Apprentissage Automatique (4/7): Apprentissage non supervisé

S. Herbin, **B. Le Saux**, A. Boulch, A. Chan Hon Tong

20 février 2018

Introduction

Sélection de caractéristiques : pourquoi ?

Problèmes de l'analyse de données:

Données de grande dimension:

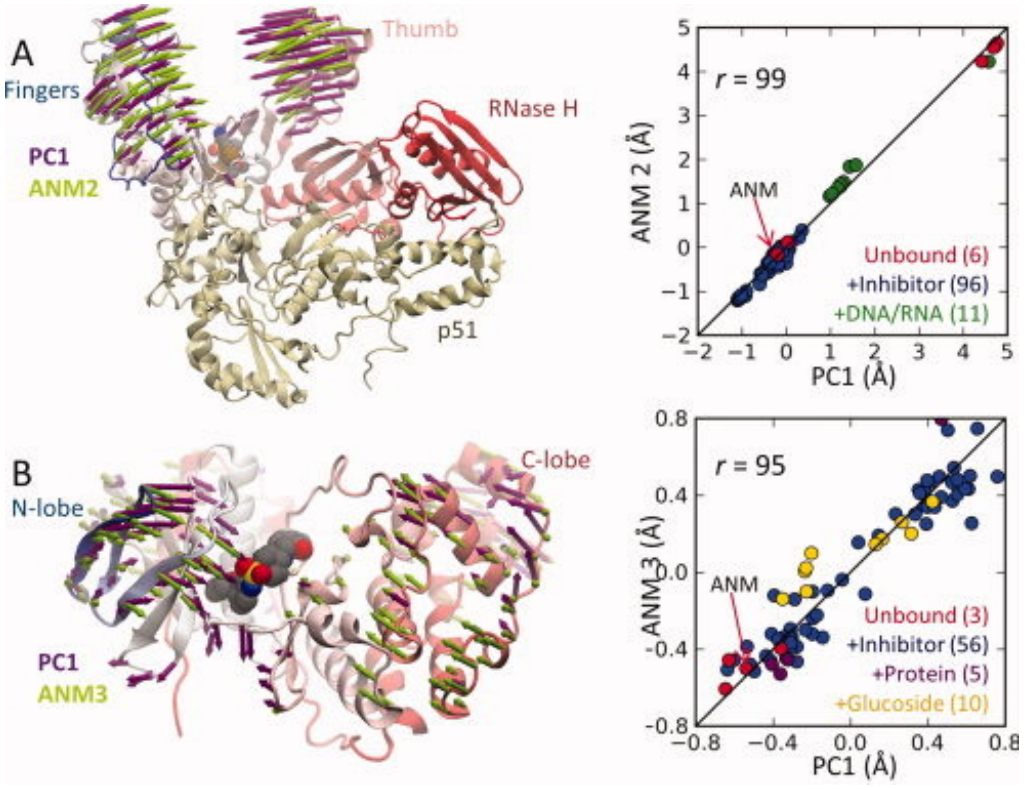
- Ex : image = qq MPixels
- Info redondante, non-pertinente
- Fléau de la dimension : espace vide (exemple : 50 dimensions, 20 niveaux par dimensions $\Longrightarrow$ 20^{50} cellules...)

Grand volume de données:

- Ex: 1 minute de données produites par le collisionneur de particules du CERN = 100 POctets...
- Temps de traitement extrêmement longs

Sélection de caractéristiques : pourquoi ?

Exemple : visualiser et analyser la structure de protéines



Moreiles *et al.*, Protein Science 2011

Sélection de caractéristiques : pourquoi ?

Définition:

Action de selectionner un ensemble réduit de variables utiles pour représenter les données (*avant* d'appliquer les algorithmes d'apprentisssage et de prédiction)

Motivations pour sélectionner des caractéristiques:

- Avoir un modèle simple des données, humainement compréhensible
- Temps d'estimation et d'apprentissage réduits
- Éliminer l'information non-pertinente pour permettre une bonne généralisation de l'apprentissage

Sélection de caractéristiques : plan

Réduction de dimensionalité

- Analyse en Composantes Principales
- Analyse Discriminante Linéaire
- Pour aller plus loin: t-SNE

Catégorisation

- K-means
- CApproches spectrales, DBSCAN
- Pour aller plus loin : apprentissage de dictionnaire

Conclusion

Réduction de dimensionalité

Analyse en Composantes Principales

Dessinez un poisson...

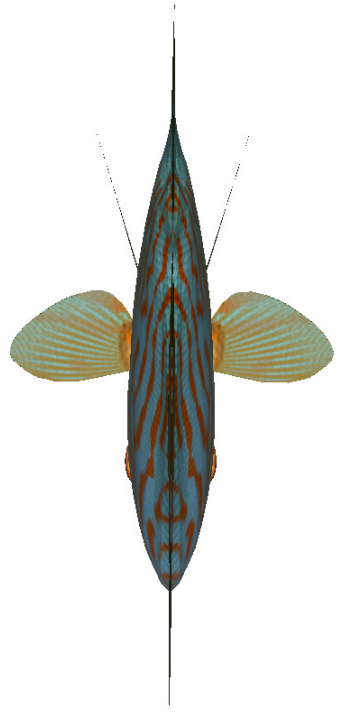
Analyse en Composantes Principales

Dessinez un poisson...

Analyse en Composantes Principales

Dessinez un poisson...

- Les poissons vivent en 3D...



Analyse en Composantes Principales

Dessinez un poisson...

- Les poissons vivent en 3D...
- Comment les représenter sur une feuille 2D ?

Analyse en Composantes Principales

Dessinez un poisson...

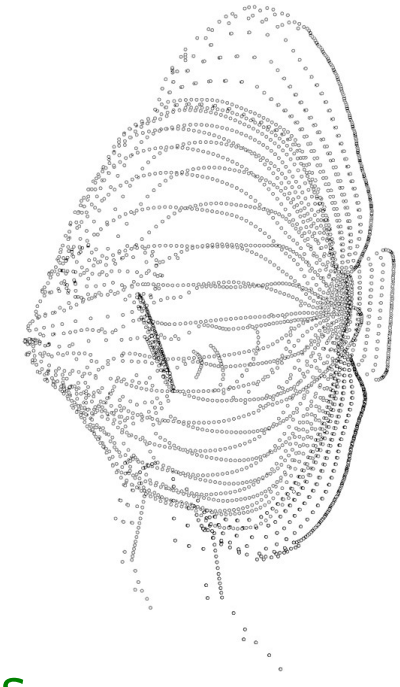
- Les poissons vivent en 3D...
- Comment les représenter sur une feuille 2D ?
- En choisissant le meilleur point de vue

Analyse en Composantes Principales

Dessinez un poisson...

- Les poissons vivent en 3D...
- Comment les représenter sur une feuille 2D ?
- En choisissant le meilleur point de vue
- Encore mieux : en perspective (Giotto, 1420)

Analyse en Composantes Principales



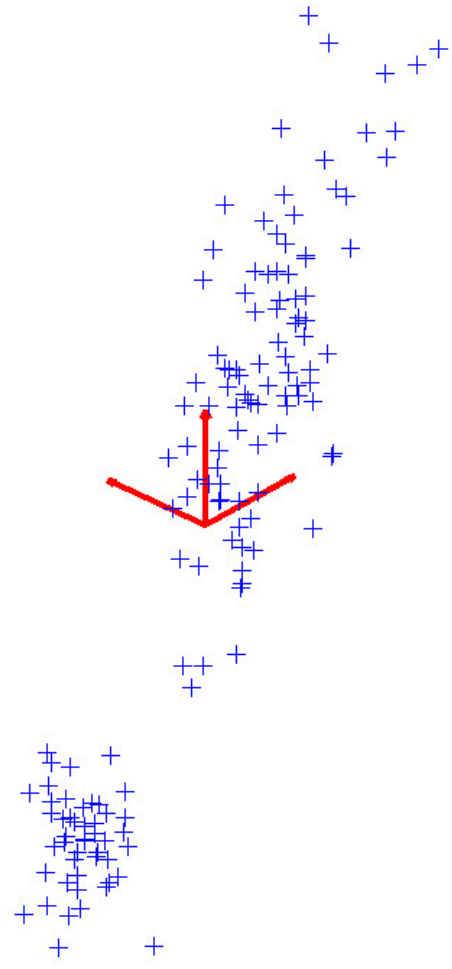
Analyse en Composantes Principales

L'ACP est une méthode de projection qui permet de représenter au mieux les données d'origine en réduisant le nombre de dimensions.

Analyse en Composantes Principales : Formalisme

Algèbre Linéaire (*Rappel*)

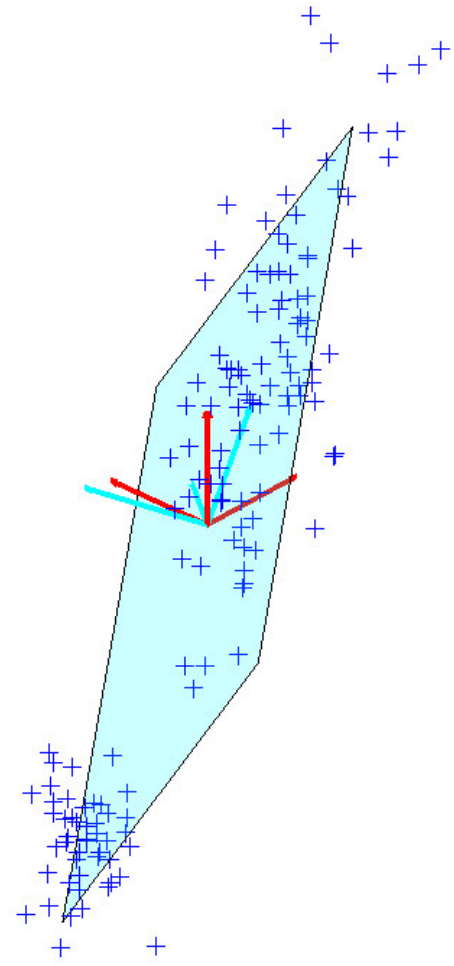
- Espace vectoriel E: structure permettant des combinaisons linéaires de *vecteurs* $\mathbf{x_k} = (x_k^1, \ldots, x_k^n)$
- Base B : famille de vecteurs *libre* et *génératrice*



Analyse en Composantes Principales : Formalisme

Algèbre Linéaire (*Rappel*)

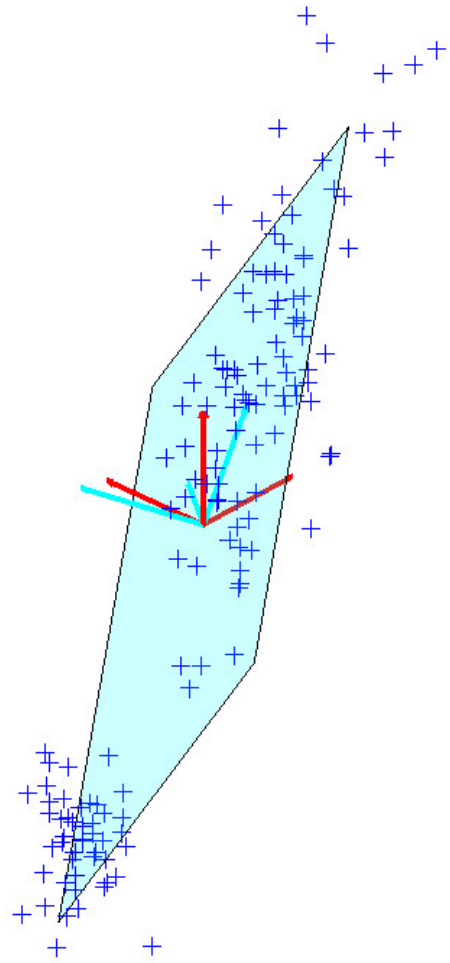
- Espace vectoriel E: structure permettant des combinaisons linéaires de *vecteurs* $\mathbf{x_k} = (x_k^1, \ldots, x_k^n)$
- Base B : famille de vecteurs *libre* et *génératrice*
- Changement de base : endomorphisme $E \to E$, $B \mapsto B'$.
- Projection : Application linéaire de $E \to F$, ss-EV de E.



Analyse en Composantes Principales : Formalisme

Objectif géométrique de l'ACP

L'ACP est la recherche du sous-espace de projection qui permet la représentation la plus fidèle des variables dans un sous-espace de dimension réduite.



Analyse en Composantes Principales : Formalisme

Statistiques (*Rappel*)

Soient X, Y 2 Variables Aléatoires

- Moyenne $\bar{x} = \frac{1}{N} \sum x$
- Variance $\sigma_X = \frac{1}{N} \sum (x - \bar{x})^2$: mesure de la dispersion
- Covariance $\sigma_{X,Y} = \frac{1}{N} \sum (x - \bar{x})(y - \bar{y})$: mesure prop. à la corrélation

Soit $\mathbf{X} = (X^1, \ldots, X^n)$ un vecteur aléatoire :

- Matrice de Variance-Covariance

$$Var(\mathbf{X}) = \begin{pmatrix} \sigma^2_{X^1} & \sigma_{X^1X^2} & \cdots & \sigma_{X^1X_n} \\ \sigma_{X^1X^2} & \sigma^2_{X^2} & \cdots & \sigma_{X^2X^n} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \sigma_{X^1X^n} & \sigma_{X^2X^n} & \cdots & \sigma^2_{X^n} \end{pmatrix}$$

Analyse en Composantes Principales : Formalisme

Objectif statistique de l'ACP

$$\begin{pmatrix} \sigma^2_{X^1} & \sigma_{X^1X^2} & \cdots & \sigma_{X^1X^n} \\ \sigma_{X^1X^2} & \sigma^2_{X^2} & \cdots & \sigma_{X^2X^n} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \sigma_{X^1X^n} & \sigma_{X^2X^n} & \cdots & \sigma^2_{X^n} \end{pmatrix} \rightarrow \begin{pmatrix} \sigma^2_{X^1} & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & \sigma^2_{X^2} & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & \sigma^2_{X^n} \end{pmatrix}$$

L'ACP cherche à :

- Maximiser la dispersion sur les 1ères dimensions de la nouvelle base : $\sigma_{X^i} \gg 0$ et $\sigma_{X^i} > \sigma_{X^j}\ \forall i > j$
- Décorréler chaque dimension : $\sigma_{X^iX^j} \rightarrow 0$

Analyse en Composantes Principales : Algorithme

Algorithme

Échantillon $\{\mathbf{x_k} = (x_k^1, \ldots, x_k^n)_{1 \leq k \leq p}\}$, réalisations d'un vecteur aléatoire $\mathbf{X} = (X^1, \ldots, X^n)$. M matrice $n \times p$ des vecteurs en lignes.

1. Centrer l'échantillon $\forall i \, X^i \mapsto X^i - \bar{X}^i$, tq : $B = M - \bar{M}$
2. Construire la matrice de variance-covariance $Var(\mathbf{X}) = \frac{1}{p-1} B^T B$
3. Diagonaliser la matrice de variance-covariance [1]:

$$Var(\mathbf{X}) = P \Delta P^T$$

4. Trier les valeurs propres par ordre décroissant (et les vecteurs propres de P)

$\Rightarrow$ On obtient la matrice de passage P et les valeurs propres Δ_i

[1] Symétrique donc diagonalisable par le th. de Weierstass

Analyse en Composantes Principales : Propriétés

Propriétés

- Matrice de passage $P = \left(\mathbf{u^1}, \ldots, \mathbf{u^n}\right)$ composée des vecteurs de la nouvelle base (même dimension) :

$$T = PM$$

- Matrice de projection dans la base d'un sous-espace vectoriel optimal pour la représentation $P_{1\to l} = \left(\mathbf{u^1}, \ldots, \mathbf{u^n}\right)$ pour $l \leq n$:

$$T = P_{1\to l}M$$

Analyse en Composantes Principales : Propriétés

Propriétés

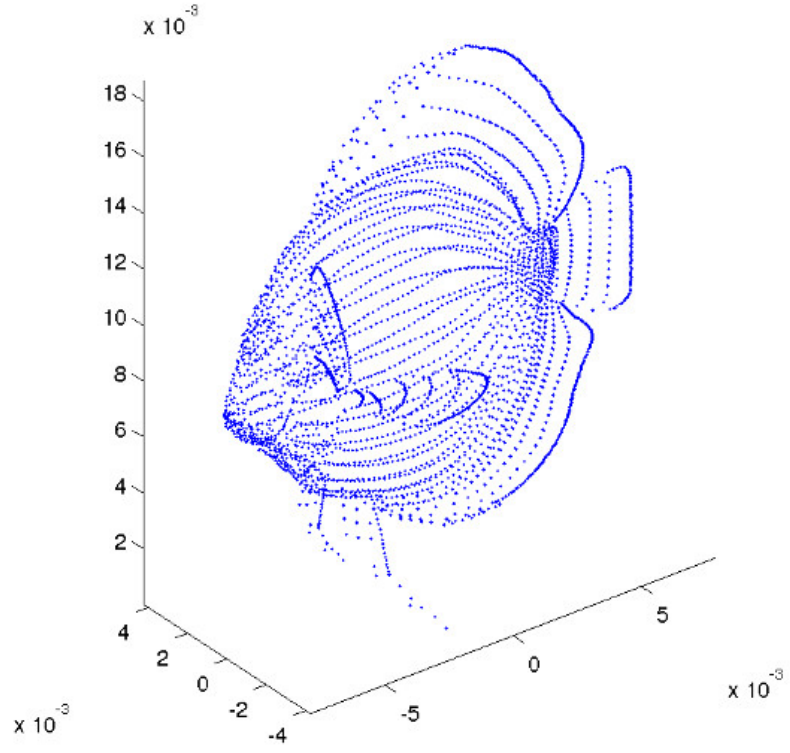
- Vecteurs propres $P = (\mathbf{u^1}, \ldots, \mathbf{u^n})$ associés aux valeurs propres $\Delta_i \propto \sigma^2_{X^i}$ triées par ordre décroissant.

- Variance $\propto$ information statistique portée par la dimension. Lien avec la théorie du signal :
  - les composantes principales avec une large dynamique représentent le signal,
  - celles avec une faible variance constituent le bruit.

Analyse en Composantes Principales : Exemples

Revenons à nos poissons

Points $\in \mathbb{R}^3$ répartis sur la surface du Discus Alenquer



Variances:

$$\Delta \propto \begin{pmatrix} 0.17 & 0 & 0 \\ 0 & 0.15 & 0 \\ 0 & 0 & 0.01 \end{pmatrix}$$

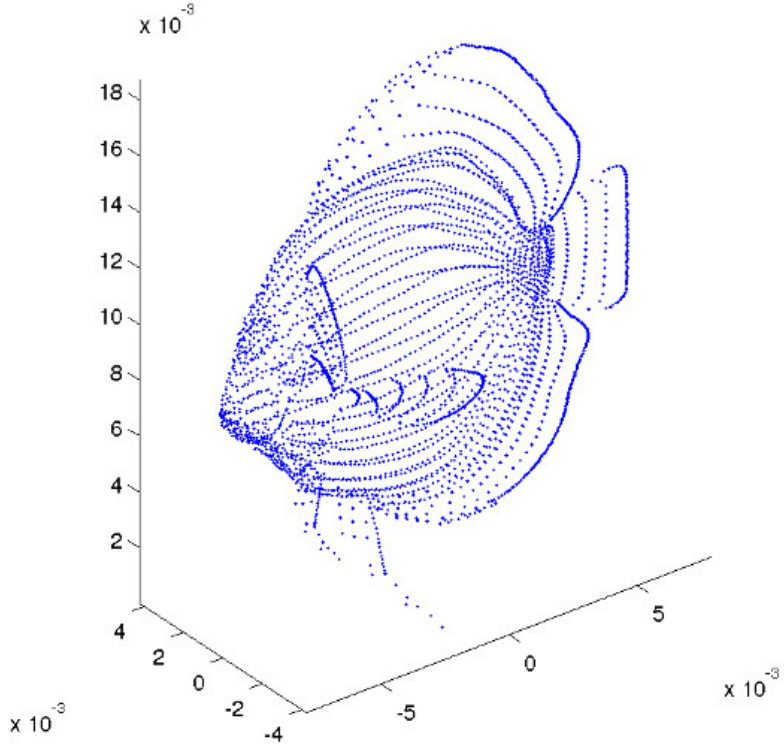
Base des vecteurs propres:

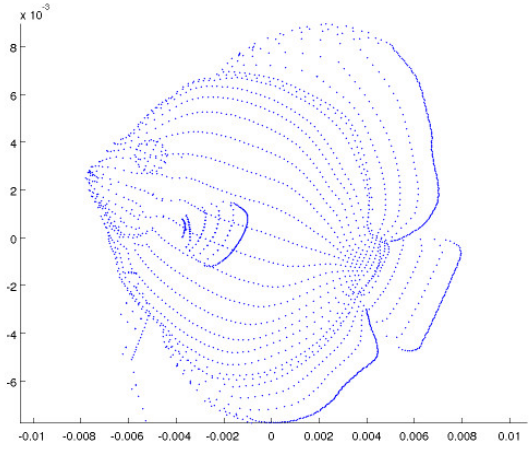
$$P = \begin{pmatrix} 0.91 & -0.42 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 0.42 & 0.91 & 0 \end{pmatrix}$$

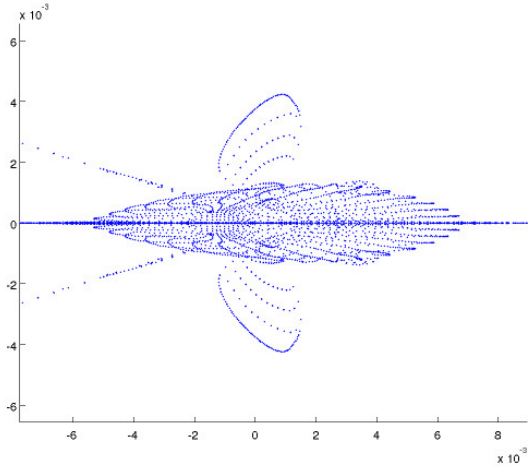
Analyse en Composantes Principales : Exemples

Revenons à nos poissons

Projections sur les 2 premières (ou dernières) composantes



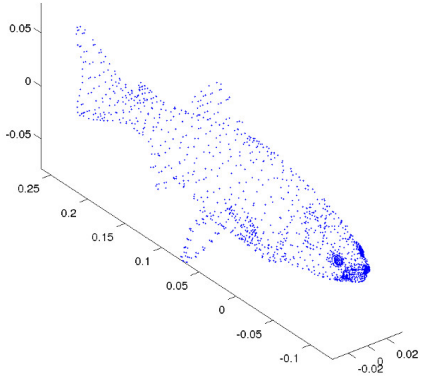


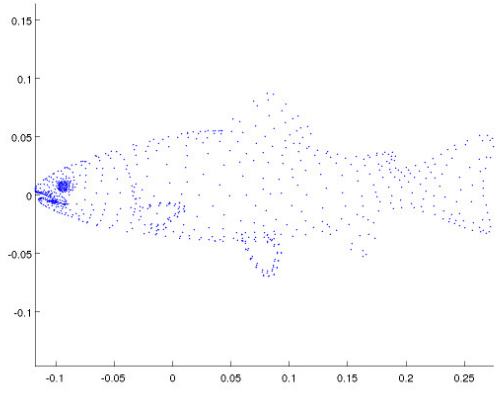


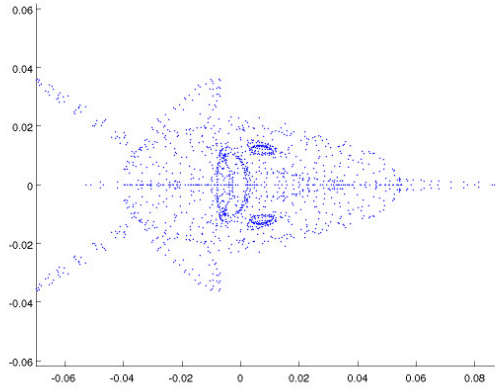
Analyse en Composantes Principales : Exemples

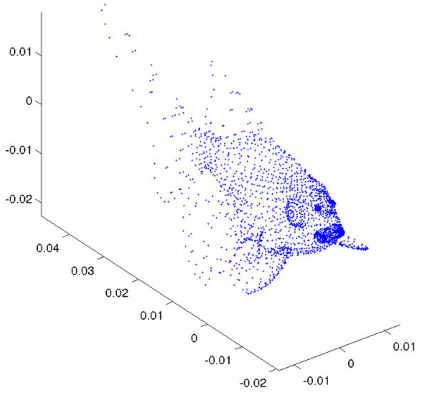
Plus de poissons...

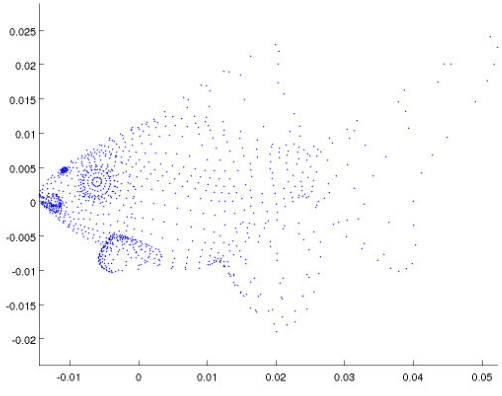
3D vs. 1ères CP (= représentation canonique) vs. dernières CP

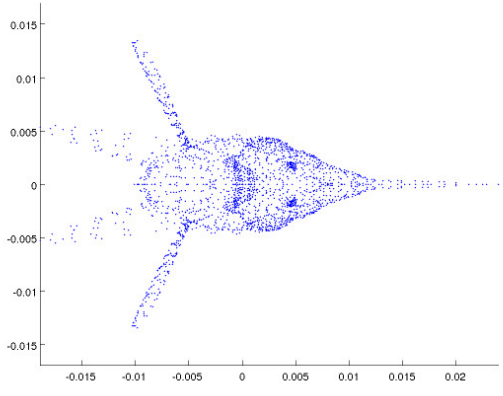








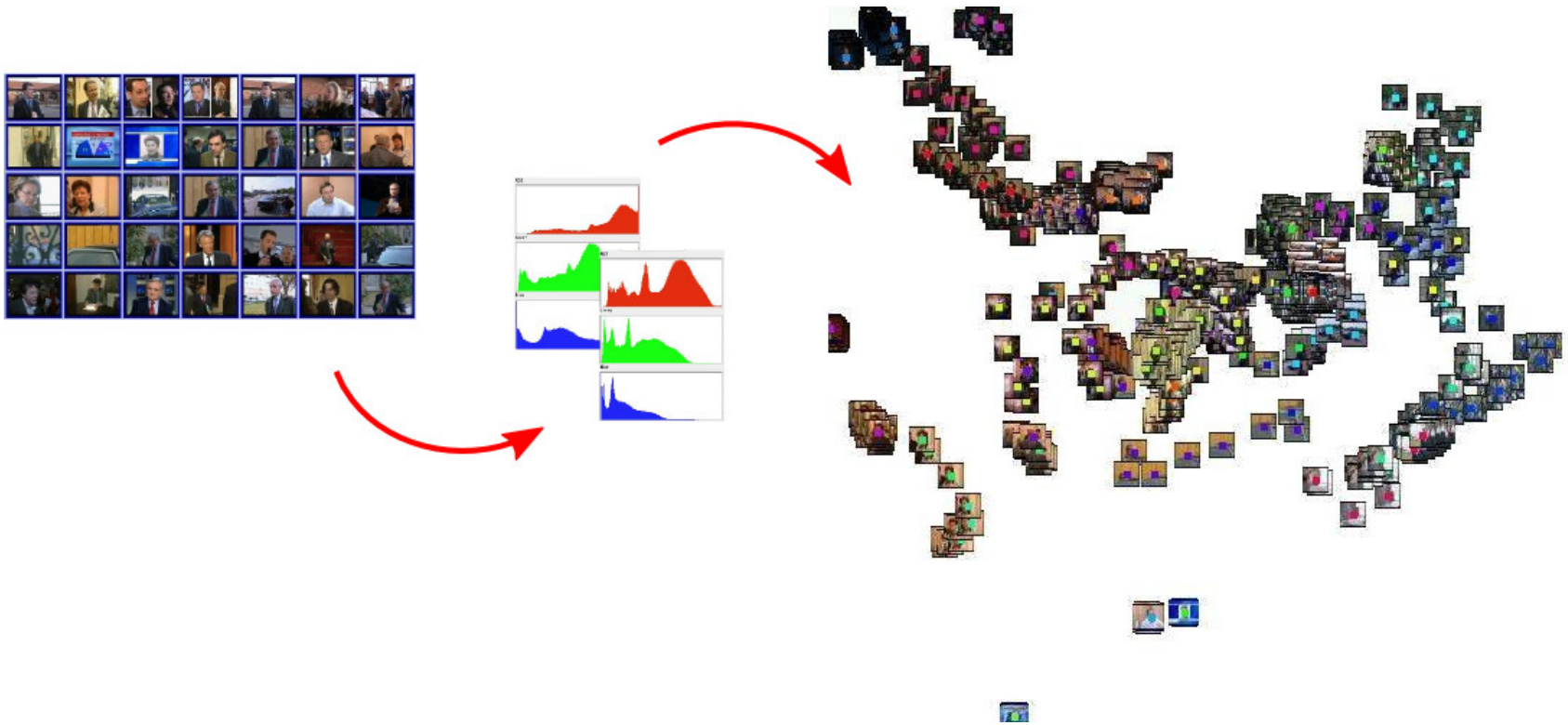




Analyse en Composantes Principales : Exemples

Plus complexe : analyse de vidéos

Images vidéos caractérisées par des histogrammes de couleurs et visualisées selon les 2 premières composantes issues de l'ACP



Le Saux, 2003

Analyse en Composantes Principales : Résumé

Points clés de l'ACP

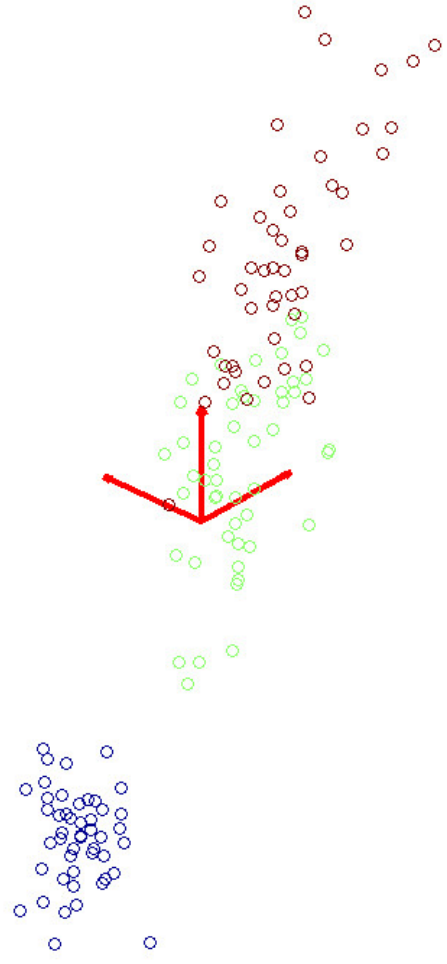
- Représenter des données de grande dimension
- Réduire la dimension
- Décorréler les variables
- Basé sur la diagonalisation de la matrice de variance-covariance des données (*vecteurs*)

Utilisations

- Pré-traitement pour l'analyse de données (cf. cours 1, 2, 3)
- Visualisation

Analyse Discriminante Linéaire

- L'ACP optimise la variance globale d'un ensemble de données $X = \{\mathbf{x_k} \in \mathbb{R}^n\}_{1 \leq k \leq p}$
- Peut-on faire mieux quand les données appartiennent à des sous-groupes connus ?
- Données étiquetées (ou *labellisées* - une couleur par groupe)



Analyse Discriminante Linéaire

- Données étiquetées (ou *labellisées*)
- Ensemble de couples de données avec leur groupe respectif noté $(X, Y) = \{(\mathbf{x_k}, y_k),\ \mathbf{x_k} \in \mathbb{R}^n, y_k \in \{1, \ldots, C\}\}_{1 \leq k \leq p}$

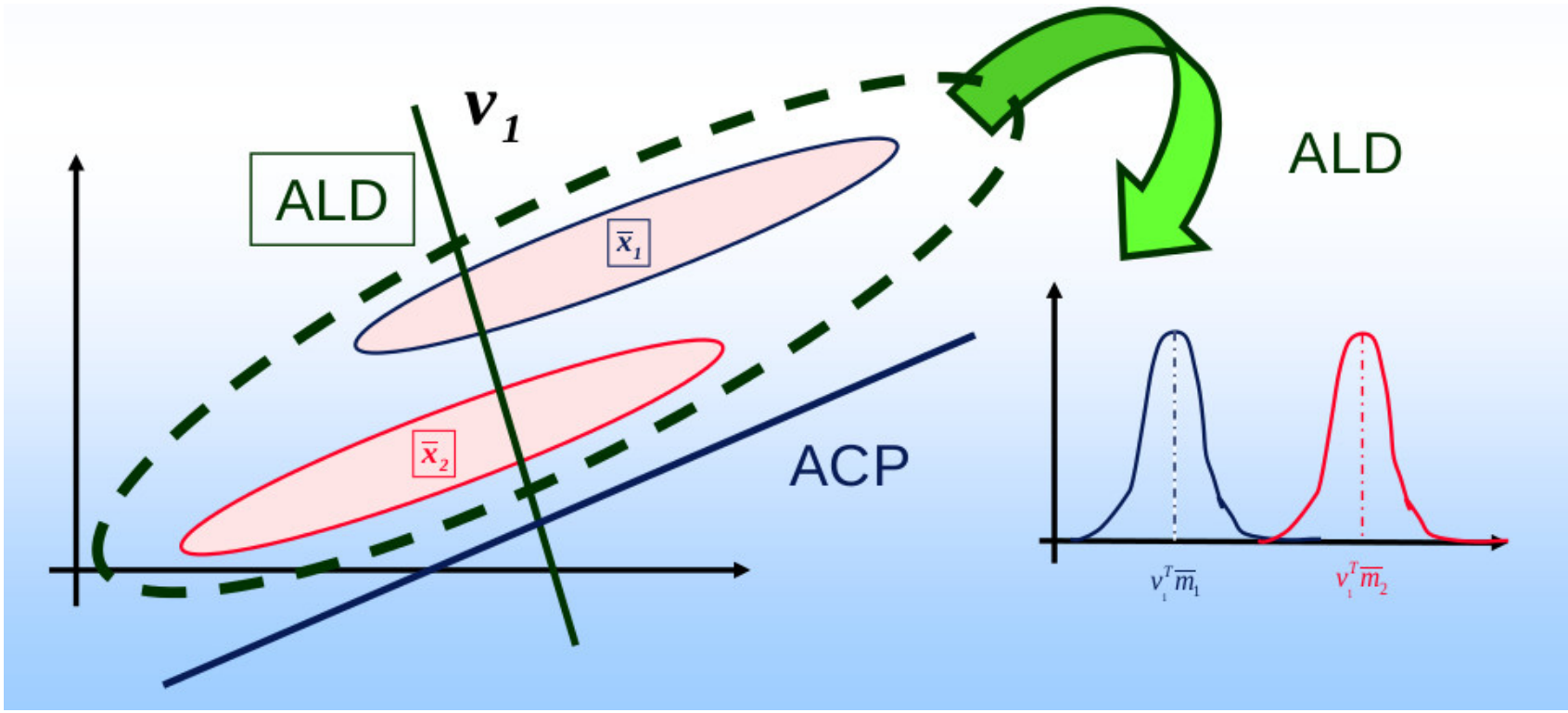
Objectifs

- En classification on vise la **séparabilité** des données
- Mettre en évidence les **différences** entre classes

Analyse Discriminante Linéaire

Cas à 2 classes

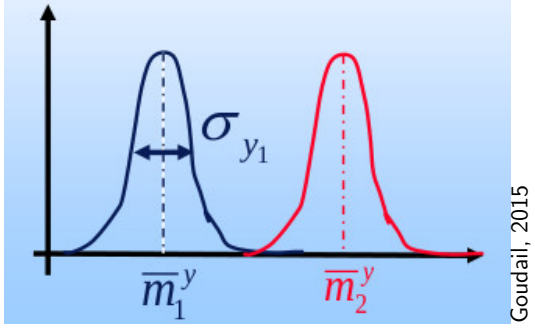
- Recherche du vecteur unitaire $\mathbf{u}$ de la droite ALD tel que les 2 groupes sont séparés au mieux après projection
- Après projection en 1D, $\mathbf{x}'_\mathbf{k} = \mathbf{u}^T \mathbf{x}_\mathbf{k}$



Analyse Discriminante Linéaire

Cas à 2 classes

- Après projection en 1D, $\mathbf{x'_k} = \mathbf{u}^T \mathbf{x_k}$
- La séparabilité des données est quantifiée par le critère de Fisher : $f(\mathbf{u}) = \frac{(m'_1 - m'_2)^2}{\sigma_1^2 + \sigma_2^2}$



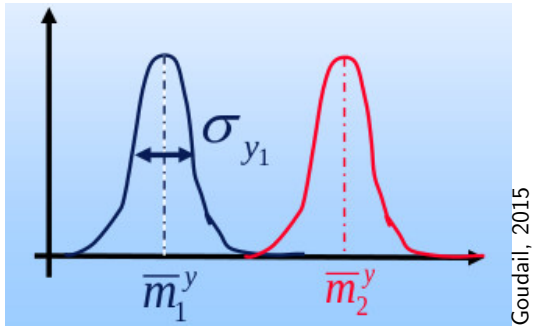
Goudail, 2015

- Recherche de $\mathbf{u}$ tel que $f(\mathbf{u})$ est maximisée.

Analyse Discriminante Linéaire

Cas à 2 classes

- Critère de Fisher : $f(\mathbf{u}) = \frac{(m'_1 - m'_2)^2}{\sigma_1^2 + \sigma_2^2}$



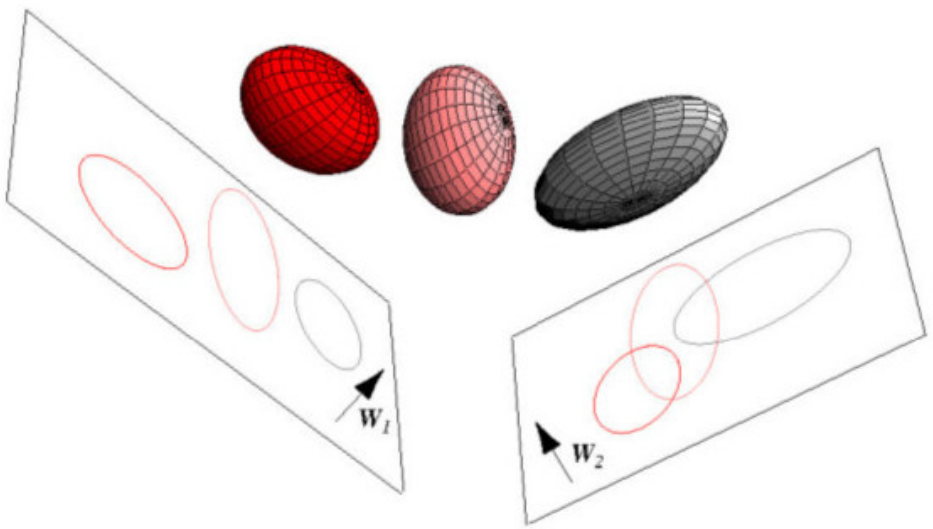
Goudail, 2015

- Matrice de covariance inter-classe Γ_B à maximiser: $(m'_1 - m'_2)^2 = \mathbf{u}^T \Gamma_B \mathbf{u}$
- Matrices de covariance intra-classe $\Gamma_c, c = 1, 2$ à minimiser: $\Gamma_c = \frac{1}{N}(\mathbf{x} - \mathbf{m_c})(\mathbf{x} - \mathbf{m_c})^T$

Analyse Discriminante Linéaire

Cas multiclasse

- Projection dans un sous-espace $\mathbf{x_k}' = V\mathbf{x_k}$
- Soient:
  - p^i le nombre d'exemples de la classe i,
  - $\bar{x}^i = \frac{1}{p^i} \sum_{\mathbf{x} \in classei} \mathbf{x}_k^i$ la moyenne de la classe i,
  - et $\bar{x} = \frac{1}{p} \sum_{\mathbf{x_k}} \mathbf{x}_k^i$ la moyenne globale.



in: *Pattern Classification*, Duda, Hart & Stock, 2001

Analyse Discriminante Linéaire

Cas multiclasse

- Fonction objective à minimiser de l'Analyse Discriminante Multiple: $j(V) = \frac{det(V^t S_B V)}{det(V^t S_W V)}$
- Avec la matrice de variance intra-classe : $S_W = \sum_{i=1}^{c} \sum_{\mathbf{x} \in classei} (\mathbf{x_k} - \bar{x}^i)(\mathbf{x_k} - \bar{x}^i)^t$
- Et la matrice de variance inter-classes : $S_B = \sum_{i=1}^{c} n^i (\bar{x}^i - \bar{x})(\bar{x}^i - \bar{x})^t$

Analyse Discriminante Linéaire

Algorithme

1. Calcul des moyennes de classe $\bar{x}^i$ (dimension n)
2. Calcul des matrices de variance intra-classe S_W et inter-classes S_B
3. Calcul des vecteurs propres $\mathbf{v_1}, \ldots, \mathbf{v_n}$ et valeurs propres $\lambda_1, \ldots, \lambda_n$ pour les matrices de variance
4. Tri des vecteurs propres par ordre décroissant des valeurs propres
5. Sélection des f vecteurs propres associés aux plus grandes λ_k $\rightarrow$ matrice de passage V (dimension $d * f$) où chaque colonne est un vecteur propre v_k.
6. Projection dans le sous-espace : $\mathbf{x_k}' = V\mathbf{x_k}$

Analyse Discriminante Linéaire

Propriétés

- Matrice de passage $V_n = (\mathbf{v^1}, \ldots, \mathbf{v^n})$ composée des vecteurs de la nouvelle base (même dimension) : $T = PM$
- Matrice de projection dans la base d'un sous-espace vectoriel optimal pour la classification $V_{1\to f} = (\mathbf{v^1}, \ldots, \mathbf{v^f})$ pour $f \leq n$: $T = P_{1\to l}M$

- L'Analyse Discrminante Linéaire est une ACP sur les vecteurs moyens de chaque classe, normalisée par la variance intra-classe

Analyse Discriminante Linéaire : Résumé

Points clés de l'ADL

- Représenter des données labelisées de grande dimension
- Optimiser la séparabilité des données projetées
- Basé sur la variance intra-classe (à minimiser) et de la variance inter-classes (à maximiser)

Utilisations

- Pré-traitement pour l'analyse de données (cf. cours 1, 2, 3)
- Classification sommaire
- Visualisation

Réduction de dimension : Pour aller plus loin, **t-SNE**

Définition

- t-SNE = t-distributed stochastic neighbor embedding
- Approche **non-linéaire** de réduction de dimension, proposée par [Van Der Maaten & Hinton, 2008]

Objectifs

- Trouver un mapping en faible dimension qui réflète au mieux les **similarités** entre les observations dans l'espace de départ.

Réduction de dimension : Pour aller plus loin, **t-SNE**

Algorithme (1/2)

Soient N observations $(\mathbf{x_1}, \ldots, \mathbf{x_N})$ en grande dimension.

1. Calcul des probabilités de **similarité** des observations:
   $p_{j|i} = \frac{exp(-||x_i - x_j||^2/2\sigma_i^2)}{\sum_{k \neq i} exp(-||x_i - x_k||^2/2\sigma_i^2)}$ et $p_{ij} = \frac{p_{j|i} + p_{i|j}}{2N}$
2. ...

Objectifs

t-SNE cherche à apprendre une représentation d-dimensionnelle $\mathbf{y}_1, \ldots, \mathbf{y}_N$ (avec $\mathbf{y}_i \in \mathbb{R}^d$) qui réflète au mieux les similarités p_{ij}.

Réduction de dimension : Pour aller plus loin, **t-SNE**

Algorithme (2/2)

Soient N observations $(\mathbf{x_1}, \ldots, \mathbf{x_N})$ en grande dimension.

1. Calcul des probabilités de **similarité** des observations:
   $p_{j|i} = \frac{exp(-||x_i - x_j||^2/2\sigma_i^2)}{\sum_{k \neq i} exp(-||x_i - x_k||^2/2\sigma_i^2)}$ et $p_{ij} = \frac{p_{j|i} + p_{i|j}}{2N}$
2. Définition des probabilités de **similarité** des représentations cibles selon une distribution de Student :
   $q_{ij} = \frac{(1+||y_i - y_j||^2)^{-1}}{\sum_{k,m,k \neq m}(1+||y_k - y_m||^2)^{-1}}$
3. Minimisation de la divergence de Kullback-Leibler de Q par rapport à P : $KL(P||Q) = \sum_{i \neq j} p_{ij} \log \frac{p_{ij}}{q_{ij}}$

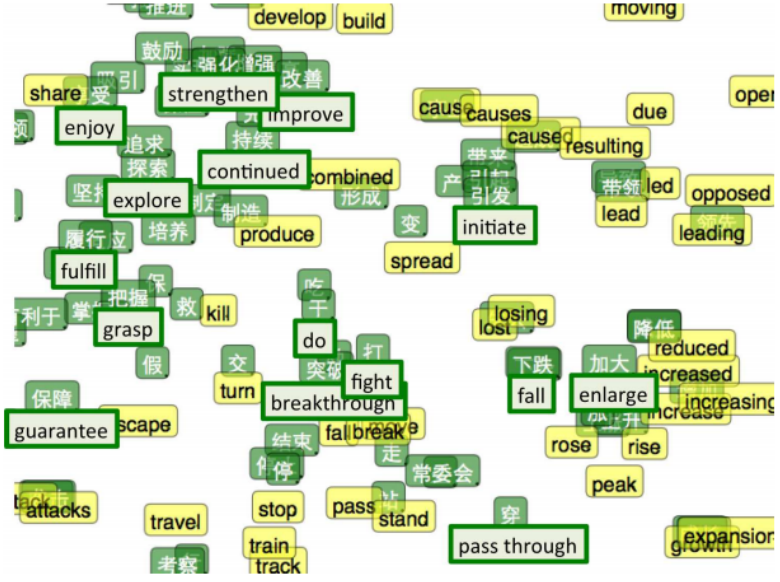
- Distrib. de Student force les individus dissimilaires à être éloignés
- $KL(P||Q)$ facilement dérivable, donc optimisation par descente de gradient

Réduction de dimension : Pour aller plus loin, **t-SNE**

t-SNE sur base d'images

Van Maaten, https://lvdmaaten.github.io/tsne/

t-SNE sur mots chinois + anglais



Zou et al., ENMLP'13

t-SNE : Résumé

Points clés de t-SNE

- Approche non-linéaire de réduction de données
- Optimiser la distrib. des similarités entre observations et projections
- Dans l'espace de proj., la distrib. de Student éloigne les individus dissimilaires
- Optimisation par descente de gradient (cf. cours réseaux de neurones 5, 6)

Utilisations / liens

- Pré-traitement pour l'analyse de données (cf. cours 1, 2, 3)
- Visualisation
- Autre approche pour apprendre un espace de représentation : les auto-encodeurs (cf. cours 6)

Catégorisation

Catégorisation

Définition

- Trouver des catégories d'objets proches ou similaires
- Synonymes : partitionnement, *clustering*...
- ... classification non-supervisée : des données $\{x_i | i \in \{1..N\}\}$ dans $\mathbb{R}^n$ mais pas de labels

Objectifs

- Trouver les groupes de données *proches* dans $\mathbb{R}^n$ (*notion de distance*)
- Mettre en évidence des catégories (*"Qui se ressemble s'assemble"*)

Catégorisation : K-means

K-means

- Soit K le nombre de groupe cherchés.
- Un groupe (d'indice $j \in \{1 \cdots K\}$) = un ensemble de points.
- Soit $u_{ji} \in \{0, 1\}$ l'appartenance de chaque x_i au groupe j
- Soient $B = \{\beta_j | \, j \in \{1 \cdots K\}\}$ les prototypes qui caractérisent ces groupes.

L'algorithme **K-means** minimise :

- $J_{B,U}(X) = \sum_{j=1}^{K} \sum_{i=1}^{N} (u_{ji})^m d^2(x_i, \beta_j)$

Catégorisation : K-means

Algorithme

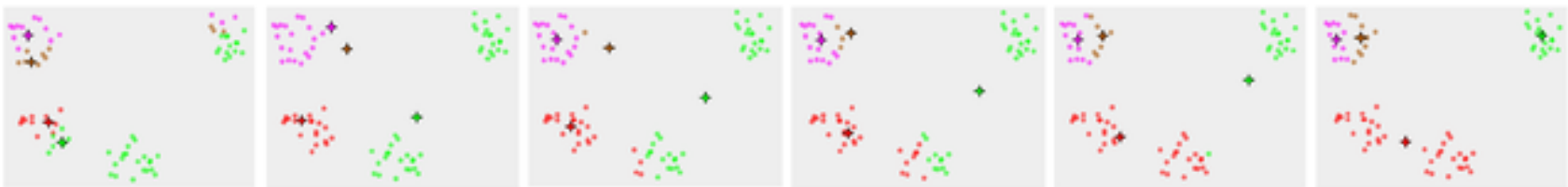
Initialiser les β_j, puis itérer :

1. Assigner chaque donnée x_i au plus proche β_j
2. Recalculer les prototypes selon: $\beta_j = \frac{\sum_{i=1}^{N} u_{ji} * x_i}{\sum_{i=1}^{N} u_{ji}}$ (moyenne des observations du groupe)

Catégorisation : K-means

Propriétés

- L'algorithme fait diminuer la fonction de coût $J_{B,U}(X)$ à chaque itération.
- Il y a un nombre fini de K partitions possible, donc l'algorithme converge.
- Mais la solution peut ne pas être optimale (minimum local) !



- importance de l'initialisation
- Par exemple: choisir β_j parmi les observations x_i...

Catégorisation

Variante statistique :

- Paramètres d'un *Modèle de Mélange de Gaussiennes (GMM)* estimé par l'algorithme *Expectation-Maximisation*
- x_i réalisation d'un V.A. modélisée par un Mélange de Gaussiennes : $p(x_i) = \sum_1^K p(x_i|k)P(k)$
- $d(x_i, \mu_k) \longrightarrow p(x_i|k) \quad \propto \exp(-||x_i - \mu_k||^2/2\sigma_k^2)$ (Gaussienne simplifiée)
- Paramètres à estimer : $\forall k : P(k), \mu_k, \sigma_k$

Catégorisation

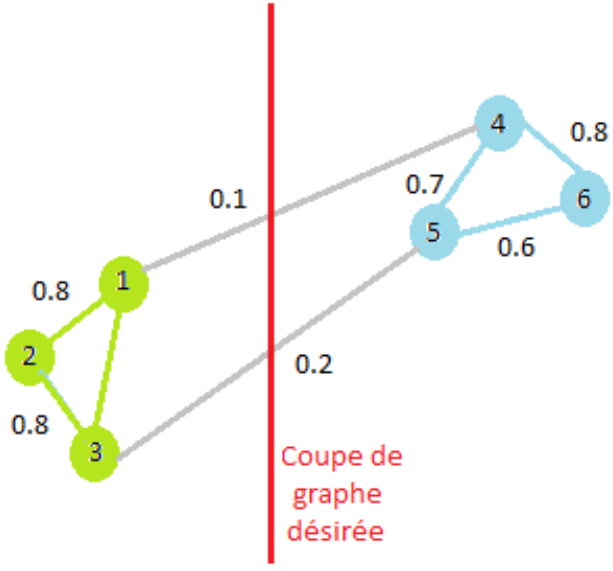
Variantes et trucs :

- Fuzzy C-means : appartenance $u_i^j \in [0, 1]$
- Formes variées : distance de Mahalanobis (FCM) / Matrice de covariance complète (GMM)
- Données aberrantes : *si* $\forall k \; d(x_i, \mu_k), x_i \mapsto \text{categorie bruit}$
- Critères pour estimer le nombre de catégorie :
- Initialisation des μ_k : uniformément dispersés parmi les données

Catégorisation : catalogue de méthodes alternatives

Partitionnement spectral:

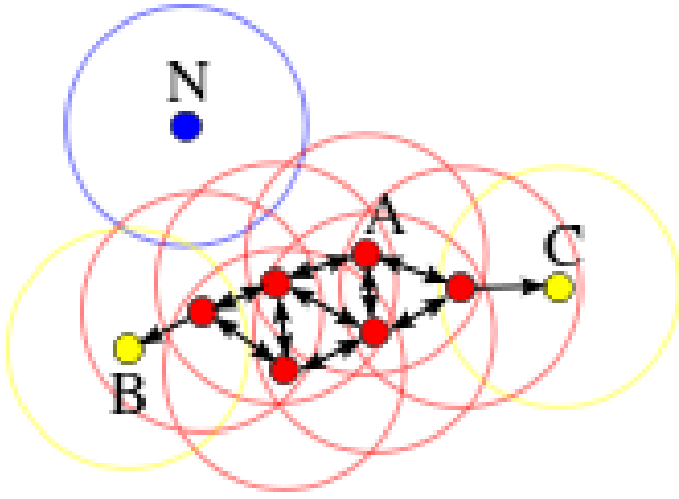
- Matrice de similarité,
- Réduction de dimension (1ers vecteurs propres)
- K-means



https://fr.wikipedia.org/wiki/Partitionnement_spectral

$\Rightarrow$ *objets complexes, non vectoriels*

Catégorisation : catalogue de méthodes alternatives



https://fr.wikipedia.org/wiki/DBSCAN

DBSCAN:

- Partionnement des données en catégories de *MinPts* points se trouvant dans un rayon ϵ
- Parcours de proche en proche de tous les points pour ajouter des points à la catégorie courante

$\Rightarrow$ *estime automatiquement le nombre catégories,*

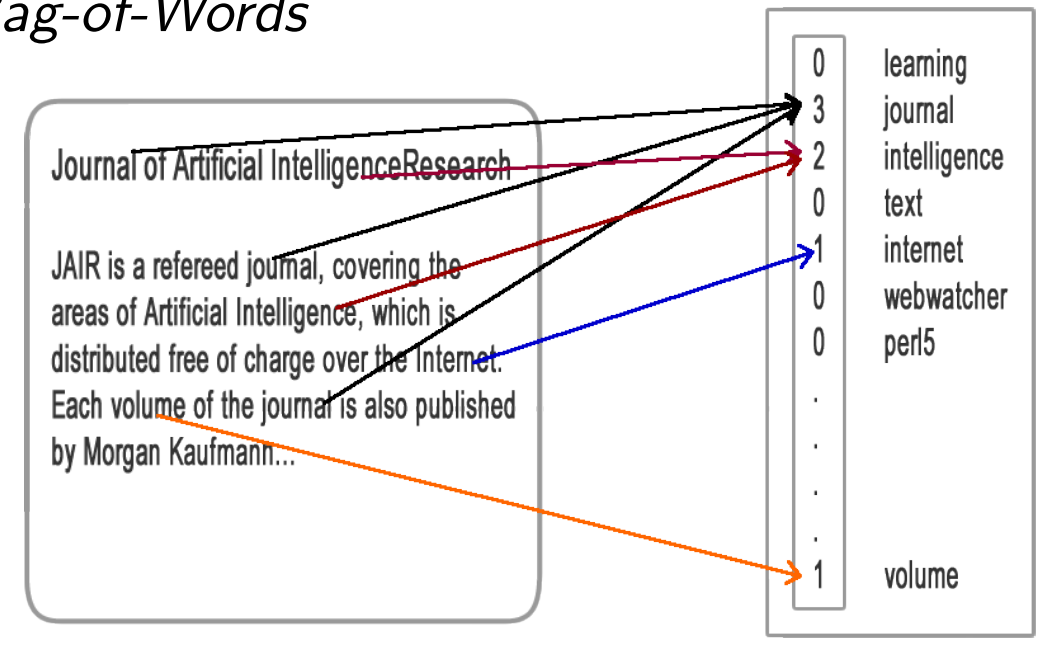
$\Rightarrow$ *gère les données aberrantes*

Catégorisation : pour aller plus loin

Apprentissage de dictionnaire:

- Estime un dictionnaire (=ensemble d'éléments de base) qui représente un ensemble de données
- Encode chaque donnée en fonction du dictionnaire (*sparse encoding*)

Exemple : *Bag-of-Words*

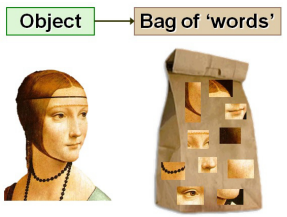


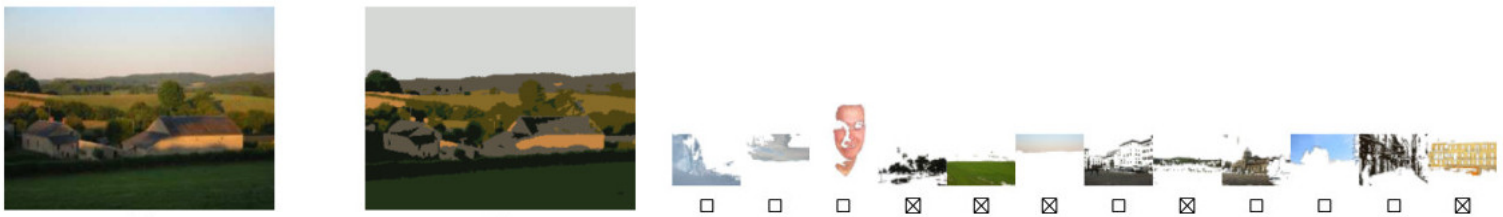
Catégorisation : pour aller plus loin

Apprentissage de dictionnaire:

- Estime un dictionnaire (=ensemble d'éléments de base) qui représente un ensemble de données
- Encode chaque donnée en fonction du dictionnaire (*sparse encoding*)
- Notion-clé : parcimonie (*sparsity*); une donnée est représentée par seulement quelques éléments du dictionnaire

Exemple : *Bag-of-Words* pour les images





B. Le Saux, ICCVG'04

Catégorisation : Résumé

Points clés du clustering

- Regrouper des données non-labelisées en catégories
- Notion de distance ou de similarité entre échantillons
- Comme l'ADL, idée de variance intra-classe (à minimiser) et de variance inter-classes (à maximiser)

Utilisations

- Pré-traitement pour l'analyse de données (cf. cours 1, 2, 3) : Bag-of-words, superpixels, etc.
- Classification non-supervisée
- Visualisation

Conclusion

Cours n°3: Sélection de caractéristiques

Notions phares du jour

- ACP, LDA, t-SNE
- Catégorisation, classification non-supervisée
- Préparation des données (*pre-processing*)

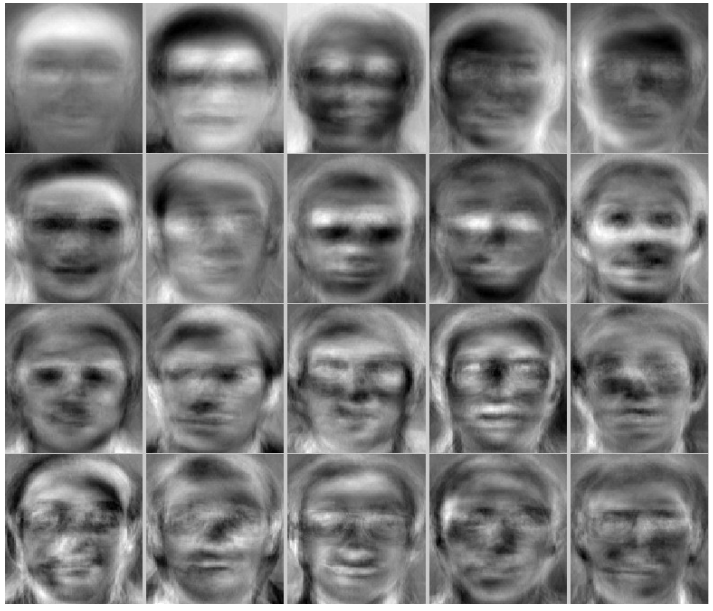
Concepts généraux

- Grande dimension / Big data (*curse of dimensionality*)
- Caractéristiques, espace de représentation (projection et mapping, linéaire et non-linéaire)
- Similarité intra-classe, variance inter-classes

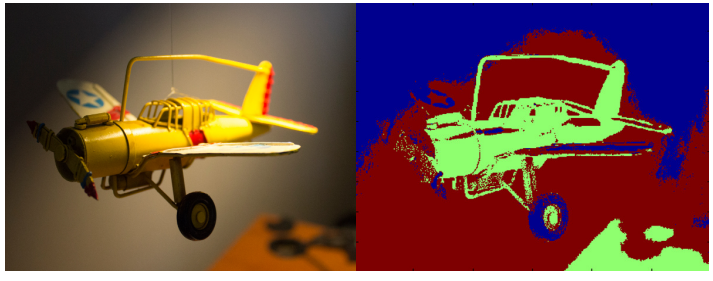
Sélection de caractéristiques

TD à suivre:

- ACP sur exemple jouet
- Eigen faces
- k-means pour la segmentation couleur



ATT Laboratories Cambridge/ BLS



CC0 https://www.pexels.com// BLS