Projet 1

Lien GitHub

Jean-Thomas Baillargeon
Christopher Blier-Wong

Pour le cours STT-7330
Méthode d'analyse des données

Présenté le 25 mars 2018 à la professeure

Anne-Sophie Charest

Département de mathématiques et de statistiques
Faculté des sciences et de génie
Université Laval

Jean-Thomas Baillargeon
Christopher Blier-Wong
Faculté des sciences et de génie
École d'actuariat
Université Laval
Hiver 2018

Table des matières

1 Introduction **2**

2 Motivation **2**

3 Fonction noyau **5**

4 ACP avec noyau **7**
4.1 Normalisation des données 7

5 Application pratique **8**

6 Discussion **11**
6.1 Avantages 11
6.2 Désavantages 11

7 Conclusion **12**

1 Introduction

Dans la résolution de problèmes reliés à l'étude des données, le statisticien peut être confronté à des jeux de données volumineux ayant un grand nombre d'attributs. Ce genre de jeux de données posent certaines difficultés tels un temps d'exécution élevé, le fléau de la dimension ou encore le surapprentissage. Afin de pallier à ces problèmes, quelques méthodes efficaces et reconnues ont été développées afin de réduire mathématiquement le nombre de variables explicatives d'un jeu de données. Une de ces techniques est l'analyse par composantes principales (ACP). Ce rapport présente une généralisation de la méthode permettant d'y intégrer des éléments de non-linéarité. La motivation de cette généralisation est de permettre de capturer autant de variance tout en réduisant davantage le nombre de composantes principales (CP) utilisées.

2 Motivation

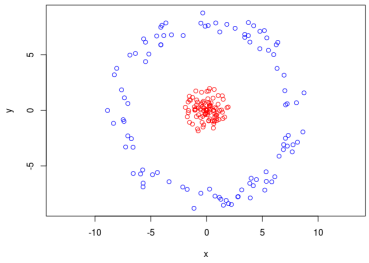
L'analyse par composantes principales est une technique de réduction de la dimension d'un jeu de données. Elle permet de projeter les données dans un espace restreint tout en conservant le maximum de variance entre les données. Les axes utilisés par l'analyse sont appelés composantes principales. Ces composantes principales permettent de transposer les données en utilisant les meilleures combinaisons linéaires. Les composantes sont ordonnées de telle sorte qu'elles conservent une proportion décroissante de la variance du jeu de données. Les premières composantes sont généralement beaucoup plus informatives que les dernières. Il est ainsi possible de réduire la dimension d'un jeu de données en ne considérant que les premières composantes principales tout en conservant une quantité d'information satisfaisante.

Mathématiquement, l'ACP s'exécute en décomposant la matrice de variance-covariance (ou de corrélation) estimée avec le jeu de données en valeurs et vecteurs propres. La matrice de variance-covariance est définie telle que

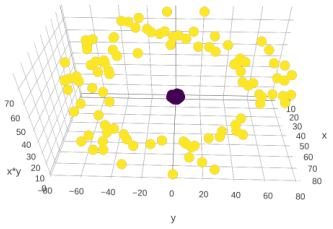
$$C = Var(X) = \frac{1}{N}\sum_{i=1}^{N} \mathbf{x}_i \mathbf{x}_i^T = \frac{1}{N}\sum_{i=1}^{N} \mathbf{x}_i \cdot \mathbf{x}_i$$

La principale limitation de cette méthodologie est qu'elle ne permet pas d'exploiter l'information contenue dans les interactions non linéaires entre les attributs. De plus, les composantes principales sont indépendantes les unes entres elles de telle sorte que l'information non linéaire peut réapparaitre dans les données en conservant un grand nombre de composantes principales.

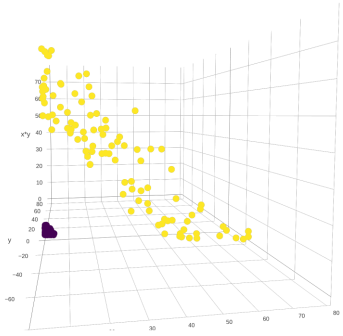
Par exemple, les données dans la figure suivante n'ont aucune de relation linéaire.



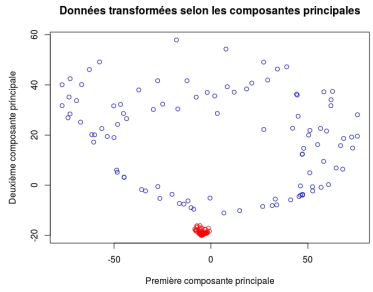
Ensuite, on applique une transformation non linéaire sur les données et on obtient



A priori, on ne voit pas l'information additionnelle. Cependant, en appliquant une rotation au graphique, on obtient



On remarque que ces données peuvent être séparées et interprétées linéairement. Une ACP peut s'appliquer sur ces données transformées et on obtient



L'idée de l'espace des attributs est de projeter les données originales par une fonction non linéaire vers un nouvel espace qui permet d'interpréter linéairement les relations entre les attributs. Formellement, on a

$$\begin{aligned} \Phi : \mathbb{R}^N &\to \mathcal{F} \\ \mathbf{x} &\mapsto \Phi(\mathbf{x}) \end{aligned} \tag{2.1}$$

où les données $\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2 \ldots, \mathbf{x}_N \in \mathbb{R}^p$ sont projetées vers un espace d'attributs $\mathcal{F}$ [Muller et al., 2001]. Souvent, la dimension de $\mathcal{F}$ est beaucoup plus élevée que p. L'apprentissage statistique peut maintenant être fait sur les données

$$(\Phi(\mathbf{x}_1), y_1), (\Phi(\mathbf{x}_2), y_2), \ldots, (\Phi(\mathbf{x}_n), y_n).$$

Afin de motiver cette généralisation du modèle, considérons l'exemple précédent, avec le jeu de données précédent, où

$$\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \ldots, \mathbf{x}_N = (x_{1,1}, x_{1,2}), (x_{2,1}, x_{2,2}), \ldots, (x_{N,1}, x_{N,2})$$

et la transformation utilisée $\Phi(\mathbf{x}) = (x_1^2 + \sqrt{2} \times x_1 \times x_2 + x_2^2)$. La matrice de variance covariance à utiliser pour l'ACP devient

$$\overline{C} = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^{N} \Phi(\mathbf{x}_i) \Phi(\mathbf{x}_i)^T.$$

Ensuite, on peut reformuler le produit scalaire entre les deux espaces d'attributs comme

$$\begin{aligned} (\Phi(\mathbf{x}_i) \cdot \Phi(\mathbf{x}_j)) &= (x_{i,1}^2 + \sqrt{2} x_{i,1} x_{i,2} + x_{i,2}^2)(x_{j,1}^2 + \sqrt{2} x_{j,1} x_{j,2} + x_{j,2}^2)^T \\ &= ((x_{i,1} x_{i,2})(x_{j,1} x_{j,2})^T)^2 \\ &= (\mathbf{x}_i \cdot \mathbf{x}_j)^2. \end{aligned}$$

En remplaçant avec le résultat précédent, on obtient

$$\overline{C} = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^{N} (\mathbf{x}_i \cdot \mathbf{x}_j)^2$$

et on doit appliquer une décomposition par valeurs et vecteurs propres sur cette matrice.

3 Fonction noyau

On rappelle la propriété suivante du produit scalaire pour les vecteurs $\mathbf{x}$ et $\mathbf{y}$:

$$\mathbf{x}\mathbf{y}^T = \mathbf{x} \cdot \mathbf{y}.$$

En général, lorsque le produit scalaire entre les transformations définies en (2.1) existe, on appelle cette fonction le noyau et on peut reformuler le produit scalaire comme

$$\mathrm{k}(\mathbf{x}, \mathbf{y}) = \Phi(\mathbf{x})\Phi(\mathbf{y})^T = \Phi(\mathbf{x}) \cdot \Phi(\mathbf{y}).$$

Dans plusieurs problèmes d'apprentissage, le "truc du noyau" permet d'éviter de calculer directement les nouvelles données $\Phi(\mathbf{x})$. En effet, il n'est parfois pas nécessaire d'avoir toutes les données, car on peut reformuler les équations de mise à jour par le produit scalaire entre différents $\Phi(\mathbf{x})$ et ainsi les remplacer par la fonction de noyau.

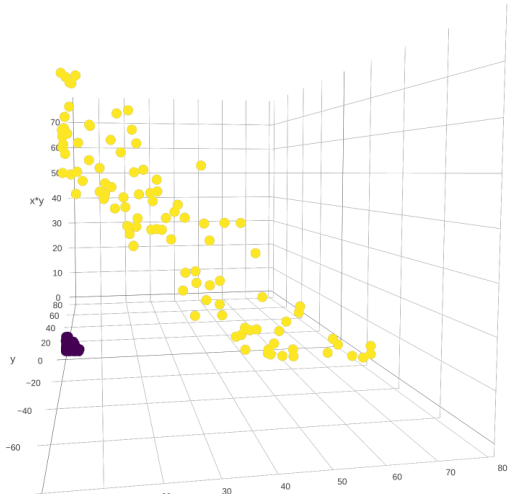
Réutilisons l'exemple fourni à la section précédente. Nous avions le jeu de donnée avec des données réparties selon 3 cercles concentriques et la transformation

$$\Phi(\mathbf{x}) = (x_1^2 + \sqrt{2} \times x_1 \times x_2 + x_2^2)$$

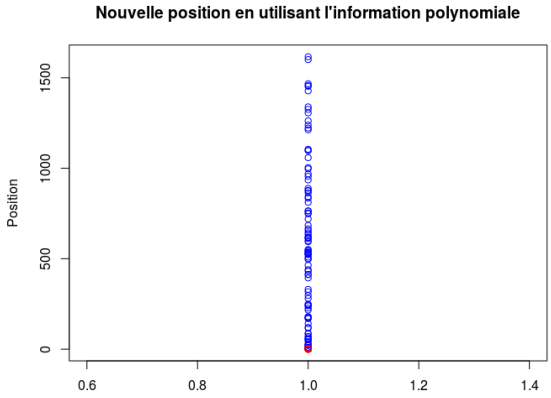
.
la fonction noyau associée est

$$\mathbf{(x,y)} = (x \cdot y)^2$$

Concrètement, cette projection fera en sorte de créer un de points de données pour chacune des classes à des hauteurs différentes.



Cette information, initialement cachée du jeu de données, devient évidente lorsqu'on regarde la valeur de chaque point sur la dimension ajoutée (soit la hauteur entre chaque groupe de points.) Si nous utilisions le noyau associé pour générer des valeurs au lieu de projeter les données avec la fonction $\Phi(\mathbf{x})$, nous aurions une division des données qui serait sensiblement similaire



Il est important de retenir que pour obtenir l'information k générée par la projection, les transformations vers $\mathcal{F}$ n'ont pas à être explicitement calculées. La fonction de noyau permet de calculer directement cette information et il s'agit de la raison pour laquelle les noyaux sont des outils intéressants.

L'exemple jouet ne présente qu'une projection en 3 dimensions et son utilité peut sembler limité. Cependant, certains noyaux émulent une projection dans un espace de dimensions infini. En projetant dans un espace ayant un nombre de dimensions infini, il est théoriquement possible de modéliser parfaitement chacun des points des données. On a ainsi l'assurance de trouver une fonction linéaire séparant les données parfaitement - sans avoir à faire des calculs qui seraient impossibles à faire.

En pratique, au lieu de sélectionner un espace d'attributs $\mathcal{F}$, on sélectionne directement le noyau. Il n'est pas nécessaire de connaître l'espace d'attributs $\mathcal{F}$ ou la fonction Φ. De plus, il est possible que la fonction Φ projette des données vers une dimension infinie. Ceci ne cause pas de problème car l'impossibilité analytique de déterminer la fonction $\Phi(\mathbf{x})$ est esquivée par le truc du noyau. Des exemples de noyaux communément utilisés sont présentés dans la table 1.

Nom	$k(\mathbf{x}, \mathbf{y})$
Gaussien (RBF)	$\exp\left(\frac{-\|\|\mathbf{x}-\mathbf{y}\|\|^2}{c}\right)$
Polynomial	$((\mathbf{x} \cdot \mathbf{y} + \theta))^d$
Sigmodoidal	$\tanh(\kappa(\mathbf{x} \cdot \mathbf{y}) + \theta)$
Multiquadrique inversé	$\frac{1}{\sqrt{\|\|\mathbf{x}-\mathbf{y}\|\|^2+c^2}}$

TABLE 1 – Noyaux communs

4 ACP avec noyau

Dans le contexte de l'ACP, on trouvait les valeurs et vecteurs propres qui correspondaient à la matrice de covariance. Si les données sont centrées, c-à-d $\sum_{i=1}^{N} x_i = 0$, on a

$$C = Var(X) = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^{N} \mathbf{x}_i \mathbf{x}_i^T.$$

[Schölkopf et al., 1997] proposent de répéter cette analyse sur une transformation des données originales, c-à-d trouver les valeurs et vecteurs propres de

$$\overline{C} = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^{N} \Phi(\mathbf{x}_i) \Phi(\mathbf{x}_i)^T. \tag{4.1}$$

Ensuite, en appliquant le "truc du noyau" présenté dans la section (3), on évite de calculer explicitement les données $\Phi(\mathbf{x})$, il suffit de calculer la matrice des noyaux. Comme dans l'ACP, on doit faire une décomposition par valeurs et vecteurs propres de

$$\overline{C} = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^{N} K(\mathbf{x}_i, \mathbf{x}_i). \tag{4.2}$$

4.1 Normalisation des données

Dans le développement de l'ACP, on a appliqué l'hypothèse que les données étaient centrées. Par contre, dans le contexte de projection des données dans l'espace $\mathcal{F}$ et pour profiter du truc du noyau, on ne peut pas calculer

$$\tilde{\Phi}(\mathbf{x}_i) = \Phi(\mathbf{x}_i) - \frac{1}{N} \sum_{i=1}^{N} \Phi(\mathbf{x}_i).$$

La solution à ce problème est présenté dans [Schölkopf et al., 1998]. Soit la matrice K, où

$$K_{ij} = (k(\mathbf{x}_i, \mathbf{x}_j))_{ij}.$$

Il est possible que $\frac{1}{N}\sum_{i=1}^{N}\Phi(\mathbf{x}) \neq 0$. On doit alors centrer les données selon le développent suivant :

$$\begin{aligned}\tilde{k}(\mathbf{x}_i, \mathbf{x}_j) &= \tilde{\Phi}(\mathbf{x}_i)^T \tilde{\Phi}(\mathbf{x}_j) \\ &= \left(\Phi(x_i) - \frac{1}{N}\sum_{l=1}^{N}\Phi(\mathbf{x}_l)\right)^T \left(\Phi(x_j) - \frac{1}{N}\sum_{l=1}^{N}\Phi(\mathbf{x}_l)\right) \\ &= k(\mathbf{x}_i, \mathbf{x}_j) - \frac{1}{N}\sum_{l=1}^{N}k(\mathbf{x}_i, \mathbf{x}_l) - \frac{1}{N}\sum_{l=1}^{N}k(\mathbf{x}_j, \mathbf{x}_l) + \frac{1}{N^2}\sum_{l,k}^{N}k(\mathbf{x}_l, \mathbf{x}_k).\end{aligned}$$

Alors, on peut centrer la matrice $\tilde{K}$ selon

$$\tilde{K}_{ij} = K - \mathbb{1}_N K - K\mathbb{1}_N + \mathbb{1}_N K \mathbb{1}_N,$$

où $(\mathbb{1}_N)_{ij} := \frac{1}{N}$ et éviter de calculer les données $\Phi(\mathbf{x})$.

5 Application pratique

On applique l'analyse par composantes principales et l'analyse par composantes principales avec noyau sur le jeu de données MNIST. Une donnée représente l'intensité de gris entre 0 et 255 des 728 pixels d'une image 28× 28 de chiffres entre 0 et 9. Elles ont été récoltées par [LeCun et al., 1998]. Voici un exemple des données :

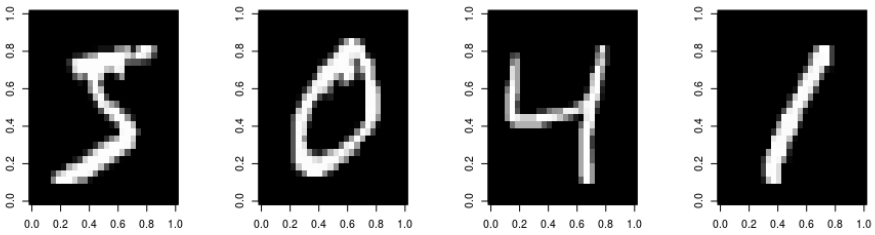


FIGURE 1 – 4 premiers exemples de MNIST

On créer aussi un jeu de données modifié de MNIST, où un applique un bruit gaussien. Voici les mêmes exemples que dans la figure 1 :

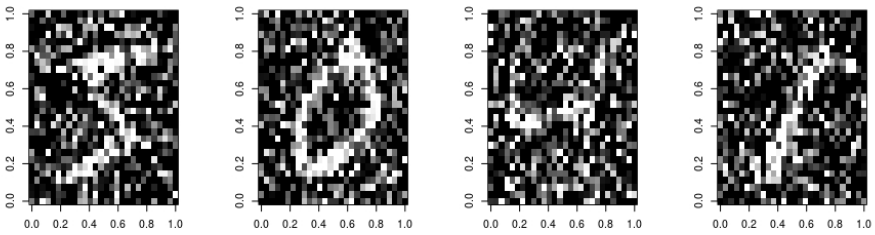
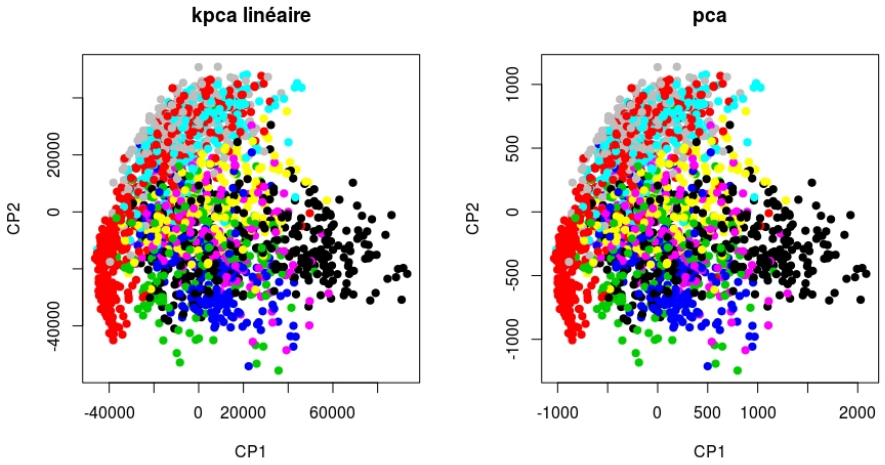


FIGURE 2 – 4 premiers exemples de MNIST avec bruit gaussien

Une analyse par composantes principales est identique à une analyse par composantes principales avec un noyau linéaire. On projette les données selon les deux premières composantes principales. On obtient



Il n'y a pas de flexibilité à cette méthode. On remplace la matrice variance-covariance par différents noyaux et on présente les projections dans la prochaine figure.

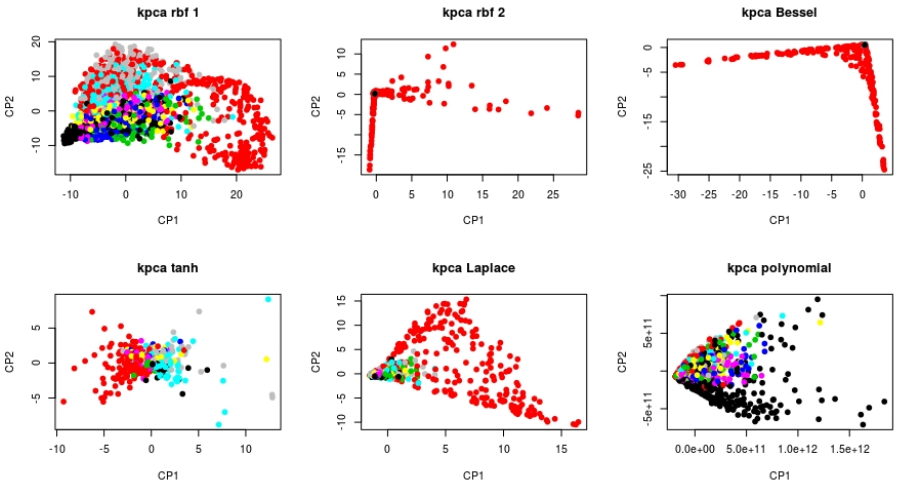


FIGURE 3 – Projection des deux premières composantes principales selon différents noyaux.

On remarque que le choix du noyau a beaucoup d'importance sur la projection. Les données en rouge représentent le chiffre 1 et la plupart des noyaux peuvent séparer les données. Le noyau polynomial est performant pour segmenter les chiffres 0.
On applique ensuite l'ACP avec noyau sur les données MNIST bruitées. On obtient

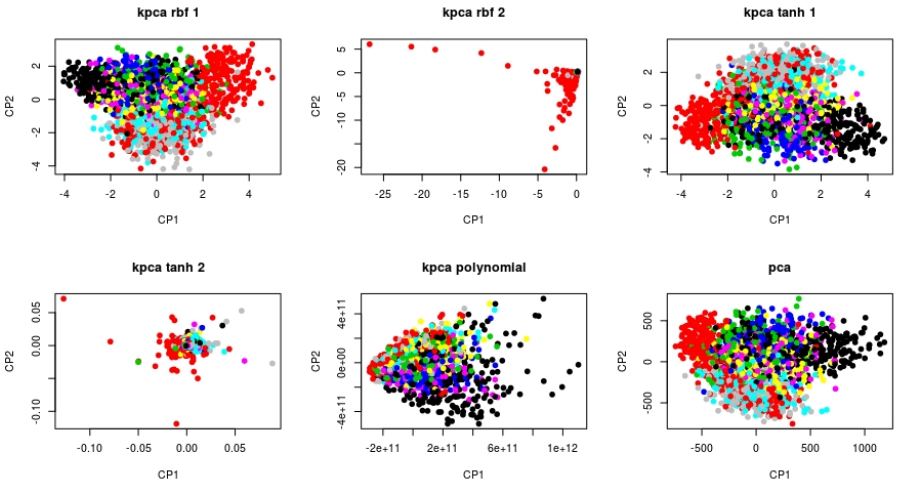


FIGURE 4 – Projection des deux premières CPs selon différents noyaux.

On remarque que certains noyaux sont moins performants pour capturer l'information que sans le bruit, mais que certains sont capables de trouver les relations non linéaires dans les données bruitées pour retrouver l'information originale.

6 Discussion

On a présenté les fonctions noyau et l'analyse par composantes principales avec noyaux. L'idée de la méthode est la suivante : au lieu de faire une décomposition par valeurs et vecteurs propres de la matrice variance covariance des données $\mathbf{x}$, on doit faire une décomposition par valeurs et vecteurs propres de la matrice des noyaux. Or, on effectue un ACP sur une projection des données vers un espace où il est possible d'expliquer la variation par les données de manière non linéaire. On a présenté le truc du noyau : il n'est pas nécessaire de calculer directement les données projetées pour effectuer une ACP car on peut substituer le produit scalaire entre les données par une fonction noyau.

Ces méthodes ont notamment été utilisées dans la détection d'attributs dans la reconnaissance faciale, voir [Kim et al., 2002].

6.1 Avantages

Comme mentionné précédemment, l'ACP avec noyau permet de faire une ACP sur une transformation non-linéaire des données. Les méthodes à noyaux ont eu beaucoup de succès dans les tâches de classification et de régression, car il est possible de trouver une espace où un hyperplan séparateur pourrait parfaitement séparer les données. Dans le contexte de l'ACP, cette méthode peut permettre de découvrir des relations non linéaire et bien représenter la variabilité des données dans un nombre plus restreint de composantes principales et pourrait aider à mieux interpréter les composantes.

Par exemple, dans le jeu de données jouet, il n'était pas possible de réduire la dimension des données, car les relations étaient circulaires, on devait garder toute la dimension des données pour comprendre la distribution des classes. Avec un noyau Gaussien, il était possible de représenter et interpréter les données avec une seule composante.

6.2 Désavantages

Les fonctions à noyau sont très flexibles, mais on doit souvent ajuster des hyperparamètres pour avoir une représentation des données qui est utile pour l'interprétation. Dans notre application, il était simple de distinguer les bonnes projections des mauvaises, car les étiquettes de classe étaient disponibles. Dans le contexte de découverte d'information.

Une propriété intéressante de l'ACP est qu'on peut reconstruire les données en gardant toutes les composantes. Dans notre cas, on ne peut pas les reconstruire, car ces données se trouvent dans un espace $\mathcal{F}$ qui n'est pas toujours connu. Avec l'ACP appliqué en vision, il est possible de visualiser l'information conservée. Par exemple, on recréer les images originales avec l'ACP mais en ne conservant que dix composantes principales. On obtient

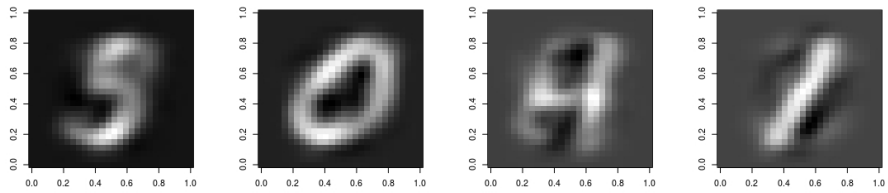


FIGURE 5 – Données reconstruites avec 10 composantes principales

On remarque qu'on humain peut distinguer les chiffres dans la figure 5. Par contre, on ne peut pas faire cette même projection avec les données dans l'espace $\mathcal{F}$, car elles ne sont jamais calculées. Ainsi, la meilleure manière d'évaluer la qualité de l'ACP avec noyau est d'étudier la proportion de l'information des noyaux qui est expliquée par les premières composantes principales.

7 Conclusion

En conclusion, il est clair que l'utilisation des noyaux peut apporter un élément additionnel à l'analyse par composante principale.

Modéliser l'information non linéaire contenue dans des données dans des espaces à dimension potentiellement infinis est un atout majeur. Nous avons vu que dans certains jeux de données, ces relations existent réellement et que l'utilisation de noyau permet de les détecter.

Cependant, il n'est pas clair si les noyaux sont des outils mathématiques devant être intégrés à tous les problèmes. En effet, les noyaux demandent qu'on ajuste des hyper paramètres, ce qui peut être une lourde tâche. Un autre point faible de cette approche est que les composantes principales obtenues grâce à la méthode des noyaux ne permet pas de reconstruire les valeurs.

Nous croyons qu'il s'agit d'une méthode de plus à utiliser et que celle-ci devrait être comparée aux autres méthodes traditionnelles lorsque des travaux de science des données demandent de travailler avec un nombre restreint d'attributs.

Références

[Kim et al., 2002] Kim, K. I., Jung, K., and Kim, H. J. (2002). Face recognition using kernel principal component analysis. *IEEE signal processing letters*, 9(2) :40–42.

[LeCun et al., 1998] LeCun, Y., Bottou, L., Bengio, Y., and Haffner, P. (1998). Gradient-based learning applied to document recognition. *Proceedings of the IEEE*, 86(11) :2278–2324.

[Muller et al., 2001] Muller, K.-R., Mika, S., Ratsch, G., Tsuda, K., and Scholkopf, B. (2001). An introduction to kernel-based learning algorithms. *IEEE transactions on neural networks*, 12(2) :181–201.

[Schölkopf et al., 1997] Schölkopf, B., Smola, A., and Müller, K.-R. (1997). Kernel principal component analysis. In *International Conference on Artificial Neural Networks*, pages 583–588. Springer.

[Schölkopf et al., 1998] Schölkopf, B., Smola, A., and Müller, K.-R. (1998). Nonlinear component analysis as a kernel eigenvalue problem. *Neural computation*, 10(5) :1299–1319.