Notes TC4

Adrien Pavao

September 2017

Contents

1 Inférence Bayesienne

Différents niveaux d'inférence...

1.1 Niveau 1 : Classification Bayesienne

- Y : La classe à prédire (catégorielle)
- $\vec{X}$: Vecteur aléatoire, $\vec{X} \begin{pmatrix} x_1 \\ ... \\ x_2 \end{pmatrix}$

On cherche à choisir y de façon à maximiser :

$$P(Y = y|\vec{X} = \vec{x}) = \frac{P(\vec{X} = \vec{x}|Y = y)P(Y = y)}{P(\vec{X} = \vec{x})}$$

Dans cette formule, on remarque des termes particuliers :

- La **vraisemblance** : $P(\vec{X} = \vec{x}|Y = y)$.
- L'**a priori** : $P(Y = y)$.

- L'**évidence** : $P(\vec{X} = \vec{x})$.

La vraisemblance et l'a priori sont à estimer. On estime une ditribution sur X pour chaque classe y. On peut donc faire l'hypothèse naïve suivante :

$$P(\vec{X} = \vec{x}|Y = y) = \Pi_{i=1}^{d} P(\vec{X}_i = \vec{x}_i|Y = y)$$

Estimer les paramètres

Cas Bernouilli : $\Theta_{iy} = \frac{n(1,i,y)}{N(i,y)}$

$n(1, i, y)$ = nombre de fois où $\vec{X}_i = 1$ dans la classe y.

Si $n(1, i, y) = 0$ alors $\Theta_{iy} = 0$ Donc $P(\vec{X} = \vec{x}|Y = y) = 0$, ce qui est mauvais. On estime Θ sur les données et on vient à la conclusion qu'un evenement est impossible sous pretexte qu'on ne l'a jamais observé. Il faut éviter ce problème.

Ce type d'estimation est appelée une estimation MLE : Maximum Likelihood Estimate. Il s'agit de l'interprétation **fréquentiste** des données.

Autrement dit, on cherche les paramètres Θ_{iy} qui maximisent $P(D|\Theta_{iy})$. (D la réalisation des données ..)

1.2 Niveau 2 : Inférence Bayesienne des paramètres

On cherche $P(X_i|Y)$ -¿ $P(X_i|Y_i\Theta_{iy})$. L'apprentissage revient à l'estimation d'une distribution sur les paramètres.

Estimer $P(\Theta_{iy}|D)$.

$$P(\Theta_{iy}|D) = \frac{P(D|\Theta_{iy})P(\Theta_{iy})}{P(D)}$$

1.2.1 A priori sur les paramètres

Cas Bernouilli : $\Theta_{iy} \in [0, 1]$, continu. Donc $P(\Theta_{iy})$ _ une loi continue de support $[0, 1]$. Le choix : Loi Beta.

$$P(\Theta_{iy}; \alpha_0, \alpha_1) = \frac{\Gamma(\alpha_0 + \alpha_1)}{\Gamma(\alpha_0)\Gamma(\alpha_1)} \Theta_{iy}^{\alpha_1 - 1}(1 - \Theta_{iy})^{\alpha_0 - 1}$$

(Dénominateur et game -¿ Normalisation)

α_0 et α_1 sont les paramètres de la loi Beta. On a $\alpha_0, \alpha_1 > 0, \in R$ (R reel, D majuscule ...)

- **Fonction de densité symétrique :** $\alpha_0 = \alpha_1$ et $\alpha_0, \alpha_1 > 1$.

  Graphe 1

- **A priori non-informatif :**

  $\alpha_0 = \alpha_1 = 1$.

  Graphe 2

- **A priori parcimonieux (sparse) :**

  $\alpha_0, \alpha_1 < 1$

  Graphe 3

1.2.2 A posteriori sur les paramètres

$P(\Theta_{iy}|D)$ gamealpha $P(D|\Theta_{iy})P(\Theta_{iy};\alpha_1,\alpha_0)$ (vraimsemblance et a priori). gamealpha -¿ proportionnel à $P(\Theta_{iy}|D)$ propor $\Theta_{iy}^{N_1+\alpha_1-1}(1-\Theta_{iy})^{N_0+\alpha_0-1}$

- N_0 : Nombre de x_i à 0 dans D.
- N_1 : Nombre de x_i à 1 dans D.

(defition importante) La loi a posteriori est comme la loi a priori, une loi Beta. La loi Beta est l'a priori **conjugué** de Bernouilli (conjugated prior).

1.2.3 Retour à la classification

1. **Maximum a Posteriori des Paramètres (MAP)**

   $\Theta_{iy} = argmax P(\Theta_{iy}|D)$ (chapeau sur le theta !) $\Theta_{iy} = \frac{N_1+\alpha_1-1}{N_1+N_0+\alpha_1+\alpha_0-2}$

   α_1 et α_0 agissent comme des "pseudo-comptes". Lissage (smoothing) de distibution. $\Theta_{iy}! = 0$ Si $N_1, N_0 >> \alpha_1, \alpha_0$ alors l'a priori est négligeable.

   -¿ Régularisation, éviter le sur-apprentissage.

2. **Loi prédictive (inférence Bayesienne 3)**

   $P(X_i = x_i|Y = y;\Theta_{iy})$ avec Θ_{iy} estimés à partir des données (MAP).

   Le paramètre n'existe pas et ne doit donc pas apparaitre dans la prédiction. La vraie prédiction :

   $P(X_i = x_i|D) = integrale01 P(X_i = x_i;\Theta_{iy}|D)d\Theta_{iy}$, en marginalisant les paramètres.

   $P(X_i;\Theta_{iy}|D) = P(X_i|\Theta_{iy};D)P(\Theta_{iy}|D)$ (vraisemblance et a priori).

   $P(X_i = x_i|D) = \frac{N_1+\alpha_1}{N_1+N_0+\alpha_1+\alpha_0}$, $\forall \alpha_1$ et $\alpha_0 > 0$.

2 Modèles de mélange (G.M.M.)

2.1 Introduction

Un large champ d'applications :

- **Clustering :** Apprentissage non supervisé. Par exemple, l'algorithme des K-means.

  $$D = (x_n)^N{}_{n=1}$$

  On fixe K, un nombre de clusters.

- **Estimation de distribution.**

  Exemple : La classification (d'image).

  Graphe 1.

  -¿ Augmenter la capacité du modèle. -¿ Augmenter le nombre de paramètres.

- **Mélange de Gaussienne (G.M.M.)**

  K : Le nombre de Gausiennes / clusters.

$$P(\vec{x_n}|\Theta) = \sum_{k=1}^{k} \pi_k N(\vec{u_k}, \Sigma_k)$$

  - Les paramètres Θ : $(\pi_k, \vec{u_k}, \sum_k)_{k=1}^{K}$
  - π_k est le poids du mélange.
  - $N(\vec{u_k}, \Sigma_k)$ est la loi gaussienne.

L'objectif de l'apprentissage est d'estimer les paramètres du mélange permettant de :

- Maximiser $\Pi_{n=1}^{N} P(\vec{X} = \vec{x}|\Theta)$
- Maximiser $log(\Pi_{n=1}^{N} P(\vec{X} = \vec{x_n}|\Theta))$ (on retrouve la probabilité vue plus haut).

2.2 Algorithme E.M.

- Algorithme itératif qui cherche à maximiser :

$$log(P(\vec{X} = \vec{x_n}|\Theta))$$

- Introduire des variables **latentes** (cachées) :
  - Pour chaque $\vec{x} -> \vec{Z}$ (one-hot vecteur)
  - $\vec{Z} = (0, 0, ..., 1, 0, 0) -> Z_k = 1 <=> \vec{x} \in clusterk$
  - $\vec{Z}$:
    - Pseudo-affectation
    - Un vecteur latent
    - Inconnu =¿ $\vec{Z}$ un vecteur aléatoire
    - Affectation "soft" : Un point peut appartenir à tous les clusters.

Résumé du programme :
Introduction $\vec{Z}$ associé à $\vec{X}$. Si on souhaite maximiser :

$$P(X|\Theta) = \sum_{Z} P(\vec{X}, \vec{Z}|\Theta)$$

$$P(X|\Theta) = \sum_{Z} P(\vec{X}|\vec{Z}, \Theta) P(\vec{Z}|\Theta)$$

On note que $P(X|Z, \Theta)$ est la loi normale $N(\vec{u_k}, \Sigma_k)$ et que $P(\vec{Z}|\Theta)$ est π_k.
Si $\vec{Z_k} = (0, ..., 1, 0)rangk$

- $(\vec{X}, \vec{Z})$: Données complètes.
- $(\vec{X})$: Données incomplètes.

Etape E(xpection) :

- Connaitre $\vec{Z}$ à Θ **fixé**.
- Calcul la probabilité d'affectation : $P(\vec{Z}|, \vec{X}, \Theta)$

Etape M(aximization) : Les données sont incomplètes. On calcule Θ et on "fixe" $\vec{Z}$.

2.3 Optimisation variationnelle

Après l'introduction de $\vec{Z}$, on introduit une distribution auxiliaire sur $\vec{Z}$, notée $q(\vec{Z})$. On souhaite maximiser selon Θ :

$$log(P(X|\Theta) = \sum_{\vec{Z}} q(\vec{Z} log(\frac{P(\vec{X}, \vec{Z}|\Theta)}{q(\vec{Z})}) - \sum_{\vec{Z}} q(\vec{Z} log(\frac{P(\vec{Z}|\vec{X}, \Theta)}{q(\vec{Z})})$$

$$log(P(X|\Theta)) = log(P(X, Z|\Theta)) - log(P(Z|X, \Theta))$$

Rappel : $P(X|\Theta) = \frac{P(X,Z|\Theta)}{P(Z|X,\Theta)}$
C'est-à-dire : Le second terme :

$$-\sum_{\vec{Z}} q(\vec{Z} log(\frac{P(\vec{Z}|\vec{X}, \Theta)}{q(\vec{Z})}) = E_{\vec{Z} vq(\vec{Z})}[log(\frac{P(\vec{Z}, \vec{X}|\Theta}{q(\vec{Z})})]$$

Divergence de Kullback-Leibler (DKL).

$$DKL(q(\vec{Z})||P(\vec{Z}|\vec{X}, \Theta))$$

De chaque côté du "||" on a deux distributions sur $\vec{Z}$.
Divergence $\neq$ distance (asymétrique). (faire une phrase...)

- $DKL(q, P) = 0$ ssi $q = P$
- $DKL(q, P) \geq 0$

Le premier terme : $E_{\vec{Z}vq(\vec{Z})}[log(\frac{P(\vec{Z},\vec{X}|\Theta}{q(\vec{Z})})]$ est nommé ELBO (Evidence Lower Bound).

$$log(P(\vec{X}|\Theta)) = L(\Theta, q) + DKL(q(\vec{Z})||P(\vec{Z}|\vec{X}, \Theta))$$

On a $L(\Theta, q)$ une borne inférieure (ELBO). On fait une optimisation par borne inférieure : on maximise la fonction en maximisant sa borne inférieure. Il s'agit d'une maximisation "indirecte".