Fondements de l'apprentissage machine

Automne 2014

Roland Memisevic

Leçon 3

Plan

- Classification linéaire
- Modèles discriminatifs, régression logistique
- Modèles génératifs, Bayes naïf

Classification linéaire

$$\mathbf{x} \rightarrow t$$

- Les sorties, t, sont discrètes et peuvent prendre K valeurs possibles $\mathcal{C}_1, \ldots, \mathcal{C}_K$.
- Tâche : Apprendre à prédire t pour des nouveaux $\mathbf{x}$.
- Un problème d'apprentissage supervisé.
- Comme pour la régression linéaire, la linéarité rend la tâche simple.
- Mais «linéaire» veut dire autre chose que dans le cas de la régression linéaire.

Discriminatif vs génératif

$$\mathbf{x} \rightarrow t$$

- Il existe principalement deux types de solutions.
- Les méthodes discriminatives essaient d'apprendre directement une fonction $y(\mathbf{x})$.
- Les méthodes génératives apprennent un modèle pour représenter chaque classe $\mathcal{C}_k$ (par exemple, des distributions $p(\mathbf{x}|t)$). Puis, la classification revient à "inverser" ce modèle (par exemple, en calculant $p(t|\mathbf{x})$)

Fonctions discriminantes

- Dans le cas $K = 2$, on peut définir :

Classification linéaire (deux classes)

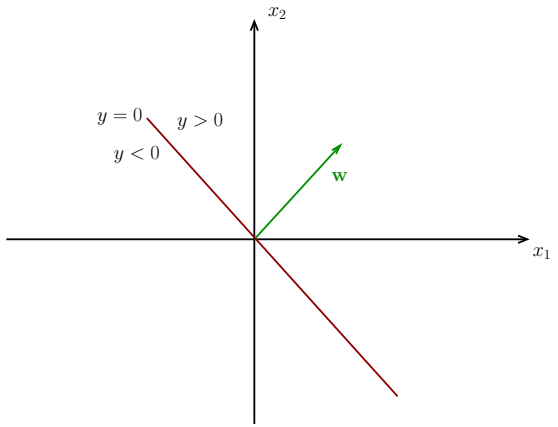
- En utilisant la **fonction discriminante**

$$y(\mathbf{x}) = \mathbf{w}^{\mathrm{T}}\mathbf{x} + w_0$$

avec les paramètres $\mathbf{w}, w_0$, attribuez $\mathbf{x}$ à la classe $\mathcal{C}_1$ si $y(\mathbf{x}) \geq 0$, et à la classe $\mathcal{C}_2$ autrement.

- L'apprentissage revient à ajuster les paramètres $\mathbf{w}$ et w_0.

Une interprétation géométrique



- Cette règle correspond à une frontière linéaire.
- En $D > 2$ dimensions, il s'agit d'un hyperplan de dimension $(D - 1)$.
- (Ici $w_0 = 0$)

Le biais

- Le biais, w_0, nous permet de déplacer la frontière de sorte qu'elle ne passe pas par l'origine.
- Comme dans le cas de la régression linéaire, nous pouvons l'éliminer formellement :

$$\begin{pmatrix} x_1 \\ \vdots \\ x_D \end{pmatrix} \rightarrow \begin{pmatrix} 1 \\ x_1 \\ \vdots \\ x_D \end{pmatrix}$$

- Ici (pour la classification), w_0 agit comme un **seuil** négatif.

Plusieurs classes

- Pour le cas $K \geq 2$, on peut définir :

Classification linéaire multi-classe

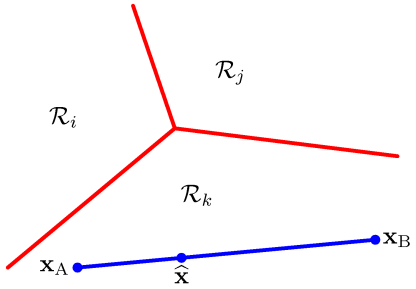
- En utilisant K **fonctions discriminantes**

$$y_k(\mathbf{x}) = \mathbf{w}_k^{\mathrm{T}}\mathbf{x} + w_{k0}$$

avec les paramètres $\mathbf{w}_k, w_{k0} \ , k = 1 \ldots K$, attribuez $\mathbf{x}$ à la classe $\mathcal{C}_k$ si $y_k(\mathbf{x}) > y_j(\mathbf{x}) \ \ \forall j \neq k$

- Nous pouvons aussi définir un modèle 2-classe de cette façon.

Plusieurs classes : une interprétation géométrique



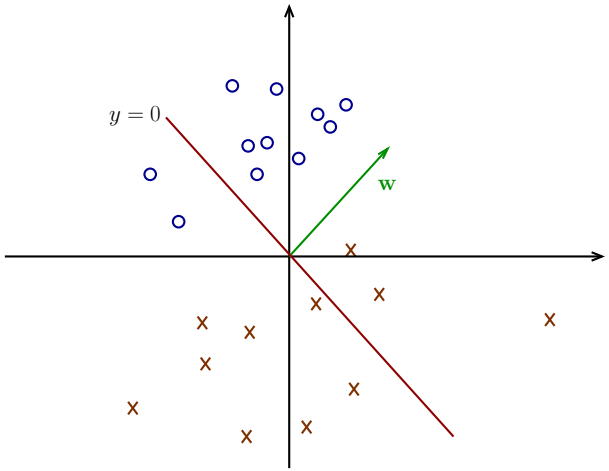
- Le modèle divise l'espace en K régions convexes :
- Toute combinaison convexe de deux points dans la même classe sera également dans cette catégorie (Bishop, page 183)

L'apprentissage

- L'objectif de l'apprentissage : en utilisant des données d'entraînement $\mathcal{D} = \{(\mathbf{x}_n, t_n)\}$, ajuster les paramètres de sorte que sur des données de test, le modèle fasse le moins d'erreurs de classification possible.
- Comme pour la régression linéaire, cela revient habituellement à l'optimisation d'un critère d'entraînement en gardant l'espace d'hypothèses petit (= en contraignant la flexibilité du modèle) pour prévenir le sur-apprentissage.

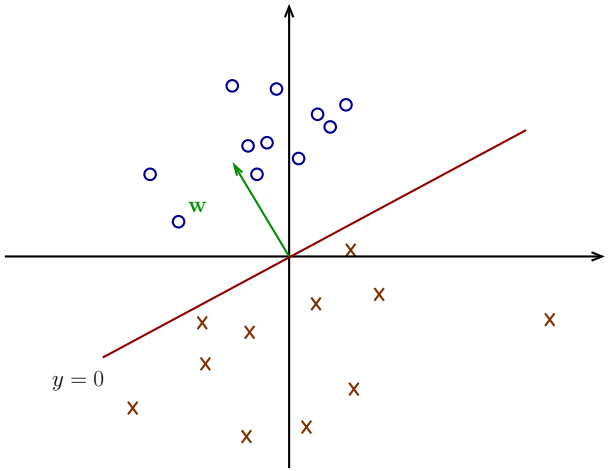
Exemple

- S'il existe une frontière de classification qui ne fait aucune erreur sur l'ensemble d'entraînement, cet ensemble est appelé linéairement séparable.



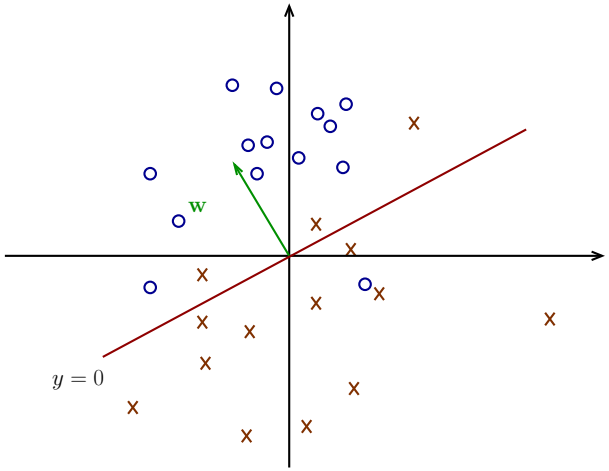
Exemple

- S'il existe une frontière de classification qui ne fait aucune erreur sur l'ensemble d'entraînement, cet ensemble est appelé linéairement séparable.



Exemple

- Un ensemble d'entraînement qui n'est pas linéairement séparable :



L'apprentissage de classifieurs linéaires

- Dans ce qui suit, nous empilons les vecteurs de paramètres $\mathbf{w}_k$ côte à côte dans la matrice $\mathbf{W}$.
- Pour un cas d'entraînement $\mathbf{x}$,

$$\mathbf{y} = \mathbf{W}^{\mathrm{T}}\mathbf{x}$$

  représente un vecteur de "*scores*" $\mathbf{w}_k^{\mathrm{T}}\mathbf{x}$ (un pour chacque classe).
- Le critère d'apprentissage doit ajuster $\mathbf{W}$, de sorte que pour les exemples d'entraînement appartenant à la classe $\mathcal{C}_k$, le modèle produise de grandes valeurs $\mathbf{w}_k^{\mathrm{T}}\mathbf{x}_n$ et de petites valeurs $\mathbf{w}_j^{\mathrm{T}}\mathbf{x}_n \; \forall j \neq k$.

Représenter les valeurs discrètes

- Comme les sorties représentent des valeurs discrètes, il est utile d'utiliser le **codage orthogonal**.
- Nous utilisons la matrice $\mathbf{T}$ pour représenter toutes les sorties de l'ensemble d'entraînement (une par rangée).
- Par conséquent, une valeur $t_{nk} = 1$ signifie que le n-ième exemple d'entraînement appartient à la classe K.

Régression logistique multinomiale

- La régression logistique est probablement le classifieur le plus ancien, mais est quand même l'un des plus utilisés.
- Il définit un modèle probabiliste sur t sachant $\mathbf{x}$:

Régression logistique multinomiale ("softmax regression")

$$p(\mathcal{C}_k|\mathbf{x}) = \frac{\exp\left(\mathbf{w}_k^{\mathrm{T}}\mathbf{x}_n\right)}{\sum_{j=1}^{K}\exp\left(\mathbf{w}_j^{\mathrm{T}}\mathbf{x}_n\right)}$$

- Explication : Le $\exp$ assure la positivité de sorties, et la normalisation que leur somme soit égale à 1.

Maximum de vraisemblance pour la régression logistique multinomiale

- Comme dans le cas de la régression linéaire, nous pouvons minimiser la log-vraisemblance négative lors de l'entraînement.
- On obtient la fonction de coût :

$$\begin{aligned} & E(\mathbf{W};\mathcal{D}) \\ = & -\log \prod_n p(\mathbf{t}_n|\mathbf{x}_n) \\ = & -\log \prod_n \prod_k p(\mathcal{C}_k|\mathbf{x}_n)^{t_{nk}} \\ = & -\sum_n \sum_k t_{nk} \log p(\mathcal{C}_k|\mathbf{x}_n) \\ = & -\sum_{nk} t_{nk} \left(\mathbf{w}_k^{\mathrm{T}}\mathbf{x}_n - \log \sum_{j=1}^{K} \exp\left(\mathbf{w}_j^{\mathrm{T}}\mathbf{x}_n\right)\right) \end{aligned}$$

Maximum de vraisemblance pour la régression logistique multinomiale

- Contrairement à la la régression linéaire, il n'y a pas de solution de forme fermée pour $\mathbf{W}$.
- Mais on peut utiliser l'optimisation basée sur le gradient (par exemple SGD) pour minimiser $E(\mathbf{W};\mathcal{D})$.
- Le gradient par rapport au chaque vecteur $\mathbf{w}_k$ est

$$\begin{aligned} \frac{\partial E(\mathbf{W};\mathcal{D})}{\partial \mathbf{w}_k} &= -\sum_n t_{nk}\mathbf{x}_n - \frac{\exp\left(\mathbf{w}_k^{\mathrm{T}}\mathbf{x}_n\right)}{\sum_j \exp\left(\mathbf{w}_j^{\mathrm{T}}\mathbf{x}_n\right)}\mathbf{x}_n \\ &= \sum_n \left(p(\mathcal{C}_k|\mathbf{x}_n) - t_{nk}\right)\mathbf{x}_n \end{aligned}$$

- On peut montrer que $E(\mathbf{W};\mathcal{D})$ est convexe. Ainsi, il n'y a pas de minima non globaux.

L'astuce "logsumexp"

- Les expressions comme

$$\frac{\exp\left(\mathbf{w}_k^{\mathrm{T}}\mathbf{x}_n\right)}{\sum_{j=1}^{K} \exp\left(\mathbf{w}_j^{\mathrm{T}}\mathbf{x}_n\right)}$$

  sont très instables en pratique parce que les "exp" du dénominateur peuvent provoquer un débordement.
- Il ne faut jamais utiliser des expressions comme "$\sum_i \exp(a_i)$" naïvement dans le code.
- Solution : ajouter une constante A à l'argument de chaque "exp" pour que même les plus grands arguments deviennent petits ; annuler l'opération après avoir calculé la somme.

L'astuce "logsumexp"

- De nombreux logiciels fournissent une fonction "logsumexp" à cette fin

logsumexp

$$\begin{gathered} \mathrm{logsumexp}(a_1,\ldots,a_K) = \log\left(\textstyle\sum_i \exp(a_i + A)\right) - A \\ \text{with } A = -(\max_i a_i) \end{gathered}$$

- D'autres instabilités numériques peuvent très souvent être résolues par la transformation de l'expression instable en une expression contenant $\sum_i \exp(a_i)$, puis en utilisant logsumexp.

Régression logistique binaire

- Traditionnellement, le terme "régression logistique" a été utilisé pour se référer à des modèles à deux classes.
- Ces modèles ont été définis à l'aide d'un seul vecteur de paramètres $\mathbf{w}$:

Régression logistique binaire

$$p(\mathcal{C}_1|\mathbf{x}) = 1 - p(\mathcal{C}_2|\mathbf{x}) = \frac{1}{1 + \exp\left(-\mathbf{w}^{\mathrm{T}}\mathbf{x}\right)}$$

- Cela revient à retirer le surparamétrage dans les définitions précédentes, qui est dû à la contrainte $\sum_i p(\mathcal{C}_i|\mathbf{x}) = 1$.

Régression logistique binaire

- Pour la classe 1, nous pouvons écrire :

$$\begin{aligned} p(\mathcal{C}_1|\mathbf{x}) &= \frac{\exp\left(\mathbf{w}_1^{\mathrm{T}}\mathbf{x}\right)}{\exp\left(\mathbf{w}_1^{\mathrm{T}}\mathbf{x}\right) + \exp\left(\mathbf{w}_2^{\mathrm{T}}\mathbf{x}\right)} \\ &= \frac{1}{1 + \exp\left(-(\mathbf{w}_1 - \mathbf{w}_2)^{\mathrm{T}}\mathbf{x}\right)} \end{aligned}$$

- De même, pour la classe 2 :

$$p(\mathcal{C}_2|\mathbf{x}) = \frac{1}{1 + \exp\left((\mathbf{w}_1 - \mathbf{w}_2)^{\mathrm{T}}\mathbf{x}\right)}$$

- Donc, la définition sur la diapo précédente est équivalente au modèle multi-classe en utilisant : $\mathbf{w} := \left(\mathbf{w}_1 - \mathbf{w}_2\right)$
- On pourrait retirer le surparamétrage également pour les modèles multi-classe, mais cela n'est pas courant.

La fonction sigmoïde

- La fonction

$$\sigma(a) = \frac{1}{1 + \exp(-a)}$$

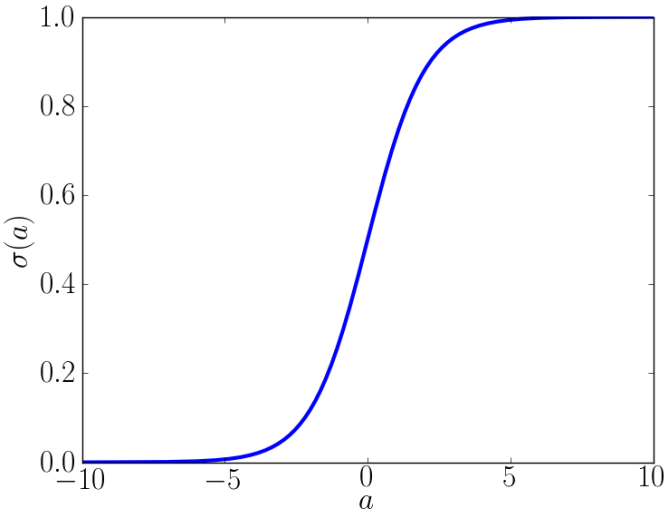
est une fonction en forme de "S", appelé "sigmoïde" ou "fonction logistique". (Raison pour laquelle on dit "régression logistique".)

- Sa dérivée peut s'écrire :

$$\frac{d\sigma(a)}{da} = \sigma(1 - \sigma)$$

- Son inverse est $a = \log\left(\frac{\sigma}{1-\sigma}\right)$ ("fonction logit")

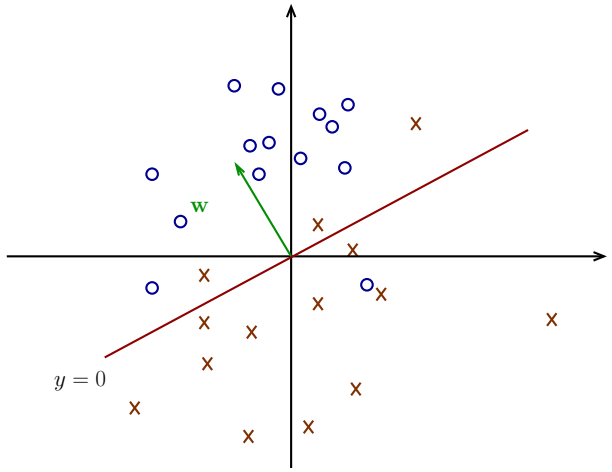
La fonction sigmoïde



L'expansion de base

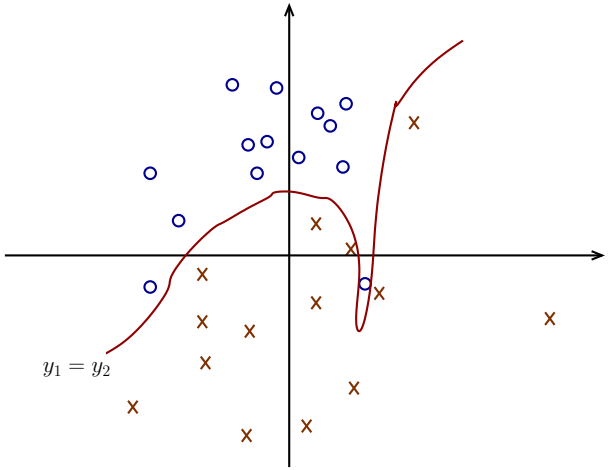
- Comme pour la régression linéaire, nous pouvons utiliser une expansion de base non linéaire $\mathbf{x} \rightarrow \mathbf{\Phi}(\mathbf{x})$.
- Cela conduit à des frontières non linéaires entre les classes.
- Mais peut causer du sur-apprentissage.

L'expansion de base



- Un modèle linéaire.

L'expansion de base



- Un modèle non linéaire.

Régularisation

- Comme pour la régression linéaire, on peut régulariser le modèle en ajoutant à l'objectif une pénalité telle que

$$E_W(\mathbf{W}, \lambda) = \frac{\lambda}{2}\|\mathbf{W}\|^2$$

pour prévenir le sur-apprentissage.

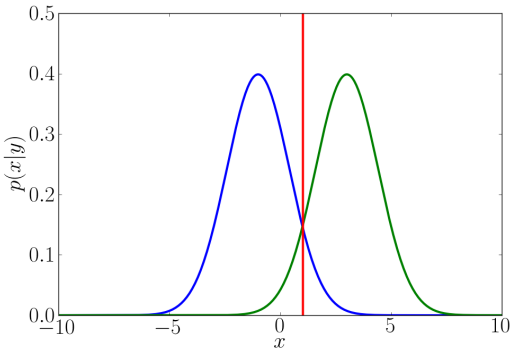
Méthodes génératives

- Les **méthodes génératives** entraînent un modèle probabiliste $p(\mathbf{x}|\mathcal{C}_k)$ pour chaque classe.
- Pour faire la classification, il faut inverser cette relation, ce qui peut être fait en utilisant la règle de Bayes :

$$p(\mathcal{C}_k|\mathbf{x}) = \frac{p(\mathbf{x}|\mathcal{C}_k)p(\mathcal{C}_k)}{\sum_j p(\mathbf{x}|\mathcal{C}_j)p(\mathcal{C}_j)}$$

- Comme les classifieurs génératifs impliquent la règle de Bayes, ils sont parfois appelés "classifieur de Bayes" (mais ils ne sont pas vraiment des modèles bayésiens).

Exemple d'une méthode générative de dimension 1



- Les frontières entre les classes $\mathcal{C}_1$ et $\mathcal{C}_2$ peuvent être définies par :

$$p(\mathbf{x}|\mathcal{C}_1)p(\mathcal{C}_1) = p(\boldsymbol{x}|\mathcal{C}_2)p(\mathcal{C}_2)$$

Méthodes génératives

- Pour définir un classifieur génératif en pratique, il faut préciser deux quantités :
  1. Les probabilités a priori $p(\mathcal{C}_k)$. En pratique, on utilise souvent
  $$\frac{\sum_n t_{nk}}{N}$$
  2. Les distributions $p(\mathbf{x}|\mathcal{C}_k)$. Il y a beaucoup de choix possibles.
- Notez que la régression logistique et les modèles génératifs définissent un classifieur en modélisant la distribution conditionnelle $p(\mathcal{C}_k|\mathbf{x})$. Ils ne diffèrent que *par la façon* dont ils définissent cette probabilité.

Modèles génératifs avec des entrées réelles

- Pour des entrées réelles (de dimension D), un choix très commun pour la distribution $p(\mathbf{x}|\mathcal{C}_k)$ est la gaussienne :

$$p(\mathbf{x}|\mathcal{C}_k) = \frac{1}{(2\pi)^{\frac{D}{2}}|\boldsymbol{\Sigma}_k|^{\frac{1}{2}}} \exp\Big(-\frac{1}{2}(\mathbf{x}-\boldsymbol{\mu}_k)^{\mathrm{T}}\boldsymbol{\Sigma}_k^{-1}(\mathbf{x}-\boldsymbol{\mu}_k)\Big)$$

- Normalement, chaque classe a sa propre moyenne. La matrice de covariance est parfois partagée entre les classes :

$$p(\mathbf{x}|\mathcal{C}_k) = \frac{1}{(2\pi)^{\frac{D}{2}}|\boldsymbol{\Sigma}_k|^{\frac{1}{2}}} \exp\Big(-\frac{1}{2}(\mathbf{x}-\boldsymbol{\mu}_k)^{\mathrm{T}}\boldsymbol{\Sigma}^{-1}(\mathbf{x}-\boldsymbol{\mu}_k)\Big)$$

Estimation de paramètres

- Pour les modèles sans partage de la matrice de covariance, les estimations du maximum de vraisemblance sont

$$\boldsymbol{\mu}_k = \frac{1}{\sum_n t_{nk}} \sum_{n=1}^{N} t_{nk} \mathbf{x}_n$$

et

$$\boldsymbol{\Sigma}_k = \frac{1}{\sum_n t_{nk}} \sum_{n=1}^{N} t_{nk} (\mathbf{x}_n - \boldsymbol{\mu}_k)(\mathbf{x}_n - \boldsymbol{\mu}_k)^{\mathrm{T}}$$

- Pour les modèles qui partagent la matrice de covariance, l'estimation est

$$\boldsymbol{\Sigma} = \frac{1}{N} \sum_{n=1}^{N} (\mathbf{x}_n - \boldsymbol{\mu})(\mathbf{x}_n - \boldsymbol{\mu})^{\mathrm{T}}$$

où $\boldsymbol{\mu}$ est la moyenne sur tous les exemples d'entraînement.

Frontières entre les classes

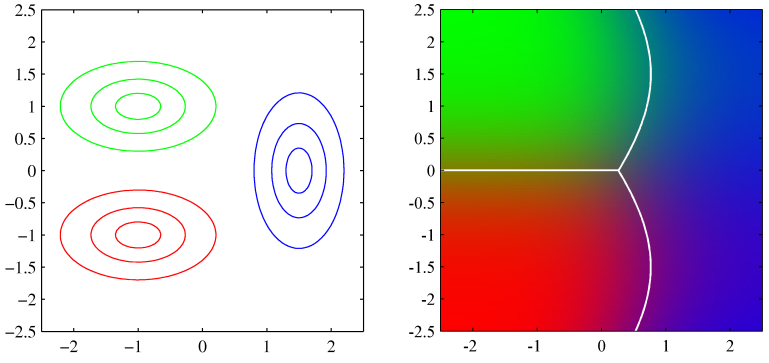
- Pour les modèles qui partagent la matrice de covariance, les frontières satisfont la condition :

$$\begin{aligned}
& \log p(\mathbf{x}|\mathcal{C}_1) + \log p(\mathcal{C}_1) = \log p(\mathbf{x}|\mathcal{C}_2) + \log p(\mathcal{C}_2) \\
\Leftrightarrow \quad & (\mathbf{x} - \boldsymbol{\mu}_1)^{\mathrm{T}} \boldsymbol{\Sigma}^{-1} (\mathbf{x} - \boldsymbol{\mu}_1) - \log p(\mathcal{C}_1) \\
& \qquad = (\mathbf{x} - \boldsymbol{\mu}_2)^{\mathrm{T}} \boldsymbol{\Sigma}^{-1} (\mathbf{x} - \boldsymbol{\mu}_k) - \log p(\mathcal{C}_2) \\
\Leftrightarrow \quad & \mathbf{x}^{\mathrm{T}} \boldsymbol{\Sigma}^{-1} \mathbf{x} + \boldsymbol{\mu_1}^{\mathrm{T}} \boldsymbol{\Sigma}^{-1} \boldsymbol{\mu_1} - 2 \boldsymbol{\mu}_1^{\mathrm{T}} \boldsymbol{\Sigma}^{-1} \mathbf{x} - \log p(\mathcal{C}_1) \\
& \qquad = \mathbf{x}^{\mathrm{T}} \boldsymbol{\Sigma}^{-1} \mathbf{x} + \boldsymbol{\mu_2}^{\mathrm{T}} \boldsymbol{\Sigma}^{-1} \boldsymbol{\mu_2} - 2 \boldsymbol{\mu}_2^{\mathrm{T}} \boldsymbol{\Sigma}^{-1} \mathbf{x} - \log p(\mathcal{C}_2) \\
\Leftrightarrow \quad & (\boldsymbol{\mu}_1 - \boldsymbol{\mu}_2)^{\mathrm{T}} \boldsymbol{\Sigma}^{-1} \mathbf{x} = \mathrm{const}
\end{aligned}$$

- Ceci est une condition linéaire pour les entrées $\mathbf{x}$.
- (On peut montrer que pour les modèles sans partage, les frontières sont des quadratiques.)

Frontières entre les classes : exemple

- Exemple d'un classifieur génératif gaussien à trois classes, où deux classes partagent une matrice de covariance :



Classifieur génératif gaussien et régression logistique

- Pour un classifieur génératif gaussien à deux classes :

$$\begin{aligned}
p(\mathcal{C}_1|\mathbf{x}) &= \frac{p(\mathcal{C}_1|\mathbf{x})p(\mathcal{C}_1)}{p(\mathcal{C}_1|\mathbf{x})p(\mathcal{C}_1) + p(\mathcal{C}_2|\mathbf{x})p(\mathcal{C}_2)} \\
&= \frac{1}{1 + \exp(-a)}
\end{aligned}$$

- Un petit calcul montre que

$$a = \log \frac{p(\mathbf{x}|\mathcal{C}_1)p(\mathcal{C}_1)}{p(\mathbf{x}|\mathcal{C}_2)p(\mathcal{C}_2)} = (\boldsymbol{\mu}_1 - \boldsymbol{\mu}_2)^{\mathrm{T}} \boldsymbol{\Sigma}^{-1} \mathbf{x} := \mathbf{w}^{\mathrm{T}} \mathbf{x}$$

- Le classifieur génératif gaussien avec une matrice de covariance commune a la même forme fonctionnelle que la régression logistique.

Modèles génératifs avec des entrées discrètes

- Des variables d'entrées discrètes sont faciles à traiter si nous supposons que les dimensions d'entrée sont *conditionnellement indépendantes, sachant la classe*.
- Des classifieurs génératifs basés sur cette hypothèse sont connus comme des classifieurs de Bayes naïf.
- Bien que l'indépendance conditionnelle semble être une restriction majeure en pratique, cela fonctionne souvent étonnamment bien.

Bayes naïf discret (multinoulli)

- Si nous utilisons des variables discrètes pour chaque dimension d'entrée, nous pouvons écrire :

$$p(\mathbf{x}|\mathcal{C}_k) = \prod_{i=1}^{D}\prod_{j=1}^{M}\mu_{kij}^{x_{ij}}$$

où $\mu_{kij} = p(x_i = j|\mathcal{C}_k)$.

- Les estimations du maximum de vraisemblance pour μ_{kij} sont :

$$\mu_{kij} = \frac{\sum_n t_{nk}x_{nij}}{\sum_n t_{nk}}$$

- Comment le savons-nous ? Maximiser la log-vraisemblance, imposer des contraintes $\sum_j \mu_{kij} = 1$ à l'aide de multiplicateurs de Lagrange.

Bayes naïf : Bernoulli

- Si nous utilisons des variables Bernoulli indépendantes pour chaque dimension d'entrée, nous pouvons écrire :

$$p(\mathbf{x}|\mathcal{C}_k) = \prod_{i=1}^{D}\mu_{ki}^{x_i}(1-\mu_{ki})^{1-x_i}$$

où $\mu_{ki} = p(x_i = 1|\mathcal{C}_k)$

- Les estimations du maximum de vraisemblance pour μ_{ki} sont :

$$\mu_{ki} = \frac{\sum_n t_{nk}x_{ni}}{\sum_n t_{nk}}$$