Techniques d'apprentissage

IFT 603-712

Méthodes à noyau

Par

Pierre-Marc Jodoin

/

Hugo Larochelle

Modélisation non linéaire

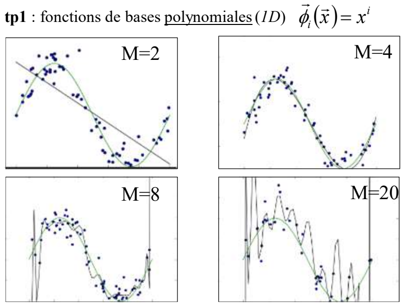
- On a vu plusieurs algorithmes basés sur des **modèles linéaires** (régression ou classification)
- Malheureusement, pas **tous les problèmes** peuvent être résolus avec un modèle linéaire
- Par contre, on peut obtenir des modèles non-linéaires à l'aide de **fonctions de base** non-linéaires

Fonctions de base polynomiales

Régression polynomiale

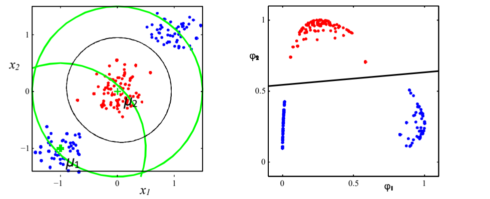
RAPPEL

Exemple tp1 : fonctions de bases polynomiales $(1D)$ $\vec{\phi}_i(\vec{x}) = x^i$



Fonctions de base gaussiennes

Segmentation avec noyau gaussien



Espace représenté par $\vec{x} = (x_1, x_2)^T$ — Espace représenté par $\vec{\phi}(\vec{x}) = (\phi_1(\vec{x}), \phi_2(\vec{x}))^T$

2 fonctions de base gaussiennes

$$\phi_1(\vec{x}) = e^{\frac{\|\vec{x}-\vec{\mu}_1\|^2}{2\sigma^2}}$$

$$\phi_2(\vec{x}) = e^{\frac{\|\vec{x}-\vec{\mu}_2\|^2}{2\sigma^2}}$$

Méthodes à noyau

RAPPEL

Revenons au problème de la régression (**Maximum *a posteriori* – Chap 3**) :

$$\vec{w} = \arg\min_{\vec{w}} \sum_{n=1}^{N} \left(\vec{w}^T \vec{\phi}(\vec{x}_n) - t_n\right)^2 + \lambda \vec{w}^T \vec{w}$$

où

$$\vec{\phi}(\vec{x}) = (1, \phi_1(\vec{x}), \phi_2(\vec{x}), \ldots, \phi_M(\vec{x}))$$

$$\vec{w}^T = (w_0, w_1, \ldots, w_M)$$

biais — poids

Méthodes à noyau

Revenons au problème de la régression (**Maximum *a posteriori* – Chap 3**) :

$$\vec{w} = \arg\min_{\vec{w}} \sum_{n=1}^{N} \left(\vec{w}^T \vec{\phi}(\vec{x}_n) - t_n\right)^2 + \lambda \vec{w}^T \vec{w}$$

Si on fixe le gradient par rapport à $\vec{w}$ à 0, on observe que

$$\begin{aligned}\vec{w} &= -\frac{1}{\lambda}\sum_{n=1}^{N}\left(\vec{w}^T\vec{\phi}(\vec{x}_n) - t_n\right)\vec{\phi}(\vec{x}_n) \\ &= \sum_{n=1}^{N} a_n \vec{\phi}(\vec{x}_n) \qquad \text{où } a_n = -\frac{\vec{w}^T\vec{\phi}(\vec{x}_n) - t_n}{\lambda} \in R \\ &= \Phi^T \vec{a}\end{aligned}$$

Méthodes à noyau

Revenons au problème de la régression (**Maximum *a posteriori* – Chap 3**) :

$$\vec{w} = \arg\min_{\vec{w}} \sum_{n=1}^{N} \left(\vec{w}^T \vec{\phi}(\vec{x}_n) - t_n\right)^2 + \lambda \vec{w}^T \vec{w}$$

La solution $\vec{w}$ est une **somme pondérée des entrées** $\phi(\vec{x}_n)$ dans l'ensemble d'entraînement

$$\underbrace{\vec{w}}_{\text{inconnue}} = \sum_{n=1}^{N} a_n \vec{\phi}(\vec{x}_n) = \underbrace{\Phi^T}_{\text{Connue}} \underbrace{\vec{a}}_{\text{inconnue}}$$

Méthodes à noyau

$$\underbrace{\vec{w}}_{\text{inconnue}} = \sum_{n=1}^{N} a_n \vec{\phi}(\vec{x}_n) = \underbrace{\Phi^T}_{\text{Connue}} \underbrace{\vec{a}}_{\text{inconnue}}$$

Idée : plutôt que d'optimiser par rapport à $\vec{w}$,

optimisons par rapport à $\vec{a}$

Méthodes à noyau

Partant de

$$J(\vec{w}) = \sum_{n=1}^{N} \left(t_n - \vec{w}^T \vec{\phi}(\vec{x}_n)\right)^2 + \lambda \vec{w}^{\mathrm{T}} \vec{w}$$

Si on remplace $\vec{w}$ par $\Phi^{\mathrm{T}} \vec{a}$ on peut démontrer qu'on obtient

$$J(\vec{a}) = \vec{a}^T \Phi \Phi^T \Phi \Phi^T \vec{a} - \vec{a}^T \Phi \Phi^T \vec{t} + \vec{t}^T \vec{t} + \lambda \vec{a}^T \Phi \Phi^T \vec{a}$$

C'est la **représentation duale** de $J(W)$

Représentation duale

On peut aussi noter que $\Phi\Phi^{\mathrm{T}} = K$ où $K_{nm} = k(\vec{x}_n, \vec{x}_m)$

Matrice de Gram

et $k(\vec{x}_n, \vec{x}_m) = \phi(\vec{x}_n)^{\mathrm{T}} \phi(\vec{x}_m)$

Noyau

$$J(\vec{a}) = \vec{a}^T \Phi\Phi^T \Phi\Phi^T \vec{a} - \vec{a}^T \Phi\Phi^T \vec{t} + \vec{t}^T \vec{t} + \lambda \vec{a}^T \Phi\Phi^T \vec{a}$$

$$\Downarrow$$

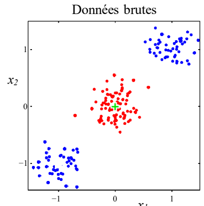
$$J(\vec{a}) = \vec{a}^{\mathrm{T}} K K \vec{a} - \vec{a}^{\mathrm{T}} K \vec{t} + \vec{t}^{\mathrm{T}} \vec{t} + \lambda \vec{a}^{\mathrm{T}} K \vec{a}$$

Matrice de Gram

La matrice de Gram est une **matrice *N* x *N*** contenant le **produit scalaire** entre chaque élément de l'ensemble d'entraînement.

Illustration en 2D

Données brutes



Espace représenté par $\vec{x} = (x_1, x_2)^{\mathrm{T}}$

Matrice de Gram

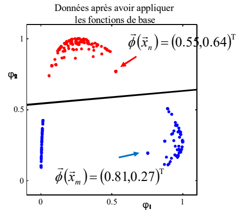
La matrice de Gram est une **matrice *N* x *N*** contenant le **produit scalaire** entre chaque élément de l'ensemble d'entraînement.

Illustration en 2D

$$K = \begin{pmatrix} k(\vec{x}_1, \vec{x}_1) & \cdots & k(\vec{x}_1, \vec{x}_N) \\ \vdots & k(\vec{x}_n, \vec{x}_m) & \vdots \\ k(\vec{x}_N, \vec{x}_1) & \cdots & k(\vec{x}_N, \vec{x}_N) \end{pmatrix}$$

$$k(\vec{x}_n, \vec{x}_m) = \vec{\phi}(\vec{x}_n)^{\mathrm{T}} \vec{\phi}(\vec{x}_m) = (0.55 \quad 0.64) \begin{pmatrix} 0.81 \\ 0.27 \end{pmatrix} = 0.628$$

Données après avoir appliquer les fonctions de base



Espace représenté par $\vec{\phi}(\vec{x}) = (\phi_1(\vec{x}), \phi_2(\vec{x}))^{\mathrm{T}}$

Représentation Duale

$$J(\vec{a}) = \vec{a}^{\mathrm{T}} K K \vec{a} - \vec{a}^{\mathrm{T}} K \vec{t} + \vec{t}^{\mathrm{T}} \vec{t} + \lambda \vec{a}^{\mathrm{T}} K \vec{a}$$

On peut démontrer qu'en **fixant à zéro la dérivée** $\nabla J(\vec{a}) = 0$ on obtient

$$\boxed{\vec{a} = \left(K + \lambda I_N\right)^{-1} \vec{t}}$$

Matrice N x N de Gram

Matrice Identité N x N

Vecteur Nx1 contenant les N cibles de l'ensemble d'entraînement

Preuve à faire en devoir

Représentation Duale

Une fois $\vec{a}$ calculée, la **prédiction d'une nouvelle donnée** $\vec{x}$ se fait comme suit

$$\begin{aligned} y(\vec{x}) &= \vec{w}^{\mathrm{T}} \vec{\phi}(\vec{x}) \\ &= \vec{a}^{\mathrm{T}} \Phi \vec{\phi}(\vec{x}) \\ &= \left(\left(K + \lambda I_N\right)^{-1} \vec{t}\right)^{\mathrm{T}} \Phi \vec{\phi}(\vec{x}) \\ &= \left(\left(K + \lambda I_N\right)^{-1} \vec{t}\right)^{\mathrm{T}} k(\vec{x}) \end{aligned}$$

où

$$k(\vec{x}) = \left(k(\vec{x}_1, \vec{x}), \ldots, k(\vec{x}_N, \vec{x})\right)^{\mathrm{T}}$$

$$k(\vec{x}_n, \vec{x}) = \vec{\phi}(\vec{x}_n)^{\mathrm{T}} \vec{\phi}(\vec{x})$$

Méthode à noyau duale (version alpha)

Entraînement

Soient les données d'entraînement brutes $D = \{(\vec{x}_1, t_1), \ldots, (\vec{x}_N, t_N)\}$

Mettre les N cibles dans un vecteur à N dimensions $\vec{t}$

Appliquer les fonctions de base à chaque donnée : $\vec{x}_n \rightarrow \vec{\phi}(\vec{x}_n) \quad \forall n$

Calculer la matrice N x N de Gram : $K(\vec{x}_n, \vec{x}_m) = \vec{\phi}(\vec{x}_n)^{\mathrm{T}} \vec{\phi}(\vec{x}_m) \quad \forall n, m$

$\vec{a} = \left(K + \lambda I_N\right)^{-1} \vec{t}$

Généralisation

Appliquer les fonctions de base à la donnée à prédire : $\vec{x} \rightarrow \vec{\phi}(\vec{x})$

$\vec{k}(\vec{x})^{\mathrm{T}} = \left(k(\vec{x}_1, \vec{x}), \ldots, k(\vec{x}_N, \vec{x})\right) = \left(\vec{\phi}(\vec{x}_1)^{\mathrm{T}} \vec{\phi}(\vec{x}), \ldots, \vec{\phi}(\vec{x}_N)^{\mathrm{T}} \vec{\phi}(\vec{x})\right)$

$y_{\vec{a}}(\vec{x}) = \vec{k}(\vec{x})^{\mathrm{T}} \vec{a}$

Peut-on améliorer l'efficacité
des algorithmes de la page précédente?

OUI!

Astuce du noyau (*kernel trick*)

Dans l'algo d'entraînement de la page précédente, on calcule en premier

$$\vec{x}_n \rightarrow \vec{\phi}(\vec{x}_n) \quad \forall n$$

puis ensuite la matrice de Gram

$$K(\vec{x}_n, \vec{x}_m) = \vec{\phi}(\vec{x}_n)^{\mathrm{T}} \vec{\phi}(\vec{x}_m) \quad \forall n, m$$

L'astuce du noyau permet de **calculer K sans avoir à calculer** $\vec{\phi}(\vec{x}_n)$ ce qui est plus efficace

Astuce du noyau (*kernel trick*)

Exemple:

Soit $\vec{x}^{\mathrm{T}} = (x_1, x_2)$ et $\vec{\phi}(\vec{x})^{\mathrm{T}} = (x_1^2, \sqrt{2}x_1x_2, x_2^2)$

Par conséquent

10 multiplications et 2 additions

$$\begin{aligned} k(\vec{x}, \vec{x}') &= \vec{\phi}(\vec{x})^{\mathrm{T}} \vec{\phi}(\vec{x}') \\ &= (x_1^2, \sqrt{2}x_1x_2, x_2^2)(x_1'^2, \sqrt{2}x_1'x_2', x_2'^2)^T \\ &= x_1^2 x_1'^2 + 2x_1x'_1\, x_2x'_2 + x_2^2 x_2'^2 \\ &= (x_1x'_1 + x_2x'_2)^2 \\ &= (\vec{x}^{\mathrm{T}}\vec{x}')^2 \end{aligned}$$

3 multiplications et 1 addition

Astuce du noyau (*kernel trick*)

Une forme générale est le **noyau polynomial**

$$k(\vec{x}, \vec{x}') = (\vec{x}^{\mathrm{T}}\vec{x}' + c)^M$$

où c est une constante > 0

On peut montrer que le $\vec{\phi}(\vec{x})$ implicite que ce noyau contient tous les produits possibles entre au plus M éléments de $\vec{x}$

$$M = 1 \quad \Rightarrow \quad \vec{\phi}(\vec{x}) = (c_0, c_0x_1, \ldots, c_0x_d)$$

Astuce du noyau (*kernel trick*)

Une forme générale est le **noyau polynomial**

$$k(\vec{x},\vec{x}') = \left(\vec{x}^{\mathrm{T}}\vec{x}' + c\right)^{M}$$

Où c est une constante > 0

On peut montrer que le $\vec{\phi}(\vec{x})$ implicite que ce noyau contient tous les produits possibles entre au plus M éléments de $\vec{x}$

$$M = 2 \quad \Rightarrow \quad \vec{\phi}(\vec{x}) = (c_0, c_0 x_1, \ldots, c_d x_d, \\ c_{11}x_1^2, c_{12}x_1x_2, \ldots)$$

Astuce du noyau (*kernel trick*)

Une forme générale est le **noyau polynomial**

$$k(\vec{x},\vec{x}') = \left(\vec{x}^{\mathrm{T}}\vec{x}' + c\right)^{M}$$

Où c est une constante > 0

On peut montrer que le $\vec{\phi}(\vec{x})$ implicite que ce noyau contient tous les produits possibles entre au plus M éléments de $\vec{x}$

$$M = 3 \quad \Rightarrow \quad \vec{\phi}(\vec{x}) = (c_0, c_0 x_1, \ldots, c_d x_d, \\ c_{11}x_1^2, c_{12}x_1x_2, \ldots, \\ c_{111}x_1^3, c_{112}x_1^2x_2, c_{123}, x_1x_2x_3, \ldots)$$

Grâce à **l'astuce du noyau,**

on défini un **noyau** $k(\vec{x}_n, \vec{x}_m)$

et non

des **fonctions de base** $\vec{\phi}(\vec{x})$

L’astuce du noyau

Entraînement

Soient les données d'entraînement brutes $D = \{(\vec{x}_1, t_1), \ldots, (\vec{x}_N, t_N)\}$

Mettre les N cibles dans un vecteur à N dimensions $\vec{t}$

Calculer la matrice N x N de Gram : $k(\vec{x}_n, \vec{x}_m) \quad \forall n, m$

$$\vec{a} = (K + \lambda I_N)^{-1} \vec{t}$$

Généralisation

Calculer le noyau entre chaque donnée d’entrainement et $\vec{x}$: $k(\vec{x})^{\mathrm{T}} = (k(\vec{x}_1, \vec{x}), \ldots, k(\vec{x}_N, \vec{x}))$

$$y_{\vec{a}}(\vec{x}) = k(\vec{x})^{\mathrm{T}} \vec{a}$$

Quelles noyaux utiliser?

Astuce du noyau (*kernel trick*)

Question : comment peut-on définir des noyaux $k(\vec{x}_n,\vec{x}_m)$ valides
c'est-à-dire des noyaux pour lesquels $k(\vec{x}_n,\vec{x}_m)=\vec{\phi}(\vec{x}_n)^{\mathrm{T}}\vec{\phi}(\vec{x}_m)$

Règles pour **construire des noyaux** valides

$$
\begin{aligned}
k(\vec{x},\vec{x}') &= ck_1(\vec{x},\vec{x}') \\
k(\vec{x},\vec{x}') &= k_1(\vec{x},\vec{x}')+k_2(\vec{x},\vec{x}') \\
k(\vec{x},\vec{x}') &= f(\vec{x})k_1(\vec{x},\vec{x}')f(\vec{x}') \\
k(\vec{x},\vec{x}') &= q(k_1(\vec{x},\vec{x}')) \\
k(\vec{x},\vec{x}') &= \exp(k_1(\vec{x},\vec{x}'))
\end{aligned}
\qquad
\begin{aligned}
k(\vec{x},\vec{x}') &= k_1(\vec{x},\vec{x}')k_2(\vec{x},\vec{x}') \\
k(\vec{x},\vec{x}') &= k_1(\vec{\phi}(\vec{x}),\vec{\phi}(\vec{x}')) \\
k(\vec{x},\vec{x}') &= \vec{x}^{\mathrm{T}}\mathrm{A}\vec{x}' \\
k(\vec{x},\vec{x}') &= k_1(\vec{x}_a,\vec{x}_a')+k_2(\vec{x}_b,\vec{x}_b') \\
k(\vec{x},\vec{x}') &= k_1(\vec{x}_a,\vec{x}_a')k_2(\vec{x}_b,\vec{x}_b')
\end{aligned}
$$

Où c>0, $f(\vec{x})$ est une function, *q(a)* est un polynôme avec coefficients positifs
A est une matrice définie positive et $\vec{x}=(\vec{x}_a,\vec{x}_b)$
les noyaux k_1,k_2 doivent être valides.

Construction de noyaux

Exemple1: prouvons que $ck_1(\vec{x},\vec{x}')$ est valide si c>0 et $k_1(\vec{x},\vec{x}')$ est un noyau valide.

Si $k_1(\vec{x},\vec{x}')$ est un noyau valide alors il existe une fonction de base $\vec{\phi}(\vec{x})$ tel que

$$k_1(\vec{x},\vec{x}')=\vec{\phi}(\vec{x})^{\mathrm{T}}\vec{\phi}(\vec{x}')$$

Par conséquent

$$
\begin{aligned}
ck_1(\vec{x},\vec{x}') &= c\vec{\phi}(\vec{x})^{\mathrm{T}}\vec{\phi}(\vec{x}') \\
&= \left(\sqrt{c}\vec{\phi}(\vec{x})\right)^{\mathrm{T}}\left(\sqrt{c}\vec{\phi}(\vec{x}')\right) \\
&= \hat{\phi}(\vec{x})^{\mathrm{T}}\hat{\phi}(\vec{x})
\end{aligned}
$$

CQFD ■

Construction de noyaux

Exemple2: prouvons que le noyau gaussien est valide: $k(\vec{x},\vec{x}')=e^{-\frac{\|\vec{x}-\vec{x}'\|^2}{2\sigma^2}}$

Considérant que $\|\vec{x}-\vec{x}'\|^2=\vec{x}^{\mathrm{T}}\vec{x}+\vec{x}'^{\mathrm{T}}\vec{x}'-2\vec{x}^{\mathrm{T}}\vec{x}'$

On obtient que

$$
\begin{aligned}
k(\vec{x},\vec{x}') &= e^{-\frac{\|\vec{x}-\vec{x}'\|^2}{2\sigma^2}} \\
&= e^{-\frac{\vec{x}^{\mathrm{T}}\vec{x}+\vec{x}'^{\mathrm{T}}\vec{x}'-2\vec{x}^{\mathrm{T}}\vec{x}'}{2\sigma^2}} \\
&= e^{-\frac{\vec{x}^{\mathrm{T}}\vec{x}}{2\sigma^2}}e^{-\frac{\vec{x}^{\mathrm{T}}\vec{x}'}{2\sigma^2}}e^{\frac{\vec{x}'^{\mathrm{T}}\vec{x}'}{\sigma^2}}
\end{aligned}
$$

Construction de noyaux

Exemple2: prouvons que le noyau gaussien est valide: $k(\vec{x},\vec{x}')=e^{-\frac{\|\vec{x}-\vec{x}'\|^2}{2\sigma^2}}$

$\vec{x}^{\mathrm{T}}\vec{x}'=k_1(\vec{x},\vec{x}')\Rightarrow valide$

$$k(\vec{x},\vec{x}')=e^{-\frac{\vec{x}^{\mathrm{T}}\vec{x}}{2\sigma^2}}e^{-\frac{\vec{x}^{\mathrm{T}}\vec{x}'}{2\sigma^2}}e^{\frac{\vec{x}'^{\mathrm{T}}\vec{x}'}{\sigma^2}}$$

Construction de noyaux

Exemple2: prouvons que le noyau gaussien est valide: $k(\vec{x},\vec{x}')=e^{-\frac{\|\vec{x}-\vec{x}'\|^2}{2\sigma^2}}$

$\vec{x}^{\mathrm{T}}\vec{x}'=k_1(\vec{x},\vec{x}')\Rightarrow valide$

$k_2(\vec{x},\vec{x}')=ck_1(\vec{x},\vec{x}')$

$$k(\vec{x},\vec{x}')=e^{-\frac{\vec{x}^{\mathrm{T}}\vec{x}}{2\sigma^2}}e^{-\frac{\vec{x}^{\mathrm{T}}\vec{x}'}{2\sigma^2}}e^{-\frac{\vec{x}'^{\mathrm{T}}\vec{x}'}{2\sigma^2}}$$

Construction de noyaux

Exemple2: prouvons que le noyau gaussien est valide: $k(\vec{x},\vec{x}')=e^{-\frac{\|\vec{x}-\vec{x}'\|^2}{2\sigma^2}}$

$\vec{x}^{\mathrm{T}}\vec{x}'=k_1(\vec{x},\vec{x}')\Rightarrow valide$

$k_2(\vec{x},\vec{x}')=ck_1(\vec{x},\vec{x}')$

$k_3(\vec{x},\vec{x}')=\exp(k_2(\vec{x},\vec{x}'))$

$$k(\vec{x},\vec{x}')=e^{-\frac{\vec{x}^{\mathrm{T}}\vec{x}}{2\sigma^2}}e^{-\frac{\vec{x}^{\mathrm{T}}\vec{x}'}{2\sigma^2}}e^{-\frac{\vec{x}'^{\mathrm{T}}\vec{x}'}{2\sigma^2}}$$

Construction de noyaux

Exemple2: prouvons que le noyau gaussien est valide: $k(\vec{x},\vec{x}')=e^{-\frac{\|\vec{x}-\vec{x}'\|^2}{2\sigma^2}}$

$$\boxed{\begin{array}{l}\vec{x}^{\mathrm{T}}\vec{x}'=k_1(\vec{x},\vec{x}')\Rightarrow valide\\ k_2(\vec{x},\vec{x}')=ck_1(\vec{x},\vec{x}')\\ k_3(\vec{x},\vec{x}')=\exp(k_2(\vec{x},\vec{x}'))\\ k(\vec{x},\vec{x}')=f(\vec{x})k_3(\vec{x},\vec{x}')f(\vec{x}')\end{array}}$$

$$k(\vec{x},\vec{x}')=e^{-\frac{\vec{x}^{\mathrm{T}}\vec{x}}{2\sigma^2}}e^{-\frac{\vec{x}^{\mathrm{T}}\vec{x}'}{2\sigma^2}}e^{-\frac{\vec{x}'^{\mathrm{T}}\vec{x}'}{2\sigma^2}}$$

CQFD ■

Capacité d'un noyau

- **Noyau polynomial:** $k(\vec{x},\vec{x}')=\left(\vec{x}^{\mathrm{T}}\vec{x}'+c\right)^M$
  - plus M **est grand**, plus le modèle a de la capacité
- **Noyau gaussien:** $k(\vec{x},\vec{x}')=e^{-\frac{\|\vec{x}-\vec{x}'\|^2}{2\sigma^2}}$
  - plus σ^2 **est petit**, plus le modèle a de la capacité

Résumé

- **Problème:** $\vec{w}=\arg\min_{\vec{w}}\sum_{n=1}^{N}\left(\vec{w}^T\vec{\phi}(\vec{x}_n)-t_n\right)^2+\lambda\vec{w}^T\vec{w}$
- **Paramètres** : $\vec{w}=\sum_{n=1}^{N}a_n\vec{\phi}(\vec{x}_n)=\Phi^{\mathrm{T}}\vec{a}$ somme pondérée des entrées
- **Entraînement** : $\vec{a}=(K+\lambda I_N)^{-1}\vec{t}$
  Matrice de Gram
- **Prédiction**: $y(\vec{x})=\sum_{n=1}^{N}k(\vec{x},\vec{x}_n)a_n$
  Noyau
- **Hyper-paramètres**:
  - λ
  - c et M pour le noyau polynomial
  - σ pour le noyau gaussien