biologiquement.

$\Rightarrow$ Établir des diagnostics

Toxicité de molécules



- Données : molécules toxiques ou non, description de ces molécules.
- Étant donnée une nouvelle molécule, est-elle toxique ?

$\Rightarrow$ Développement de thérapies, de bioproduits...

Autres applications...

- Prédire si une molécule se lie à ($\Rightarrow$ inhibe, active...) une cible thérapeutique.
- Prédire quelles parties d'un pathogène peuvent déclencher une réaction immunitaire.
- Détecter un site d'intérêt sur un chromosome, une protéine.
- Établir/enrichir des réseaux métaboliques (enzymes), de régulation de gènes, d'interaction de protéines...
- ...

Résumé

- Domaine riche en données et problèmes se prêtant à des approches *machine learning*.
- Beaucoup de problèmes non résolus avec des applications directes très importantes.

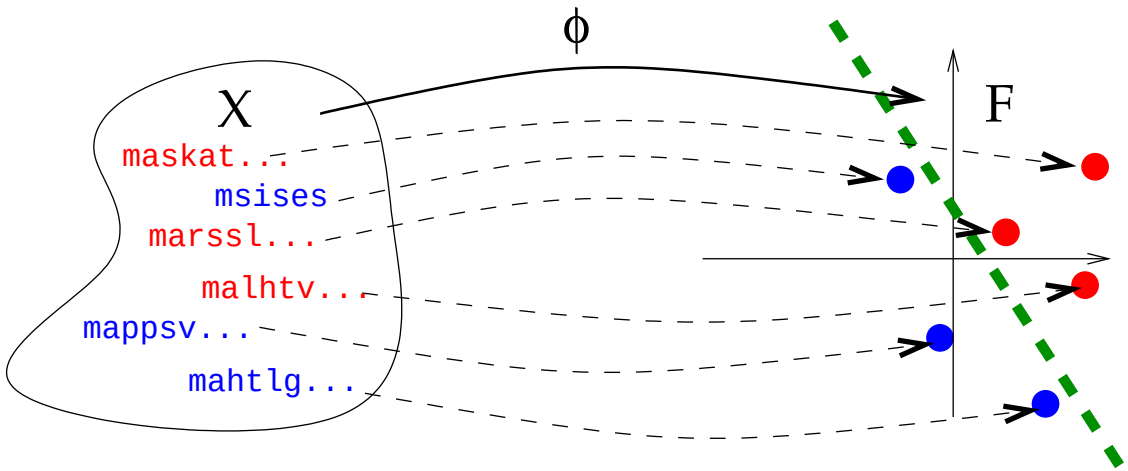
2e partie

Méthodes à noyaux

Outline

Motivation

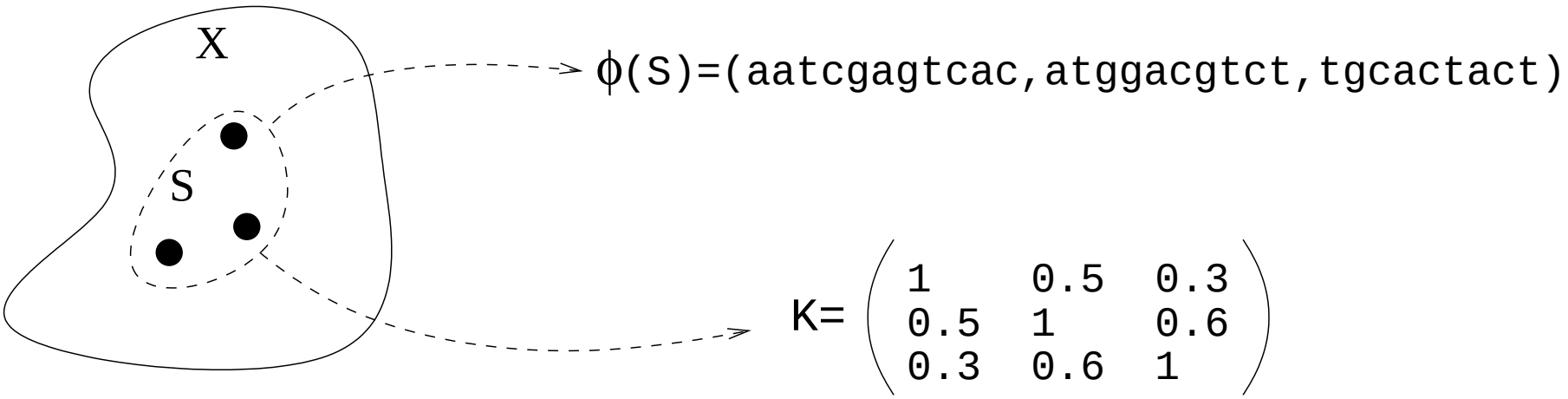
- Les algorithmes d'apprentissage (régression, KNN, réseaux de neurones, SVM...) utilisent une représentation des données.
- Il n'est pas forcément évident de décrire efficacement des données :
  - Quels descripteurs ?
  - Si on a trop de descripteurs, les calculs deviennent difficiles.
  - Un choix de descripteurs ne donne pas forcément une séparation linéaire des données.



- Les noyaux définis positifs proposent un cadre pour représenter des objets quelconques par comparaisons.

Outline

Représentation par comparaisons



Idée

- Définir une "fonction de comparaison" : $K : \mathcal{X} \times \mathcal{X} \mapsto \mathbb{R}$.
- Représenter un ensemble de n données $\mathcal{S} = \{\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \ldots, \mathbf{x}_n\}$ par la matrice $n \times n$:

$$[K]_{ij} := K(\mathbf{x}_i, \mathbf{x}_j)$$

Représentation par comparaisons

Remarques

- Quelle que soit la nature des données (vecteurs, chaines, graphes...), on a toujours un matrice $n \times n$.
- Modularité totale entre le choix de K et le choix de l'algorithme.
- Mauvais comportement quand on a beaucoup de données (n^2)
- On se restreint à une classe de fonctions K particulière : les noyaux définis positifs.

Noyaux définis positifs (d.p)

Definition

Un noyau défini positif (d.p) sur l'ensemble $\mathcal{X}$ est une fonction $K : \mathcal{X} \times \mathcal{X} \to \mathbb{R}$ symétrique :

$$\forall \left(\mathbf{x}, \mathbf{x}'\right) \in \mathcal{X}^2, \quad K\left(\mathbf{x}, \mathbf{x}'\right) = K\left(\mathbf{x}', \mathbf{x}\right),$$

satisfaisant, pour tout $N \in \mathbb{N}$, $(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \ldots, \mathbf{x}_N) \in \mathcal{X}^N$ et $(a_1, a_2, \ldots, a_N) \in \mathbb{R}^N$:

$$\sum_{i=1}^{N} \sum_{j=1}^{N} a_i a_j K\left(\mathbf{x}_i, \mathbf{x}_j\right) \geq 0.$$

Le noyau d.p le plus simple

Lemme

Soit $\mathcal{X} = \mathbb{R}^d$. La fonction $K : \mathcal{X}^2 \mapsto \mathbb{R}$ définie par :

$$\forall \left(\mathbf{x}, \mathbf{x}'\right) \in \mathcal{X}^2, \quad K\left(\mathbf{x}, \mathbf{x}'\right) = \left\langle \mathbf{x}, \mathbf{x}' \right\rangle_{\mathbb{R}^d}$$

est d.p (c'est le noyau linéaire).

Preuve

- $\langle \mathbf{x}, \mathbf{x}' \rangle_{\mathbb{R}^d} = \langle \mathbf{x}', \mathbf{x} \rangle_{\mathbb{R}^d}$,
- $\sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^N a_i a_j \langle \mathbf{x}_i, \mathbf{x}_j \rangle_{\mathbb{R}^d} = \| \sum_{i=1}^N a_i \mathbf{x}_i \|_{\mathbb{R}^d}^2 \geq 0$

Le noyau d.p le plus simple

Lemme

Soit $\mathcal{X} = \mathbb{R}^d$. La fonction $K : \mathcal{X}^2 \mapsto \mathbb{R}$ définie par :

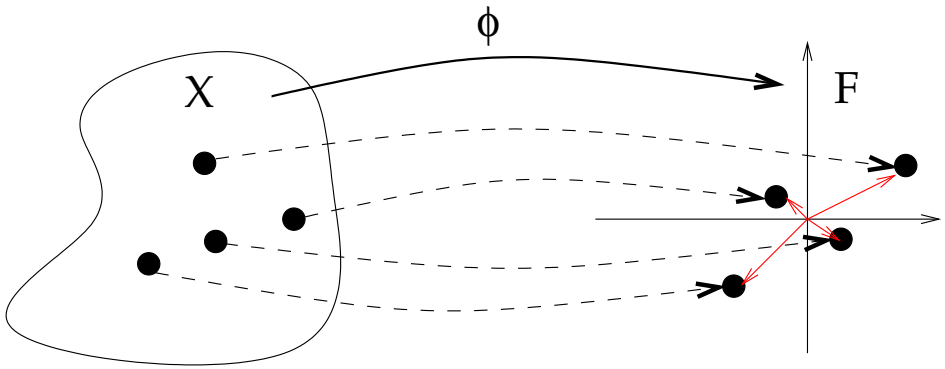
$$\forall \left(\mathbf{x}, \mathbf{x}'\right) \in \mathcal{X}^2, \quad K\left(\mathbf{x}, \mathbf{x}'\right) = \left\langle \mathbf{x}, \mathbf{x}' \right\rangle_{\mathbb{R}^d}$$

est d.p (c'est le noyau linéaire).

Preuve

- $\left\langle \mathbf{x}, \mathbf{x}' \right\rangle_{\mathbb{R}^d} = \left\langle \mathbf{x}', \mathbf{x} \right\rangle_{\mathbb{R}^d}$,
- $\sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^N a_i a_j \left\langle \mathbf{x}_i, \mathbf{x}_j \right\rangle_{\mathbb{R}^d} = \| \sum_{i=1}^N a_i \mathbf{x}_i \|_{\mathbb{R}^d}^2 \geq 0$

Un noyau d.p plus ambitieux



Lemme

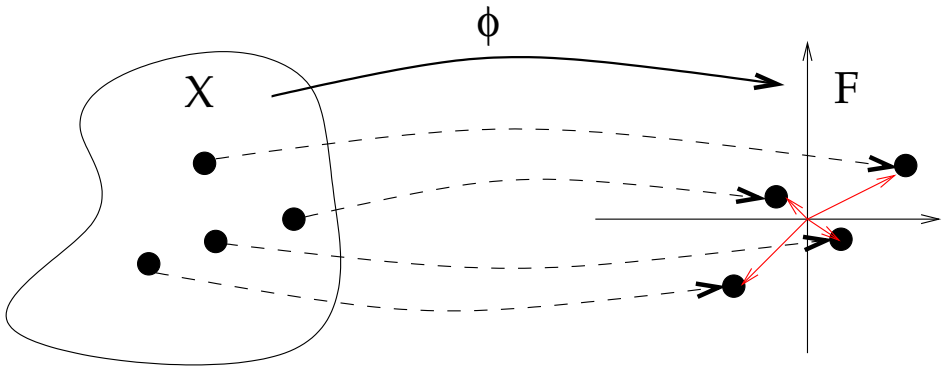
Soit $\mathcal{X}$ un ensemble quelconque, et $\Phi : \mathcal{X} \mapsto \mathbb{R}^d$. La fonction $K : \mathcal{X}^2 \mapsto \mathbb{R}$ définie comme suit est d.p :

$$\forall \left(\mathbf{x}, \mathbf{x}'\right) \in \mathcal{X}^2, \quad K\left(\mathbf{x}, \mathbf{x}'\right) = \left\langle \Phi\left(\mathbf{x}\right), \Phi\left(\mathbf{x}'\right) \right\rangle_{\mathbb{R}^d} .$$

Preuve

- $\left\langle \Phi\left(\mathbf{x}\right), \Phi\left(\mathbf{x}'\right) \right\rangle_{\mathbb{R}^d} = \left\langle \Phi\left(\mathbf{x}'\right), \Phi\left(\mathbf{x}\right)_{\mathbb{R}^d} \right\rangle$,
- $\sum_{i=1}^{N} \sum_{j=1}^{N} a_i a_j \left\langle \Phi\left(\mathbf{x}_i\right), \Phi\left(\mathbf{x}_j\right) \right\rangle_{\mathbb{R}^d} = \| \sum_{i=1}^{N} a_i \Phi\left(\mathbf{x}_i\right) \|_{\mathbb{R}^d}^2 \geq 0$.

Un noyau d.p plus ambitieux



Lemme

Soit $\mathcal{X}$ un ensemble quelconque, et $\Phi : \mathcal{X} \mapsto \mathbb{R}^d$. La fonction $K : \mathcal{X}^2 \mapsto \mathbb{R}$ définie comme suit est d.p :

$$\forall \left(\mathbf{x}, \mathbf{x}'\right) \in \mathcal{X}^2, \quad K\left(\mathbf{x}, \mathbf{x}'\right) = \left\langle \Phi\left(\mathbf{x}\right), \Phi\left(\mathbf{x}'\right) \right\rangle_{\mathbb{R}^d} .$$

Preuve

- $\left\langle \Phi\left(\mathbf{x}\right), \Phi\left(\mathbf{x}'\right) \right\rangle_{\mathbb{R}^d} = \left\langle \Phi\left(\mathbf{x}'\right), \Phi\left(\mathbf{x}\right)_{\mathbb{R}^d} \right\rangle$,
- $\sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^N a_i a_j \left\langle \Phi\left(\mathbf{x}_i\right), \Phi\left(\mathbf{x}_j\right) \right\rangle_{\mathbb{R}^d} = \| \sum_{i=1}^N a_i \Phi\left(\mathbf{x}_i\right) \|_{\mathbb{R}^d}^2 \geq 0$.

Inversement : les noyaux comme produits scalaires

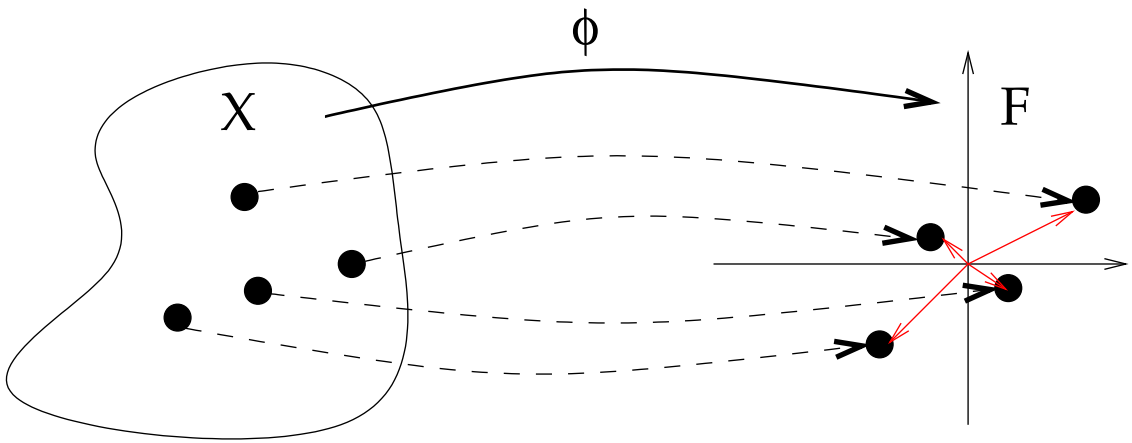
Théorème (Aronszajn, 1950)

K est un noyau d.p sur l'ensemble $\mathcal{X}$ si et seulement si il existe un espace de Hilbert $\mathcal{H}$ et un mapping

$$\Phi : \mathcal{X} \mapsto \mathcal{H} \, ,$$

tels que, pour tous $\mathbf{x}, \mathbf{x}' \in \mathcal{X}$:

$$K\left(\mathbf{x}, \mathbf{x}'\right) = \left\langle \Phi\left(\mathbf{x}\right), \Phi\left(\mathbf{x}'\right) \right\rangle_{\mathcal{H}} \, .$$



Quelques noyaux

Exemples de définitions indirectes

- Définir une description (*features*) des x et trouver une façon efficace de calculer le produit scalaire.
- Utiliser une mesure de similarité existante et vérifier qu'elle est d.p (ou la rendre d.p).

Exemples de définitions directes

- Polynomial : $K(x, x') = (xx' + 1)^d$
- Gaussien RBF : $K(x, x') = \exp\left(-\frac{\|x-x'\|^2}{2\sigma^2}\right)$
- Φ associés ?

Astuce noyau

Idée

Soit un algorithme manipulant des vecteurs de dimension finie et pouvant s'exprimer uniquement en termes de produits scalaires. Remplacer les produits scalaires par un noyau K dans l'algorithme revient implicitement à appliquer l'algorithme aux vecteurs décrits dans l'espace $\mathcal{H}_K$.

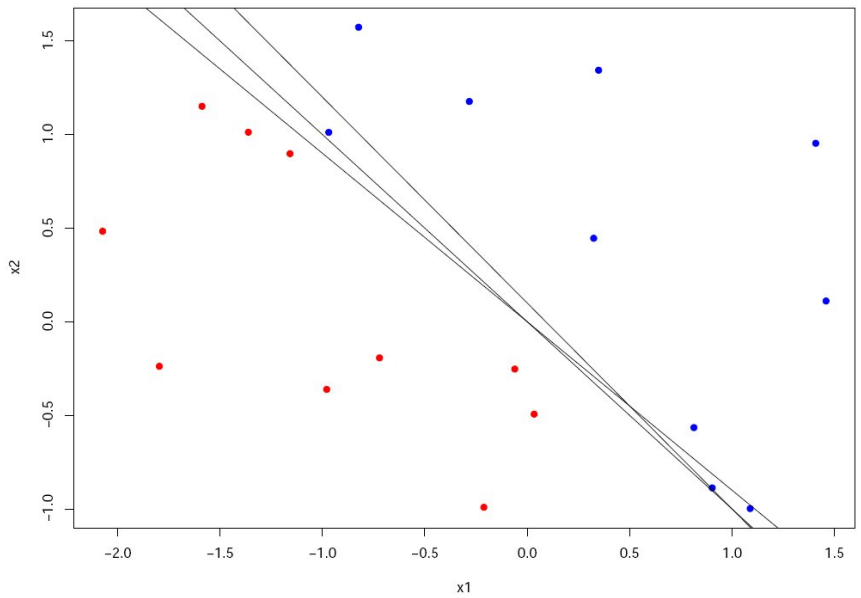
Exemple (historique) d'algorithme "kernelisable" : la SVM.

Interêts

- Pas besoin de manipuler les $\Phi(x)$ (grande dimension, voire dimension infinie), ni même d'expliciter Φ.
- Il est parfois plus facile de définir une comparaison qu'une représentation.
- Permet d'introduire de la non linéarité à peu de frais dans un algorithme.

Outline

SVM linéaire : idée



Idée

- Soient des données x_i de classes $y_i \in \{-1, 1\}$ dans un certain espace.
- Comment trouver un hyperplan séparant avec le moins d'erreur possible des nouveaux points distribués de la même manière ?
- Proposition : choisir l'hyperplan de marge maximale sur les données d'entraînement.

SVM linéaire : formalisation

Formalisation

- Si l'équation de l'hyperplan est $wx + b = 0$, alors la (demie) marge est $1/\|w\|$.
- Problème d'optimisation : minimiser $\|w\|^2$ sous les contraintes :

$$\forall i, y_i(w^T x_i + b) \geq 1$$

Cas non séparable

- Données pas toujours séparables (ou séparation parfaite n'est pas toujours souhaitable) $\Rightarrow$ introduire des variables ressort.
- Nouveau problème :

$$\begin{cases} \min\limits_{w,b,\xi} \|w\|^2 + \dfrac{C}{n}\sum\limits_{i=1}^{n} \xi_i \\ \forall i, y_i(w^T x_i + b) \geq 1 - \xi_i,\ \xi_i \geq 0 \end{cases}$$

Résolution

Résolution

- Problème quadratique, contraintes linéaires convexes.
- On résout généralement le problème dual. Pour n points $x_i \in \mathbb{R}^d$, donne un problème dans $\mathbb{R}^n$ au lieu de $\mathbb{R}^d$.
- C joue sur la régularité de la solution. Son choix est important et non trivial.
- La solution est de la forme $w = \sum_{i=1}^n \alpha_i x_i$, donc $\hat{y} = w.x + b = \sum_{i=1}^n \alpha_i \langle x_i, x \rangle + b$.
- Si on remplace le produit scalaire par un noyau K, la solution est de la forme $f = \sum_{i=1}^n \alpha_i \Phi(x_i)$, donc $\hat{y} = f(x) = \sum_{i=1}^n \alpha_i K(x_i, x) + b$.

Analyse

- Le problème s'écrit sous la forme :

$$\min_f C \sum_{i=1}^{n} L(y_i, f(x_i)) + \|f\|^2.$$

- Le premier terme favorise l'ajustement de la solution au problème, le second favorise sa régularité. C gère un compromis entre ces deux objectifs.
- Une interprétation : si la norme de f est petite, la marge de la séparation dans $\mathcal{H}$ sera grande (éventuellement au détriment de l'ajustement) $\Rightarrow$ même comportement sur de nouvelles données.
- Une autre interprétation : en limitant la norme de f, on limite la complexité de la fonction recherchée ce qui garantit une meilleure généralisation en limitant le surajustement.

3e partie

Noyaux pour structures

Outline

Motivation

- Beaucoup de problèmes en bioinformatique impliquent des données structurées, non vectorielles : molécules, protéines...
- Exemple de problème où la description des objets n'est pas triviale.
- Plusieurs noyaux intégrant l'information de structure ont été proposés.
- Remarque : pas propre à la bioinformatique (images, sorties structurées...).

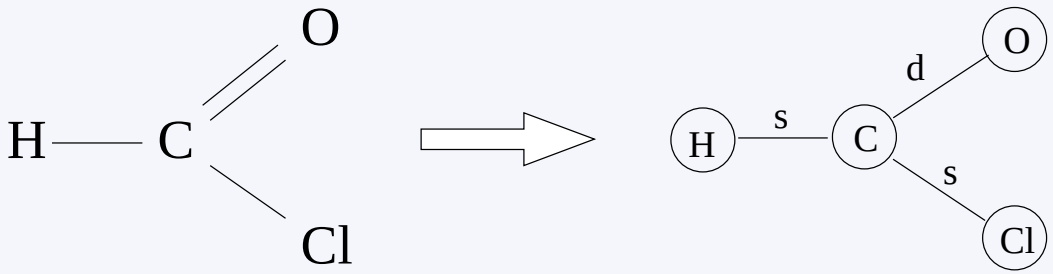
Noyaux pour molécules

- But : comparer les molécules de façon pertinente au sens du problème biologique.
- On suppose donc qu'il existe un lien entre la structure de l'objet et ses propriétés : toxicité, capacité de liaison...
- Un exemple n'utilisant que la structure 2D : le noyau pour marches.

Outline

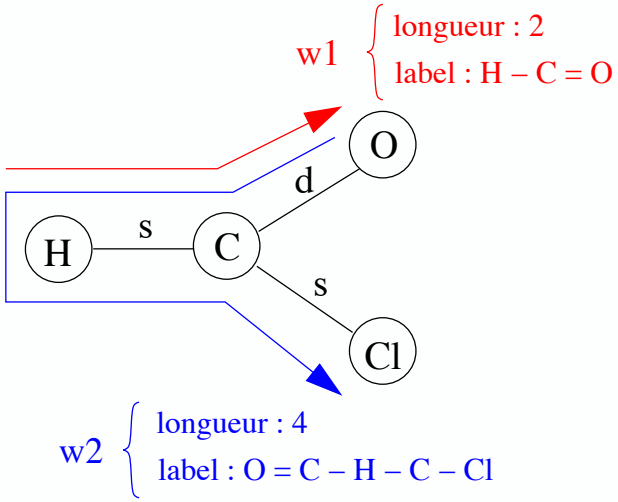
Définitions préliminaires

Graphe etiqueté : $G = (\mathcal{V}_G, \mathcal{E}_G)$, avec $l : \mathcal{V}_G \cup \mathcal{E}_G \to \mathcal{A}$



Marche sur un graphe

Séquence de noeuds connectés : $(v_0, \ldots, v_n)$ t.q. $(v_i, v_{i+1}) \in \mathcal{E}_G$

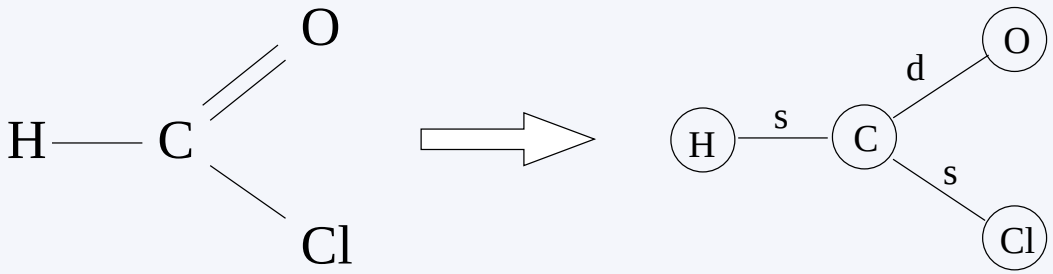


- longueur : nombre d'arêtes
- label : $l(v_0) + l(v_0, v_1) + \cdots + l(v_n)$

$\Rightarrow \mathcal{W}(G) = \{$ marches de G $\}$

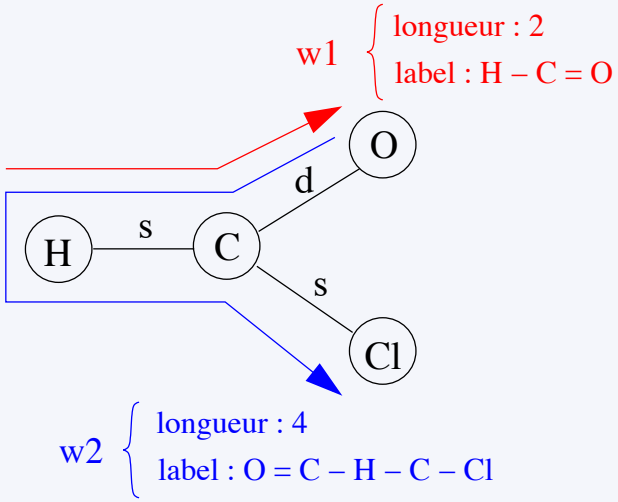
Définitions préliminaires

Graphe etiqueté : $G = (\mathcal{V}_G, \mathcal{E}_G)$, avec $l : \mathcal{V}_G \cup \mathcal{E}_G \to \mathcal{A}$



Marche sur un graphe

Séquence de noeuds connectés : $(v_0, \ldots, v_n)$ t.q. $(v_i, v_{i+1}) \in \mathcal{E}_G$



- longueur : nombre d'arêtes
- label : $l(v_0) + l(v_0, v_1) + \cdots + l(v_n)$

$\Rightarrow \mathcal{W}(G) = \{$ marches de G $\}$

Noyaux pour graphes et marches

Définition générale

$$K(G_1, G_2) = \sum_{\substack{(w_1, w_2) \in \\ \mathcal{W}(G_1) \times \mathcal{W}(G_2)}} K_{\mathcal{W}}(w_1, w_2)$$

Noyau marginalisé (Kashima et al., 2003)

$$K(G_1, G_2) = \sum_{\substack{(w_1, w_2) \in \\ \mathcal{W}(G_1) \times \mathcal{W}(G_2)}} p_{G_1}(w_1) p_{G_2}(w_2) K_{\mathcal{L}}\left(l(w_1), l(w_2)\right)$$

- $K_{\mathcal{L}}$ = noyau entre labels de marches
  - i.e., entre séquences de types d'atomes et de liaisons
- p_G = distribution de probabilité sur $\mathcal{W}(G)$
  - i.e., $\sum_{w \in \mathcal{W}(G)} p_G(w) = 1$

Noyaux pour graphes et marches

Définition générale

$$K(G_1, G_2) = \sum_{\substack{(w_1, w_2) \in \\ \mathcal{W}(G_1) \times \mathcal{W}(G_2)}} K_{\mathcal{W}}(w_1, w_2)$$

Noyau marginalisé (Kashima et al., 2003)

$$K(G_1, G_2) = \sum_{\substack{(w_1, w_2) \in \\ \mathcal{W}(G_1) \times \mathcal{W}(G_2)}} p_{G_1}(w_1) p_{G_2}(w_2) K_{\mathcal{L}}\left(l(w_1), l(w_2)\right)$$

- $K_{\mathcal{L}}$ = noyau entre labels de marches
  - i.e., entre séquences de types d'atomes et de liaisons
- p_G = distribution de probabilité sur $\mathcal{W}(G)$
  - i.e., $\sum_{w \in \mathcal{W}(G)} p_G(w) = 1$

Noyau marginalisé : paramétrisation

Noyau entre labels de marches : $K_{\mathcal{L}}$

$$K_{\mathcal{L}}(l_1, l_2) = \begin{cases} 1 & \text{si } l_1 = l_2 \ , \\ 0 & \text{sinon .} \end{cases}$$

$\Rightarrow$ noyau basé sur les marches communes

Distribution de probabilité sur les marches : p_G

Modèle de marche aléatoire du 1er ordre :

$$p_G(v_0, \ldots, v_n) = p_s^{(G)}(v_0) \prod_{i=0}^{n-1} p_t^{(G)}(v_{i+1}|v_i)$$

En pratique = modèle "uniforme" tué à chaque étape avec une probabilité p_q :

$$p_G(v_0, \ldots, v_n) = \frac{p_q}{|\mathcal{V}_G|} \prod_{i=0}^{n-1} \frac{1 - p_q}{d^-(v_i)}$$

Noyau marginalisé : paramétrisation

Noyau entre labels de marches : $K_{\mathcal{L}}$

$$K_{\mathcal{L}}(l_1, l_2) = \begin{cases} 1 & \text{si } l_1 = l_2 \ , \\ 0 & \text{sinon .} \end{cases}$$

$\Rightarrow$ noyau basé sur les marches communes

Distribution de probabilité sur les marches : p_G

Modèle de marche aléatoire du 1er ordre :

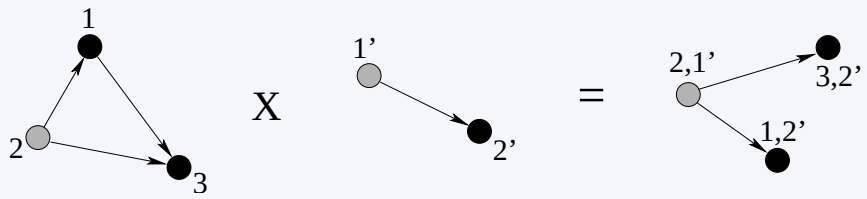
$$p_G(v_0, \ldots, v_n) = p_s^{(G)}(v_0) \prod_{i=0}^{n-1} p_t^{(G)}(v_{i+1}|v_i)$$

En pratique = modèle "uniforme" tué à chaque étape avec une probabilité p_q :

$$p_G(v_0, \ldots, v_n) = \frac{p_q}{|\mathcal{V}_G|} \prod_{i=0}^{n-1} \frac{1 - p_q}{d^-(v_i)}$$

Implémentation : introduction

Produit de graphe : $G = G_1 \times G_2$



$\Rightarrow$ bijection $\mathcal{W}(G)$ / marches communes à G_1 et G_2

Puissances de matrice d'adjacence

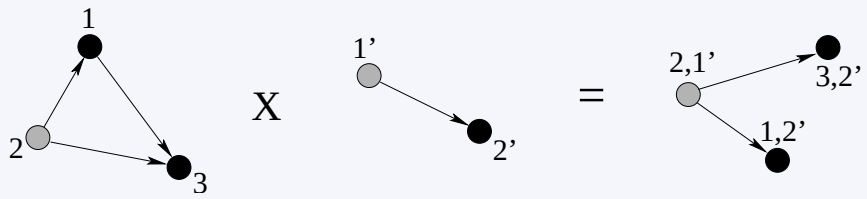
$$\text{Matrice d'adjacence : } A_G[i,j] = \begin{cases} 1 & \text{si } (v_i, v_j) \in \mathcal{E}_G \ , \\ 0 & \text{sinon .} \end{cases}$$

$\Rightarrow A_G^k[i,j] = \#$ marches $(v_i \rightarrow v_j)$ de longueur k

Π_t : même idée en "enrichissant" avec les probabilités de transition définies sur le graphe produit.

Implémentation : introduction

Produit de graphe : $G = G_1 \times G_2$



$\Rightarrow$ bijection $\mathcal{W}(G)$ / marches communes à G_1 et G_2

Puissances de matrice d'adjacence

$$\text{Matrice d'adjacence : } A_G[i,j] = \begin{cases} 1 & \text{si } (v_i, v_j) \in \mathcal{E}_G \ , \\ 0 & \text{sinon .} \end{cases}$$

$\Rightarrow A_G^k[i,j] = \#$ marches $(v_i \rightarrow v_j)$ de longueur k

Π_t : même idée en "enrichissant" avec les probabilités de transition définies sur le graphe produit.

Implémentation : calcul

Calcul du noyau

- Avec la paramétrisation précédente, on a $K(G_1, G_2) = \sum_{w \in \mathcal{W}(\mathcal{G})} \pi(w)$, où π est la distribution induite sur le graphe produit.
- Par ailleurs, on montre que $\sum_{w \in \mathcal{W}(\mathcal{G}), |w|=n} \pi(w) = \pi_s^T \Pi_t^n \mathbf{1}$.
- On peut donc calculer :

$$K(G_1, G_2) = \sum_{n=0}^{\infty} \left(\sum_{h \in \mathcal{W}(\mathcal{G}), |h|=n} \pi(h) \right) = \pi_s^T (I - \Pi_t)^{-1} \mathbf{1}$$

$\Rightarrow$ Complexité : cubique en $|\mathcal{V}_G| = \#$ paires d'atomes identiques. Peut être accéléré dans la pratique en utilisant la structure sparse de Π_t ou en ne prenant en compte que les premiers termes de la somme.

Noyau marginalisé : remarques

Noyau marginalisé

- Feature space de dimension infinie
- Expression analytique et complexité polynomiale
  - cas général : cubique en fonction du produit de la taille des graphes
  - avec marches communes : cubique en fonction du nombre de paires d'atomes identiques

Limitations en pratique

- Calcul coûteux
- Structures de marches : peu expressives + bruitées

$\Rightarrow$ Extensions pour pallier à ces limitations

Noyau marginalisé : remarques

Noyau marginalisé

- Feature space de dimension infinie
- Expression analytique et complexité polynomiale
  - cas général : cubique en fonction du produit de la taille des graphes
  - avec marches communes : cubique en fonction du nombre de paires d'atomes identiques

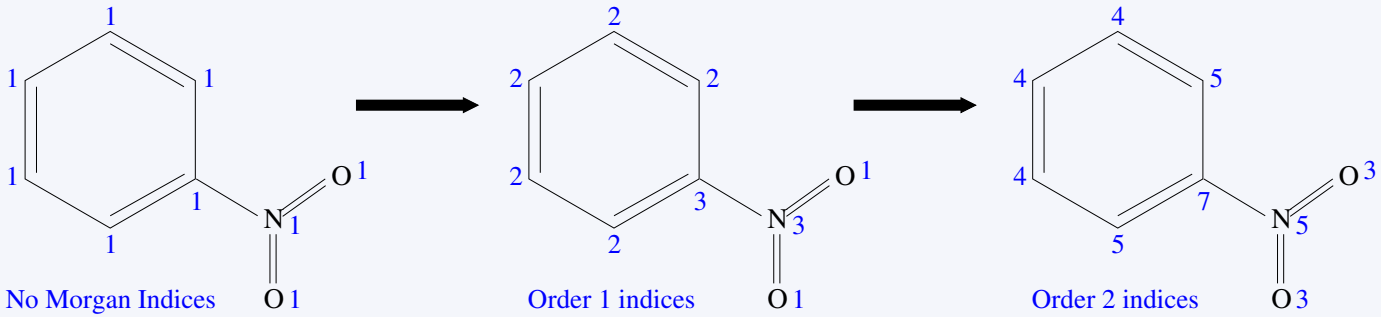
Limitations en pratique

- Calcul coûteux
- Structures de marches : peu expressives + bruitées

$\Rightarrow$ Extensions pour pallier à ces limitations

Extension

Indices de Morgan



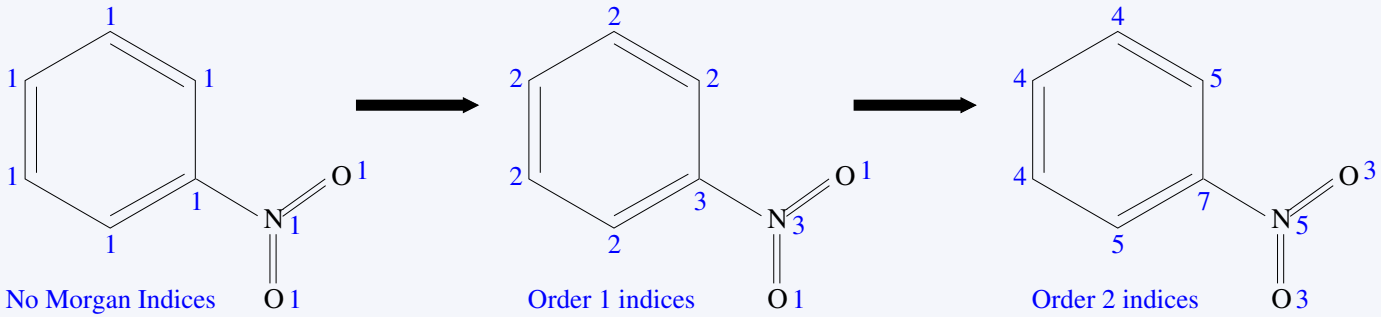
Extension = enrichir les labels

type d'atome = (type d'atome) + (indice de Morgan)

- introduction automatique d'information topologique
- avec $K_{\mathcal{L}}$ = noyau de Dirac : réduit le coût du noyau
- plusieurs niveaux de résolution

Extension

Indices de Morgan



Extension = enrichir les labels

$$\text{type d'atome} = (\text{type d'atome}) + (\text{indice de Morgan})$$

- introduction automatique d'information topologique
- avec $K_{\mathcal{L}}$ = noyau de Dirac : réduit le coût du noyau
- plusieurs niveaux de résolution

Outline

Autres noyaux pour structures

Molécules

- Basés sur des sous-graphes plus complexes que les marches (par exemple des arbres).
- Basés sur la structure 3D.

Protéines

- Basés sur des scores d'alignement existant.
- Basés sur les structures secondaires.
- Basés sur les angles entre les atomes...

Conclusion

Conclusion (1/2)

Apprentissage en bioinformatique

Beaucoup de problèmes importants nécessitent de l'apprentissage :

- Compréhension des systèmes.
- Construction d'outils de diagnostic.
- *Design* de nouvelles thérapies.

Noyaux

- Définir un noyau d.p sur des objets est équivalent à utiliser un produit scalaire sur ces objets décrits dans un certain espace de Hilbert.
- "Astuce noyau" : remplacer les produits scalaires par un noyau d.p. revient à travailler implicitement dans l'espace des descripteurs correspondant.
- Permet d'introduire facilement des non-linéarités, de travailler dans des espaces de dimension grande voire infinie...

Conclusion (2/2)

Noyaux pour structures

- Il est délicat de manipuler des données structurées, non vectorielles (molécules, protéines...).
- Définir un noyau comparant ces objets est une manière pratique d'utiliser la structure.
- Le noyau (la façon dont les structures sont comparées) peut être adapté en fonction du problème.