Université de Montréal

Département d'informatique et de recherche opérationnelle

IFT3390/6390
Fondements de l'apprentissage machine

http://www.iro.umontreal.ca/~vincentp/ift3390

Sixième cours:

Distribution Gaussienne multivariée.
Évaluation de la performance de généralisation.
Courbes d'apprentissage.

Professeur: Pascal Vincent

LISA Laboratoire d'Informatique des Systèmes d'Apprentissage

Au programme aujourd'hui

- Opérations sur les Distributions
- Gaussienne multivariée.
- Évaluation de performance de généralisation.
- Courbes d'apprentissage

Première partie

Distributions

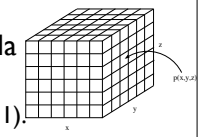
Distributions

Voir http://www.techno-science.net/?onglet=glossaire&definition=6395
et le rappel de proba de Balazs

- On associe naturellement une loi de probabilité (ou **distribution**) à une variable aléatoire pour décrire la *répartition des valeurs qu'elle peut prendre.*
- La distribution d'une variable aléatoire peut se caractériser par sa fonction de distribution cumulative (c.d.f.):

$$F_X(x) = P(X \leq x) = P(X_1 \leq x_1, \cdots, X_n \leq x_n)$$

- La loi d'une variable discrète est déterminée par la probabilité de chacune des valeurs qu'elle peut prendre. => table de probabilités (qui doivent sommer à 1).



- La loi d'une variable continue peut être donnée sous la forme d'une fonction de densité de probabilité (p.d.f.) qui est la dérivée de la c.d.f. *La probabilité qu'un tirage de la variable tombe dans une certaine région de l'espace est l'intégrale de la densité sur cette région.*

Opérations avec les distributions

Avec une distribution, on peut vouloir:

- Générer des données, c.a.d. tirer des échantillons selon la distribution.
- Calculer la (log) probabilité d'une configuration (sachant la valeur de certaines des variables et ayant maginalisé celles dont on ne connaît pas la valeur).
- Inférence: *inférer* la valeur la plus probable ou la valeur espérée d'un sous ensemble de variables sachant la valeur des autres.
- Apprentissage des paramètres de la distribution à partir d'un ensemble de données (de sorte à maximiser la probabilité que les données soient générées par cette distribution avec ces paramètres: principe du *maximum de vraisemblance*).

Ex. variable scalaire discrète X

Table de probabilité:

x	$P(X=x)$
1	0.10
2	0.80
3	0.10

Génération →

← Apprentissage

Ensemble de données:

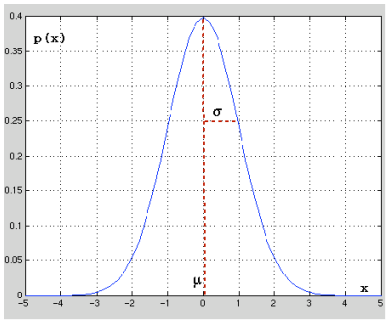
2 2 2 1 2 2 2 3 2 2 ⋮

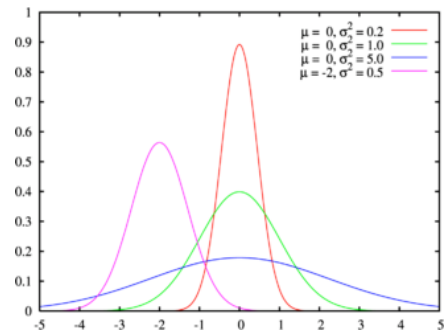
La densité Gaussienne univariée

(distribution dite Gaussienne ou Normale)

Densité Gaussienne univariée (c.a.d. en dimension 1) de moyenne μ et de variance σ^2 (écart type σ).

$$p(x) = \mathcal{N}_{\mu,\sigma^2}(x) = \frac{1}{\sigma\sqrt{2\pi}} e^{-\frac{(x-\mu)^2}{2\sigma^2}}$$





La plupart des graphiques de cette partie proviennent de la page http://www.cs.mcgill.ca/~mcleish/644/normal.html par **Erin Mcleish**

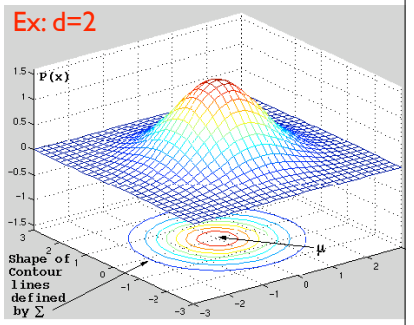
La densité Gaussienne multivariée

Gaussienne isotropique ("sphérique") en dimension d:

$$p(x) = \mathcal{N}_{\mu,\sigma^2}(x) = \frac{1}{(2\pi)^{\frac{d}{2}}\sigma^d} e^{-\frac{1}{2}\frac{\|x-\mu\|^2}{\sigma^2}}$$

Il s'agit d'une "bosse" Gaussienne ***"centrée"*** *en* μ *et de* ***"largeur"*** σ*, la même dans toutes les direcitons.*

Ex: d=2



Gaussienne générale en dimension d, de moyenne μ et de matrice de covariance Σ.

$$p(x) = \mathcal{N}_{\mu,\Sigma}(x) = \frac{1}{(2\pi)^{\frac{d}{2}}\sqrt{|\Sigma|}} e^{-\frac{1}{2}(x-\mu)^T\Sigma^{-1}(x-\mu)}$$

déterminant de Σ

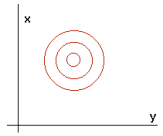
$$\mu = \begin{bmatrix} \mu_1 \\ \vdots \\ \mu_d \end{bmatrix} \quad \Sigma = \begin{bmatrix} \sigma_{11} & \cdots & \sigma_{1d} \\ \vdots & & \\ \sigma_{d1} & \cdots & \sigma_{dd} \end{bmatrix}$$

Note: le dénominateur est une simple normalisation qui assure que la densité intègre à 1, mais ne change rien à sa forme

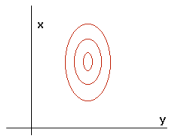
La densité Gaussienne multivariée

matrices de covariance particulières

- Gaussienne isotropique ou sphérique: $\Sigma = \sigma^2 I$
  (avec I la matrice identité)

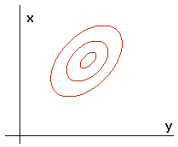


- Gaussienne diagonale: $\Sigma = \begin{pmatrix} \sigma_1^2 & & 0 \\ & \sigma_2^2 & \\ 0 & & \ddots \\ & & & \sigma_d^2 \end{pmatrix}$



- Décomposition en valeurs propres/vecteurs propres:

$$\Sigma = \sum_{i=1}^{d} \lambda_i v_i v_i^T$$



Les vecteurs propres indiquent les directions des axes de l'ellipsoide associée, les valeurs propres leur "longeur".
Le déterminant $|\Sigma| = \lambda_1 \lambda_2 \ldots \lambda_d$ indique la "taille" de l'ellipsoide.

La densité Gaussienne multivariée

apprentissage des paramètres

- On peut apprendre les paramètres d'une Gaussienne à partir d'un ensemble de données de manière simple:
- Pour μ on calcule la moyenne empirique des points (le "centroide").
- Pour Σ on calcule la matrice de covariance empirique des données.
- On verra comment dériver ces résultats dans un prochain cours *(principe du maximum de vraisemblance)*.

Deuxième partie

Evaluation de la performance de généralisation

Estimation de l'erreur de généralisation

Le problème:

- Principe de minimisation du risque empirique: on entraîne un modèle (on adapte ses paramètres) de manière à ce qu'il fasse un minimum d'erreurs sur l'ensemble d'entraînement.
- MAIS ce qui nous intéresse vraiment, c'est de bien généraliser sur de nouveaux exemples.
- Puisque les paramètres du modèle sont choisis, spécialisés, pour minimiser l'erreur sur les exemples d'entraînement, celle-ci sous-estime l'erreur de généralisation.
- Ainsi l'erreur d'entraînement n'est pas un bon estimé de l'erreur de généralisation (c'est un estimé *biaisé*).

Estimation d'erreur de généralisation: Validation simple

Ensemble de toutes les données étiquetées dont on dispose:

$D=$ (x_1, y_1) (x_2, y_2) ⋮ (x_N, y_N)

On sépare nos données en **deux**

(attention il peut s'avérer nécessaire de d'abord mélanger les rangées de données)

Ensemble d'entraînement (taille n)

On entraîne le modèle pour minimiser l'erreur sur l'ensemble d'entraînement

Ensemble de test (taille m)

On évalue la performance de généralisation en mesurant les erreurs sur l'ensemble de test qu'on n'a jamais regardé pendant l'entraînement. (mesure de performance "hors échantillon").

Sélection des hyper-paramètres

Ex: choisir le k des k-PPV

$D=$ (x_1, y_1) (x_2, y_2) ⋮ (x_N, y_N)

*On sépare nos données en **trois***

Ensemble d'entraînement (taille n)

Ensemble de validation (taille n')

Ensemble de test (taille m)

Pour chaque valeur d'hyper-paramètres considérée:

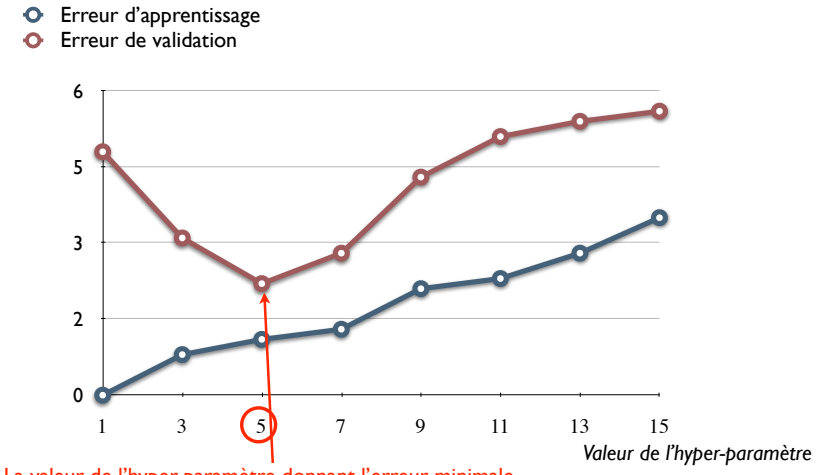
1) On entraîne le modèle pour minimiser l'erreur sur l'ensemble d'entraînement.

2) On évalue l'erreur sur l'ensemble de validation.

On utilise finalement la valeur des hyper-paramètres donnant l'erreur la plus basse sur l'ensemble de validation. (possibilité de réentraîner sur les n+n' exemples ou non).

On évalue la performance de généralisation en mesurant les erreurs sur l'ensemble de test qu'on n'a jamais regardé pendant l'entraînement / validation (mesure de performance "hors échantillon").

Courbes d'apprentissage



La valeur de l'hyper-paramètre donnant l'erreur minimale sur l'ensemble de validation est **5** (alors que c'est **1** pour l'ensemble d'apprentissage)

Si on n'a pas assez de données: validation croisée *(en k blocs)*

$D=$ (x_1, y_1) (x_2, y_2) ⋮ (x_N, y_N)

Bloc 1

Bloc 2

Bloc 3

...

Bloc k-1

Bloc k

Idée simple: on répète plusieurs fois la procédure entraînement/test en divisant différemment l'ensemble de données.

Entraînement sur	*Calcul de l'erreur (test) sur*
D \ Bloc 1	Bloc 1
D \ Bloc 2	Bloc 2
...	...
D \ Bloc k	Bloc k

Notre estimé de l'erreur de généralisation de l'algorithme sur ce problème est déduit de la somme des erreurs obtenues sur tous les blocs.

En Anglais on appelle cela *k-fold cross validation.*
Le cas où k=N est appelé *leave-one-out* ou *jackknife*.

Double validation croisée

- Si on a peu de données et qu'on veut faire de la sélection d'hyper-paramètre ET obtenir un estimé non biaisé de l'erreur de généralisation de la procédure, on peut faire une double validation croisée:
- Un premier niveau de validation croisée est utilisé pour obtenir des paires d'ensembles entraînement/test
- Un deuxième niveau (imbriqué) de validation croisée où l'on divise l'ensemble d'entraînement sert à sélectionner les hyper-paramètres.