Université de Montréal
Département d'informatique et de recherche opérationnelle

IFT3395/6390

Fondements de l'apprentissage machine

Apprentissage non-supervisé

Réduction de dimensionalité. Modèles à variables latentes continues.

Pascal Vincent

LISA Laboratoire d'Informatique des Systèmes d'Apprentissage

Mise en contexte

Apprentissage supervisé = classification, régression

Apprentissage non supervisé = Algorithmes pour lesquels on ne distingue pas de "cible" explicite dans les données d'entraînement.

- Estimation de densité
  (ex: mélange de Gaussiennes)
- *Clustering*, partitionnement
  (ex: k-moyennes)
- Réduction de dimensionalité...

$$\hat{p}(\mathbf{x})$$

"classification non-supervisée"

La réduction de dimensionalité
Qu'est-ce que c'est?

$\mathbf{z} \in \mathbb{R}^M$

$M < D$

(0.32, -1.3, 1.2)

$\mathbf{x} \in \mathbb{R}^D$ (3.5, -1.7, 2.8, -3, 5, -1.4, 2.4, 2.7, 7.5, -3, -2)

La réduction de dimensionalité
A quoi ça peut servir?

- Compression de données (avec perte)
- Visualisation des données en 2D ou 3D
- Extraction de caractéristiques

  potentiellement +fondamentales, +explicatives, +compactes

  Prétraitement => meilleure représentation de départ pour un autre algorithme (classification ou régression).

Les algorithmes

Modèles linéaires Gaussiens

- L'Analyse en Composantes Principales (ACP ou PCA) traditionnelle
- L'ACP probabiliste
- L'analyse de facteurs *(factor analysis)*

Modèles non linéaires ou non Gaussiens

- L'ACP à Noyau (*Kernel PCA*)
- L'Analyse en Composantes Indépendantes (ICA)
- Réseaux de neurones auto-associateurs
- Modélisation de variétés *(manifold)* non-linéaires

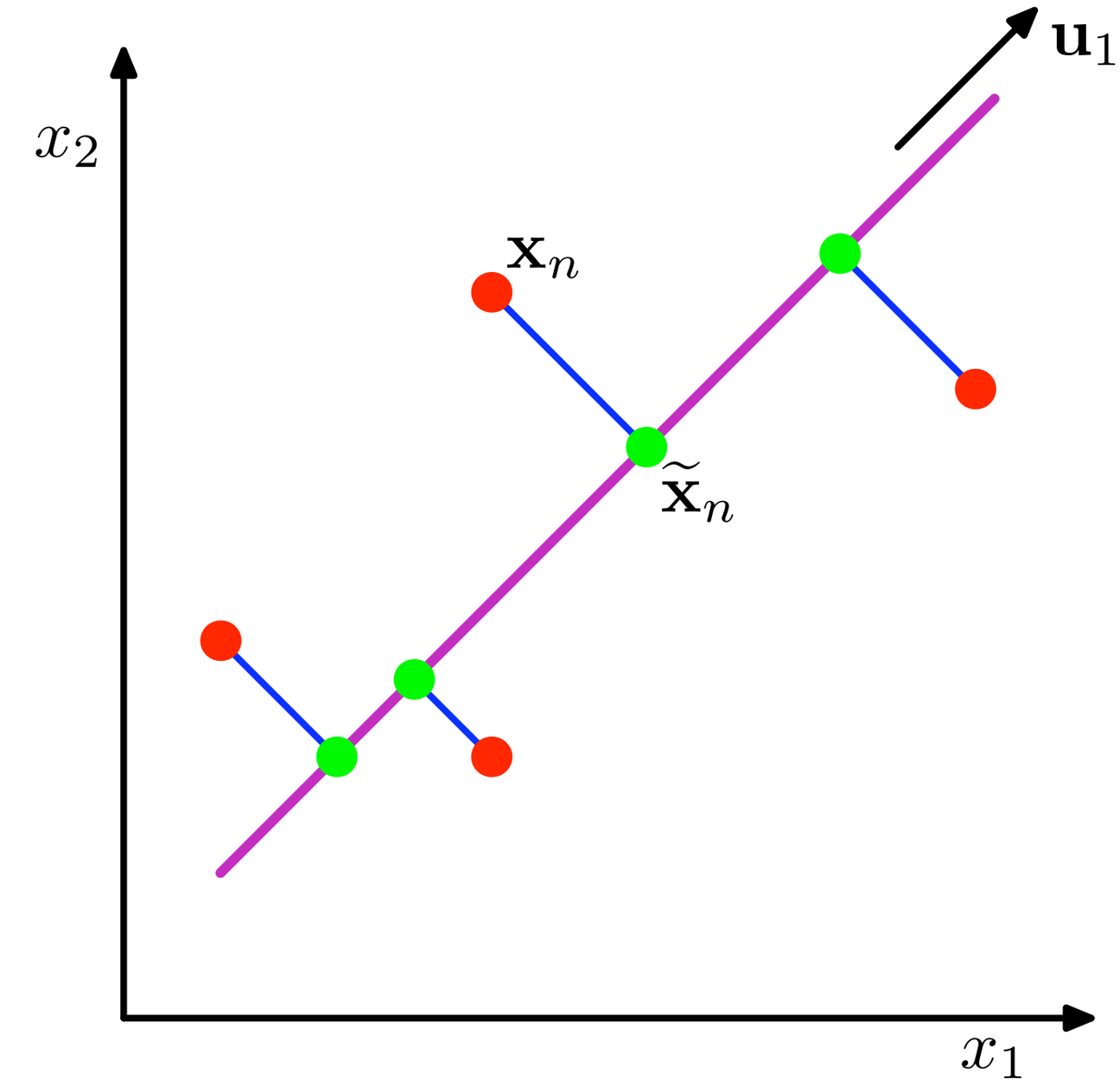
L'ACP classique

- L'ACP trouve un sous-espace linéaire qui passe proche des données: projection orthogonale de $\mathbf{x} \in \mathbb{R}^D$ sur un sous espace linéaire de plus faible dimension M.
- Les composantes z représentent les coordonnées de la projection de x dans ce sous-espace de dimension M.
- Très utilisé comme pré-traitement (extraciton de caractéristiques) ou pour la visualisation.
- Un vieil algorithme classique, 2 formulations équivalentes:
  - minimisation de l'erreur de reconstruction *(Pearson 1901)*
  - maximisation de la variance *(Hotelling 1933)*.
- La réinterprétation en tant que modèle probabiliste à variables latentes est beaucoup plus récente.

ACP: deux formulations équivalentes

On cherche les directions principales **u**: une base orthonormale du sous-espace sur lesquelles projeter les **x**

- Minimum d'erreur (de reconstruction): on minimise la moyenne des distances carrées entre les x et leur projection (lignes bleues).
- Maximum de variance: on maximise la variance le long de la direction de projection (variance des points verts)



ACP par maximisation de variance

Soit la moyenne empirique $\bar{\mathbf{x}} = \frac{1}{N}\sum_{n=1}^{N}\mathbf{x}_n$
La variance des points projetés dans la direction $\mathbf{u}_1$ est:

$$\frac{1}{N}\sum_{n=1}^{N}(\mathbf{u}_1^T\mathbf{x}_n - \mathbf{u}_1^T\bar{\mathbf{x}})^2 = \mathbf{u}_1^T\mathbf{S}\mathbf{u}_1$$

où $\mathbf{S}$ est la matrice de covariance empirique.

$$\mathbf{S} = \frac{1}{N}\sum_{n=1}^{N}(\mathbf{x}_n - \bar{\mathbf{x}})(\mathbf{x}_n - \bar{\mathbf{x}})^T$$

Maximiser sous la contrainte $\|\mathbf{u}_1\|^2 = \mathbf{u}_1^T\mathbf{u}_1 = 1$
(multiplicateur de Lagrange) donne:

$$\begin{aligned}\mathbf{S}\mathbf{u}_1 &= \lambda_1\mathbf{u}_1\\ \mathbf{u}_1^T\mathbf{S}\mathbf{u}_1 &= \lambda_1\end{aligned}$$

donc la variance est maximale quand $\mathbf{u}_1$ est le vecteur propre correspondant à la plus grande valeur propre λ_1.

ACP par maximisation de variance

- Une fois trouvée la première direction principale, on peut trouver incrémentalement la 2ème et ainsi de suite, en se restreignant aux directions orthogonales à toutes les précédentes.
- La formulation par minimisation d'erreur donne les mêmes directions principales.

ACP: procédure générale simple

La base orthonormale U qu'on obtient est constituée des M premiers vecteurs propres de la matrice de covariance empirique S (ceux correspondant aux M plus grandes valeurs propres).

Calcul de la matrice de covariance: $\mathbf{S} = \frac{1}{N}\sum_{n=1}^{N}(\mathbf{x}_n - \bar{\mathbf{x}})(\mathbf{x}_n - \bar{\mathbf{x}})^T$

Décomposition en vecteurs propres: $\mathbf{S} = \mathbf{U}\mathbf{\Lambda}\mathbf{U}^T$

$$\mathbf{\Lambda} = \begin{pmatrix} \lambda_1 & & 0 \\ & \ddots & \\ 0 & & \lambda_d \end{pmatrix}$$

On ne conserve que les M premiers vecteurs propres: $\mathbf{S} \approx \mathbf{U}_M \mathbf{\Lambda}_M \mathbf{U}_M^T$

Extraction des M composantes principales pour un exemple $\mathbf{x}$ (projection sur les *M* directions principales)

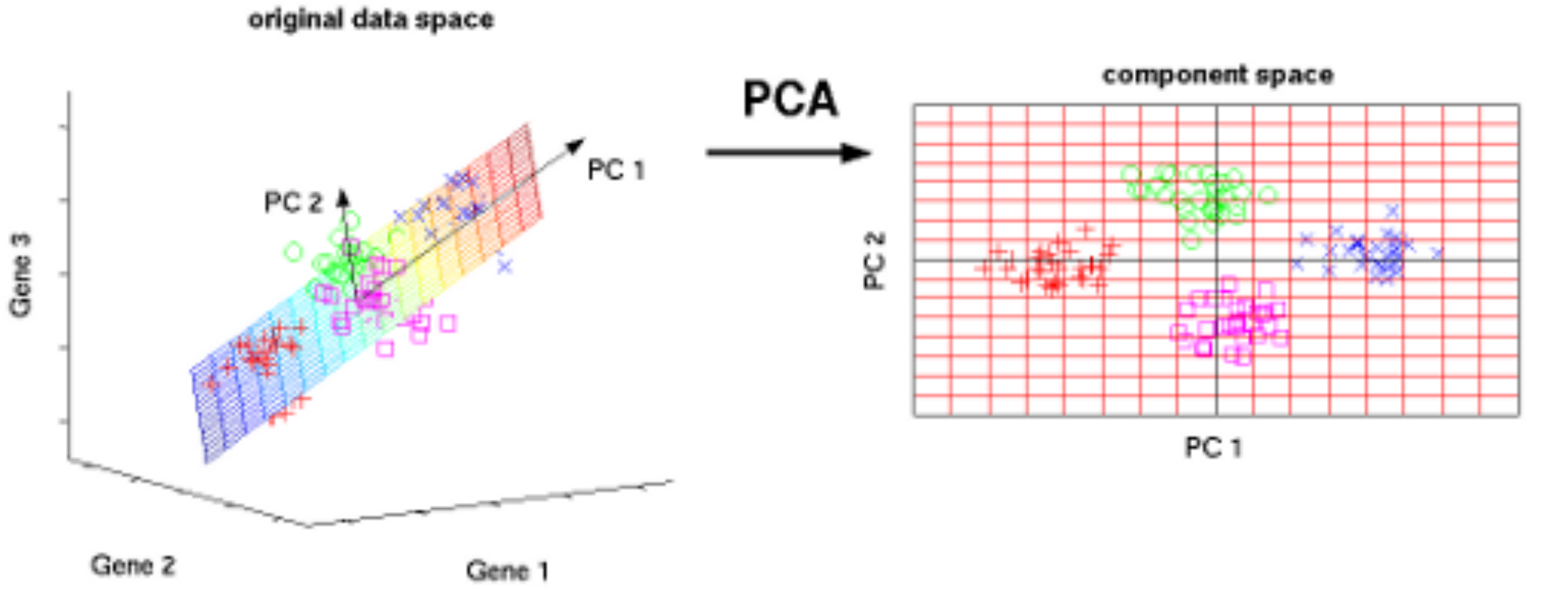
$$\mathbf{z}(\mathbf{x}) = \mathbf{\Lambda}_M^{-\frac{1}{2}} \mathbf{U}_M^T (\mathbf{x} - \bar{\mathbf{x}})$$

- Le prétraitement par ACP, permet d'obtenir des composantes $\mathbf{z}$ "normalisées" c.a.d. décorellées et de variance unitaire

- On peut projeter sur les directions principales pour fins de visualisation 2D ou 3D.

Reconstruction (à partir des *M* composants principales): $\mathbf{x} \approx \mathbf{U}_M(\Lambda_M^{\frac{1}{2}}\mathbf{z}) + \bar{\mathbf{x}}$

Ex PCA: D=3 → M=2



Source: http://www.nlpca.org/pca_principal_component_analysis.html

ACP et normalization

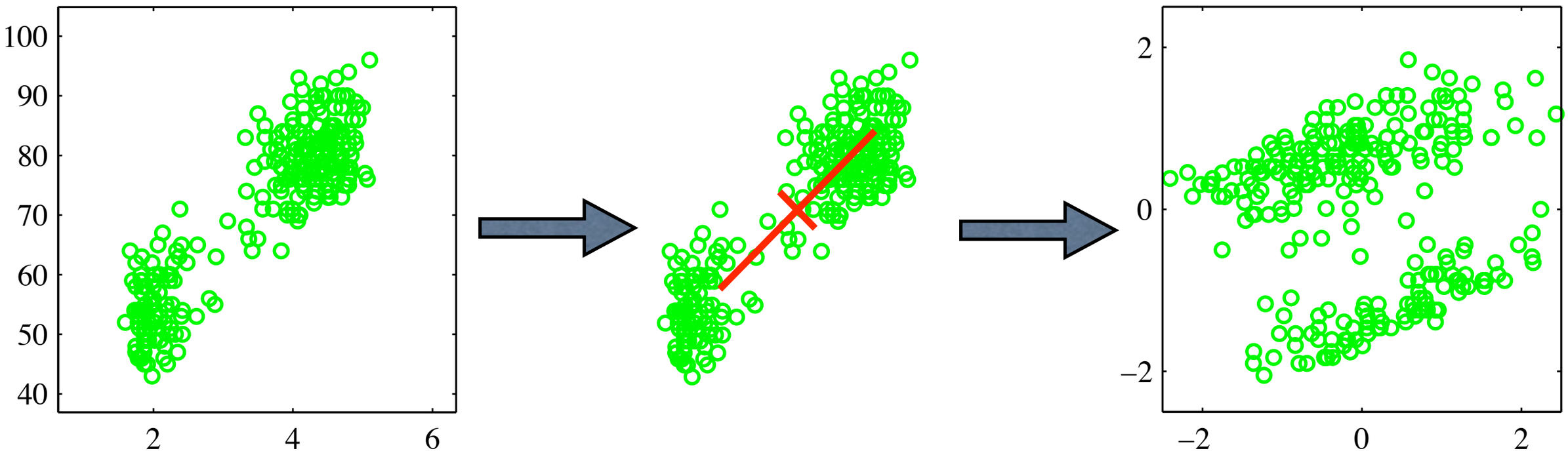
données de départ

directions principales

(intervalle $\pm\lambda_i^{1/2}$ *)*

données prétraitées

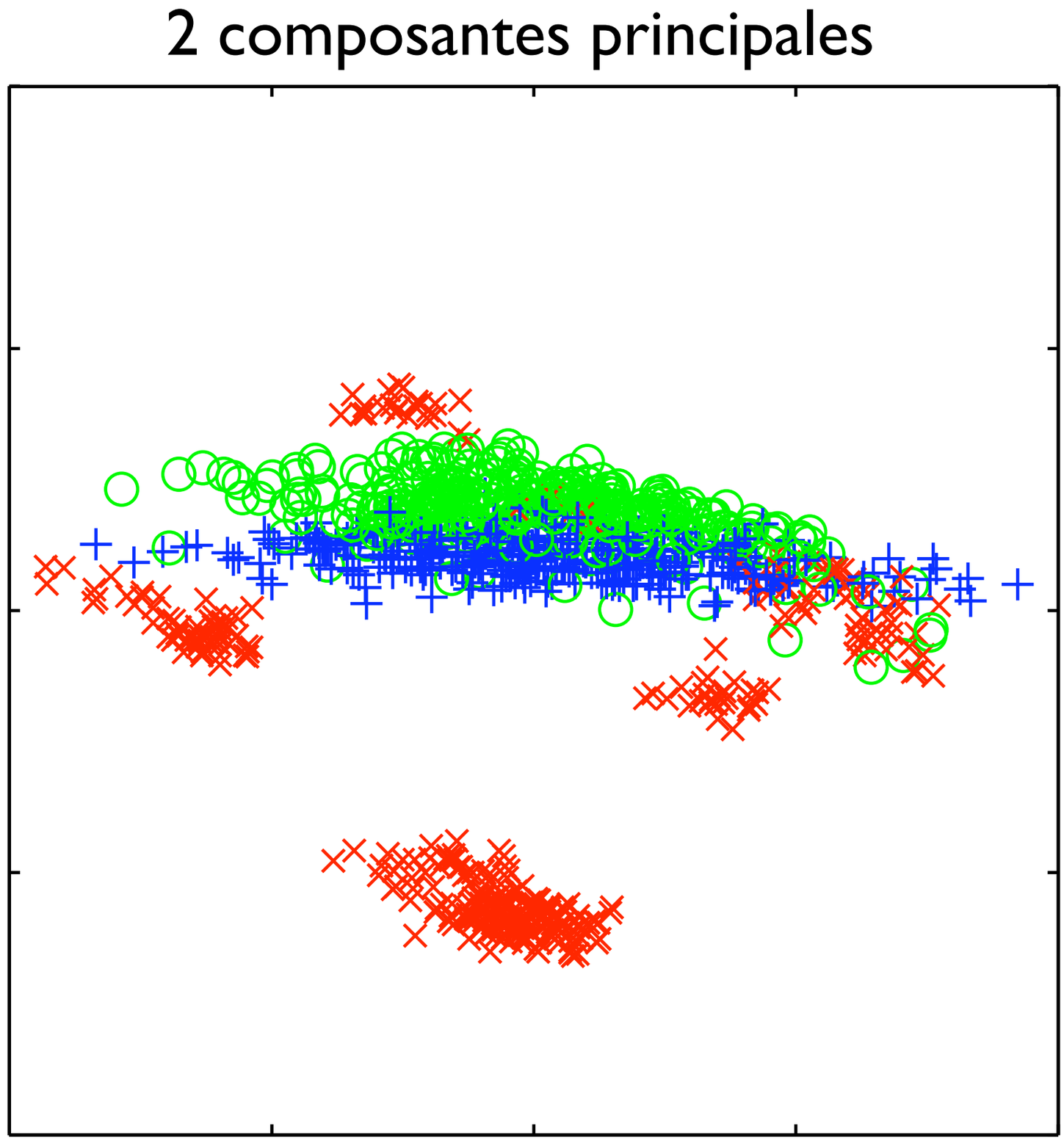
(cov = I)



On aurait pu aussi ne conserver que la première composante principale.

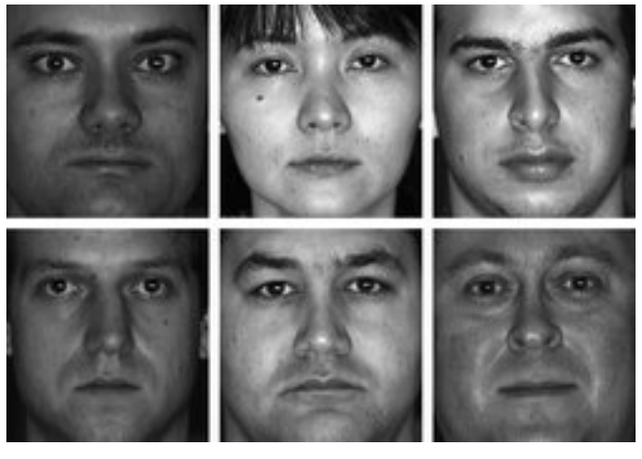
ACP pour visualisation

Données de départ
en haute dimension



Ex: eigenfaces

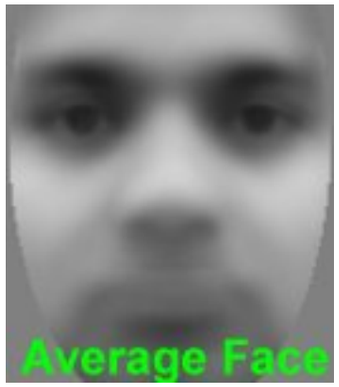
Ensemble de données de visages

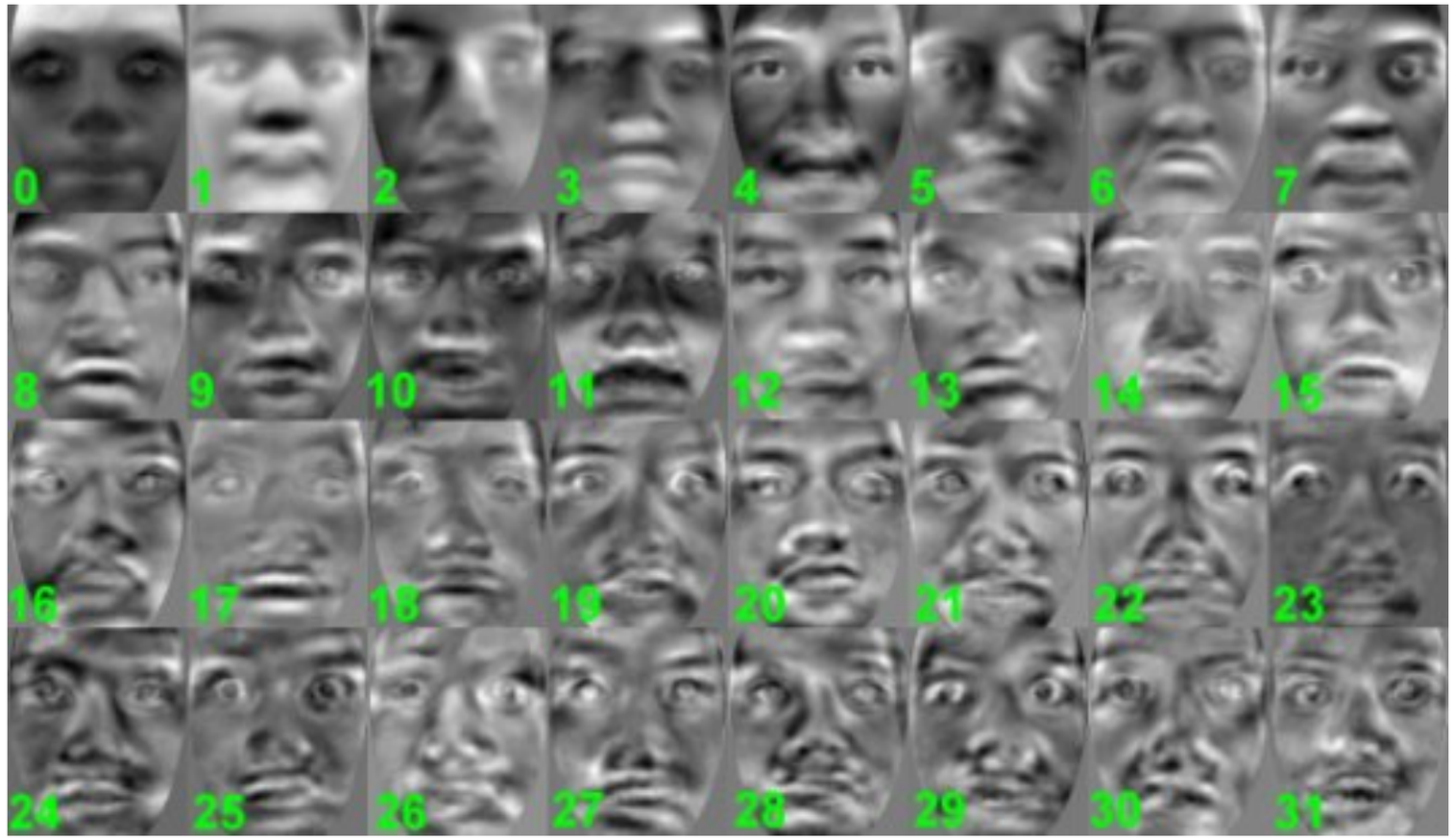


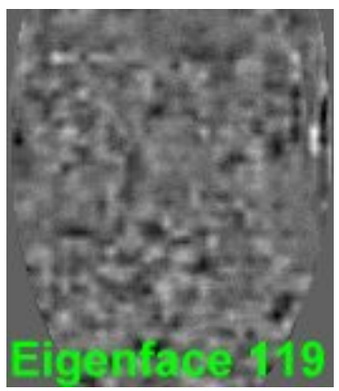
etc …

Chaque exemple est un vecteur de dimension d

La base des 31 premiers vecteurs propres:







http://www.shervinemami.info/faceRecognition.html

ACP à Noyau *(Kernel PCA)*

- La transformation apprise par l'ACP est linéaire. Une version non-linéaire peut s'obtenir en appliquant l'ACP sur les données transformées par une transformation non linéaire ϕ.

- Les données ainsi transformées ont une matrice de covariance

$$\mathbf{C} = \frac{1}{N}\sum_{n=1}^{N}\phi(\mathbf{x}_n)\phi(\mathbf{x}_n)^T$$

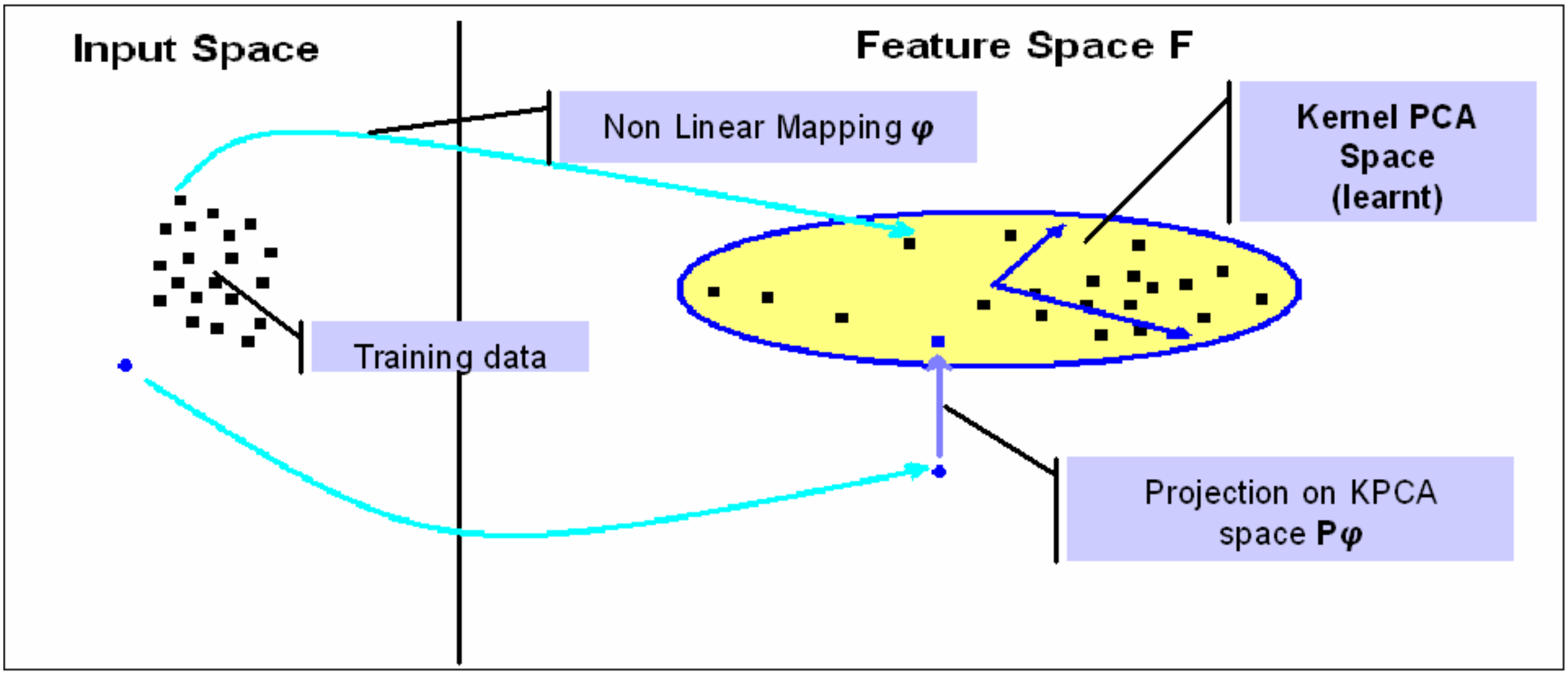
- Et les vecteurs propres dans l'espace transformé sont donnés par $\mathbf{C}\mathbf{v}_i = \lambda_i \mathbf{v}_i$ et peuvent s'exprimer sous la forme

$$\mathbf{v}_i = \sum_{n=1}^{N} a_{in}\phi(\mathbf{x}_n)$$

- Avec un noyau k, on peut utiliser l'astuce du noyau pour calculer les produits scalaires dans l'espace transformé sans jamais avoir à faire la transformation explicitement:

$$\phi(\mathbf{x}_n)^T\phi(\mathbf{x}_m) = k(\mathbf{x}_n, \mathbf{x}_m)$$

ACP à noyau
Illustration du principe



ACP à Noyau *(Kernel PCA)*

- L'astuce du noyau permet de trouver les vecteurs de coefficiens $\mathbf{a}_i = (a_{1i}, \ldots, a_{ni})^T$ représentant les vecteurs propres en solutionnant le problème de vecteurs propres suivant

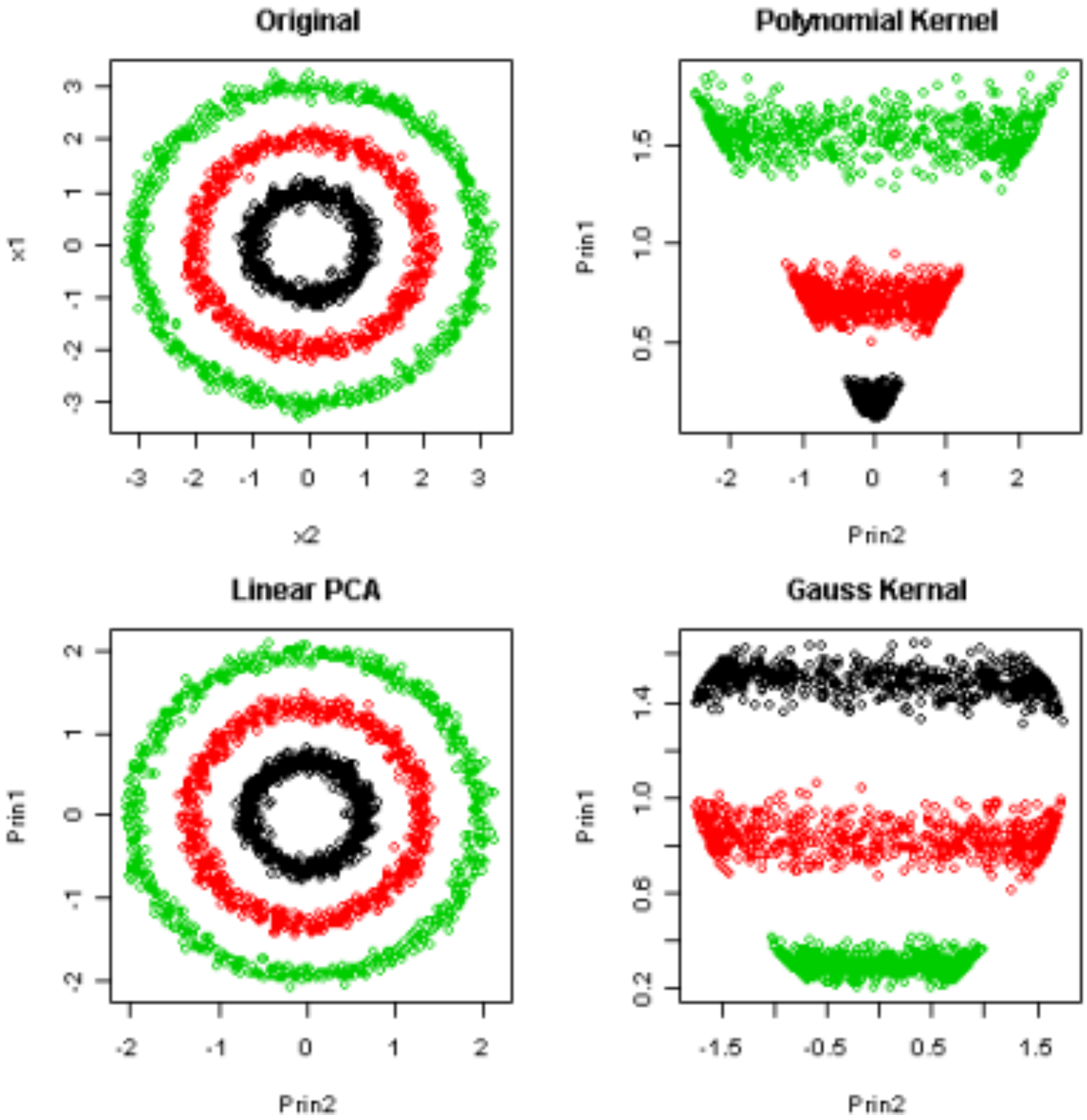
$$\mathbf{K}\mathbf{a}_i = \lambda_i N \mathbf{a}_i \text{ où } \mathbf{K} \text{ est la matrice de Gram:}$$
$$\mathbf{K}_{nm} = k(\mathbf{x}_n, \mathbf{x}_m) = \phi(\mathbf{x}_n)^T \phi(\mathbf{x}_m)$$

- On peut ensuite facilement calculer les projections donnant les composantes principales

$$z_i(\mathbf{x}) = \phi(\mathbf{x})^T \mathbf{v}_i = \sum_{n=1}^{N} a_{in} \phi(\mathbf{x})^T \phi(\mathbf{x}_n) = \sum_{n=1}^{N} a_{in} k(\mathbf{x}, \mathbf{x}_n)$$

- Remarque: si on veut d'abord centrer les données transformées, il faut utiliser une matrice de Gram corrigée (voir Bishop 12.3)

ACP à noyau, ex:



source: http://programmingsas.wordpress.com/page/3/

Inconvénients de l'ACP à Noyau

- Il faut calculer la décomposition en vecteurs et valeurs propres d'une une matrice de Gram NxN plutôt que d'une matrice DxD. Or généralement N>>D.
  => Peu utilisé en pratique pour de vraies données car trop coûteux.

- Si on conserve seulement les quelques premières composantes principales, on ne peut pas trouver de point correspondant (la projection sur l'hyperplan) dans l'espace de départ.

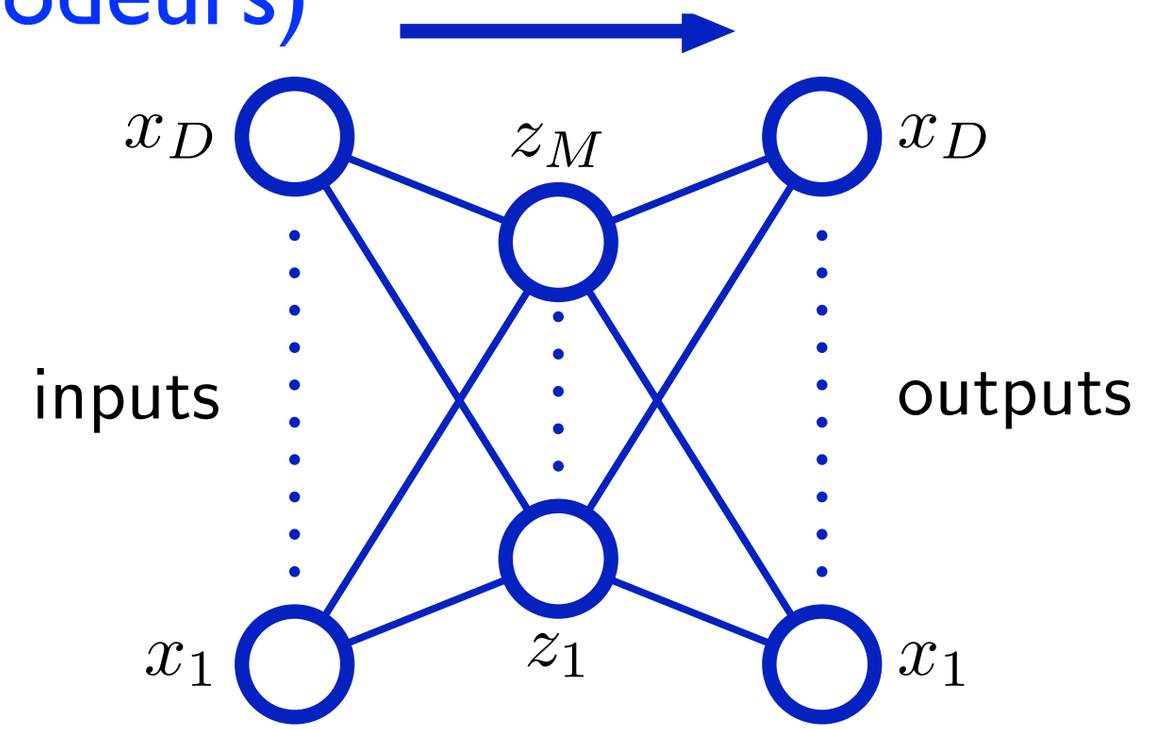
Explication: le point projeté sur l'hyperplan existe bien dans l'espace transformé, mais n'a pas de pré-image correspondante dans l'espace de départ.

Réseaux de neurones auto-associateurs

(ou auto-encodeurs)

- Un réseau de neurones de type MLP est entraîné à reproduire son entrée (cible=observations)

- La couche cachée est choisie de dimension $M<D$. Ceci entraîne des erreurs de reconstruction, que l'entraînement cherche à minimiser.



- On obtient une représentation de dimension réduite au niveau de la couche cachée.

- Si le réseau est linéaire, ou s'il n'a qu'une couche cachée (même non-linéaire) c'est équivalent à la PCA (les poids des M neurones cachés définissent le même sous-espace que la PCA à M composantes).

- S'il y a plusieurs couches cachées avec des non-linéarités c'est une méthode de réduction de dimensionalité non-linéaire.

Préalable à ce qui suit...

Voir cours sur modèles graphiques probabilistes

Plus particulièrement la partie «histoire générative»

Modèles à variables latentes **continues** ???

(Bishop, chap. 12)

- variable observée (visible): $\mathbf{x} \in \mathbb{R}^D$
- variable latente (cachée): $\mathbf{z} \in \mathbb{R}^M$
- à chaque x correspond un z différent
  (contrairement aux paramètres du modèle, les mêmes pour tout x)
  - on peut voir z comme étant une *"explication"* de x

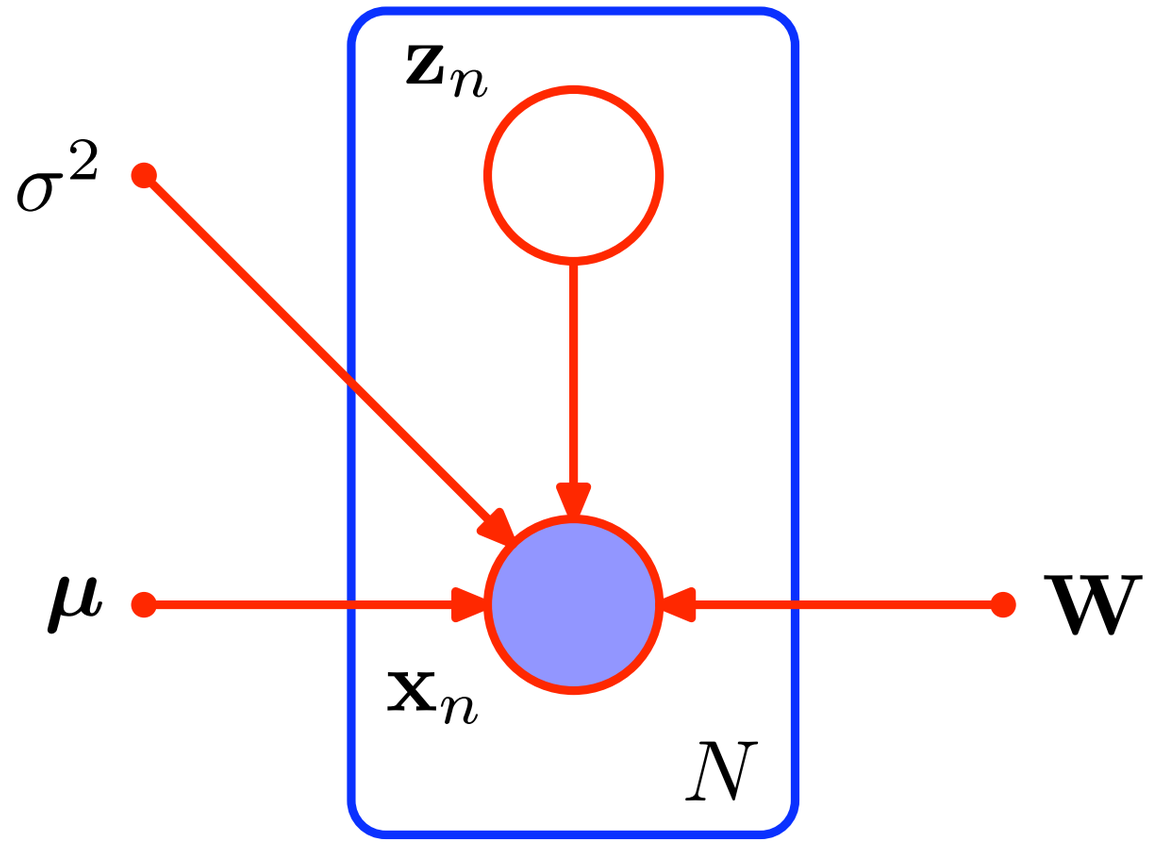
Vous avez peut-être déjà vu un modèle à variable latente **discrète** (z discret):

- Le mélange de Gaussiennes!
- z indique... à quel groupe (cluster) x appartient.

ACP probabiliste: un modèle génératif simple

- $\mathbf{z} \sim \mathcal{N}(0, \mathbf{I}_M)$
- $\mathbf{x} = \mathbf{W}\mathbf{z} + \mu + \epsilon$

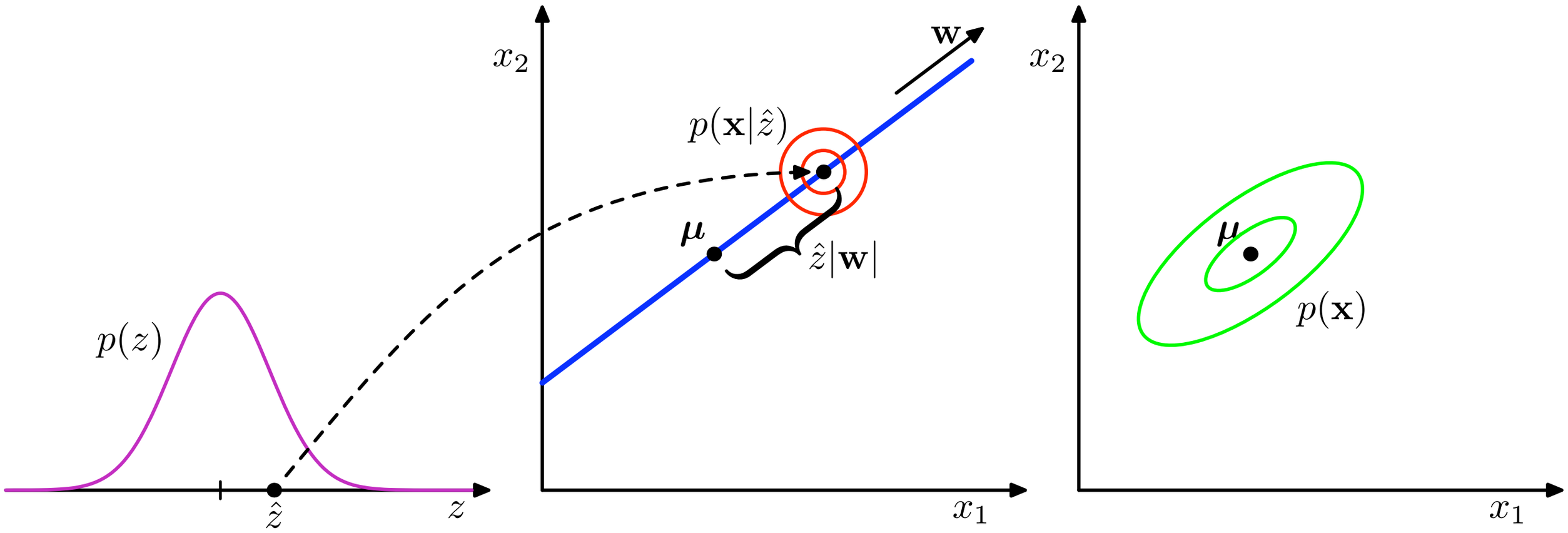
avec $\mu \in \mathbb{R}^D$,
$\mathbf{W}$ une matrice $D \times M$,
$\epsilon \sim \mathcal{N}(0, \sigma^2 \mathbf{I}_D)$
et $\mathbf{I}_D$ la matrice identité $D \times D$.



Cela correspond à $p(\mathbf{x}|\mathbf{z}) = \mathcal{N}(\mathbf{x}|\mathbf{W}\mathbf{z} + \mu, \sigma^2 \mathbf{I}_D)$

Contrairement à la PCA classique, on définit ainsi un vrai modèle de densité p(x).

ACP probabiliste: illustration du processus générateur



- **W** spécifie un ensemble de directions, μ est la moyenne des données et le vecteur de variables latentes **z** indique de combien on doit se déplacer à partir de la moyenne dans chaque direction.

- **x** est finalement généré en y ajoutant un bruit Gaussien sphérique.

Apprentissage des paramètres du modèle d'ACP probabiliste

Soit par maximisation directe de la vraisemblance

- On peut apprendre les paramètres en maximisant la vraisemblance du modèle étant donné l'ensemble de données $\mathbf{X}$:

$$\log p(\mathbf{X}|\mathbf{W}, \mu, \sigma^2) = -\frac{N}{2}[D\log(2\pi) + \log|\mathbf{C}| + Tr(\mathbf{C}^{-1}\mathbf{S})]$$
$$\text{avec } \mathbf{C} = \mathbf{W}\mathbf{W}^T + \sigma^2\mathbf{I}.$$

- Ceci admet une solution analytique: $\mathbf{W} = \mathbf{U}(\Lambda - \sigma^2\mathbf{I})^{1/2}\mathbf{R}$
- $\mathbf{R}$ est une matrice de rotation arbitraire. Donc $\mathbf{W}$ n'est la projection de la PCA classique (avec prise en compte des variances) qu'à une rotation près.
- Donc l'ACP probabiliste trouve le même sous-espace principal que la PCA classique, mais pas nécessairement les mêmes composantes.

Soit avec l'algorithme EM (voir Bishop)

Analyse de facteurs
(factor analysis, FA)

- L'Analyse de Facteurs correspond à un modèle génératif très semblable (un peu plus riche) que la PCA probabiliste.

- La seule différence est que le bruit Gaussien final ajouté est diagonal plutôt que sphérique.

$$p(\mathbf{x}|\mathbf{z}) = \mathcal{N}(\mathbf{x}|\mathbf{W}\mathbf{z} + \mu, \Psi) \qquad \mathbf{\Psi} = \begin{pmatrix} \psi_1 & & 0 \\ & \ddots & \\ 0 & & \psi_D \end{pmatrix}$$

- PCA probabiliste = cas particulier où $\mathbf{\Psi} = \sigma^2 \mathbf{I}_D$

- La distribution marginale des x est une Gaussienne
  (avec une paramétrisation de faible rang de sa covariance)

$$p(\mathbf{x}) = \int p(\mathbf{x}|\mathbf{z})p(\mathbf{z})\mathrm{d}\mathbf{z} = \mathcal{N}(\mathbf{x}|\mu, \mathbf{W}\mathbf{W}^T + \Psi)$$

Comment choisir le nombre de composantes?

- Soit en se basant sur la log vraisemblance obtenue sur un ensemble de validation.
- Soit en adoptant une approche Bayesienne en précisant des distributions à priori pour chacun des paramètres $\mu, \mathbf{W}, \sigma^2$ *(voir Bishop 12.2.3)*

L'Analyse en Composantes Indépendantes
(Independent Component Analysis ICA)

ICA vu comme modèle génératif à variables latentes continues

- Similaire à ACP probabiliste ou analyse de facteurs, mais la distribution sur les variables latentes (les composantes) est non Gaussienne, et factorielle, ce qui correspond à avoir des composantes indépendantes:

$$p(z) = \prod_{j=1}^{M} p(z_j)$$

mais où les $p(z_j)$ ne sont pas Gaussiens

- Tout comme dans ACP probabiliste, les observations x résultent d'une transformation linéaire des z (+ bruit)

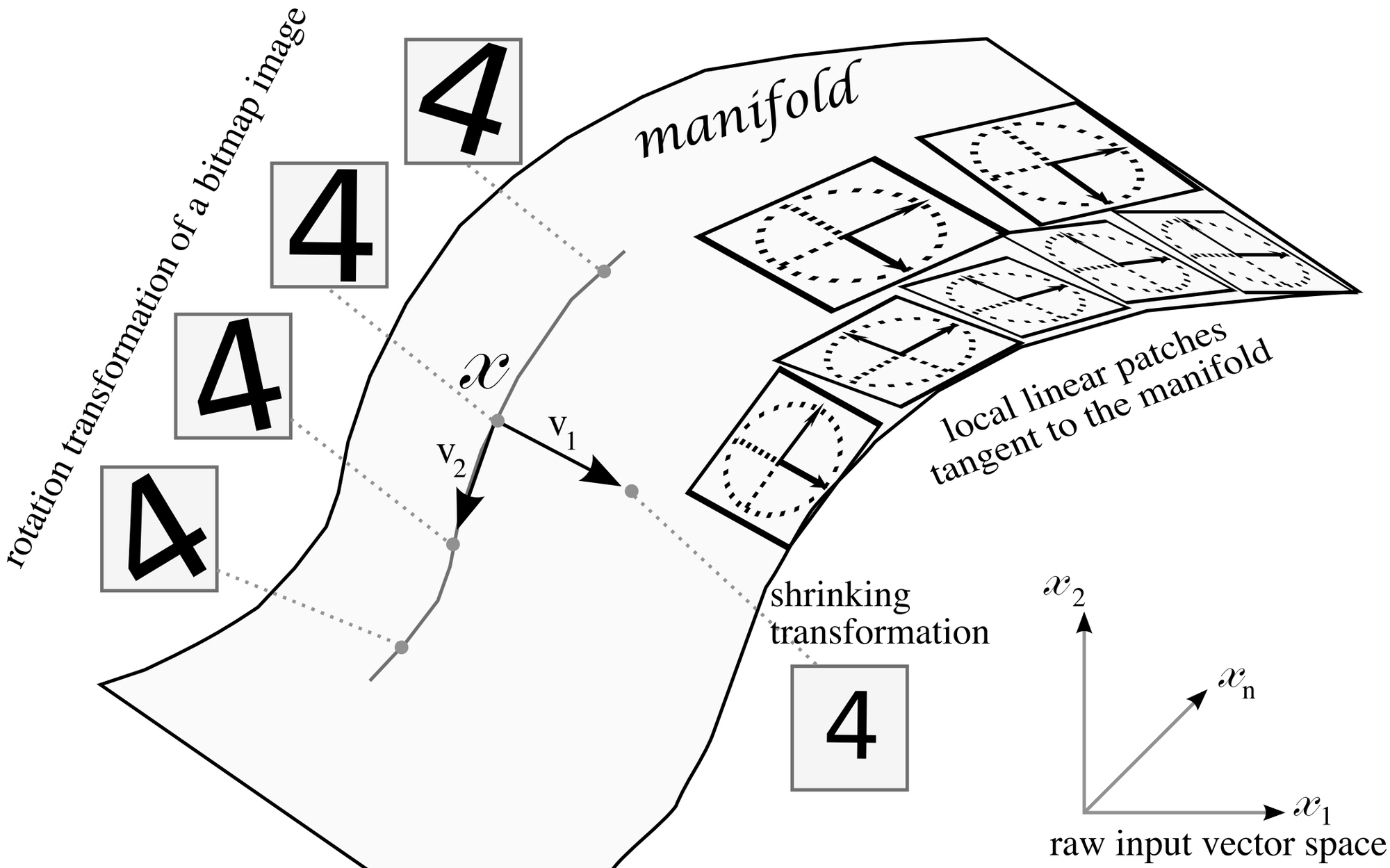
$$\mathbf{x} = \mathbf{W}\mathbf{z} + \mu + \epsilon \quad \text{(dans la version originale, M=D et } \epsilon = 0, \quad \mu = 0\text{)}$$

Il y a beaucoup d'autres façons de voir ICA, notamment comme la maximization de l'information mutuelle $I(x,z)$.

L'hypothèse de variété *(manifold hypothesis)*

une motivation géométrique pour la réduction de dimensionalité

degrés de variabilité dans les données semble < D



Modélisation de variétés

- On peut modéliser une variété non-linéaire par un mélange de modèles linéaires, par ex. un mélange d'analyses de facteurs.
- Autres méthodes de réduction de dimensionalité:
  - Multidimensional Scaling (MDS)
  - Locally Linear Embedding (LLE)
  - Isometric Feature Mapping (Isomap)
  - t-Distributed Stochastic Neighbor Embedding (t-SNE)
  - ...

Questions ouvertes

- Pour apprendre une bonne représentation: réduction de dimensionalité ou augmentation (+*sparsité*) ?
- ...