Université de Montréal
Département d'informatique et de recherche opérationnelle

IFT3390/6390
Fondements de l'apprentissage machine

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

Quatrième cours:

Méthodes à base de voisinage: k-NN, Parzen
pour classificaiton, régression, estimation de densité

Professeur: Pascal Vincent

LISA Laboratoire d'Informatique des Systèmes d'Apprentissage

Au programme aujourd'hui

- Rappel des types de problème en apprentissage
- Méthodes à base de voisinage: k-NN et Parzen
  pour classification binaire, régression, estimation de densité.
- Etapes de conception d'un algorithme d'apprentissage.

Les types de problèmes en apprentissage

	Classification	**Régression**	**Estimation de densité**
Signification de la cible y	indique une classe parmi c classes.	une valeur réelle à prédire.	pas de cible y!
Domaine de y	$y \in$ {-1,1} ou $y \in$ {1, ..., c} ou $y \in$ {0, 1, ... , c-1}	$y \in \mathbb{R}$	pas de cible y!
Ce que $f(x)$ vise à prédire	la classe de x (la classe la plus probablement associée à x)	la valeur espérée de y (le y "moyen") correspondant à x. $E[Y \mid X=x]$	la densité p(x) (l'observation x est-elle fort ou peu probable?)
Fonction de perte (ou coût) que l'on veut habituellement minimiser.	l'erreur de classification: $L((x,y),f) = I_{\{f(x) \neq y\}}$	l'erreur quadratique: $L((x,y),f) = (f(x)-y)^2$	la log-vraisemblance négative: $L(x,f) = -\log f(x)$

Méthodes à base de voisinage

- Une idée simple: faire voter les voisins du point de test.
- Ex. k-NN classification multiclasse: "parmi mes k plus proches voisins, quelle classe est majoritaire?"
- Tout comme les méthodes de type histogramme (quadrillage de l'espace), les méthodes à base de voisinage sont des méthodes dites "non-paramétriques".

k-NN (k nearest neighbors)

k-PPV (k plus proches voisins)

Pour la classification binaire (avec $Y_i \in \{-1, 1\}$)

$$f(x) = \text{sign}\left(\frac{1}{k} \sum_{\{i \in 1 \ldots n | X_i \in V(x)\}} Y_i\right)$$

signe de la moyenne des valeurs cibles des k voisins les plus proches de x

$$f(x) = \text{sign}\left(\frac{1}{k} \sum_{i=1}^{n} I_{\{X_i \in V(x)\}} Y_i\right)$$

V(x) = ensemble des k plus proches voisins de x dans l'ensemble d'apprentissage

$$f(x) = \text{sign}\left(\frac{1}{\sum_{i=1}^{n} w_i} \sum_{i=1}^{n} w_i Y_i\right) \quad \text{avec} \quad w_i = I_{\{X_i \in V(x)\}}$$

signe de la moyenne **pondérée** des valeurs cibles de **tous** les points d'entrainement, pondérées par un poids indiquant si le point d'entrainement est voisin de x.

k-NN (k nearest neighbors)

k-PPV (k plus proches voisins)

Pour la régression (avec $Y_i \in \mathbb{R}$)

$$f(x) = \cancel{\text{sign}} \left(\frac{1}{k} \sum_{\{i \in 1 \ldots n | X_i \in V(x)\}} Y_i \right)$$

la moyenne des valeurs cibles des k voisins les plus proches de x

$$f(x) = \cancel{\text{sign}} \left(\frac{1}{k} \sum_{i=1}^{n} I_{\{X_i \in V(x)\}} Y_i \right)$$

V(x) = ensemble des k plus proches voisins de x dans l'ensemble d'apprentissage

$$f(x) = \cancel{\text{sign}} \left(\frac{1}{\sum_{i=1}^{n} w_i} \sum_{i=1}^{n} w_i Y_i \right) \quad \text{avec} \quad w_i = I_{\{X_i \in V(x)\}}$$

la moyenne **pondérée** des valeurs cibles de **tous** les points d'entrainement, pondérées par un poids indiquant si le point d'entrainement est voisin de x.

Fenêtres de Parzen

à voisinage dur

Pour la classification binaire (avec $Y_i \in \{-1, 1\}$)

$V(x)$ = ensemble des points de l'ensemble d'apprentissage situés à moins d'une distance h de x.

signe de la moyenne des valeurs cibles des voisins de x situés à distance $\leq h$

$$f(x) = \text{sign}\left(\frac{1}{\sum_{i=1}^{n} w_i} \sum_{i=1}^{n} w_i Y_i\right) \quad \text{avec} \quad w_i = I_{\{X_i \in V(x)\}}$$

$$w_i = I_{\{d(X_i,x)<h\}}$$

$$w_i = I_{\{\frac{d(X_i,x)}{h}<1\}}$$

signe de la moyenne **pondérée** des valeurs cibles de **tous** les points d'entrainement, pondérées par un poids indiquant si le point d'entrainement est voisin de x.

Fenêtres de Parzen

à voisinage dur

Pour la régression (avec $Y_i \in \mathbb{R}$)

$V(x)$ = ensemble des points de l'ensemble d'apprentissage situés à moins d'une distance h de x.

la moyenne des valeurs cibles des voisins de x situés à distance $\leq h$

$$f(x) = \frac{1}{\sum_{i=1}^{n} w_i} \sum_{i=1}^{n} w_i Y_i \quad \text{avec} \quad w_i = I_{\{X_i \in V(x)\}}$$

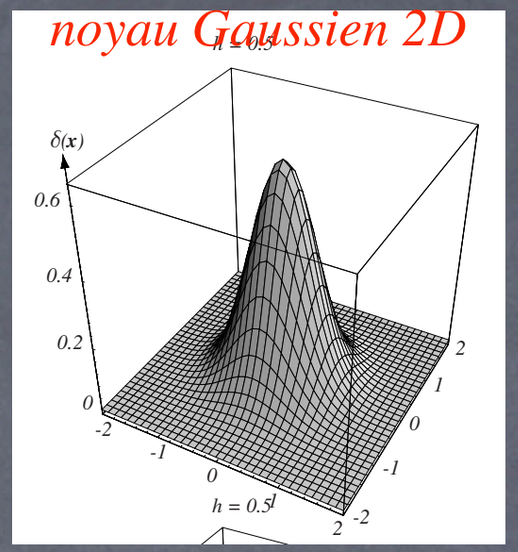
$$w_i = I_{\{d(X_i,x)<h\}}$$

$$w_i = I_{\{\frac{d(X_i,x)}{h}<1\}}$$

la moyenne **pondérée** des valeurs cibles de **tous** les points d'entrainement, pondérées par un poids indiquant si le point d'entrainement est voisin de x.

Fenêtres de Parzen

à voisinage mou (soft)



Pour la régression (avec $Y_i \in \mathbb{R}$)

$$f(x) = \frac{1}{\sum_{i=1}^{n} w_i} \sum_{i=1}^{n} w_i Y_i \qquad \text{avec} \qquad w_i = K(X_i, x)$$

la moyenne **pondérée** des valeurs cibles de **tous** les points d'entrainement, pondérées par un poids indiquant à quel "degré" le point est voisin de x.

K est un noyau *(Kernel)*

notez que $w_i = I_{\{\frac{d(X_i,x)}{h}<1\}}$ correspond à un K particulier
(un noyau "dur")

Comme noyau "mou" on choisit souvent un noyau Gaussien (correspond à une densité Normale)

$$\begin{aligned} K(X_i, x) &= \mathcal{N}_{x,\sigma^2}(X_i) = \mathcal{N}_{X_i,\sigma^2}(x) \\ &= \frac{1}{(2\pi)^{\frac{d}{2}}\sigma^d} e^{-\frac{1}{2}\frac{d(X_i,x)^2}{\sigma^2}} \end{aligned}$$

Fenêtres de Parzen (en résumé)

Pour la régression ($Y_i \in \mathbb{R}$) :

$$f(x) = \frac{1}{\sum_{i=1}^{n} K(X_i, x)} \sum_{i=1}^{n} K(X_i, x) Y_i$$

Pour la classification binaire ($Y_i \in \{-1, 1\}$) :

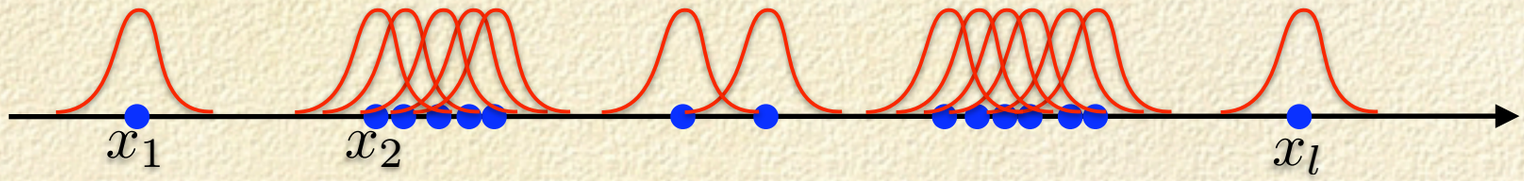
$$f(x) = \text{sign}\left(\frac{1}{\sum_{i=1}^{n} K(X_i, x)} \sum_{i=1}^{n} K(X_i, x) Y_i \right)$$

Pour l'estimation de densité :

$$f(x) = \hat{p}(x) = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^{n} K(X_i; x)$$

à condition que
$K_{X_i}(x) = K(X_i; x)$
soit bien une fonction de densité de probabilité.
Ex: une Gaussienne centrée en X_i

Fenêtres de Parzen en 1D



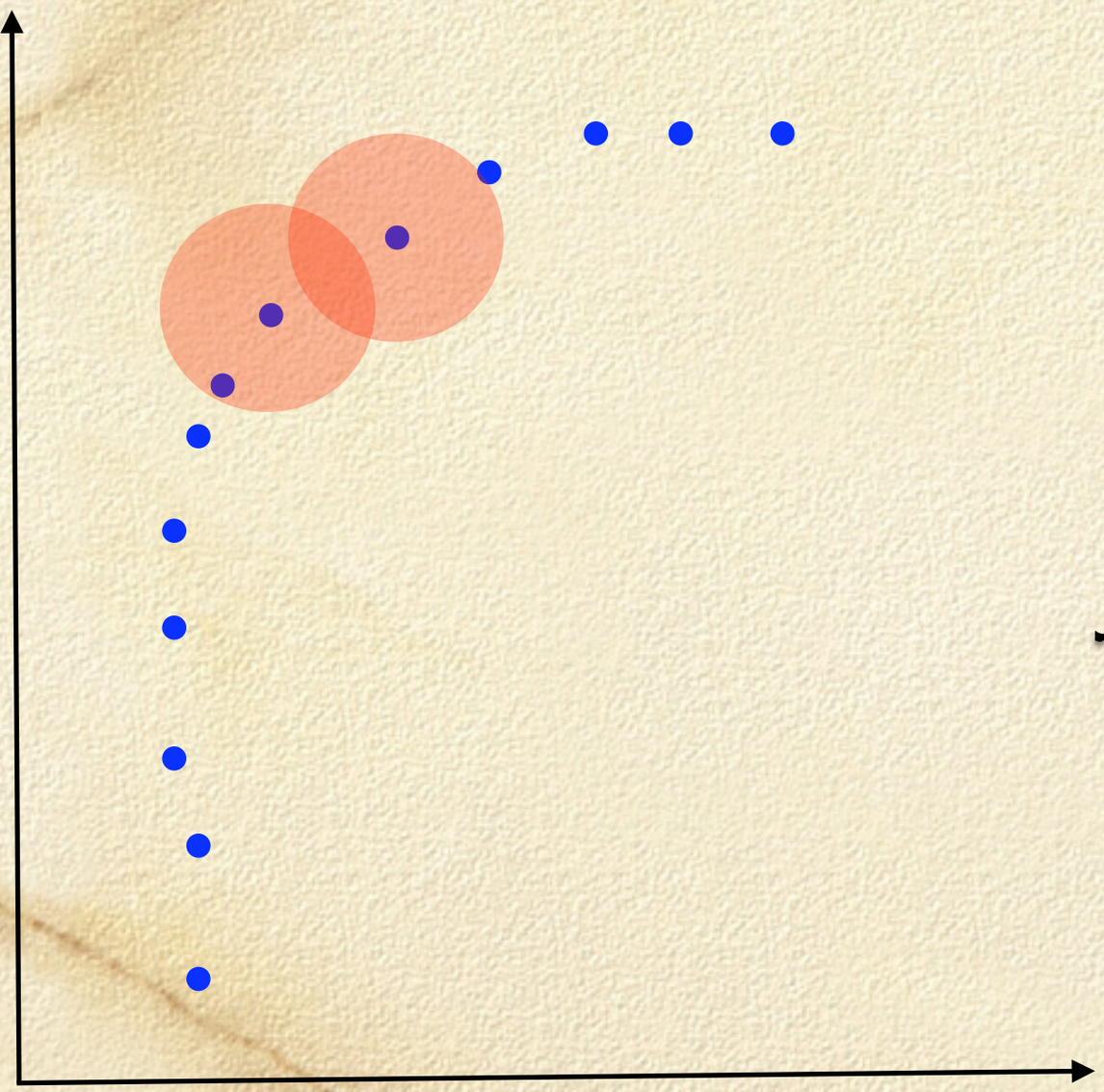
Gaussienne en dimension 1:

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

Estimateur de densité de Parzen:

$$\hat{p}(x) = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^{n} \mathcal{N}_{X_i,\sigma}(x)$$

Fenêtres de Parzen en 2D

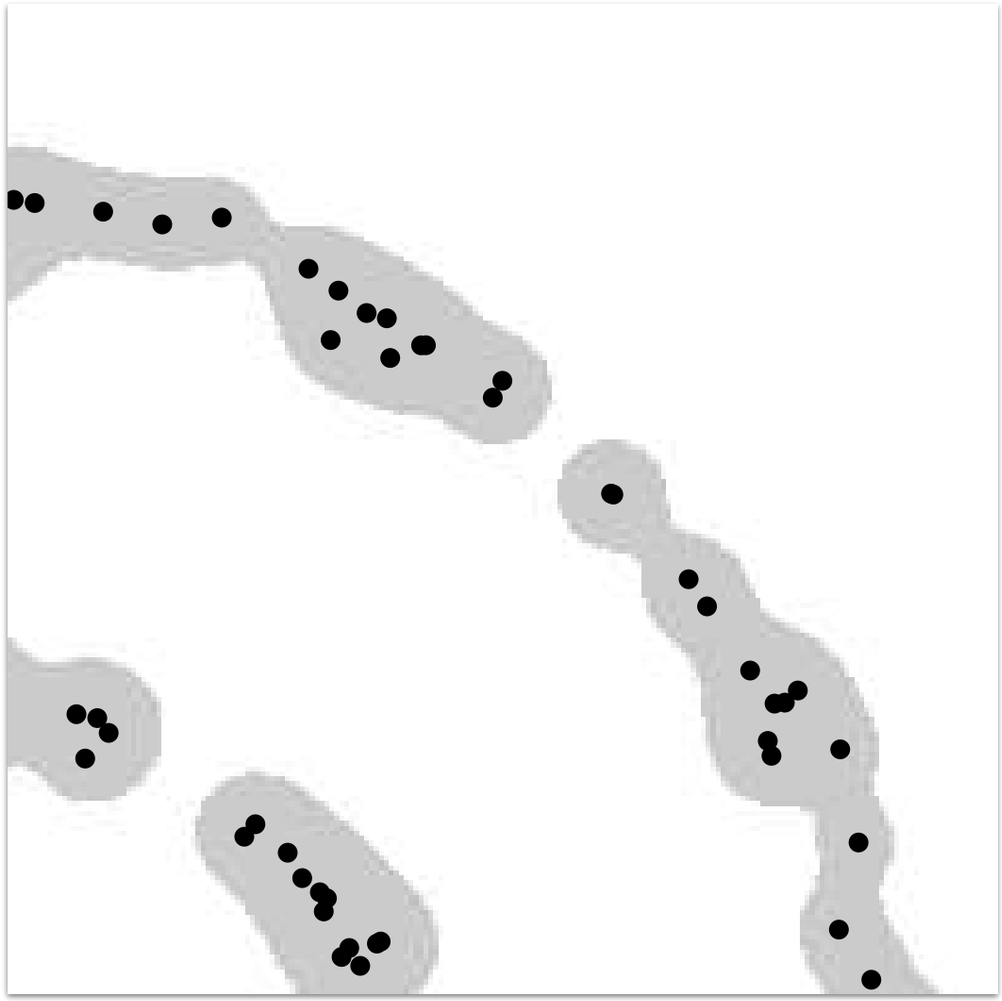


Gaussienne isotropique en dimension d:

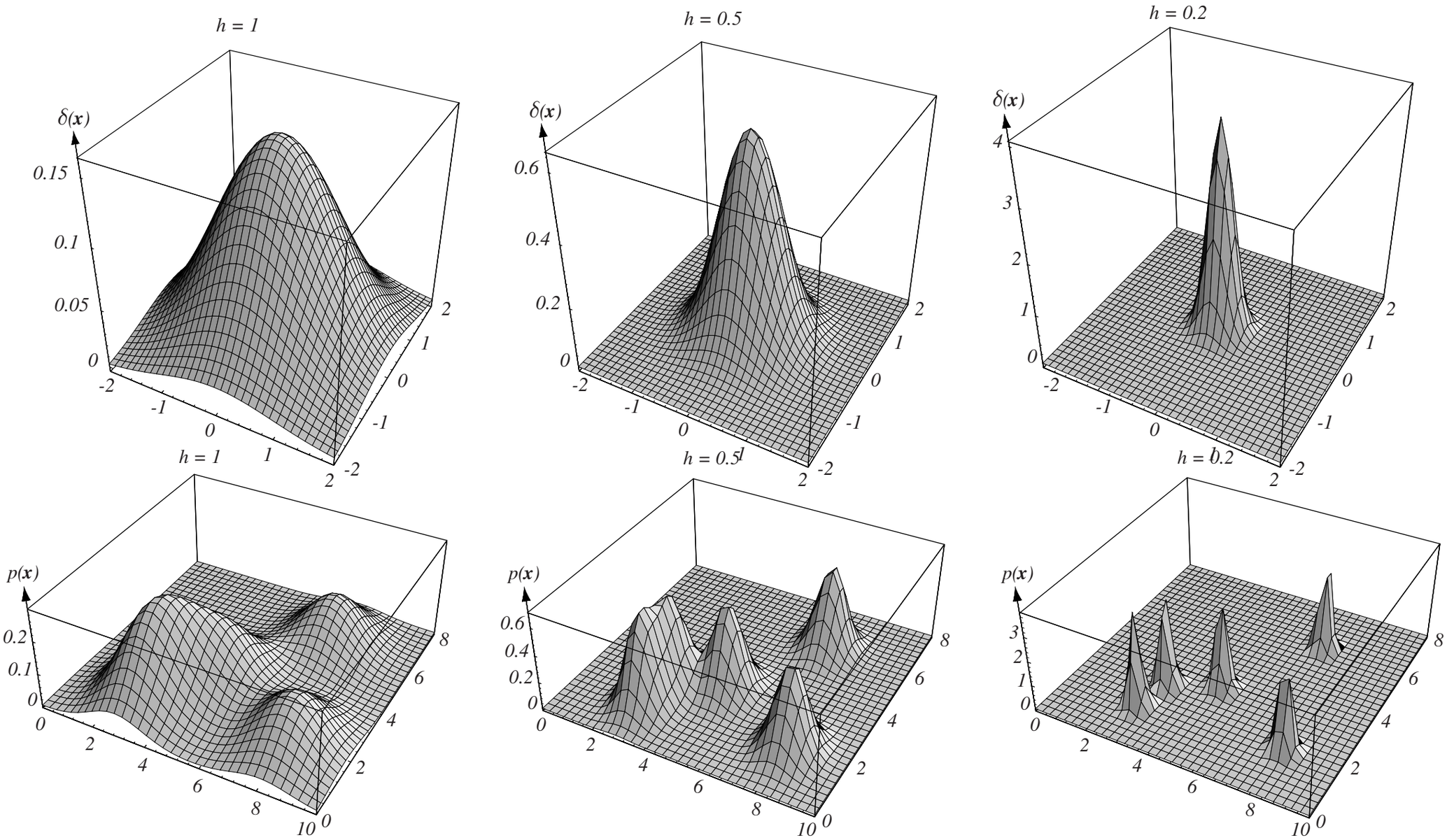
$$\mathcal{N}_{\mu,\sigma}(x) = \frac{1}{(2\pi)^{\frac{d}{2}}\sigma^d} e^{-\frac{1}{2}\frac{\|x-\mu\|^2}{\sigma^2}}$$

Exemple d'estimation de densité 2D

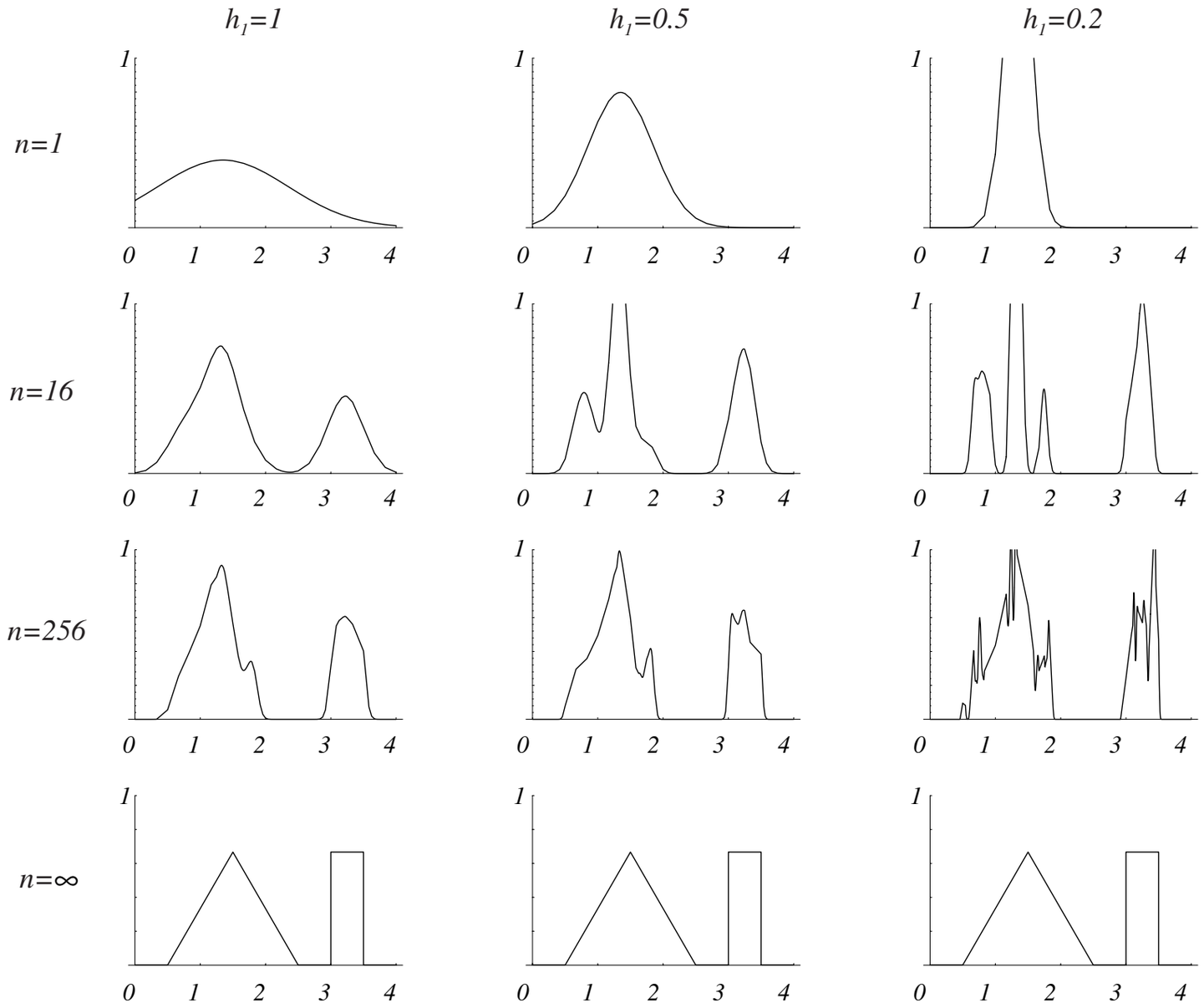
Parzen Windows



- L'effet de la largeur de fenêtre h_n



- Exemple: $p(x) \sim$ triangle + uniform, $\phi(u) = \dfrac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{-u^2/2}$



Etapes de conception d'un algorithme d'apprentissage

- Compréhension intuitive de l'algorithme. Savoir l'expliquer en français!
- Formalisation mathématique de l'algorithme.
- Ecriture de l'algo sous forme de pseudo-code.
- Implémentation dans un langage/environnement de programmation.
- Entraînement/test de l'algo sur des problèmes simples en faible dimension, où on peut vérifier graphiquement si ça fait bien ce qu'on veut.
- Evaluation de preformance sur des problèmes réels, et comparaison avec d'autres algorithmes concurrents.