Méthodes d'apprentissage

IFT603-712

Théorie de la décision

Par

Pierre-Marc Jodoin

Régression linéaire

RAPPEL

- Le modèle de **régression linéaire** est le suivant :

$$y_{\vec{w}}(\vec{x}) = w_0 + w_1 x_1 + w_2 x_2 + \ldots + w_d x_d$$

$$\text{où } \vec{x} = (x_1, x_2, \ldots, x_d)^{\mathrm{T}}$$

- La prédiction correspond donc à
  - Une **droite** pour *d=1*
  - Un **plan** pour *d=2*
  - Un **hyperplan** pour *d>2*

2

Régression linéaire

RAPPEL

$$y_{\vec{w}}(\vec{x}) = w_0 + w_1 x_1 + w_2 x_2 + \ldots + w_d x_d$$

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

$$\text{où } \vec{x}' = (1, x_1, x_2, \ldots, x_d)^{\mathrm{T}}$$

3

Problème à résoudre

RAPPEL

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

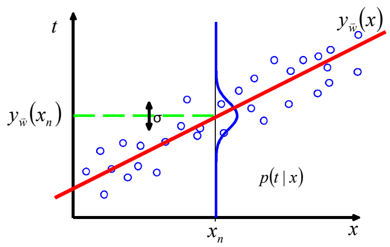
Il est très bien connu en technique d'apprentissage que cette solution est **optimale** lorsque le **bruit est gaussien.**

C'est même une question d'entrevue!

Formulation probabiliste

Loi conditionnelle (*maximum de vraisemblance*)

RAPPEL



Formulation probabiliste

RAPPEL

Pour entraîner le modèle $y_{\vec{w}}(\vec{x})$ nous passerons par une formulation probabiliste :

$$p(t \mid \vec{x}, \vec{w}, \Sigma) = N(t \mid y_{\vec{w}}(\vec{x}), \Sigma)$$

Hypothèse gaussienne

- Revient à supposer que les **cibles** sont des **versions bruitées** du vrai modèle

$$t_n = y_{\vec{w}}(\vec{x}_n) + \varepsilon$$

Bruit gaussien de moyenne 0 et de variance σ^2

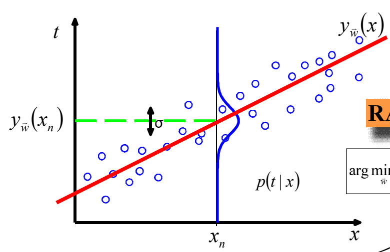
Maximum de vraisemblance

RAPPEL

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

$$\vec{w}_{\text{MV}} = \left(X^{\mathrm{T}} X \right)^{-1} X^{\mathrm{T}} T$$

Et bien sûr, on peut utiliser une **fonction de base** pour rendre le modèle non linéaire.



RAPPEL

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

Le meilleur modèle $y_{\vec{w}}(\vec{x}_n)$ selon correspond à la **moyenne** de la distribution **conditionnelle**

$$y_{\vec{w}}(\vec{x}_n) = E[t \mid \vec{x}] = \int t p(t \mid \vec{x}) dt$$

8

Comment prouver cette affirmation?

$$\arg\min_{y} \sum_{n=1}^{N} \left(y(x_n) - t_n \right)^2$$

Meilleure solution

$$y(x) = E[t \mid x] = \int t p(t \mid x) dt$$

9

Preuve 1 (1.5.5 Bishop)

$$\arg\min_y \sum_{n=1}^{N} \underbrace{\left(y(\vec{x}_n)-t_n\right)^2}_{L(y(x_n),t_n)} = \arg\min_y \underbrace{\frac{1}{N}\sum_{n=1}^{N} L(y(\vec{x}_n),t_n)}_{\substack{\text{Erreur moyenne:} \\ N\to\infty,\ E[L]}}$$

puisque $(\vec{x},t)$ est i.i.d de $p(\vec{x},t)$

$$E[L] = \iint L p(\vec{x},t)\,dx\,dt$$
$$= \iint \left(y(\vec{x})-t\right)^2 p(\vec{x},t)\,dx\,dt$$

10

Preuve 1

$$\arg\min_y \underbrace{\iint \left(y(\vec{x})-t\right)^2 p(\vec{x},t)\,dx\,dt}_{E[L]}$$

$$\frac{\delta E[L]}{\delta y} = 0 \quad \Rightarrow 2\int \left(y(\vec{x})-t\right)p(\vec{x},t)\,dt = 0$$

Calcul variationnel
Euler-Lagrange

11

Preuve 1

$$\cancel{2}\int \left(y(\vec{x})-t\right)p(\vec{x},t)\,dt = 0$$

$$\int \left(y(\vec{x})p(\vec{x},t) - tp(\vec{x},t)\right)dt = 0$$

$$\int y(\vec{x})p(\vec{x},t)\,dt - \int tp(\vec{x},t)\,dt = 0$$

$$y(\vec{x})\underbrace{\int p(\vec{x},t)\,dt}_{\text{Marginalisation de t}} - \int tp(\vec{x},t)\,dt = 0$$

$$y(\vec{x})p(\vec{x}) - \int tp(\vec{x},t)\,dt = 0$$

$$y(\vec{x})p(\vec{x}) - \int tp(t\,|\,\vec{x})p(\vec{x})\,dt = 0 \quad \text{car } p(x,t) = p(t\,|\,x)p(x)$$

Preuve 1

$$y(\vec{x})p(\vec{x}) - \int tp(t \mid \vec{x})p(\vec{x})dt = 0$$

$$y(\vec{x})\cancel{p(\vec{x})} - \cancel{p(\vec{x})}\underbrace{\int tp(t \mid \vec{x})dt}_{\text{Expérance mathématique conditionnelle}} = 0$$

$$y(\vec{x}) - E[t \mid \vec{x}] = 0$$

$$\boxed{y(\vec{x}) = E[t \mid \vec{x}]}$$

Preuve 2 (1.5.5 Bishop)

$$L = (y(\vec{x}) - t)^2 = (y(\vec{x}) - E[t \mid x] + E[t \mid x] - t)^2$$

$$= (y(\vec{x}) - E[t \mid \vec{x}])^2$$
$$+ 2(y(\vec{x}) - E[t \mid \vec{x}])(E[t \mid \vec{x}] - t)$$
$$+ (E[t \mid \vec{x}] - t)^2$$

Preuve 2

$$E[L] = \iint (y(\vec{x}) - t)^2 \, p(x,t)dxdt$$

$$= \iint (y(\vec{x}) - E[t \mid \vec{x}])^2 \, p(\vec{x},t)dxdt$$
$$+ \boxed{\iint 2(y(\vec{x}) - E[t \mid \vec{x}])(E[t \mid \vec{x}] - t)p(\vec{x},t)dxdt}$$
$$+ \iint (E[t \mid \vec{x}] - t)^2 \, p(\vec{x},t)dxdt$$

$$\boxed{\iint 2(y(\vec{x}) - E[t \mid \vec{x}])(E[t \mid \vec{x}] - t)p(\vec{x},t)dxdt}$$

Preuve 2

$$E[L] = \iint (y(\vec{x}) - t)^2 \, p(x,t) dx dt$$

$$= \iint (y(\vec{x}) - E[t \mid \vec{x}])^2 \, p(\vec{x},t) dx dt$$
$$+ \iint 2(y(\vec{x}) - E[t \mid \vec{x}])(E[t \mid \vec{x}] - t) p(\vec{x},t) dx dt$$
$$+ \iint (E[t \mid \vec{x}] - t)^2 \, p(\vec{x},t) dx dt$$

$$\iint 2(y(\vec{x}) - E[t \mid \vec{x}])(E[t \mid \vec{x}] - t) p(t \mid \vec{x}) p(\vec{x}) dt dx$$

16

Preuve 2

$$E[L] = \iint (y(\vec{x}) - t)^2 \, p(x,t) dx dt$$

$$= \iint (y(\vec{x}) - E[t \mid \vec{x}])^2 \, p(\vec{x},t) dx dt$$
$$+ \iint 2(y(\vec{x}) - E[t \mid \vec{x}])(E[t \mid \vec{x}] - t) p(\vec{x},t) dx dt$$
$$+ \iint (E[t \mid \vec{x}] - t)^2 \, p(\vec{x},t) dx dt$$

$$\int 2(y(\vec{x}) - E[t \mid \vec{x}]) p(\vec{x}) \left\{ \int (E[t \mid \vec{x}] - t) p(t \mid \vec{x}) dt \right\} dx$$

17

Preuve 2

$$E[L] = \iint (y(\vec{x}) - t)^2 \, p(\vec{x},t) dx dt$$

$$= \iint (y(\vec{x}) - E[t \mid \vec{x}])^2 \, p(\vec{x},t) dx dt$$
$$+ \iint 2(y(\vec{x}) - E[t \mid \vec{x}])(E[t \mid \vec{x}] - t) p(\vec{x},t) dx dt$$
$$+ \iint (E[t \mid \vec{x}] - t)^2 \, p(\vec{x},t) dx dt$$

$$\int 2(y(\vec{x}) - E[t \mid \vec{x}]) p(\vec{x}) \left\{ \int E[t \mid \vec{x}] p(t \mid \vec{x}) dt - \int t p(t \mid \vec{x}) dt \right\} dx$$

18

Preuve 2

$$E[L] = \iint \left(y(\vec{x}) - t\right)^2 p(x,t)\,dx\,dt$$

$$= \iint \left(y(\vec{x}) - E[t \mid \vec{x}]\right)^2 p(\vec{x},t)\,dx\,dt$$
$$+ \boxed{\iint 2\left(y(\vec{x}) - E[t \mid \vec{x}]\right)\left(E[t \mid \vec{x}] - t\right) p(\vec{x},t)\,dx\,dt}$$
$$+ \iint \left(E[t \mid \vec{x}] - t\right)^2 p(\vec{x},t)\,dx\,dt$$

$$\boxed{\int 2\left(y(\vec{x}) - E[t \mid \vec{x}]\right) p(\vec{x}) \left\{ E[t \mid \vec{x}] \cancelto{1}{\int p(t \mid \vec{x})\,dt} - E[t \mid \vec{x}] \right\} dx}$$

Preuve 2

$$E[L] = \iint \left(y(\vec{x}) - t\right)^2 p(x,t)\,dx\,dt$$

$$= \iint \left(y(\vec{x}) - E[t \mid \vec{x}]\right)^2 p(\vec{x},t)\,dx\,dt$$
$$+ \boxed{\iint 2\left(y(\vec{x}) - E[t \mid \vec{x}]\right)\left(E[t \mid \vec{x}] - t\right) p(\vec{x},t)\,dx\,dt}$$
$$+ \iint \left(E[t \mid \vec{x}] - t\right)^2 p(\vec{x},t)\,dx\,dt$$

$$\boxed{\int 2\left(y(\vec{x}) - E[t \mid \vec{x}]\right) p(\vec{x}) \left\{ \cancelto{0}{E[t \mid \vec{x}] - E[t \mid \vec{x}]} \right\} dx}$$

Preuve 2

$$E[L] = \iint \left(y(\vec{x}) - t\right)^2 p(\vec{x},t)\,dx\,dt$$

$$= \iint \left(y(\vec{x}) - E[t \mid \vec{x}]\right)^2 p(\vec{x},t)\,dx\,dt$$
$$+ \iint \left(E[t \mid \vec{x}] - t\right)^2 p(\vec{x},t)\,dx\,dt$$

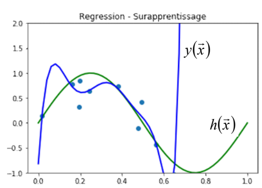
$E[L]$ est minimum lorsque $\underline{y(\vec{x}) = E[t \mid \vec{x}]}$

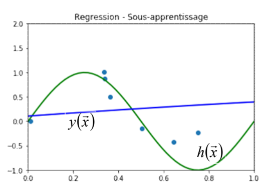
21

22

Décomposition biais-variance
(Bishop 3.2)

On a vu les concepts de « sur-apprentissage » et de « sous-apprentissage ».

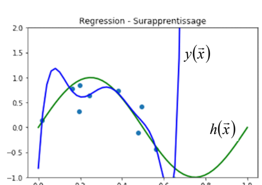


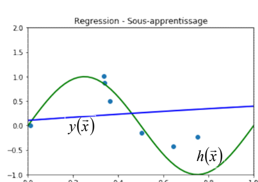


$y(\vec{x})$: modèle trouvé par apprentissage
$h(\vec{x})$: le meilleur modèle représentant les données

Décomposition biais-variance
(Bishop 3.2)

On a vu les concepts de « sur-apprentissage » et de « sous-apprentissage ».

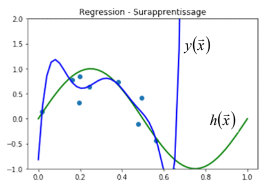




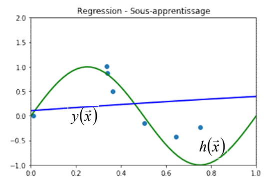
Le but d'un bon modèle est de trouver le **bon compromis biais-variance**

Décomposition biais-variance
(Bishop 3.2)

On a vu les concepts de « sur-apprentissage » et de « sous-apprentissage ».

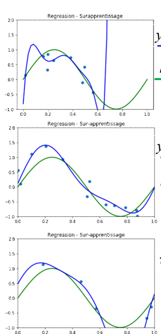


Variance élevée
Biais faible



Variance faible
Biais élevée

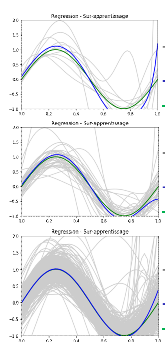
Variance élevée, Biais faible



D1 $y(\vec{x};D_1)$ $h(\vec{x})$

D2 $y(\vec{x};D_2)$ $h(\vec{x})$

D3 $y(\vec{x};D_3)$ $h(\vec{x})$

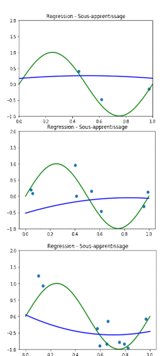


$y(\vec{x};D_1),\dots,y(\vec{x};D_5)$
$1/5\sum_{i=1}^{5} y(\vec{x};D_i)$
$h(\vec{x})$

$y(\vec{x};D_1),\dots,y(\vec{x};D_{40})$
$1/40\sum_{i=1}^{40} y(\vec{x};D_i)$
$h(\vec{x})$

$y(\vec{x};D_1),\dots,y(\vec{x};D_{500})$
$1/500\sum_{i=1}^{500} y(\vec{x};D_i)$
$h(\vec{x})$

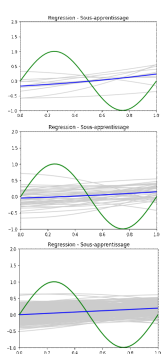
Variance faible, Biais élevé



D1 $y(\vec{x};D_1)$ $h(\vec{x})$

D2 $y(\vec{x};D_2)$ $h(\vec{x})$

D3 $y(\vec{x};D_3)$ $h(\vec{x})$



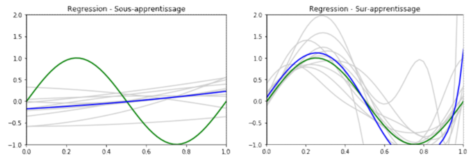
$y(\vec{x};D_1),\dots,y(\vec{x};D_5)$
$1/5\sum_{i=1}^{5} y(\vec{x};D_i)$
$h(\vec{x})$

$y(\vec{x};D_1),\dots,y(\vec{x};D_{40})$
$1/40\sum_{i=1}^{40} y(\vec{x};D_i)$
$h(\vec{x})$

$y(\vec{x};D_1),\dots,y(\vec{x};D_{500})$
$1/500\sum_{i=1}^{500} y(\vec{x};D_i)$
$h(\vec{x})$

Variance

Peut être vu intuitivement comme la **écart moyen entre les « courbes grises »** $y(\vec{x};D_i)$



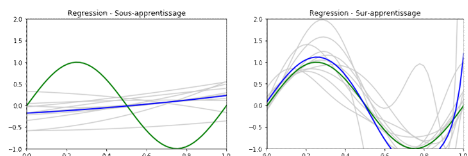
Variance faible | **Variance élevée**

Dans le cas à 5 courbes:

$$\text{variance} = \frac{1}{5}\sum_{l=1}^{5}\Big(y(\vec{x};D_l) - \underbrace{1/5\sum_{i=1}^{5} y(\vec{x};D_i)}_{\text{Courbe moyenne (bleue)}}\Big)^2$$

Biais

Peut être vu intuitivement comme la **différence entre les « courbes verte et bleue »**



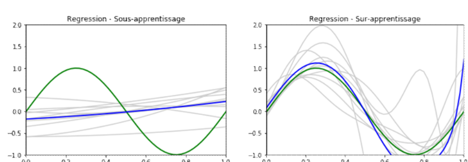
Biais élevé | **Variance faible**

Dans le cas à 5 courbes:

$$\text{biais} = \frac{1}{5}\sum_{l=1}^{5}\Big(\underbrace{h(\vec{x})}_{\text{Courbe optimale (verte)}} - \underbrace{1/5\sum_{i=1}^{5} y(\vec{x};D_i)}_{\text{Courbe moyenne (bleue)}}\Big)^2$$

29

Compromis biais-variance



Biais élevé
Variance faible

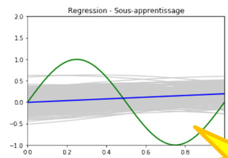
Biais faible
Variance élevée

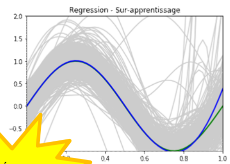
$$\text{variance} = \frac{1}{5}\sum_{l=1}^{5}\Big(y(\vec{x};D_l) - 1/5\sum_{i=1}^{5} y(\vec{x};D_i)\Big)^2$$

$$\text{biais} = \frac{1}{5}\sum_{l=1}^{5}\Big(h(\vec{x}) - 1/5\sum_{i=1}^{5} y(\vec{x};D_i)\Big)^2$$

30

Analyse quand $N \rightarrow \infty$





Biais élevé
Variance faible

Espérance mathématique

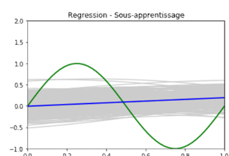
Biais faible
Variance élevée

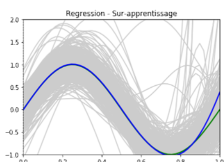
$$\text{variance} = \frac{1}{N}\sum_{l=1}^{N}\left(y(\vec{x};D_l) - 1/N\sum_{i=1}^{N} y(\vec{x};D_i)\right)^2$$

$$\text{biais} = \frac{1}{N}\sum_{l=1}^{N}\left(h(\vec{x}) - 1/N\sum_{i=1}^{N} y(\vec{x};D_i)\right)^2$$

31

Analyse quand $N \rightarrow \infty$





Biais élevé
Variance faible

Biais faible
Variance élevée

$$\text{variance} = E_D\left[\{y(\vec{x};D) - E_D[y(\vec{x};D)]\}^2\right]$$

$$\text{biais} = E_D\left[\{h(\vec{x}) - E_D[y(\vec{x};D)]\}^2\right]$$

32

Analyse formelle

On a démontré précédemment que

$$E[L] = \iint \{y(\vec{x}) - E[t \mid \vec{x}]\}^2 p(x,t)\,dxdt$$
$$+ \iint \{E[t \mid \vec{x}] - t\}^2 p(x,t)\,dxdt$$

où

$y(\vec{x})$: modèle entraîné à l'aide de D

$E[t \mid \vec{x}]$: modèle théorique optimal

(courbe verte)

33

Analyse formelle

Récriture

$$E[L] = \iint \{y(\vec{x};D) - h(\vec{x})\}^2 p(x,t)dxdt$$ Mesure la performance du modèle y

$$+ \iint \{h(\vec{x}) - t\}^2 p(x,t)dxdt$$ Mesure la magnitude du bruit dans les données

34

Analyse formelle

$$\begin{aligned}\{y(\vec{x};D) - h(\vec{x})\}^2 &= \{y(\vec{x};D) - E_D[y(\vec{x};D)] + E_D[y(\vec{x};D)] - h(\vec{x})\}^2 \\ &= \{y(\vec{x};D) - E_D[y(\vec{x};D)]\}^2 \\ &\quad + 2\{y(\vec{x};D) - E_D[y(\vec{x};D)]\}\{E_D[y(\vec{x};D)] - h(\vec{x})\} \\ &\quad + \{E_D[y(\vec{x};D)] - h(\vec{x})\}^2\end{aligned}$$

On peut démontrer que

$$\begin{aligned}E\left[\{y(\vec{x};D) - h(\vec{x})\}^2\right] &= E_D\left[\{y(\vec{x};D) - E_D[y(\vec{x};D)]\}^2\right] \\ &\quad + E_D\left[\{h(\vec{x}) - E_D[y(\vec{x};D)]\}^2\right]\end{aligned}$$

Variance

Biais

36