Introduction aux Processus Gaussiens (1/2)Application aux données temporelles

Clément Lejeune

Thales Services Numériques, AD/AD3/IA

4 novembre 2024



Objectifs de cette présentation:

• Pédagogique (pas un état de l'art)



Objectifs de cette présentation:

- Pédagogique (pas un état de l'art)
- Comprendre la philosophie (Bayésienne et non-paramétrique) des processus Gaussiens (GP)



Objectifs de cette présentation:

- Pédagogique (pas un état de l'art)
- Comprendre la philosophie (Bayésienne et non-paramétrique) des processus Gaussiens (GP)
- Comprendre leurs interêts probabilistes/prédictifs



Objectifs de cette présentation:

- Pédagogique (pas un état de l'art)
- Comprendre la philosophie (Bayésienne et non-paramétrique) des processus Gaussiens (GP)
- Comprendre leurs interêts probabilistes/prédictifs
- Comprendre les limites des GP "naïfs"

De quoi va-t-on parler ?

Théorie: lois Gaussiennes, noyaux, probabilités conditionnelles



4 novembre 2024

Objectifs de cette présentation:

- Pédagogique (pas un état de l'art)
- Comprendre la philosophie (Bayésienne et non-paramétrique) des processus Gaussiens (GP)
- Comprendre leurs interêts probabilistes/prédictifs
- Comprendre les limites des GP "naïfs"

De quoi va-t-on parler ?

- Théorie: lois Gaussiennes, noyaux, probabilités conditionnelles
- Applicatif: forecasting, prédiction d'incertitude, complétion de valeurs manquantes, lissage



4 novembre 2024

Gaussien: vecteur vs. processus

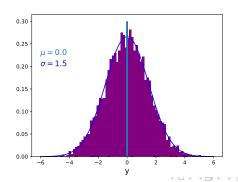
- Contenu
- 2 Gaussien: vecteur vs. processus
 - Construction d'un GP
 - Le kernel
- 3 Prédire avec un GP
 - Règle de Bayes
 - prédiction = data × hypothèse
 - Exemples
 - Application: prédiction de température maritime
- 4 Avantages / Limites des GP naïfs
 - Avantages
 - Limites
 - Remèdes



Loi Gaussienne unidimensionnelle:

$$y \sim \mathcal{N}(m, \sigma^2) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma^2}} e^{-\frac{(y-m)^2}{2\sigma^2}}$$

- m: espérance (aka moyenne) de y
- ② $\sigma > 0$: écart-type





Loi Gaussienne multidimensionnelle (vecteur Gaussien): Distribution jointe des composantes d'un vecteur d-dimensionnel dont les marginales sont Gaussiennes (unidimensionnelles).

$$\mathbf{y} := [y_1, \dots, y_d]^\top \sim \mathcal{N}(\boldsymbol{\mu}, \boldsymbol{\Sigma}) = \frac{1}{\sqrt{(2\pi)^d \det |\boldsymbol{\Sigma}|}} e^{-\frac{1}{2}(\mathbf{y} - \boldsymbol{\mu})^\top \boldsymbol{\Sigma}^{-1}(\mathbf{y} - \boldsymbol{\mu})}$$

- **1** $\mu \in \mathbb{R}^d$: vecteur moyen $\implies \mu_i$: moyenne de la Gaussienne y_i
- $\Sigma \in \mathbb{R}^{d \times d}$ définie positive¹: matrice de covariance



Loi Gaussienne multidimensionnelle (*vecteur* Gaussien): Distribution *jointe* des composantes d'un vecteur *d*-dimensionnel dont les *marginales* sont Gaussiennes (unidimensionnelles).

$$\mathbf{y} := [y_1, \dots, y_d]^{\top} \sim \mathcal{N}(\boldsymbol{\mu}, \boldsymbol{\Sigma}) = \frac{1}{\sqrt{(2\pi)^d \det |\boldsymbol{\Sigma}|}} e^{-\frac{1}{2}(\mathbf{y} - \boldsymbol{\mu})^{\top} \boldsymbol{\Sigma}^{-1} (\mathbf{y} - \boldsymbol{\mu})}$$

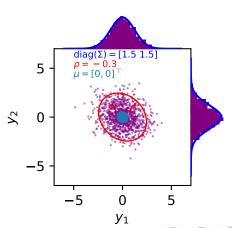
- **1** $\mu \in \mathbb{R}^d$: vecteur moyen $\implies \mu_j$: moyenne de la Gaussienne y_j
- **2** $\Sigma \in \mathbb{R}^{d \times d}$ définie positive¹: *matrice de covariance*

$$\mathbf{\Sigma} = \begin{pmatrix} \Sigma_1^2 & \Sigma_{12} & \cdots & \Sigma_{1d} \\ \Sigma_{21} & \ddots & \cdots & \vdots \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \Sigma_{d1} & \cdots & \cdots & \Sigma_d^2 \end{pmatrix} \implies \begin{cases} \Sigma_j : \text{\'ecart-type de } y_j \\ \Sigma_{ij} : \text{\'ecovariance entre les } \\ \text{marginales } y_i \text{ et } y_j \end{cases}$$



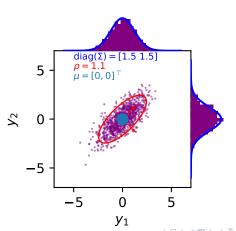


$$\boldsymbol{\mu} = \begin{pmatrix} \mu_1 \\ \mu_2 \end{pmatrix}, \quad \boldsymbol{\Sigma} = \begin{pmatrix} \Sigma_1 & \Sigma_{12} \\ \Sigma_{21} & \Sigma_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1.5 & \rho = -0.3 \\ \rho = -0.3 & 1.5 \end{pmatrix}$$



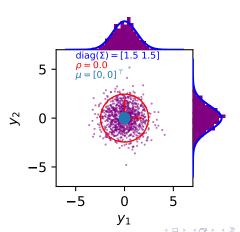


$$\boldsymbol{\mu} = \begin{pmatrix} \mu_1 \\ \mu_2 \end{pmatrix}, \quad \boldsymbol{\Sigma} = \begin{pmatrix} \Sigma_1 & \Sigma_{12} \\ \Sigma_{21} & \Sigma_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1.5 & \rho = 1.1 \\ \rho = 1.1 & 1.5 \end{pmatrix}$$





$$\boldsymbol{\mu} = \begin{pmatrix} \mu_1 \\ \mu_2 \end{pmatrix}, \quad \boldsymbol{\Sigma} = \begin{pmatrix} \Sigma_1 & \Sigma_{12} \\ \Sigma_{21} & \Sigma_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1.5 & \rho = 0 \\ \rho = 0 & 1.5 \end{pmatrix}$$





$$\mu = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ \dots \end{pmatrix}, \quad \Sigma = \begin{pmatrix} 1.5 & 0.99 & 0.98 & 0.96 & 0.94 \\ 0.99 & 1.5 & 0.99 & 0.98 & 0.96 \\ 0.98 & 0.99 & 1.5 & 0.99 & 0.98 \\ 0.96 & 0.98 & 0.99 & 1.5 & 0.99 \\ 0.94 & 0.96 & 0.98 & 0.99 & 1.5 \end{pmatrix}$$

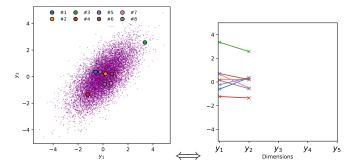


Figure: Dimensions j=1,2. Gauche: 10^4+8 échantillons. Droite: Réindéxation des 8 *mêmes* échantillons.

Cas d = 5:

$$oldsymbol{\mu} = egin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ \dots \end{pmatrix}, \quad oldsymbol{\Sigma} = egin{pmatrix} \frac{1.5 & 0.99 & 0.98 & 0.96 & 0.94 \\ 0.99 & 1.5 & 0.99 & 0.98 & 0.96 \\ 0.98 & 0.99 & 1.5 & 0.99 & 0.98 \\ 0.96 & 0.98 & 0.99 & 1.5 \\ 0.94 & 0.96 & 0.98 & 0.99 & 1.5 \end{pmatrix}$$

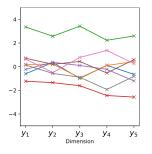


Figure: Réindéxation de 8 échantillons, dimensions $j=1,\ldots,5$. Chaque "courbe" est un tirage de $\mathcal{N}(\boldsymbol{\mu},\boldsymbol{\Sigma})$

Cas *d*= 50:

$$\boldsymbol{\mu} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ \dots \end{pmatrix}, \quad \boldsymbol{\Sigma} = \begin{pmatrix} 1.5 & 0.998 & 0.993 & 0.986 & 0.975 & 0.962 & 0.946 & 0.927 & \cdots \\ 0.998 & 1.5 & 0.998 & 0.993 & 0.986 & 0.975 & 0.962 & 0.946 & \cdots \\ 0.993 & 0.998 & 1.5 & 0.998 & 0.993 & 0.986 & 0.975 & 0.962 & \cdots \\ 0.996 & 0.993 & 0.998 & 1.5 & 0.998 & 0.993 & 0.986 & 0.975 & \cdots \\ 0.966 & 0.993 & 0.998 & 1.5 & 0.998 & 0.993 & 0.986 & \cdots \\ 0.962 & 0.975 & 0.986 & 0.993 & 0.998 & 1.5 & 0.998 & 0.993 & \cdots \\ 0.946 & 0.962 & 0.975 & 0.986 & 0.993 & 0.998 & 1.5 & 0.998 & \cdots \\ 0.927 & 0.946 & 0.962 & 0.975 & 0.986 & 0.993 & 0.998 & 1.5 & 0.998 & \cdots \\ 0.927 & 0.946 & 0.962 & 0.975 & 0.986 & 0.993 & 0.998 & 1.5 & 0.998 & \cdots \\ 0.927 & 0.946 & 0.962 & 0.975 & 0.986 & 0.993 & 0.998 & 1.5 & 0.998 & \cdots \\ 0.927 & 0.946 & 0.962 & 0.975 & 0.986 & 0.993 & 0.998 & 1.5 & 0.998 & \cdots \\ 0.927 & 0.946 & 0.962 & 0.975 & 0.986 & 0.993 & 0.998 & 1.5 & 0.998 & \cdots \\ 0.927 & 0.946 & 0.962 & 0.975 & 0.986 & 0.993 & 0.998 & 1.5 & 0.998 & \cdots \\ 0.927 & 0.946 & 0.962 & 0.975 & 0.986 & 0.993 & 0.998 & 1.5 & 0.998 & \cdots \\ 0.927 & 0.946 & 0.962 & 0.975 & 0.986 & 0.993 & 0.998 & 1.5 & 0.998 & \cdots \\ 0.927 & 0.946 & 0.962 & 0.975 & 0.986 & 0.993 & 0.998 & 1.5 & 0.998 & \cdots \\ 0.927 & 0.946 & 0.962 & 0.975 & 0.986 & 0.993 & 0.998 & 1.5 & 0.998 & \cdots \\ 0.927 & 0.946 & 0.962 & 0.975 & 0.986 & 0.993 & 0.998 & 1.5 & 0.998 & \cdots \\ 0.927 & 0.946 & 0.962 & 0.975 & 0.986 & 0.993 & 0.998 & 1.5 & 0.998 & \cdots \\ 0.927 & 0.946 & 0.962 & 0.975 & 0.986 & 0.993 & 0.998 & 1.5 & 0.998 & 0.993 & \cdots \\ 0.927 & 0.946 & 0.962 & 0.975 & 0.986 & 0.993 & 0.998 & 0.978 & 0.998 & 0.978 & 0.998 & 0.978 & 0.998 & 0.998 & 0.978 & 0.998 & 0.998 & 0.978 & 0.998 &$$

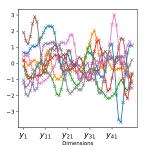


Figure: Réindéxation de 8 échantillons, dimensions $j=1,\dots,50$ thales

Cas $d = \infty$: chaque courbe est une *collection infinie* de valeurs, que l'on peut voir comme une fonction:

- **1** μ : vecteur de taille infinie \Leftrightarrow fonction moyenne $\mathbb{E}(y(x)) = m(\mathbf{x})$
- ② Σ : matrice de taille infinie \Leftrightarrow noyau de covariance ou "kernel" $\mathbb{C}(y(\mathbf{x}), y(\mathbf{x'})) = k(\mathbf{x}, \mathbf{x'})$

Cas $d = \infty$: chaque courbe est une *collection infinie* de valeurs, que l'on peut voir comme une fonction:

- **①** μ : vecteur de taille infinie \Leftrightarrow fonction moyenne $\mathbb{E}(y(x)) = m(\mathbf{x})$
- ② Σ : matrice de taille infinie \Leftrightarrow noyau de covariance ou "kernel" $\mathbb{C}(y(\mathbf{x}), y(\mathbf{x}')) = k(\mathbf{x}, \mathbf{x}')$

Processus Gaussien $y(\mathbf{x}) \sim GP(m, k)$ Rasmussen and Williams 2006

Un processus Gaussien (GP) est une distribution de probabilités sur un espace de *fonctions*, $y(\mathbf{x}): \mathcal{X} \to \mathcal{Y}$, telle que toute collection finie $[y(x_i), \ldots, y(x_j), \ldots, y(x_k)], \forall i, j, k$ forme un vecteur Gaussien.

• GP peut être vu comme une réindéxation d'un vecteur "infini"



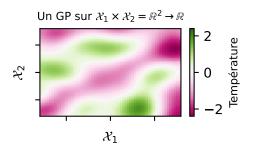
- GP peut être vu comme une réindéxation d'un vecteur "infini"
- Cas temporal: $y(t): \mathbb{R}^+ \to \mathbb{R}$, n'importe qu'elle discrétisation de y doit former un vecteur Gaussien, en prenant par ex 2 entrées de y:

$$y(\mathbf{x}) \sim GP(m,k) \implies y([t_i,t_j]) \sim \mathcal{N}(\begin{pmatrix} \mu_i \\ \mu_j \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} \Sigma_i^2 & \Sigma_{ij} \\ \Sigma_{ij} & \Sigma_j^2 \end{pmatrix})$$

Exemple visu: cf. exemples introductifs



- Cas spatial: $y(\mathbf{x}): \mathbb{R}^2 \to \mathcal{Y} = \mathbb{R}$ (ex: température en 2D)
- Visu d'un échantillon:



• On impose souvent une forme simple sur $\mathbb{E}(y(x)) = m(x)$ comme: $\boldsymbol{\beta}^{\top}\mathbf{x}$, $\mathbf{0}$



- On impose souvent une forme simple sur $\mathbb{E}(y(x)) = m(x)$ comme: $\boldsymbol{\beta}^{\top} \mathbf{x}$, $\mathbf{0}$
- $y: \mathcal{X} \to \mathcal{Y}$ est une *fonction*: il suffit de bien choisir \mathcal{X} et \mathcal{Y}
 - $\mathcal{X} = \mathbb{R}^+$ et $\mathcal{Y} = \mathbb{R} \implies y =$ série temporelle Rasmussen and Williams 2006

4 novembre 2024

- On impose souvent une forme simple sur $\mathbb{E}(y(x)) = m(x)$ comme: $\boldsymbol{\beta}^{\top} \mathbf{x}$, $\mathbf{0}$
- $y: \mathcal{X} \to \mathcal{Y}$ est une *fonction*: il suffit de bien choisir \mathcal{X} et \mathcal{Y}
 - $\mathcal{X} = \mathbb{R}^+$ et $\mathcal{Y} = \mathbb{R} \implies y = \textit{s\'erie temporelle}$ Rasmussen and Williams 2006
 - $\mathcal{X} = [a, b] \times [c, d]$ (ou \mathbb{R}^2) et $\mathcal{Y} = \mathbb{R} \implies y = champ spatial$ (météo, hydro, etc)

- On impose souvent une forme simple sur $\mathbb{E}(y(x)) = m(x)$ comme: $\boldsymbol{\beta}^{\mathsf{T}}\mathbf{x}$. 0
- $y: \mathcal{X} \to \mathcal{Y}$ est une *fonction*: il suffit de bien choisir \mathcal{X} et \mathcal{Y}
 - $\mathcal{X} = \mathbb{R}^+$ et $\mathcal{Y} = \mathbb{R} \implies y =$ série temporelle Rasmussen and Williams 2006
 - $\mathcal{X} = [a, b] \times [c, d]$ (ou \mathbb{R}^2) et $\mathcal{Y} = \mathbb{R} \implies y = champ spatial$ (météo, hydro, etc)
 - $\mathcal{X} = [a, b] \times [c, d] \times \mathbb{R}^+$ et $\mathcal{Y} = \mathbb{R} \implies y = s\acute{e}rie \ temporelle \ d'images$



- On impose souvent une forme simple sur $\mathbb{E}(y(x)) = m(x)$ comme: $\boldsymbol{\beta}^{\top} \mathbf{x}$, $\mathbf{0}$
- $y: \mathcal{X} \to \mathcal{Y}$ est une *fonction*: il suffit de bien choisir \mathcal{X} et \mathcal{Y}
 - $\mathcal{X}=\mathbb{R}^+$ et $\mathcal{Y}=\mathbb{R} \implies y=$ *série temporelle* Rasmussen **and** Williams 2006
 - $\mathcal{X} = [a, b] \times [c, d]$ (ou \mathbb{R}^2) et $\mathcal{Y} = \mathbb{R} \implies y = champ spatial$ (météo, hydro, etc)
 - $\mathcal{X} = [a, b] \times [c, d] \times \mathbb{R}^+$ et $\mathcal{Y} = \mathbb{R} \implies y =$ série temporelle d'images
 - $\mathcal{X} = \mathbb{R}^d$ et $\mathcal{Y} = \{1 \dots K\} \implies y = classificateur$ d'images/pixels (exsegmentation) Hensman **andothers** 2015
 - \mathcal{X} et \mathcal{Y} peuvent être des espaces de graphes Borovitskiy **andothers** 2021
 - ...etc, etc, etc.



4 novembre 2024

Gaussien: vecteur vs. processus

- Contenu
- 2 Gaussien: vecteur vs. processus
 - Construction d'un GP
 - Le kernel
- 3 Prédire avec un GP
 - Règle de Bayes
 - prédiction = data × hypothèse
 - Exemples
 - Application: prédiction de température maritime
- 4 Avantages / Limites des GP naïfs
 - Avantages
 - Limites
 - Remèdes



4 novembre 2024

• $k(\mathbf{x}, \mathbf{x'}) = \mathbb{C}(y(\mathbf{x}), y(\mathbf{x'}))$ représente la *similarité de y* entre deux entrées x et x', donc doit générer une matrice de covariance valide²

³C-à-d être un noyau reproduisant d'un espace de Hilbert: $y(x_0) = \sum_{i=1}^{\infty} y(x_i) k(x_i, x_0)$



 $^{2\}sum_{i,j}^{n} a_i a_j k(\mathbf{x}_i, \mathbf{x}_i) \geq 0, \forall \mathbf{a} = [a_1, \dots, a_n]$

- $k(\mathbf{x}, \mathbf{x'}) = \mathbb{C}(y(\mathbf{x}), y(\mathbf{x'}))$ représente la *similarité de y* entre deux entrées \mathbf{x} et $\mathbf{x'}$, donc doit générer une matrice de covariance valide²
- k défini *implicitement* les propriétés fonctionnelles de y^3



 $^{^2\}sum_{i,j}^n a_i a_j k(\mathbf{x}_i,\mathbf{x}_j) \geq 0, \forall \mathbf{a} = [a_1,\ldots,a_n]$

 $^{^3}$ C-à-d être un noyau reproduisant d'un espace de Hilbert: $y(x_0) = \sum_{i=1}^\infty \vec{y}(x_i)k(\vec{x_i},\vec{x_0})^{-\frac{1}{2}}$

- $k(\mathbf{x}, \mathbf{x'}) = \mathbb{C}(y(\mathbf{x}), y(\mathbf{x'}))$ représente la *similarité de y* entre deux entrées x et x', donc doit générer une matrice de covariance valide²
- k défini *implicitement* les propriétés fonctionnelles de v^3
- Kernel: fonction qui dépend aussi d'hyperparamètres θ

 $^{^3}$ C-à-d être un noyau reproduisant d'un espace de Hilbert: $y(x_0) = \sum_{i=1}^{\infty} y(x_i) k(x_i) x_0$



 $^{^{2}\}sum_{i,j}^{n} a_{i}a_{j}k(\mathbf{x}_{i},\mathbf{x}_{i}) \geq 0, \forall \mathbf{a} = [a_{1},\ldots,a_{n}]$

- $k(\mathbf{x}, \mathbf{x'}) = \mathbb{C}(y(\mathbf{x}), y(\mathbf{x'}))$ représente la *similarité de y* entre deux entrées x et x', donc doit générer une matrice de covariance valide²
- k défini implicitement les propriétés fonctionnelles de y^3
- Kernel: fonction qui dépend aussi d'hyperparamètres θ
- Et donc le nerf d'un GP est essentiellement dans son kernel (noyau)

³C-à-d être un noyau reproduisant d'un espace de Hilbert: $y(x_0) = \sum_{i=1}^{\infty} y(x_i)k(x_i, x_0)$



 $^{^{2}\}sum_{i,j}^{n} a_{i}a_{j}k(\mathbf{x}_{i},\mathbf{x}_{i}) \geq 0, \forall \mathbf{a} = [a_{1},\ldots,a_{n}]$

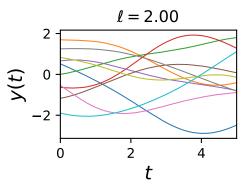
- Quelques exemples de GP(0, k) défini sur $\mathcal{X} = \mathbb{R}^+$ et $\mathcal{Y} = \mathbb{R}$ (série temporelle)
- kernel de série temporelle ↔ fonction d'autocovariance
- Visualiser: bonne manière de comprendre un kernel



- Exponentiel quadratique (aka "Radial basis", "Gaussian", "Heat" kernel): $k(t,t')=e^{-\frac{(t-t')^2}{2\ell^2}}$
- GP(0, k) génère des y infiniment différentiables par rapport à t
- ullet contrôle le lissé (ici au sens oscillatoir) des générées

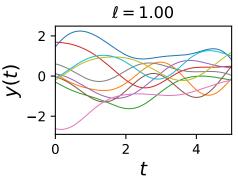


- Exponentiel quadratique (aka "Radial basis", "Gaussian", "Heat" kernel): $k(t,t')=e^{-\frac{(t-t')^2}{2\ell^2}}$
- GP(0, k) génère des y infiniment différentiables par rapport à t
- ullet contrôle le lissé (ici au sens oscillatoir) des générées



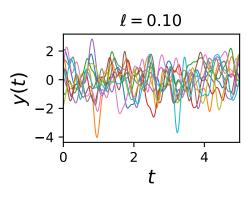


- Exponentiel quadratique (aka "Radial basis", "Gaussian", "Heat" kernel): $k(t, t') = e^{-\frac{(t-t')^2}{2\ell^2}}$
- GP(0, k) génère des y infiniment différentiables par rapport à t
- ℓ contrôle le lissé (ici au sens oscillatoir) des générées





- Exponentiel quadratique (aka "Radial basis", "Gaussian", "Heat" kernel): $k(t,t')=e^{-\frac{(t-t')^2}{2\ell^2}}$
- GP(0, k) génère des y infiniment différentiables par rapport à t
- ullet contrôle le lissé (ici au sens oscillatoir) des générées

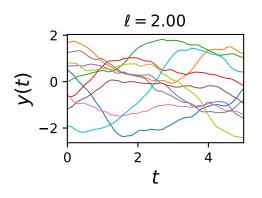




- kernel de Matérn: $k(t,t')=(1+\sqrt{\frac{3|t-t'|}{\ell}})e^{-\sqrt{\frac{3|t-t'|}{\ell}}}$
- Génère des y différentiables une seule fois par rapport à t
- ℓ : même interprétation que le kernel exponentiel quadratique

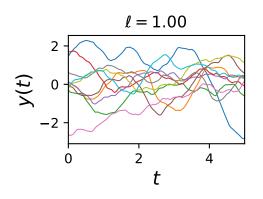


- kernel de Matérn: $k(t,t')=(1+\sqrt{\frac{3|t-t'|}{\ell}})e^{-\sqrt{\frac{3|t-t'|}{\ell}}}$
- ullet Génère des y différentiables une seule fois par rapport à t
- ullet ℓ : même interprétation que le kernel exponentiel quadratique



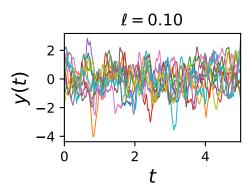


- kernel de Matérn: $k(t,t')=(1+\sqrt{\frac{3|t-t'|}{\ell}})e^{-\sqrt{\frac{3|t-t'|}{\ell}}}$
- ullet Génère des y différentiables une seule fois par rapport à t
- ullet ℓ : même interprétation que le kernel exponentiel quadratique





- kernel de Matérn: $k(t,t') = (1+\sqrt{\frac{3|t-t'|}{\ell}})e^{-\sqrt{\frac{3|t-t'|}{\ell}}}$
- Génère des y différentiables une seule fois par rapport à t
- ullet ℓ : même interprétation que le kernel exponentiel quadratique

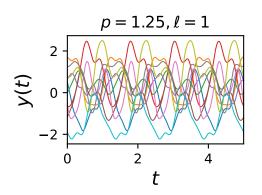




- kernel locallement-périodique: $k(t,t')=e^{-\frac{2\sin^2(\pi(t-t')/T_0)}{\ell^2}}$
- Génère des y périodiques ET lisses

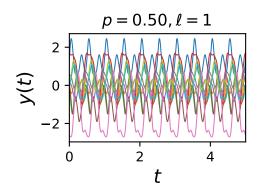


- kernel locallement-périodique: $k(t,t') = e^{-\frac{2\sin^2(\pi(t-t')/T_0)}{\ell^2}}$
- Génère des y périodiques ET lisses





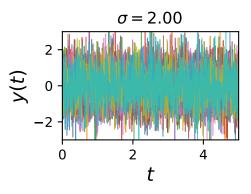
- kernel locallement-périodique: $k(t,t')=e^{-\frac{2\sin^2(\pi(t-t')/T_0)}{\ell^2}}$
- Génère des y périodiques ET lisses



kernel de bruit blanc:

$$k(t, t') = \begin{cases} \sigma^2 \text{ si } t = t' \\ 0 \text{ sinon} \end{cases}$$

ullet Aucune corrélation. σ contrôle l'amplitude (variance) du bruit



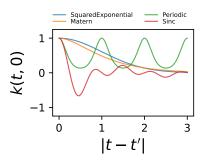


 Aussi, des kernels dans le domaine fréquentiel (Fourier)Parra and Tobar 2017⁴

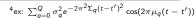
Introduction aux Processus Gaussiens



- Aussi, des kernels dans le domaine fréquentiel (Fourier)Parra and Tobar 2017⁴
- Famille des kernels stationnaires, k(t, t') ne dépend que de $t t' \leftrightarrow$ "plus les inputs sont éloignées, moins les sorties associées sont corrélées"









• Fléxibilité des kernels: $k_1 + k_2$, $k_1 \times k_2$, $g(t) \times k$ (g est déterministe)



- Fléxibilité des kernels: $k_1 + k_2$, $k_1 \times k_2$, $g(t) \times k$ (g est déterministe)
 - $k_1 + k_2$: "Ou" logique
 - $k_1 \times k_2$: "Et" logique
- Depuis quelques années: construction de kernels par des deep-nets Wilson **andothers** 2016, pratique mais peu interprétable



- Fléxibilité des kernels: $k_1 + k_2$, $k_1 \times k_2$, $g(t) \times k$ (g est déterministe)
 - $k_1 + k_2$: "Ou" logique
 - $k_1 \times k_2$: "Et" logique
- Depuis quelques années: construction de kernels par des deep-nets
 Wilson andothers 2016, pratique mais peu interprétable
- Plus récemment: construction de kernel à partir d'équations différentielles



Prédire avec un GP

- Contenu
- 2 Gaussien: vecteur vs. processus
 - Construction d'un GP
 - Le kernel
- 3 Prédire avec un GP
 - Règle de Bayes
 - prédiction = data × hypothèse
 - Exemples
 - Application: prédiction de température maritime
- 4 Avantages / Limites des GP naïfs
 - Avantages
 - Limites
 - Remèdes



• Règle de Bayes:
$$p(y_2|y_1) = \frac{p(y_1, y_2)}{p(y_1)} = \frac{p(y_1|y_2)p(y_2)}{p(y_1)}$$



• Règle de Bayes: $p(y_2|y_1) = \frac{p(y_1,y_2)}{p(y_1)} = \frac{p(y_1|y_2)p(y_2)}{p(y_1)}$

$$\bullet \ \mathbf{y} = [y_1, y_2]^\top \sim \mathcal{N}(\begin{pmatrix} \mu_1 \\ \mu_2 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} \Sigma_1 & \rho \\ \rho & \Sigma_2 \end{pmatrix})$$

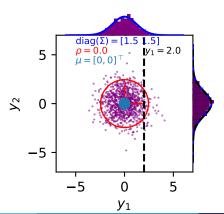


- Règle de Bayes: $p(y_2|y_1) = \frac{p(y_1,y_2)}{p(y_1)} = \frac{p(y_1|y_2)p(y_2)}{p(y_1)}$
- $\mathbf{y} = [y_1, y_2]^{\top} \sim \mathcal{N}(\begin{pmatrix} \mu_1 \\ \mu_2 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} \Sigma_1 & \rho \\ \rho & \Sigma_2 \end{pmatrix})$
- $p(y_2|y_1 = u) = \mathcal{N}(\mu_2 + \rho \Sigma_1^{-1}(u \mu_1), \Sigma_2 \rho^2 \Sigma_1^{-1})$

• Règle de Bayes: $p(y_2|y_1) = \frac{p(y_1,y_2)}{p(y_1)} = \frac{p(y_1|y_2)p(y_2)}{p(y_1)}$

$$\bullet \ \mathbf{y} = [y_1, y_2]^\top \sim \mathcal{N}(\begin{pmatrix} \mu_1 \\ \mu_2 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} \Sigma_1 & \rho \\ \rho & \Sigma_2 \end{pmatrix})$$

• $p(y_2|y_1 = u) = \mathcal{N}(\mu_2 + \rho \Sigma_1^{-1}(u - \mu_1), \Sigma_2 - \rho^2 \Sigma_1^{-1})$

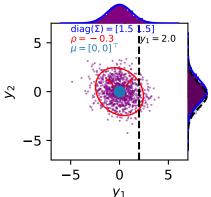




• Règle de Bayes: $p(y_2|y_1) = \frac{p(y_1,y_2)}{p(y_1)} = \frac{p(y_1|y_2)p(y_2)}{p(y_1)}$

$$\bullet \ \mathbf{y} = [y_1, y_2]^\top \sim \mathcal{N}(\begin{pmatrix} \mu_1 \\ \mu_2 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} \Sigma_1 & \rho \\ \rho & \Sigma_2 \end{pmatrix})$$

• $p(y_2|y_1 = u) = \mathcal{N}(\mu_2 + \rho \Sigma_1^{-1}(u - \mu_1), \Sigma_2 - \rho^2 \Sigma_1^{-1})$

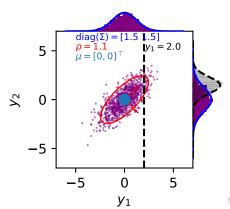




• Règle de Bayes: $p(y_2|y_1) = \frac{p(y_1,y_2)}{p(y_1)} = \frac{p(y_1|y_2)p(y_2)}{p(y_1)}$

$$\bullet \ \mathbf{y} = [y_1, y_2]^\top \sim \mathcal{N}(\begin{pmatrix} \mu_1 \\ \mu_2 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} \Sigma_1 & \rho \\ \rho & \Sigma_2 \end{pmatrix})$$

• $p(y_2|y_1 = u) = \mathcal{N}(\mu_2 + \rho \Sigma_1^{-1}(u - \mu_1), \Sigma_2 - \rho^2 \Sigma_1^{-1})$





• Règle de Bayes: $p(y_2|y_1) = \frac{p(y_1,y_2)}{p(y_1)} = \frac{p(y_1|y_2)p(y_2)}{p(y_1)}$

$$\bullet \ \mathbf{y} = [y_1, y_2]^\top \sim \mathcal{N}(\begin{pmatrix} \mu_1 \\ \mu_2 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} \Sigma_1 & \rho \\ \rho & \Sigma_2 \end{pmatrix})$$

$$p(y_2|y_1 = u) = \mathcal{N}(\mu_2 + \rho \Sigma_1^{-1}(u - \mu_1), \underbrace{\Sigma_2 - \rho^2 \Sigma_1^{-1}}_{>0})$$

Conditionner $y_2|y_1\leftrightarrow$ réduire l'incertitude (variance) de y_2 Conditionnement entre variables Gaussiennes: reste Gaussien (conjugué)



4 novembre 2024

Prédire avec un GP

- Contenu
- 2 Gaussien: vecteur vs. processus
 - Construction d'un GP
 - Le kernel
- 3 Prédire avec un GP
 - Règle de Bayes
 - prédiction = data \times hypothèse
 - Exemples
 - Application: prédiction de température maritime
- 4 Avantages / Limites des GP naïfs
 - Avantages
 - Limites
 - Remèdes



4 novembre 2024

• Data entraı̂nement: $\{y_i, x_i\}_{1 \le i \le n} = [y, \mathbf{x}]$, test: y_0, x_0



- Data entraı̂nement: $\{y_i, x_i\}_{1 \le i \le n} = [y, \mathbf{x}]$, test: y_0, x_0
- Modèle de prédiction (régression): $y_0 = f_{\theta}(x_0)$



- Data entraı̂nement: $\{y_i, x_i\}_{1 \le i \le n} = [y, \mathbf{x}]$, test: y_0, x_0
- Modèle de prédiction (régression): $y_0 = f_\theta(x_0)$
- Hypothèses: $f_{\theta} \sim GP(0, k_{\theta})$ et $y_i = f_{\theta}(x_i)$:

$$\underbrace{\begin{bmatrix} \mathbf{y}, f_{\theta}(\mathbf{x}_{0}) \end{bmatrix}^{\top}}_{(n+1)\times 1} \sim \mathcal{N}(\mathbf{0}, \begin{pmatrix} \mathbf{K}_{\mathbf{y}} & \mathbf{k}_{0} \\ \mathbf{k}_{0}^{\top} & k_{\theta}(\mathbf{x}_{0}, \mathbf{x}_{0}) \end{pmatrix})$$

- Data entraı̂nement: $\{y_i, x_i\}_{1 \le i \le n} = [y, \mathbf{x}]$, test: y_0, x_0
- Modèle de prédiction (régression): $y_0 = f_\theta(x_0)$
- Hypothèses: $f_{\theta} \sim GP(0, k_{\theta})$ et $y_i = f_{\theta}(x_i)$:

$$\underbrace{[\mathbf{y}, f_{\theta}(\mathbf{x}_0)]^{\top}}_{(n+1)\times 1} \sim \mathcal{N}(\mathbf{0}, \begin{pmatrix} \mathbf{K}_{\mathbf{y}} & \mathbf{k}_0 \\ \mathbf{k}_0^{\top} & k_{\theta}(\mathbf{x}_0, \mathbf{x}_0) \end{pmatrix})$$

$$\mathbf{K}_{\mathbf{y}} = \begin{pmatrix} k_{\theta}(\mathbf{x}_{1}, \mathbf{x}_{1}) & \dots & k_{\theta}(\mathbf{x}_{1}, \mathbf{x}_{n}) \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ k_{\theta}(\mathbf{x}_{n}, \mathbf{x}_{1}) & \dots & k_{\theta}(\mathbf{x}_{n}, \mathbf{x}_{n}) \end{pmatrix}$$



- Data entraı̂nement: $\{y_i, x_i\}_{1 \le i \le n} = [y, \mathbf{x}]$, test: y_0, x_0
- Modèle de prédiction (régression): $y_0 = f_\theta(x_0)$
- Hypothèses: $f_{\theta} \sim GP(0, k_{\theta})$ et $y_i = f_{\theta}(x_i)$:

$$\underbrace{[\mathbf{y}, f_{\theta}(\mathbf{x}_0)]^{\top}}_{(n+1)\times 1} \sim \mathcal{N}(\mathbf{0}, \begin{pmatrix} \mathbf{K}_{\mathbf{y}} & \mathbf{k}_0 \\ \mathbf{k}_0^{\top} & k_{\theta}(\mathbf{x}_0, \mathbf{x}_0) \end{pmatrix})$$

$$\mathbf{k}_0 = [k_{\theta}(\mathbf{x}_0, \mathbf{x}_1), \dots, k_{\theta}(\mathbf{x}_0, \mathbf{x}_n)]^{\top}$$



- Data entraı̂nement: $\{y_i, x_i\}_{1 \le i \le n} = [y, \mathbf{x}]$, test: y_0, x_0
- Modèle de prédiction (régression): $y_0 = f_\theta(x_0)$
- Hypothèses: $f_{\theta} \sim GP(0, k_{\theta})$ et $y_i = f_{\theta}(x_i)$:

$$\underbrace{\left[\mathbf{y}, f_{\theta}(\mathbf{x}_{0}) \right]^{\top}}_{(n+1) \times 1} \sim \mathcal{N}(\mathbf{0}, \begin{pmatrix} \mathbf{K}_{\mathbf{y}} & \mathbf{k}_{0} \\ \mathbf{k}_{0}^{\top} & k_{\theta}(\mathbf{x}_{0}, \mathbf{x}_{0}) \end{pmatrix})$$

- But: aprendre $f_{\theta} \to \operatorname{pr\'edire} f_{\theta}(x_0) = y_0$
- Intuitivement: générer des *prédictions* avec $f_{\theta} \sim GP(0, k_{\theta})$ ET garder ce qui fit à [y, x] et à x_0 :



- Data entraı̂nement: $\{y_i, x_i\}_{1 \le i \le n} = [y, \mathbf{x}]$, test: y_0, x_0
- Modèle de prédiction (régression): $y_0 = f_\theta(x_0)$
- Hypothèses: $f_{\theta} \sim GP(0, k_{\theta})$ et $y_i = f_{\theta}(x_i)$:

$$\underbrace{[\mathbf{y}, f_{\theta}(\mathbf{x}_{0})]^{\top}}_{(n+1)\times 1} \sim \mathcal{N}(\mathbf{0}, \begin{pmatrix} \mathbf{K}_{\mathbf{y}} & \mathbf{k}_{0} \\ \mathbf{k}_{0}^{\top} & k_{\theta}(\mathbf{x}_{0}, \mathbf{x}_{0}) \end{pmatrix})$$

- But: aprendre $f_{ heta} o$ prédire $f_{ heta}(x_0) = y_0$
- Intuitivement: générer des *prédictions* avec $f_{\theta} \sim GP(0, k_{\theta})$ ET garder ce qui fit à [y, x] et à x_0 :

$$\underbrace{p(hypoth\`ese|data)}_{posterior} = \underbrace{\frac{p(data|hypoth\`ese)}{p(data|hypoth\`ese)}}_{likelihood} \underbrace{p(hypoth\`ese)}_{p(data)}$$



- Data entraı̂nement: $\{y_i, x_i\}_{1 \le i \le n} = [y, \mathbf{x}]$, test: y_0, x_0
- Modèle de prédiction (régression): $y_0 = f_\theta(x_0)$
- Hypothèses: $f_{\theta} \sim GP(0, k_{\theta})$ et $y_i = f_{\theta}(x_i)$:

$$\underbrace{\begin{bmatrix} \mathbf{y}, f_{\theta}(\mathbf{x}_0) \end{bmatrix}^{\top}}_{(n+1)\times 1} \sim \mathcal{N}(\mathbf{0}, \begin{pmatrix} \mathbf{k}_{\mathbf{y}} & \mathbf{k}_0 \\ \mathbf{k}_0^{\top} & k_{\theta}(\mathbf{x}_0, \mathbf{x}_0) \end{pmatrix})$$

- But: aprendre $f_{\theta} \to \text{prédire } f_{\theta}(x_0) = y_0$
- Intuitivement: générer des *prédictions* avec $f_{\theta} \sim GP(0, k_{\theta})$ ET garder ce qui fit à $[y, \mathbf{x}]$ et à x_0 :
- Revient à générer selon:

$$posterior p(f_{\theta}(\mathbf{x}), f_{\theta}(x_0)|\mathbf{y}, \mathbf{x}, x_0)$$



- Data entraı̂nement: $\{y_i, x_i\}_{1 \le i \le n} = [y, \mathbf{x}]$, test: y_0, x_0
- Modèle de prédiction (régression): $y_0 = f_\theta(x_0)$
- Hypothèses: $f_{\theta} \sim GP(0, k_{\theta})$ et $y_i = f_{\theta}(x_i)$:

$$\underbrace{\left[\mathbf{y}, f_{\theta}(\mathbf{x}_{0}) \right]^{\top}}_{(n+1) \times 1} \sim \mathcal{N}(\mathbf{0}, \begin{pmatrix} \mathbf{K}_{\mathbf{y}} & \mathbf{k}_{0} \\ \mathbf{k}_{0}^{\top} & k_{\theta}(\mathbf{x}_{0}, \mathbf{x}_{0}) \end{pmatrix})$$

- But: aprendre $f_{\theta} \to \text{prédire } f_{\theta}(x_0) = y_0$
- Intuitivement: générer des *prédictions* avec $f_{\theta} \sim GP(0, k_{\theta})$ ET garder ce qui fit à [y, x] et à x_0 :
- Revient à générer selon:

$$\overbrace{p(f_{\theta}(\mathbf{x}), f_{\theta}(x_{0})|\mathbf{y}, \mathbf{x}, x_{0})}^{posterior} = \underbrace{\frac{\text{likelihood}}{p(\mathbf{y}|f_{\theta}(\mathbf{x}))} \underbrace{p(f_{\theta}(\mathbf{x}), f_{\theta}(x_{0}))}_{p(\mathbf{y}|\mathbf{x})}}_{p(\mathbf{y}|\mathbf{x})} = GP(m_{*}, k_{*}, \theta)$$
THALES

- $m_*, k_{*,\theta}$?

- $m_*, k_{*,\theta}$?
- $m_*(x_0) = 0 + \mathbf{k}_0^{\top} \mathbf{K}_y^{-1} y$

- $m_*, k_{*,\theta}$?
- $m_*(x_0) = 0 + \mathbf{k}_0^{\top} \mathbf{K}_y^{-1} \mathbf{y}$

- $m_*, k_{*,\theta}$?
- $m_*(x_0) = 0 + \mathbf{k}_0^{\top} \mathbf{K}_y^{-1} y$
- $k_{*,\theta}(x_0, x_0') = k_{\theta(x_0, x_0')-}$

- $m_*, k_{*,\theta}$?
- $p(f_{\theta}|y,\mathbf{x}) = GP(m_*,k_{*,\theta})$
- $m_*(x_0) = 0 + \mathbf{k}_0^{\top} \mathbf{K}_y^{-1} y$
- $\bullet \ k_{*,\theta}(x_0,x_0') = k_{\theta(x_0,x_0')-} \ \mathbf{k}_0^\top \mathbf{K}_{\mathbf{y}}^{-1} \mathbf{k}_0$

Prédiction (aka inférence):

- $m_*, k_{*,\theta}$?
- $p(f_{\theta}|y,\mathbf{x}) = GP(m_*,k_{*,\theta})$
- $m_*(x_0) = 0 + \mathbf{k}_0^{\top} \mathbf{K}_y^{-1} y$
- $k_{*,\theta}(x_0, x_0') = k_{\theta(x_0, x_0')} \mathbf{k}_0^{\top} \mathbf{K}_y^{-1} \mathbf{k}_0$
- La distribution de probabilités de la prédiction y_0 (connaissant les data d'entraînement) est caractérisée !
- Pour n'importe quel x_0 : accès à la prédiction moyenne, incertitude (intervalle de confiance), quantiles, etc., de y_0



Prédiction (aka inférence):

- $m_*, k_{*,\theta}$?
- $p(f_{\theta}|y,\mathbf{x}) = GP(m_*,k_{*,\theta})$
- $m_*(x_0) = 0 + \mathbf{k}_0^{\top} \mathbf{K}_v^{-1} y$
- $k_{*,\theta}(x_0, x_0') = k_{\theta(x_0, x_0')} \mathbf{k}_0^{\top} \mathbf{K}_y^{-1} \mathbf{k}_0$
- La distribution de probabilités de la prédiction y_0 (connaissant les data d'entraînement) est caractérisée !
- Pour n'importe quel x_0 : accès à la prédiction moyenne, incertitude (intervalle de confiance), quantiles, etc., de y_0
- Modèle de prédiction = { data d'entraînement, hyperparamètres }



Prédiction (aka inférence):

- $m_*, k_{*,\theta}$?
- $p(f_{\theta}|y,\mathbf{x}) = GP(m_*,k_{*,\theta})$
- $m_*(x_0) = 0 + \mathbf{k}_0^{\top} \mathbf{K}_v^{-1} y$
- $k_{*,\theta}(x_0, x_0') = k_{\theta(x_0, x_0')} \mathbf{k}_0^{\top} \mathbf{K}_y^{-1} \mathbf{k}_0$
- La distribution de probabilités de la prédiction y_0 (connaissant les data d'entraînement) est caractérisée !
- Pour n'importe quel x_0 : accès à la prédiction moyenne, incertitude (intervalle de confiance), quantiles, etc., de y_0
- Modèle de prédiction = { data d'entraînement, hyperparamètres }
- La prédiction dépend aussi de θ (hyperparamètre) !



4 novembre 2024

Entraînement:

• Meilleur θ ?



Entraînement:

- Meilleur θ ?
- Maximum de *likelihood*(θ) := $p(y|f_{\theta}(\mathbf{x}))$?

Entraînement:

- Meilleur θ ?
- Maximum de *likelihood*(θ) := $p(y|f_{\theta}(\mathbf{x}))$?
- NON !! Restreint l'hypothèse uniquement à [y, x] (overfitting)

Entraînement:

- Meilleur θ ?
- Maximum de *likelihood*(θ) := $p(y|f_{\theta}(\mathbf{x}))$?
- NON!! Restreint l'hypothèse uniquement à [y, x] (overfitting)
- Mieux: hypothèse sur les data + voisinage
- Maximum de *likelihood marginale*:

Entraînement:

- Meilleur θ ?
- Maximum de *likelihood*(θ) := $p(y|f_{\theta}(\mathbf{x}))$?
- NON!! Restreint l'hypothèse uniquement à [y, x] (overfitting)
- Mieux: hypothèse sur les data + voisinage
- Maximum de *likelihood marginale*:

$$= p(\mathbf{y}|f_{\theta}(\mathbf{x}))p(f_{\theta}(\mathbf{x}))$$

ullet $\leftrightarrow heta$ telle que les données d'entraînement y soient le plus probables au regard de toutes les des hypothèses possibles et des inputs x



Entraînement:

- Meilleur θ ?
- Maximum de *likelihood*(θ) := $p(y|f_{\theta}(\mathbf{x}))$?
- NON!! Restreint l'hypothèse uniquement à [y, x] (overfitting)
- Mieux: hypothèse sur les data + voisinage
- Maximum de *likelihood marginale*:

$$p(y|\mathbf{x},\theta) = \int_{\mathbb{R}^n} p(y|\mathbf{x},f_{\theta}(\mathbf{x})) p(f_{\theta}(\mathbf{x})) df_{\theta}$$

 $\bullet \leftrightarrow \theta$ telle que les données d'entraînement y soient le plus probables au regard de toutes les des hypothèses possibles et des inputs x



Entraînement:

- Meilleur θ ?
- Maximum de *likelihood*(θ) := $p(y|f_{\theta}(\mathbf{x}))$?
- NON!! Restreint l'hypothèse uniquement à [y, x] (overfitting)
- Mieux: hypothèse sur les data + voisinage
- Maximum de *likelihood marginale*:

$$p(y|\mathbf{x}, \theta) = \int_{\mathbb{R}^n} p(y|\mathbf{x}, f_{\theta}(\mathbf{x})) p(f_{\theta}(\mathbf{x})) df_{\theta}$$
$$= \int \mathcal{N}(f_{\theta}(\mathbf{x}), I_d) \mathcal{N}(\mathbf{0}, \mathbf{K}_y) df_{\theta}$$

• $\leftrightarrow \theta$ telle que les données d'entraînement y soient le plus probables au regard de toutes les des hypothèses possibles et des inputs x



$$\log likelihoodmarg(\theta) = \log p(y|\mathbf{x}, \theta) (= \log \prod_{i} p(y_{i}|\mathbf{x}_{i}, \theta))$$

$$= \log \mathcal{N}(\mathbf{0}, \mathbf{K}_{y} + I_{d})$$

$$= -\underbrace{y^{\top} \mathbf{K}_{y}^{-1} y}_{fid\acute{e}lit\acute{e}} - \underbrace{\frac{1}{2} \log |\mathbf{K}_{y}|}_{p\acute{e}nalit\acute{e}} - \frac{n}{2} \log 2\pi$$

0

 $\log \textit{likelihoodmarg}(\theta) = \log p(y|\mathbf{x}, \theta) (= \log \prod_{i} p(y_{i}|\mathbf{x}_{i}, \theta))$ $= \log \mathcal{N}(\mathbf{0}, \mathbf{K}_{y} + I_{d})$ $= -\underbrace{y^{\top} \mathbf{K}_{y}^{-1} y}_{\textit{fid\'elit\'e}} - \underbrace{\frac{1}{2} \log |\mathbf{K}_{y}|}_{\textit{p\'enalit\'e}} - \frac{n}{2} \log 2\pi$

• Rappel: \mathbf{K}_y matrice $n \times n$ des $k_{\theta}(x_i, x_j) = \mathbb{C}(f_{\theta}(x_i), f_{\theta}(x_j)) \stackrel{ex}{=} e^{-\frac{(x_i - x_j)^2}{2\ell^2}}$



0

 $\log \frac{likelihoodmarg}{(\theta)} = \log p(y|\mathbf{x}, \theta) (= \log \prod_{i} p(y_{i}|\mathbf{x}_{i}, \theta))$ $= \log \mathcal{N}(\mathbf{0}, \mathbf{K}_{y} + I_{d})$ $= -\underbrace{y^{\top} \mathbf{K}_{y}^{-1} y}_{fid\acute{e}lit\acute{e}} - \underbrace{\frac{1}{2} \log |\mathbf{K}_{y}|}_{p\acute{e}nalit\acute{e}} - \frac{n}{2} \log 2\pi$

- Rappel: \mathbf{K}_y matrice $n \times n$ des $k_{\theta}(x_i, x_j) = \mathbb{C}(f_{\theta}(x_i), f_{\theta}(x_j)) \stackrel{ex}{=} e^{-\frac{(x_i x_j)^2}{2\ell^2}}$
- Apprentissage de θ par descente de gradient de $-\log$ likelihoodmarg (large sous-domaine de la communauté GP)



Méthodo générale:

 $\textbf{0} \ \ \mathsf{Collecter} \ \mathsf{des} \ \mathsf{donn\acute{e}es:} \ \{y_i, x_i\}_{1 \leq i \leq n} = [\textbf{\textit{y}}, \textbf{\textit{x}}]$

- Collecter des données: $\{y_i, x_i\}_{1 \le i \le n} = [y, x]$
- **②** Formuler des hypothèses: choisir/combiner un/des kernels k_{θ}

- Collecter des données: $\{y_i, x_i\}_{1 \le i \le n} = [y, \mathbf{x}]$
- 2 Formuler des hypothèses: choisir/combiner un/des kernels k_{θ}
- ullet Entraı̂ner le modèle: estimer les hyperparamètres heta

- **1** Collecter des données: $\{y_i, x_i\}_{1 \le i \le n} = [y, x]$
- **2** Formuler des hypothèses: choisir/combiner un/des kernels k_{θ}
- **3** Entraı̂ner le modèle: estimer les hyperparamètres θ
- **1** Prédire ("inférence"): évaluer m_* et $k_{*,\theta}$, générer des données, etc.

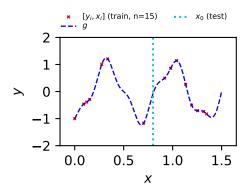
- **1** Collecter des données: $\{y_i, x_i\}_{1 \le i \le n} = [y, x]$
- **2** Formuler des hypothèses: choisir/combiner un/des kernels k_{θ}
- ullet Entraı̂ner le modèle: estimer les hyperparamètres heta
- Prédire ("inférence"): évaluer m_* et $k_{*,\theta}$, générer des données, etc.
- Oritique/évaluation du modèle



- Contenu
- 2 Gaussien: vecteur vs. processus
 - Construction d'un GP
 - Le kernel
- 3 Prédire avec un GP
 - Règle de Bayes
 - prédiction = data × hypothèse
 - Exemples
 - Application: prédiction de température maritime
- 4 Avantages / Limites des GP naïfs
 - Avantages
 - Limites
 - Remèdes



- train = $\{y_i, x_i\}_{i \le n}$ où $y_i = g(x_i) = -\cos(3\pi x_i) + \frac{1}{4}\sin(8\pi x_i)$
- g inconnue



• $f_{\theta}(x_0 = 0.8) = \tilde{y}_0$? (interpolation)



4 novembre 2024

• Hypothèses: $y_i = f(x_i)$ et f est lisse \rightarrow kernel exponentiel quadratique

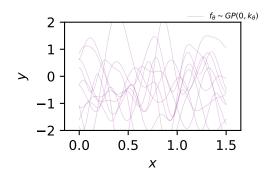
•
$$k_{\theta}(x, x') = \sigma_k^2 e^{-\frac{(x-x')^2}{2\ell^2}}, \theta = [\sigma_k, \ell]$$



ullet Hypothèses: $y_i = f(x_i)$ et f est lisse o kernel exponentiel quadratique

•
$$k_{\theta}(x, x') = \sigma_k^2 e^{-\frac{(x-x')^2}{2\ell^2}}, \theta = [\sigma_k, \ell]$$

• $[\sigma_k, \ell]$ inconnus (ici fixés arbitrairement)



Entraînement

• θ ? minimisation de – log likelihood marginale: $\sigma_k \approx 0.92, \ell \approx 0.11$

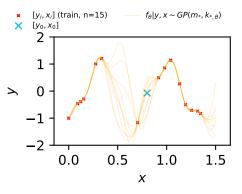
Entraînement

- θ ? minimisation de log likelihood marginale: $\sigma_k \approx 0.92, \ell \approx 0.11$
- $m_*, k_{*,\theta}$ et θ appris



Entraînement

- θ ? minimisation de log likelihood marginale: $\sigma_k \approx 0.92, \ell \approx 0.11$
- $m_*, k_{*,\theta}$ et θ appris
- Inférence: générer selon la distribution posterior $GP(m_*, k_{*,\theta})$

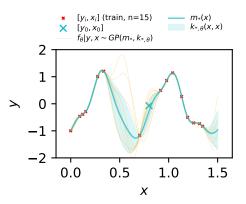


Inférence

- \tilde{y}_0 : moyenne de $p(f_\theta|y,\mathbf{x},x_0)=GP(m_*,k_{*,\theta})$ en $x_0=0.8$
- $m_*(x_0) \pm \frac{1}{2} \sqrt{k_{*,\theta}(x_0, x_0)}$: = -0.22 ± 0.16 (95%)



• Quid d'autres valeurs de x_0 ?



Incertitude sur "toute" la fonction



38 / 62

 Hypothèses précédentes: "pas de bruit" (hypothèse forte), "lisse" (hypothèse large)



- Hypothèses précédentes: "pas de bruit" (hypothèse forte), "lisse" (hypothèse large)
- Hypothèses plus réalistes ?



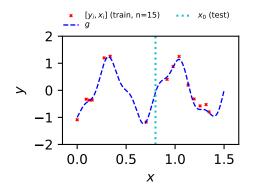
4 novembre 2024

- Hypothèses précédentes: "pas de bruit" (hypothèse forte), "lisse" (hypothèse large)
- Hypothèses plus réalistes ?
- Bruit de mesure $y_i = f_{\theta}(x_i) + \epsilon$, lisse, quasi-périodique:

$$k_{\theta} = k_{\epsilon} + \sigma_{\mathsf{exp2}} k_{\mathsf{exp2}} \times \sigma_{\mathsf{per}} k_{\mathsf{per}}$$

- k_{ϵ} : bruit
- $k_{exp2} \times k_{per}$: Lisse ET quasi-périodique
- $\theta = [\sigma_{\epsilon}, \sigma_{exp2}, \ell, \sigma_{per}, T_0, \ell_{per}]$

- Même données + bruit blanc ($\sigma = 0.3$)
- $f_{\theta}(x_0 = 0.8) = \tilde{y}_0 \text{ (smoothing)}$?



• θ ? minimisation de — log likelihood: $\sigma_{\epsilon} \approx 0.24$, $\sigma_{\text{exp2}} \approx 1$, $\ell \approx 1$, $\sigma_{\text{per}} \approx 1$, $T_0 = 0.7$, $\ell_{\text{per}} \approx 1$

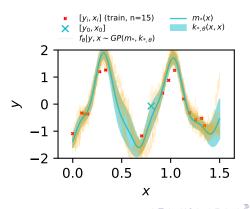


- θ ? minimisation de $-\log$ likelihood: $\sigma_{\epsilon} \approx 0.24$, $\sigma_{exp2} \approx 1$, $\ell \approx 1$, $\sigma_{per} \approx 1$, $T_0 = 0.7$, $\ell_{per} \approx 1$
- ullet $m_*, k_{*, heta}$ et heta appris



4 novembre 2024

- θ ? minimisation de log likelihood: $\sigma_{\epsilon} \approx 0.24$, $\sigma_{\text{exp2}} \approx 1$, $\ell \approx 1$, $\sigma_{per} \approx 1$, $T_0 = 0.7$, $\ell_{per} \approx 1$
- $m_*, k_{*,\theta}$ et θ appris
- Génération selon la distribution posterior $GP(m_*, k_{*,\theta})$





• Pour x > 1.5? (forecast)



- Pour x > 1.5? (forecast)
- Comparaison des deux hypothèses

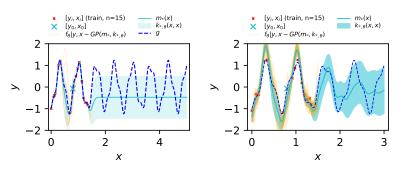


Figure: (a): sans bruit, lisse (b): bruit, lisse et périodique

Prédire avec un GP

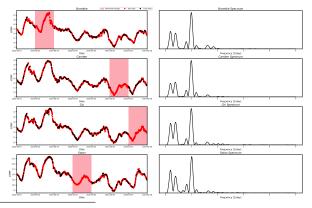
- Contenu
- 2 Gaussien: vecteur vs. processus
 - Construction d'un GP
 - Le kernel
- 3 Prédire avec un GP
 - Règle de Bayes
 - prédiction = data × hypothèse
 - Exemples
 - Application: prédiction de température maritime
- 4 Avantages / Limites des GP naïfs
 - Avantages
 - Limites
 - Remèdes



• Séries temporelles de température sur la côté sud anglaise⁵: 4 stations sur 7 jours, $\Delta t \approx 5 \text{min}$



- Séries temporelles de température sur la côté sud anglaise⁵: 4 stations sur 7 jours, $\Delta t \approx 5 \text{min}$
- But: estimation du bruit, forecasting et complétion de valeurs manquantes





• Série temporelle multivariée, GP défini de $\mathcal{X}=\mathbb{R}^+$ (temps) vers $\mathcal{Y}=\mathbb{R}^4$ (stations)



- ullet Série temporelle multivariée, GP défini de $\mathcal{X}=\mathbb{R}^+$ (temps) vers $\mathcal{Y} = \mathbb{R}^4$ (stations)
- Hypothèses: les stations sont corrélées, bruitées et périodiques
- Deux niveaux de corrélation: intra-station et inter-station

$$\mathbf{K}(\mathsf{t},\,\mathsf{t}') = \begin{pmatrix} k_{11}(t,t') & k_{12}(t,t') & k_{13}(t,t') & k_{14}(t,t') \\ \vdots & k_{22}(t,t') & k_{23}(t,t') & k_{24}(t,t') \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ k_{41}(t,t') & \dots & \dots & k_{44}(t,t') \end{pmatrix}$$

• Chaque station doit être prédite avec par elle-même + les autres



- Kernels "spectraux" ⁶Parra and Tobar 2017: fit les puissances spectrales pour estimer les périodicités intra/inter et filtrer le bruit (hautes fréquences)
- Entraı̂nement: n = 644, test: n = 6845, 84 hyperparamètres (notebook dispo: détails optim etc.)
- . . .
- 1500 itérations (1min 23s)
- Comparaison avec le même kernel sans corrélation inter-station



	MAE	MAPE	RMSE
Bramble (NaN)	2.10	10.37	2.79
Camber (NaN)	1.58	13.82	1.74
Chi (forecast)	1.76	12.53	2.01
Soton (NaN)	1.68	15.00	2.13

kernel sans corrélation inter-station

	MAE	MAPE	RMSE
Bramble	0.65	3.44	0.89
Camber	0.61	5.27	0.72
Chi	0.61	4.72	0.71
Soton	0.45	3.55	0.54

kernel avec corrélation inter-station

Table: Erreurs de prédiction



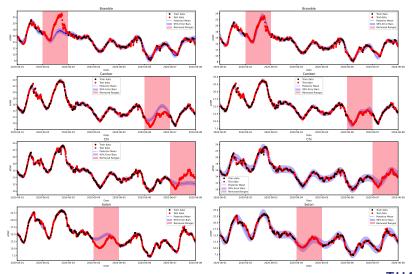


Figure: Pédictions (rouge) sans (resp avec) corrélation inter-stations à gauche representations à gauche representation au le constitution de la constitut

• Kernel appris par chaque modèle:

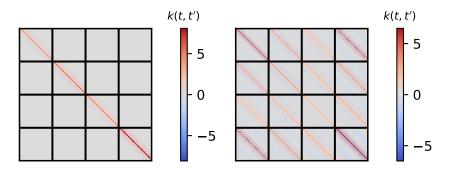


Figure: Kernel sans (resp avec) corrélation inter-stations à gauche (resp droite

• Kernel appris par chaque modèle:

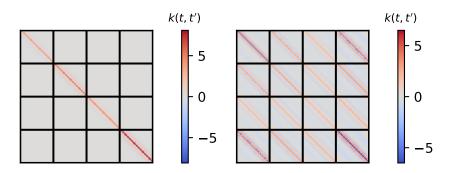


Figure: Kernel sans (resp avec) corrélation inter-stations à gauche (resp droite

• Le modèle corrèle les prédictions de chaque station à court-terme



Prédictions probabilistes:



- Prédictions probabilistes:
- Quelle est la probabilité qu'il fasse entre 13° et 14° à Bramble au 08/06/2020 à minuit ?
- Prédiction du modèle: 59%



- Prédictions probabilistes:
- Quelle est la probabilité qu'il fasse entre 13° et 14° à Bramble au 08/06/2020 à minuit ?
- Prédiction du modèle: 59%
- A l'inverse: à la même date, quel intervalle à 90% ?
- Prédiction du modèle: [14.2; 14.9]°



Avantages / Limites des GP naïfs

- Contenu
- 2 Gaussien: vecteur vs. processus
 - Construction d'un GP
 - Le kernel
- 3 Prédire avec un GP
 - Règle de Bayes
 - prédiction = data × hypothèse
 - Exemples
 - Application: prédiction de température maritime
- 4 Avantages / Limites des GP naïfs
 - Avantages
 - Limites
 - Remèdes



• Probabiliste: génératif, fourni une confiance (aka incertitude)



- Probabiliste: génératif, fourni une confiance (aka incertitude)
- Bayésien: "contrôle" des hypothèses (a priori)



- Probabiliste: génératif, fourni une confiance (aka incertitude)
- Bayésien: "contrôle" des hypothèses (a priori)
- *Non-paramétrique*: prédiction = data × hypothèse
 - Paramètres du GP (moyenne, covariance) = les/des données d'entraînement, de taille infinie (non-bornée)

- Probabiliste: génératif, fourni une confiance (aka incertitude)
- Bayésien: "contrôle" des hypothèses (a priori)
- Non-paramétrique: prédiction = $data \times hypothèse$
 - Paramètres du GP (moyenne, covariance) = les/des données d'entraînement, de taille infinie (non-bornée)
 - 2 + les hyperparamètres (ce qui règle l'hypothèse)

- Probabiliste: génératif, fourni une confiance (aka incertitude)
- Bayésien: "contrôle" des hypothèses (a priori)
- *Non-paramétrique*: prédiction = data × hypothèse
 - Paramètres du GP (moyenne, covariance) = les/des données d'entraînement, de taille infinie (non-bornée)
 - 4 + les hyperparamètres (ce qui règle l'hypothèse)
- Le modèle prédictif n'est pas "réduit" à un ensemble fini de paramètres



- Probabiliste: génératif, fourni une confiance (aka incertitude)
- Bayésien: "contrôle" des hypothèses (a priori)
- *Non-paramétrique*: prédiction = data × hypothèse
 - Paramètres du GP (moyenne, covariance) = les/des données d'entraînement, de taille infinie (non-bornée)
 - 4 + les hyperparamètres (ce qui règle l'hypothèse)
- Le modèle prédictif n'est pas "réduit" à un ensemble fini de paramètres
- Cadre naturel des données spatio/temporelles: échantillonnage irrégulier en temps (≠ SARIMA) et espace, décomposition de la variabilité



- Probabiliste: génératif, fourni une confiance (aka incertitude)
- Bayésien: "contrôle" des hypothèses (a priori)
- *Non-paramétrique*: prédiction = data × hypothèse
 - Paramètres du GP (moyenne, covariance) = les/des données d'entraînement, de taille infinie (non-bornée)
 - 4 + les hyperparamètres (ce qui règle l'hypothèse)
- Le modèle prédictif n'est pas "réduit" à un ensemble fini de paramètres
- Cadre naturel des données spatio/temporelles: échantillonnage irrégulier en temps (≠ SARIMA) et espace, décomposition de la variabilité
- Extensible à plus de dimensions d'entrée que le temps



Avantages / Limites des GP naïfs

- Contenu
- 2 Gaussien: vecteur vs. processus
 - Construction d'un GP
 - Le kernel
- Prédire avec un GP
 - Règle de Bayes
 - prédiction = data × hypothèse
 - Exemples
 - Application: prédiction de température maritime
- 4 Avantages / Limites des GP naïfs
 - Avantages
 - Limites
 - Remèdes



Scalabilité:

- Bottleneck = inverser la matrice de covariance (kernel)
- La distribution prédictive $GP(m_*, k_{*,\theta})$ est lourde à calculer $(n \gg 10^4)$
 - Entraı̂nement (log-likelihood): calcul: $\mathcal{O}(n^3)$ /itération. Mémoire: $\mathcal{O}(n^2)$
 - Prédiction (inférence): calcul $\mathcal{O}(n^3)$ (une fois),

GP pour les données non-Gaussiennes ?

• Monde Gaussien: symmétrique, pas d'outliers, valeurs réelles



GP pour les données non-Gaussiennes ?

Monde Gaussien: symmétrique, pas d'outliers, valeurs réelles

$$\overbrace{p(f_{\theta}|y,\mathbf{x},x_{0})}^{posterior} = \overbrace{\frac{p(y|\mathbf{x},f_{\theta})}{p(y|\mathbf{x})}}^{likelihood} \underbrace{p(f_{\theta})}_{Gaussien}$$

$$\underbrace{\frac{p(y|\mathbf{x},f_{\theta})}{p(y|\mathbf{x})}}_{Gaussien}$$

GP pour les données non-Gaussiennes ?

Monde Gaussien: symmétrique, pas d'outliers, valeurs réelles

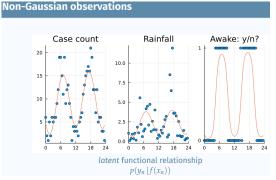
$$\underbrace{p(f_{\theta}|y,\mathbf{x},x_{0})}_{p(f_{\theta}|y,\mathbf{x},x_{0})} = \underbrace{\frac{p(y|\mathbf{x},f_{\theta})}{p(y|\mathbf{x})}}_{likelihood = Gaussien} prior = Gaussien$$

$$\underbrace{p(y|\mathbf{x},f_{\theta})}_{Gaussien} prior = Gaussien$$

$$\underbrace{p(y|\mathbf{x})}_{Gaussien} = GP(m_{*},k_{*,\theta})$$

GP pour les données non-Gaussiennes ?

 Mondes non-Gaussiens: valeurs positives (durées, pluviométrie), comptage (nb d'accidents), valeurs extrèmes (rendements financiers), taux, catégorielles, etc.



Source: Gaussian Process Summer School 22'



GP pour les données non-Gaussiennes ?

- Mondes non-Gaussiens: valeurs positives (durées, pluviométrie), comptage (nb d'accidents), valeurs extrèmes (rendements financiers), taux, catégorielles, etc.
- Principe: transformer $\mathbb{E}(y)$ (espace latent) puis faire une hypothèse de GP sur la résultante. Prédiction en opération inverse.



GP pour les données non-Gaussiennes ?

- Mondes non-Gaussiens: valeurs positives (durées, pluviométrie), comptage (nb d'accidents), valeurs extrèmes (rendements financiers), taux, catégorielles, etc.
- Principe: transformer $\mathbb{E}(y)$ (espace latent) puis faire une hypothèse de GP sur la résultante. Prédiction en opération inverse.
- Exempe (classification): modéliser inv-logit[p(y = Awake)] avec un GP



GP pour les données non-Gaussiennes ?

- Mondes non-Gaussiens: valeurs positives (durées, pluviométrie), comptage (nb d'accidents), valeurs extrèmes (rendements financiers), taux, catégorielles, etc.
- Principe: transformer $\mathbb{E}(y)$ (espace latent) puis faire une hypothèse de GP sur la résultante. Prédiction en opération inverse.
- Exempe (classification): modéliser inv-logit[p(y = Awake)] avec un GP
- Conséquence:



GP pour les données non-Gaussiennes ?

- Mondes non-Gaussiens: valeurs positives (durées, pluviométrie), comptage (nb d'accidents), valeurs extrèmes (rendements financiers), taux, catégorielles, etc.
- Principe: transformer $\mathbb{E}(y)$ (espace latent) puis faire une hypothèse de GP sur la résultante. Prédiction en opération inverse.
- Exempe (classification): modéliser inv-logit[p(y = Awake)] avec un GP
- Conséquence:

$$\underbrace{p(f_{\theta}|y,\mathbf{x},x_{0})}_{p(f_{\theta}|y,\mathbf{x},x_{0})} = \underbrace{\frac{\text{likelihood} = \text{non-Gaussien prior} = \text{Gaussien}}{p(y|\mathbf{x},f_{\theta})}}_{p(y|\mathbf{x})} = \underbrace{\frac{p(y|\mathbf{x},f_{\theta})}{p(y|\mathbf{x})}}_{non-Gaussien} = \underbrace{\frac$$

56 / 62

Avantages / Limites des GP naïfs

- Contenu
- 2 Gaussien: vecteur vs. processus
 - Construction d'un GP
 - Le kernel
- Prédire avec un GP
 - Règle de Bayes
 - prédiction = data × hypothèse
 - Exemples
 - Application: prédiction de température maritime
- 4 Avantages / Limites des GP naïfs
 - Avantages
 - Limites
 - Remèdes



 $GP(m_*, k_{*,\theta})$ est incalculable analytiquement ou trop coûteuse,

- Méthodes variationnelles: Bruinsma andothers 2020; Hensman andothers 2015
- $GP(m_*, k_{*,\theta})$ est approximée par une distribution "variationnelle" q_{ψ} , plus simple à apprendre



 $GP(m_*, k_{*,\theta})$ est incalculable analytiquement ou trop coûteuse,

- Méthodes variationnelles: Bruinsma andothers 2020; Hensman andothers 2015
- $GP(m_*, k_{*,\theta})$ est approximée par une distribution "variationnelle" q_{ψ} , plus simple à apprendre
- (hyper-) paramètres appris par minimisation d'une "différence" q_{ψ} et $GP(m_*, k_{*,\theta})$

 $GP(m_*, k_{*,\theta})$ est incalculable analytiquement ou trop coûteuse,

- Méthodes variationnelles: Bruinsma andothers 2020; Hensman andothers 2015
- $GP(m_*, k_{*,\theta})$ est approximée par une distribution "variationnelle" q_{ψ} , plus simple à apprendre
- (hyper-) paramètres appris par minimisation d'une "différence" q_{ψ} et $GP(m_*, k_{*,\theta})$
- Le modèle d'inférence est donc appris en résolvant un problème d'optimisation: gradient stochastique, differentiation automatique (PyTorch, Tensorflow, JAX), etc.



Méthodes d'échantillonnage (MCMC, importance sampling, MH, etc): Rasmussen and Williams 2006

• Principe: remplacer $GP(m_*, k_{*,\theta})$ par un échantillonneur peu coutêux



Méthodes d'échantillonnage (MCMC, importance sampling, MH, etc): Rasmussen and Williams 2006

- Principe: remplacer $GP(m_*, k_{*,\theta})$ par un échantillonneur peu coutêux
- $m_*, k_{*,\theta}$ restent inconnus et sont estimés en échantillonnant (beaucoup) puis en moyennant (loi forte des grands nombres)



Méthodes d'échantillonnage (MCMC, importance sampling, MH, etc): Rasmussen and Williams 2006

- ullet Principe: remplacer $GP(m_*,k_{*, heta})$ par un échantillonneur peu coutêux
- $m_*, k_{*,\theta}$ restent inconnus et sont estimés en échantillonnant (beaucoup) puis en moyennant (loi forte des grands nombres)

Méthode de *Kalman* ("State-space" model): Solin **and** Särkkä 2014; Titsias **andothers** 2024

• (uniquement pour les données temporelles)



Méthodes d'*échantillonnage* (MCMC, importance sampling, MH, etc): Rasmussen **and** Williams 2006

- ullet Principe: remplacer $GP(m_*,k_{*, heta})$ par un échantillonneur peu coutêux
- $m_*, k_{*,\theta}$ restent inconnus et sont estimés en échantillonnant (beaucoup) puis en moyennant (loi forte des grands nombres)

Méthode de *Kalman* ("State-space" model): Solin **and** Särkkä 2014; Titsias **andothers** 2024

- (uniquement pour les données temporelles)
- Réécriture du GP en équation différentielle stochastique



Méthodes d'*échantillonnage* (MCMC, importance sampling, MH, etc): Rasmussen **and** Williams 2006

- ullet Principe: remplacer $GP(m_*,k_{*, heta})$ par un échantillonneur peu coutêux
- $m_*, k_{*,\theta}$ restent inconnus et sont estimés en échantillonnant (beaucoup) puis en moyennant (loi forte des grands nombres)

Méthode de *Kalman* ("State-space" model): Solin **and** Särkkä 2014; Titsias **andothers** 2024

- (uniquement pour les données temporelles)
- Réécriture du GP en équation différentielle stochastique
- Apprentissage par l'algorithme de Kalman: $\mathcal{O}(n)$, calcul $\mathcal{O}(n)$



Méthodes d'*échantillonnage* (MCMC, importance sampling, MH, etc): Rasmussen **and** Williams 2006

- ullet Principe: remplacer $GP(m_*,k_{*, heta})$ par un échantillonneur peu coutêux
- $m_*, k_{*,\theta}$ restent inconnus et sont estimés en échantillonnant (beaucoup) puis en moyennant (loi forte des grands nombres)

Méthode de *Kalman* ("State-space" model): Solin **and** Särkkä 2014; Titsias **andothers** 2024

- (uniquement pour les données temporelles)
- Réécriture du *GP* en équation différentielle stochastique
- Apprentissage par l'algorithme de Kalman: $\mathcal{O}(n)$, calcul $\mathcal{O}(n)$
- La réecriture dépend du kernel: nécessite un kernel "pas trop compliqué" (état de recherche)



Merci pour votre attention. Questions ?

Références I

- Borovitskiy, Viacheslav **andothers** (2021). "Matérn Gaussian Processes on Graphs". in.
- Bruinsma, Wessel P andothers (2020). "Scalable Exact Inference in Multi-Output Gaussian Processes". in.
- Hensman, James andothers (2015). "Scalable Variational Gaussian Process Classification". in.
- Parra, Gabriel and Felipe Tobar (2017). "Spectral mixture kernels for multi-output Gaussian processes". in.
- Rasmussen, Carl Edward **and** Christopher K.I Williams (2006). *Gaussian Processes for Machine Learning*. MIT Press. ISBN: 026218253X.
- Solin, Arno and Simo Särkkä (2014). "Explicit Link Between Periodic Covariance Functions and State Space Models". in.
- Titsias, Michalis K andothers (2024). "Kalman Filter for Online Classification of Non-Stationary Data". in.

Références II



Wilson, Andrew Gordon **andothers** (2016). "Deep Kernel Learning". in.

