# Apprentissage bayésien
# Estimation de densité

Cours 2
ARF Master DAC

Nicolas Baskiotis
nicolas.baskiotis@lip6.fr
http://webia.lip6.fr/~baskiotisn

équipe MLIA, Laboratoire d'Informatique de Paris 6 (LIP6)
Sorbonne Université

S2 (2018-2019)

# Plan


1. Rappel MAPSI/Probabilités
2. Classification bayésienne
3. Estimation de densité
4. Sélection de modèles

# Notions et notations

## Rappel

- Univers $\Omega$, Espace probabiliste $(\Omega, \mathcal{A}, P)$
- Variable aléatoire réelle (v.a.r.) : $X : \Omega \to \mathbb{R}$
  notation : $P(X = 1) = 0.3$, loi de $X$ (ou mesure de probabilité) : $P_X$,
  fonction de répartition $F_X$ : $F_X(b) = P_X(X < b)$
- Dans le cas continue, fonction de densité $p_X$ :
  $p_X(x) \geq 0,\ \int_x p_X(x)dx = 1, F_X(b) - F_X(a) = p_X(a \leq X \leq b) = \int_a^b p_X(x)dx$
  abus de notation : $p_X \ \to p$
- Espérance, variance :
  $\mathbb{E}[X] = \int_x x p_X(x)dx \quad Var[X] = \mathbb{E}[(X - \mathbb{E}[X])^2]$
- Densité jointe, indépendance, conditionnement, marginalisation :
  Soit $X, Y$ deux v.a. et leur densité jointe : $p_{X,Y}(x, y)$
  - trouver $p_X \to$ marginalisation : $p_X(x) = \int_y p_{X,Y}(x, y)dy$
  - indépendance : $p_{X,Y}(x, y) = p_X(x)p_Y(y)$
  - conditionnement : $p(x|y) = p(x, y)/p(y)$

  $\Rightarrow$ Bayes : $p(y|x) = p(x|y)p(y)/p(x)$

# Quelques lois et bornes de convergence

## Loi faible/forte des grands nombres

Soit $X_1, \ldots, X_m$ v.a. tirer de la même loi, de même espérance $\mu$ et variance, et la moyenne empirique $\bar{X}_m = \frac{1}{m}\sum_{i=1}^{m} X_i$, alors

- $\forall \epsilon > 0$, $\lim_{m\to\infty} Pr(|\bar{X}_m - \mu| \leq \epsilon) = 1$ (faible)
- $Pr(\lim_{m\to\infty} \bar{X}_m = \mu) = 1$ (forte)

## Théorème central limite

$X_i$ v.a. iid, de moyenne $\mu$, variance $\sigma$, alors $Z_m = \frac{\bar{X}_m - \mu}{\sigma/\sqrt{m}} \to \mathcal{N}(0,1)$.

## Bornes usuelles

- Gauss-Markov : pour $X \geq 0, \epsilon > 0$, $Pr(X \geq \epsilon) \leq \frac{\mu}{\epsilon}$
- Tchebychev : $Pr(|X - \mu| \geq \epsilon) \leq \frac{\sigma^2}{\epsilon^2}$

$\Rightarrow$ si $\bar{X}_m = \frac{1}{m}\sum_1^m X_i$, $\mathbb{E}(\bar{X}_m) = \mu$, $Var(\bar{X}_m) = \frac{\sigma^2}{m}$, donc $Pr(|\bar{X}_m - \mu| \geq \epsilon) \leq \frac{\sigma^2}{m\epsilon^2}$

- Hoeffding : $X_i \in [a,b]$,$Pr(|\bar{X}_m - \mu| \geq \epsilon) \leq 2\exp\left(-\frac{2m\epsilon^2}{(b-a)^2}\right)$

# Plan


1 Rappel MAPSI/Probabilités

2 **Classification bayésienne**

3 Estimation de densité

4 Sélection de modèles

# Classification binaire

## Formalisation

- Deux classes : $\mathcal{Y} = \{y_+, y_-\}$
- un ensemble $\mathcal{X} \subseteq \mathbb{R}^d$ de représentation des exemples ($d$ la dimension)
- un exemple : $\mathbf{x} = (x_1, x_2, \ldots, x_d) \in \mathcal{X}$
- objectif : prendre une décision sur la classe d'un exemple $\mathbf{x} \in \mathcal{X}$

$\Rightarrow$ on cherche une fonction $f : \mathcal{X} \to \mathcal{Y}$ (classifieur)

- on notera souvent $\hat{y}$ la décision prise sur un exemple $\mathbf{x}$, $\hat{y} = f(\mathbf{x})$

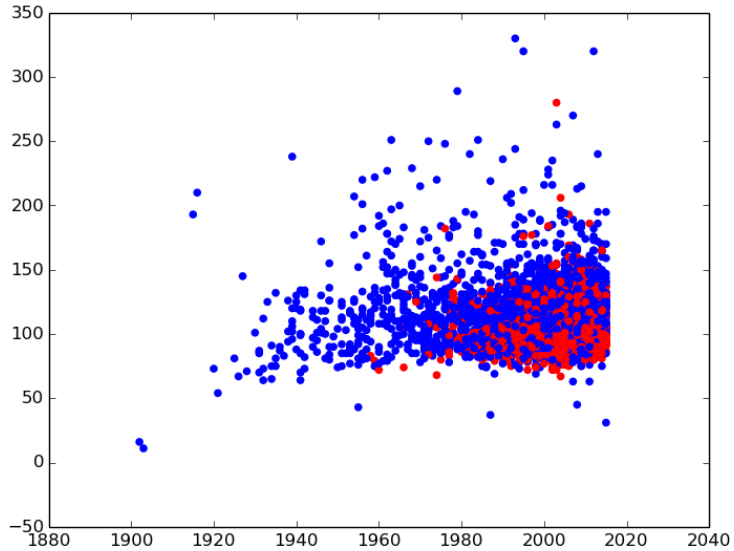
## Films et avis

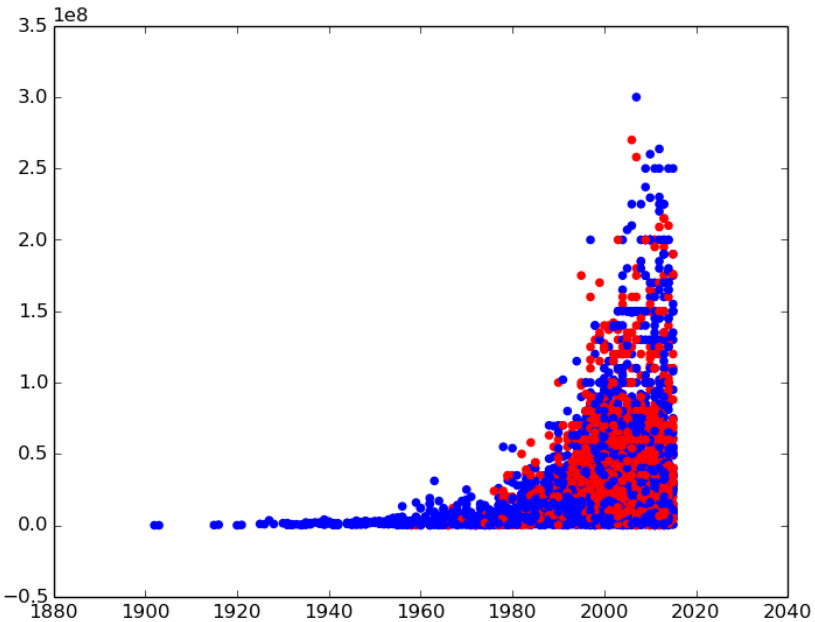
- Deux classes : j'aime ($y_+$) et je n'aime pas ($y_-$)
- Un film décrit par : (année, budget, durée,nationalité) (4 dimensions, $\mathcal{X} = \mathcal{R}^4$)
- Une fonction de prédiction : $f(\mathbf{x}) = y_+$ si $x_1 \geq 2000$ sinon $y_-$

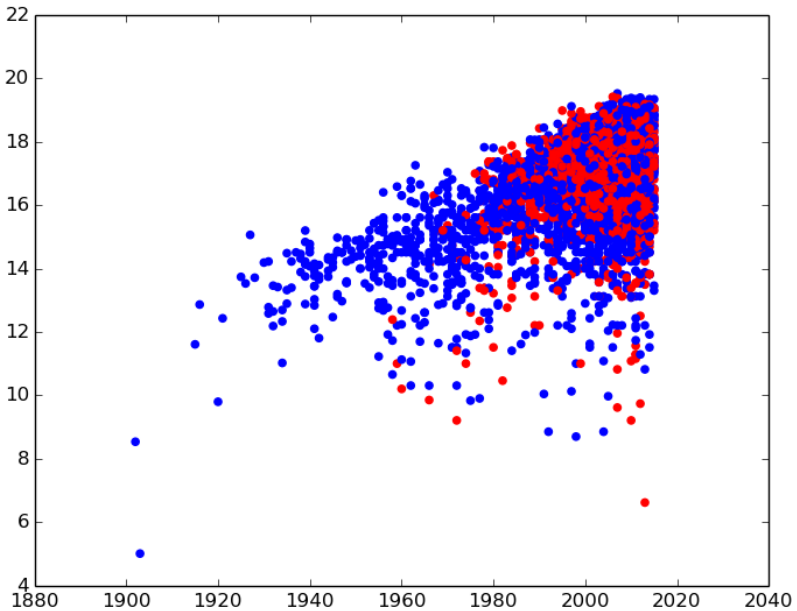
# Classification binaire

Sur la base imdb . . . :

- Année vs Durée
- Année vs Budget



# Première approche

## Le plus simple

Si on dispose de $P(y = y_+)$ et $P(y = y_-)$, probabilités a priori :

- elles décrivent notre connaissance générique du problème
- peuvent dépendre des situations
- on peut décider $y_+$ si $P(y_+) > P(y_-)$, $y_-$ dans le cas contraire
- Quel est le risque de se tromper ?

# Première approche

## Le plus simple

Si on dispose de $P(y = y_+)$ et $P(y = y_-)$, probabilités a priori :

- elles décrivent notre connaissance générique du problème
- peuvent dépendre des situations
- on peut décider $y_+$ si $P(y_+) > P(y_-)$, $y_-$ dans le cas contraire
- Quel est le risque de se tromper ?

## Problèmes

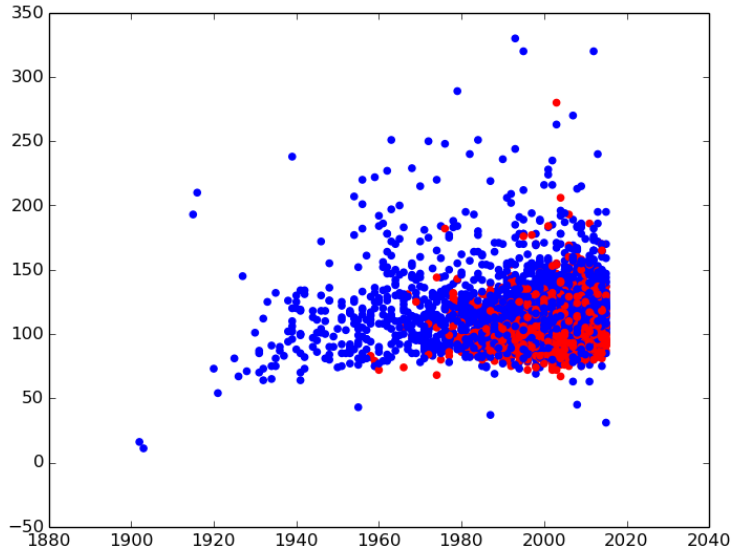
- Toujours la même décision
- On ne tient pas compte de la description $\mathbf{x} \in \mathcal{X}$.
- Évaluation du risque : $R = min(P(y_+), P(y_-))$

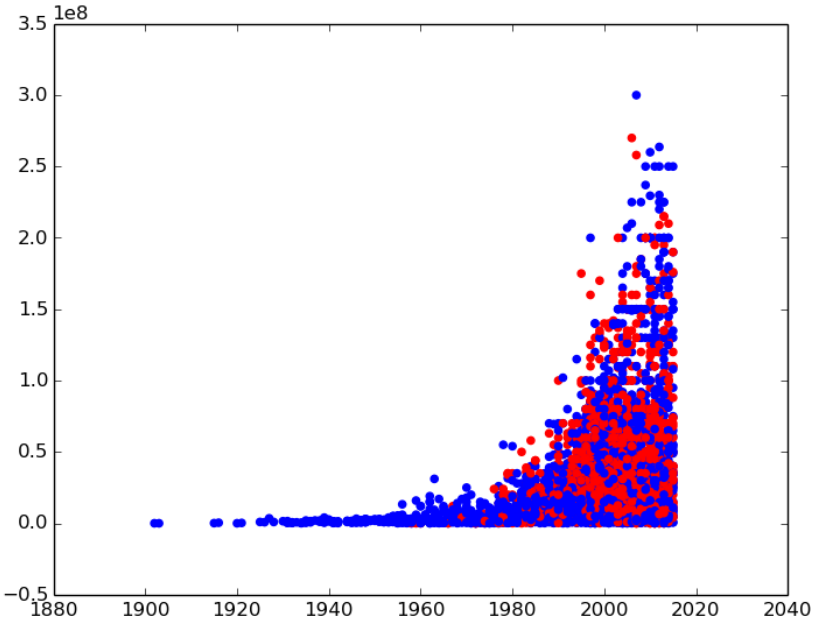
Comment faire mieux ?

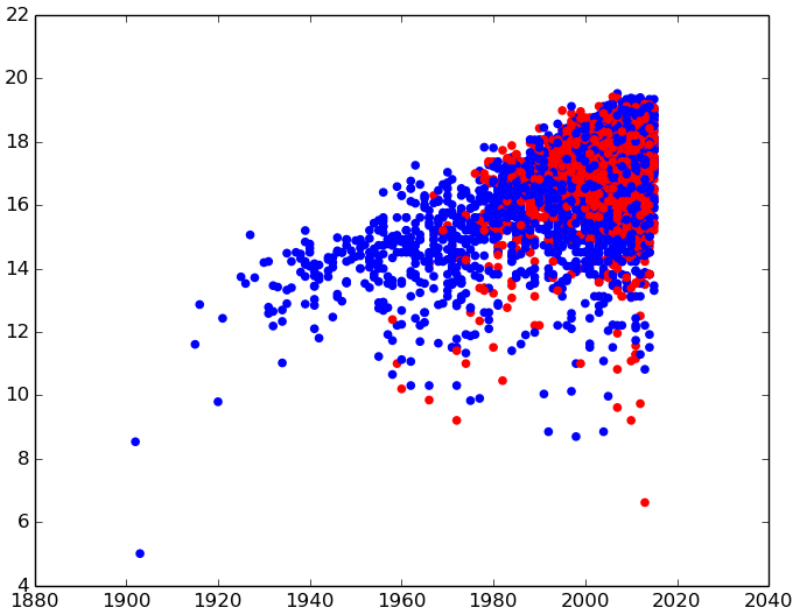
# Classification binaire

Sur la base imdb . . . :

- Année vs Durée
- Année vs Budget



# Dans un monde idéal (bayésien)

**Si on dispose . . .**

de $P(y)$ (probabilité a priori) et de $p(\mathbf{x}|y)$ :

# Dans un monde idéal (bayésien)

## Si on dispose ...

de $P(y)$ (probabilité a priori) et de $p(\mathbf{x}|y)$ :

- $p(y, \mathbf{x}) = p(y|\mathbf{x})p(\mathbf{x}) = p(\mathbf{x}|y)p(y)$
- $p(\mathbf{x}) = p(\mathbf{x}|y_+)p(y_+) + p(\mathbf{x}|y_-)p(y_-)$
- $p(y|\mathbf{x}) = \frac{p(\mathbf{x}|y)p(y)}{p(\mathbf{x})} = \frac{p(\mathbf{x}|y)p(y)}{p(\mathbf{x}|y_+)P(y_+)+p(\mathbf{x}|y_-)P(y_-)}$

# Dans un monde idéal (bayésien)

## Si on dispose ...

de $P(y)$ (probabilité a priori) et de $p(\mathbf{x}|y)$ :

- $p(y, \mathbf{x}) = p(y|\mathbf{x})p(\mathbf{x}) = p(\mathbf{x}|y)p(y)$
- $p(\mathbf{x}) = p(\mathbf{x}|y_+)p(y_+) + p(\mathbf{x}|y_-)p(y_-)$
- $p(y|\mathbf{x}) = \frac{p(\mathbf{x}|y)p(y)}{p(\mathbf{x})} = \frac{p(\mathbf{x}|y)p(y)}{p(\mathbf{x}|y_+)P(y_+)+p(\mathbf{x}|y_-)P(y_-)}$

## Alors

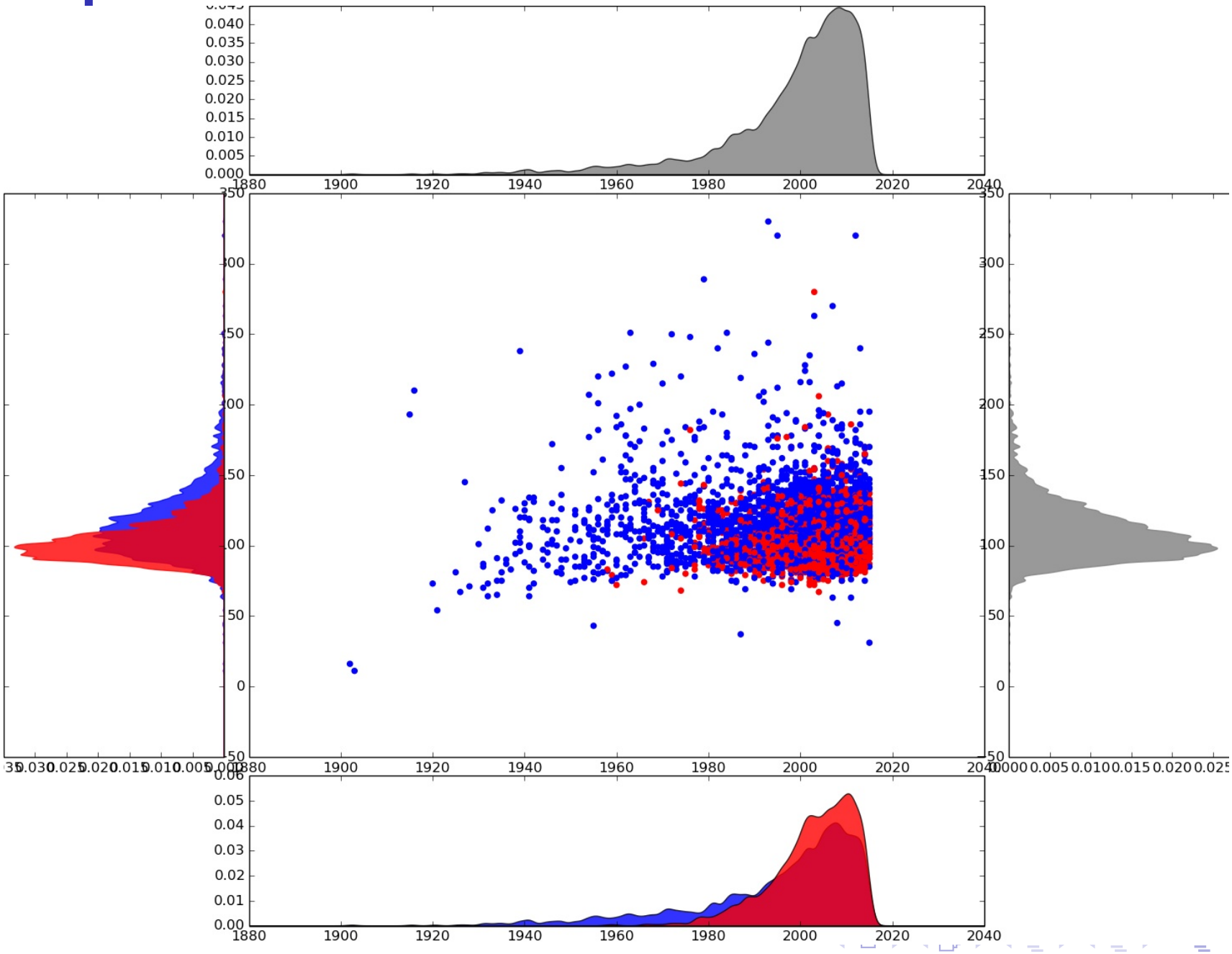
En observant $\mathbf{x}$, on peut étudier la *probabilité a posteriori* $p(y|\mathbf{x})$.

- On appelle $p(\mathbf{x}|y)$ la vraisemblance de $\mathbf{x}$ par rapport à $y$.
- décision bayésienne : choisir $y_+$ si $p(y_+|\mathbf{x}) > p(y_-|\mathbf{x})$, le contraire sinon

$\Rightarrow f(\mathbf{x}) = argmax_y p(y|\mathbf{x})$

- $p(\mathbf{x})$ est-il important ?

# Exemple imdb



# Comment évaluer l'erreur d'un classifieur?

## Fonction de perte : quantifié une erreur

- Notion d'erreur, de perte associée à une décision $f(\mathbf{x})$
- Erreur simple : à chaque fois qu'on se trompe, on compte $1$

$\Rightarrow$ fonction de perte : $\ell(f(\mathbf{x}), y) = \begin{cases} 1 & \text{si } f(\mathbf{x}) \neq y \\ 0 & \text{sinon} \end{cases}$ *0-1 loss*

- Risque associé : $R(y_i|\mathbf{x}) = \sum_j l(y_i, y_j) P(y_j|\mathbf{x}) = 1 - P(y_i|\mathbf{x})$
- $R(f) = \int_x R(f(\mathbf{x})|\mathbf{x}) p(\mathbf{x}) d\mathbf{x}$
- Peut-on toujours avoir un risque nul ? souvent ?

# Probabilité de l'erreur

## Caclul de l'erreur

- $P(\text{erreur}|\mathbf{x}) = \begin{cases} P(y_+|\mathbf{x}) & \text{si on décide } y_- \\ P(y_-|\mathbf{x}) & \text{si on décide } y_+ \end{cases}$
- $P(\text{erreur}) = \int P(\text{erreur}|\mathbf{x})p(\mathbf{x})d\mathbf{x}$
- $P(\text{erreur}|\mathbf{x}) = min(P(y_+|\mathbf{x}), P(y_-|\mathbf{x}))$
- $P(\text{erreur}|\mathbf{x}) = min(P(\mathbf{x}|y_+)P(y_+), P(\mathbf{x}|y_-)P(y_-))$
- Si $p(\mathbf{x}|y_+) = p(\mathbf{x}|y_-)$ ?
- Si $P(y_+) = P(y_-)$ ?

## Risque bayésien : $\int R(f(\mathbf{x})|\mathbf{x})p(\mathbf{x})d\mathbf{x}$

- Classifieur bayésien : $f$ qui minimise le risque
- On peut montrer que c'est le meilleur classifieur possible (cf TD)
- alors est-ce que c'est fini ?

# Probabilité de l'erreur

## Caclul de l'erreur

- $P(\text{erreur}|\mathbf{x}) = \begin{cases} P(y_+|\mathbf{x}) & \text{si on décide } y_- \\ P(y_-|\mathbf{x}) & \text{si on décide } y_+ \end{cases}$
- $P(\text{erreur}) = \int P(\text{erreur}|\mathbf{x})p(\mathbf{x})d\mathbf{x}$
- $P(\text{erreur}|\mathbf{x}) = min(P(y_+|\mathbf{x}), P(y_-|\mathbf{x}))$
- $P(\text{erreur}|\mathbf{x}) = min(P(\mathbf{x}|y_+)P(y_+), P(\mathbf{x}|y_-)P(y_-))$
- Si $p(\mathbf{x}|y_+) = p(\mathbf{x}|y_-)$ ?
- Si $P(y_+) = P(y_-)$ ?

## Risque bayésien : $\int R(f(\mathbf{x})|\mathbf{x})p(\mathbf{x})d\mathbf{x}$

- Classifieur bayésien : $f$ qui minimise le risque
- On peut montrer que c'est le meilleur classifieur possible (cf TD)
- alors est-ce que c'est fini ?

$\Rightarrow$ Malheureusement non, $p(\mathbf{x}|y)$ rarement disponible . . .

# Que faire ?

## Apprentissage paramètrique, bayésien : estimation de $p(\mathbf{x}, y)$

- attention ! $\mathbf{x} \in \mathcal{X}$, de dimension $d$ plutôt grand (voir très grand!)
- en vérité : $p(\mathbf{x}|y) = p(x_1, x_2, \ldots, x_d|y)$
- dans le cas binaire ($x_i \in \{0, 1\}$), $2 * 2^d$ paramètres !!
- une solution simple : *naive bayes*, considérer chaque dimension indépendante

$\Rightarrow$ $p(\mathbf{x}|y) = p(x_1|y)p(x_2|y)\ldots p(x_d|y)$, $2 * d$ paramètres.

- ou poser des lois a priori, estimation de paramètres des lois $\rightarrow$ estimation bayésienne, maximum de vraisemblance
- modèles graphiques, recherche d'indépendance entre dimension, ...

## Ou s'en affranchir (en partie)

- C'est la suite de ce cours !

# Plan


1 Rappel MAPSI/Probabilités

2 Classification bayésienne

3 **Estimation de densité**

4 Sélection de modèles

# Estimation de densité

## Contexte

- Estimer la densité d'une variable aléatoire (ou la loi jointe de plusieurs)
- à partir d'un ensemble de réalisation : un échantillon d'exemples.
- Exemple : distribution de films en fonction de l'année, du budget, ...
- En classification : si on peut évaluer les densités de variables aléatoires
  $\Rightarrow$ classifieur bayésien pour la classification !

## Applications multiples

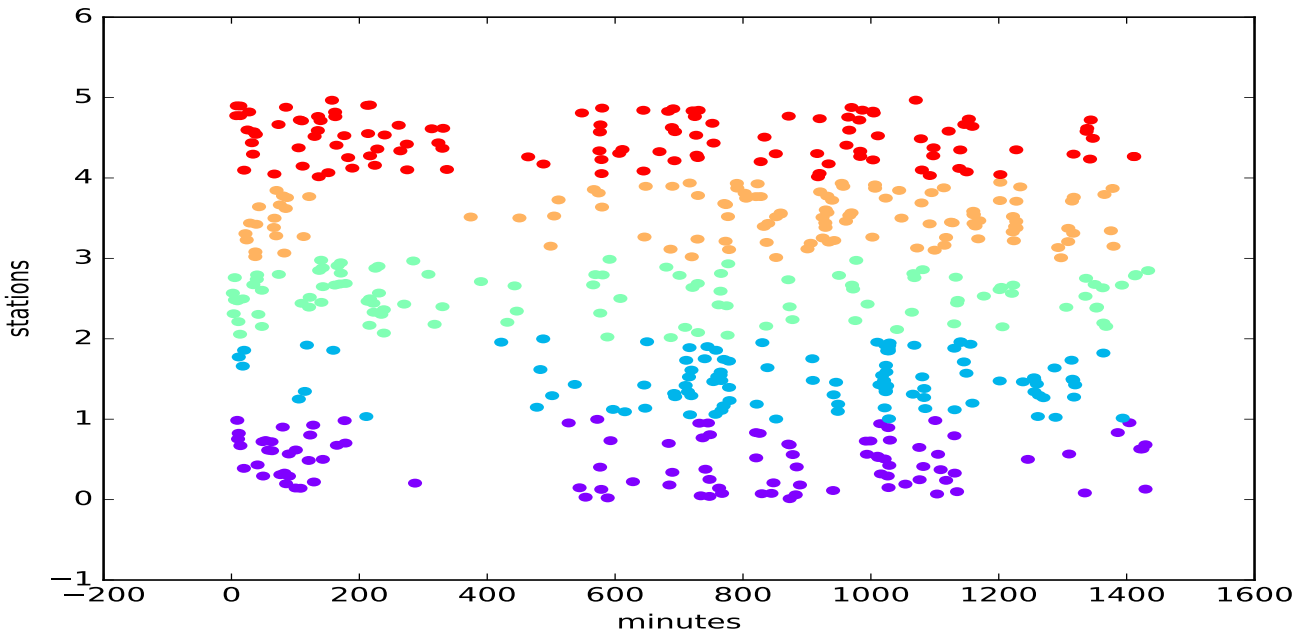
- Estimation de file d'attentes, d'occupation de lieux, des stocks, des pics de pollution
- Réponse à un problème plus général : lissage des données, traitement de données de capteurs :
  On a accès qu'à la réalisation d'une variable aléatoire à certains pas de temps, mais la mesure qui nous intéresse est une mesure continue ...

# Estimation de densité : Vélibs

## Velibs pris à une station

- Données : $\{\text{time}_i, \text{station}_i\}$ $i \in \{1, \ldots, N\}$ les logs des vélibs
- On veut évaluer la probabilité qu'un vélib soit emprunté à une station donnée durant un intervalle de temps donné

$\Rightarrow$ estimation de densité de la variable aléatoire $X_s$ à valeur dans $[0, 60 * 24]$ (temps exprimé en minute) pour la station $s$

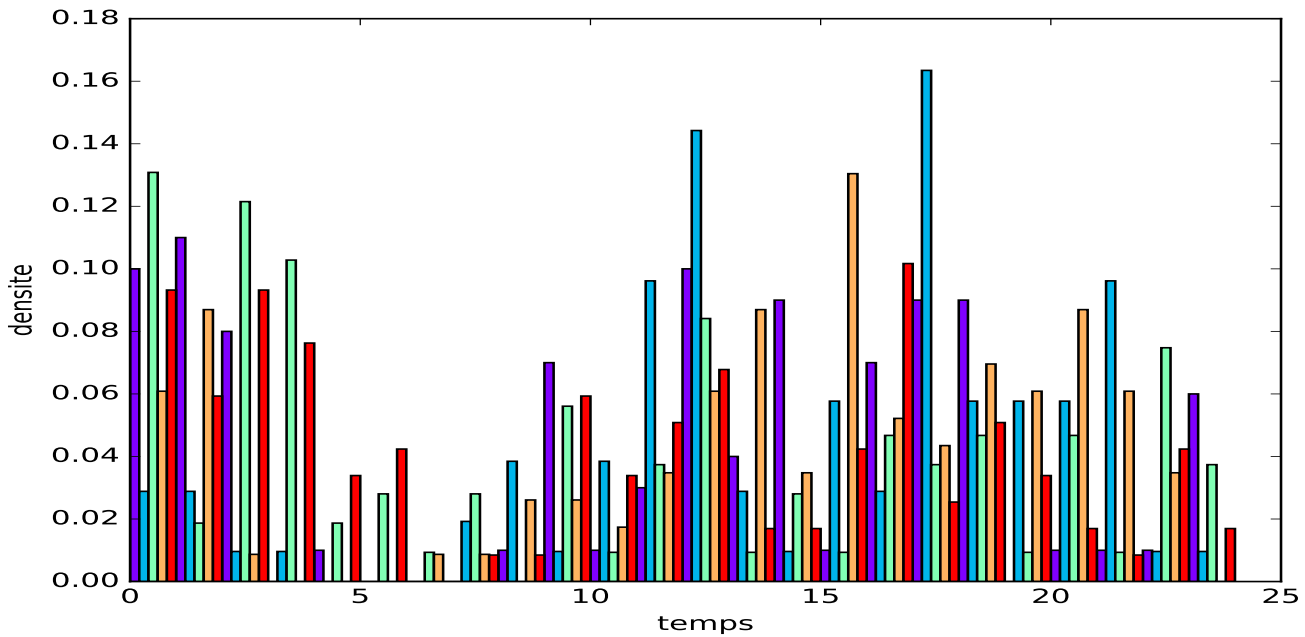



Velibs empruntés pour 5 stations sur une journée

# Méthode par histogramme

## Estimation par une variable aléatoire discrète

- Correspond à une discrétisation des valeurs de la v.a.
- Choix d'un pas de discrétisation : toutes les heures par exemple $\Delta = 60$
- On compte le nombre d'observations qui tombe dans chaque créneau $n_i,\ i \in \{0, 1, \ldots, 23\}$
- L'estimation est alors : $p_i = \frac{n_i}{N\Delta}$

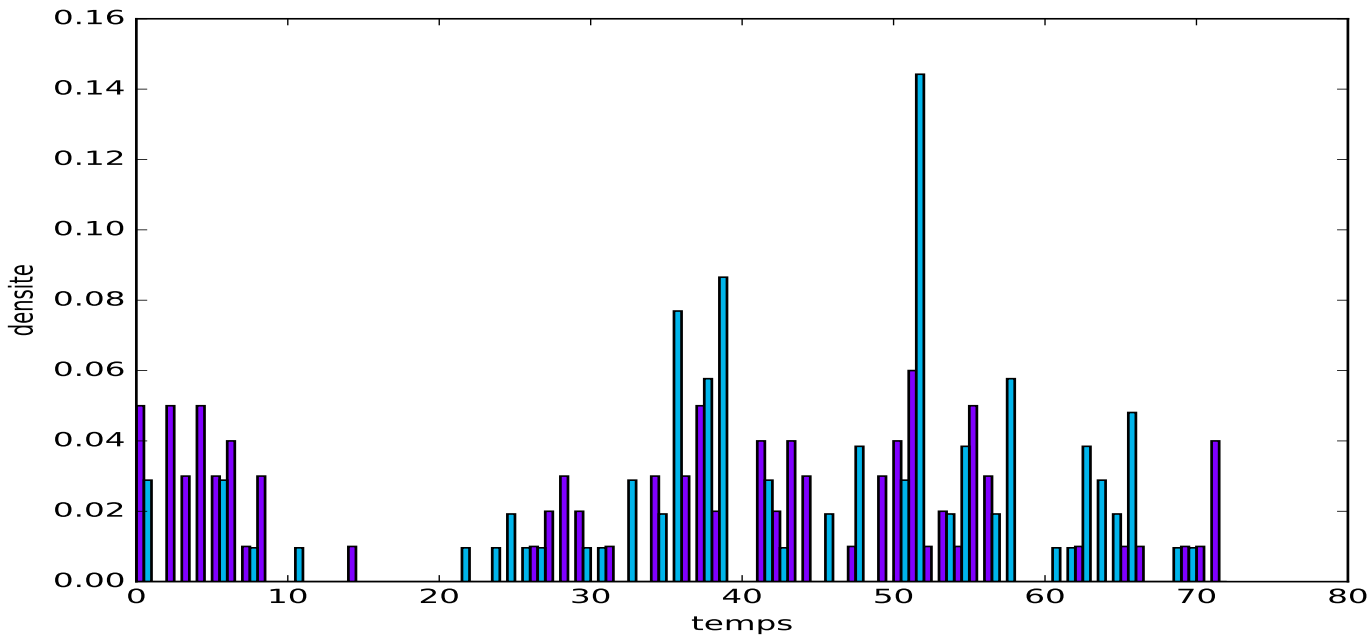



Nombre de velibs empruntés par heure sur 5 stations

# Estimation d'histogramme

## Problème : explosion combinatoire

- Quand le nombre de dimension augmente, le nombre de cases augmente exponentiellement :
- Beaucoup de cases sans aucun échantillon
- Et même celles qui en ont, un nombre faible $\rightarrow$ peu représentatif




Nombre de velibs empruntés par 20 minutes sur 2 stations

# Estimation non paramétrique par noyaux

## Idée générale

- Soit une région $\mathcal{R}$ de l'espace, et une densité de probabilité $p$
- $P_{\mathcal{R}}$ la probabilité qu'un exemple $x$ appartienne à cette région, $P_{\mathcal{R}} = \int_{\mathcal{R}} p(\mathbf{x})d\mathbf{x}$
- $x_1, \ldots, x_n$ iid, $X$ la v.a. du nombre de $x_i$ $\mathcal{R}$
- $P(X = k) = C_n^k P_{\mathcal{R}}^k (1 - P_{\mathcal{R}})^{n-k}$, $\mathbb{E}[X] = nP_{\mathcal{R}}$, donc $P_{\mathcal{R}} = \frac{\mathbb{E}[X]}{n}$

## Raffinement

- Si $p(\mathbf{x})$ est continue et que $\mathcal{R}$ est petit, que $p(x)$ ne varie presque pas dans $\mathcal{R}$

$\Rightarrow$ $P_{\mathcal{R}} = \int_{\mathcal{R}} p(x)dx \simeq p(x)V$, $V$ volume de $\mathcal{R}$

$\Rightarrow$ $p(x) \simeq \frac{k/n}{V}$

- avec $\{\mathcal{R}_1, \mathcal{R}_2, \ldots\}$ des régions pour $1, 2, \ldots$ échantillons, $k_n$ le nombre d'échantillons dans $\mathcal{R}_n$ et $V_n$ le volume, on a $p_n(x) = \frac{k_n/n}{V_n}$

# Fenêtre de Parzen

## Principe

- $\mathcal{R}_n$ est un hypercube, chaque côté de longueur $h_n$
- $V_n = h_n^d$, $d$ la dimension de l'espace de représentation
- $\phi(x) = \begin{cases} 1 & \text{si } |x^i| \leq 1/2 \\ 0 & \text{sinon} \end{cases}$ fonction indicatrice de l'hypercube unitaire
- $\phi$ définie un hypercube unitaire centré à l'origine.
- $\phi(\frac{x-x'}{h_n}) = 1$ ssi $x'$ est dans l'hypercube de volume $V_n$ centré en $x$.

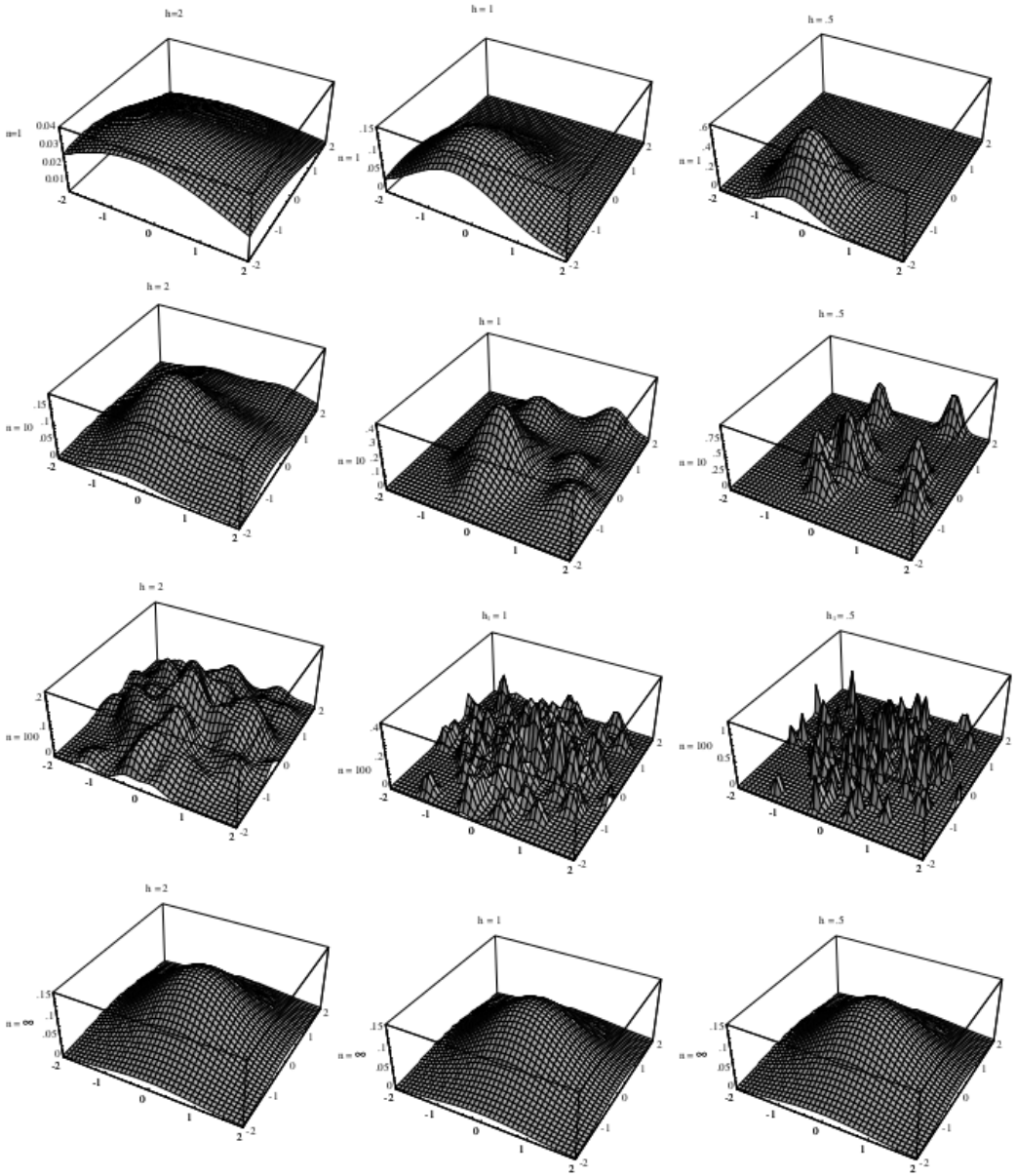
## Conséquence

- Nombre d'échantillons dans l'hypercube : $k_n = \sum_{i=1}^{n} \phi((x - x_i)/h_n)$
- Densité estimée : $p_n(x) = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^{n} \frac{1}{V_n} \phi(\frac{x-x_i}{h_n})$
- simplification : $\delta_n(x) = \frac{1}{V_n} \phi(x/h_n) \rightarrow p_n(x) = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^{n} \delta_n(x - x_i)$

# Discussion

## Effet de $h_n$

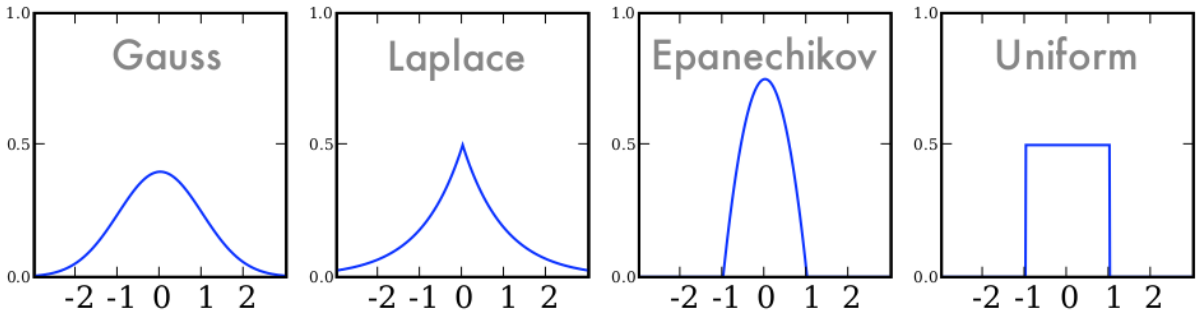
- $h_n$ grand
  $\rightarrow \delta_n$ peu sensible, paysage homogène
- $h_n$ petit
  $\rightarrow \delta_n$ tend vers un pic de Dirac.
- compromis entre petite résolution et grande variabilité



# Discussion

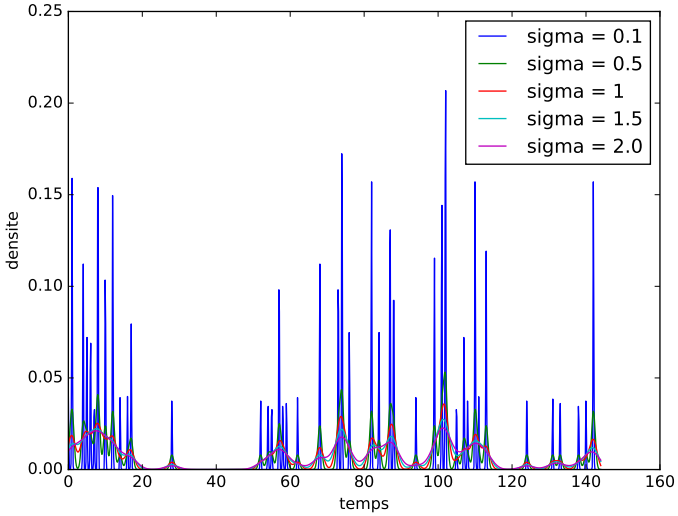
## Pourquoi se limiter à des hypercubes ?

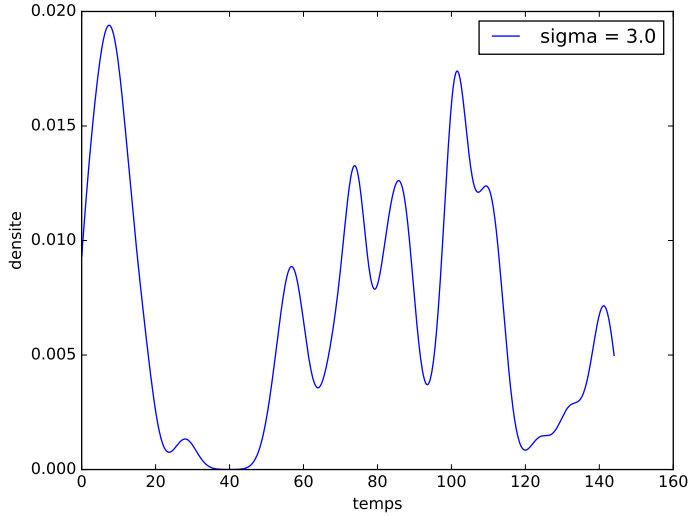
- $\phi$ peut être plus générale (noyaux)
- conditions nécessaires :
  - $\phi(x) \geq 0$
  - $\int \phi(x)dx = 1$

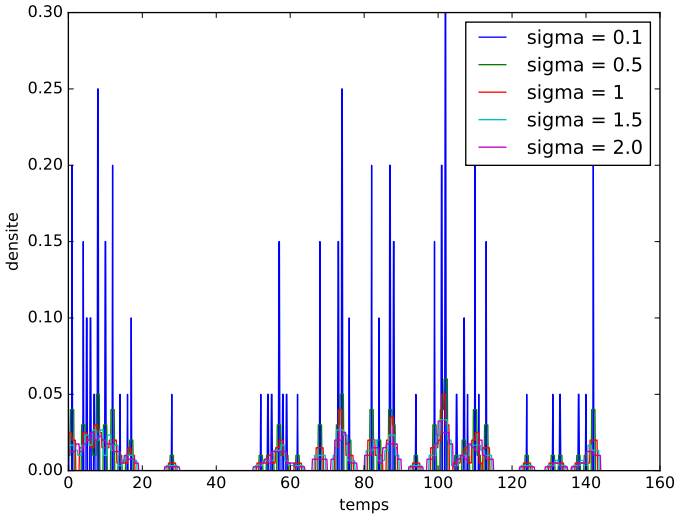


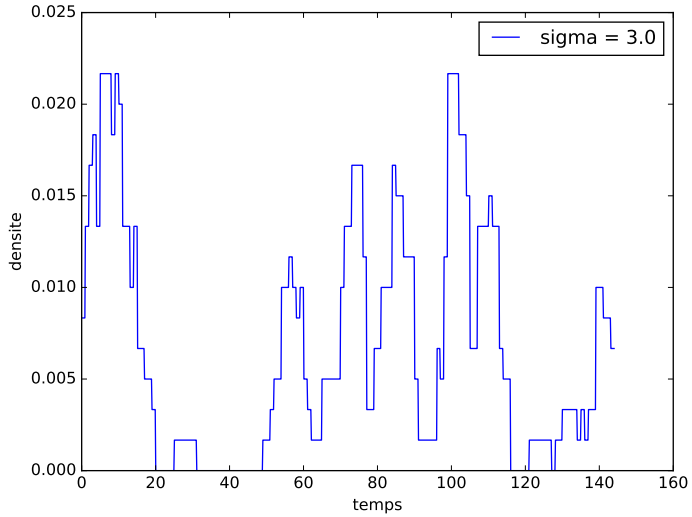

$(2\pi)^{-\frac{1}{2}} e^{-\frac{1}{2}x^2}$ $\frac{1}{2}e^{-|x|}$ $\frac{3}{4}\max(0, 1-x^2)$ $\frac{1}{2}\chi_{[-1,1]}(x)$

# Discussion : exemples velib

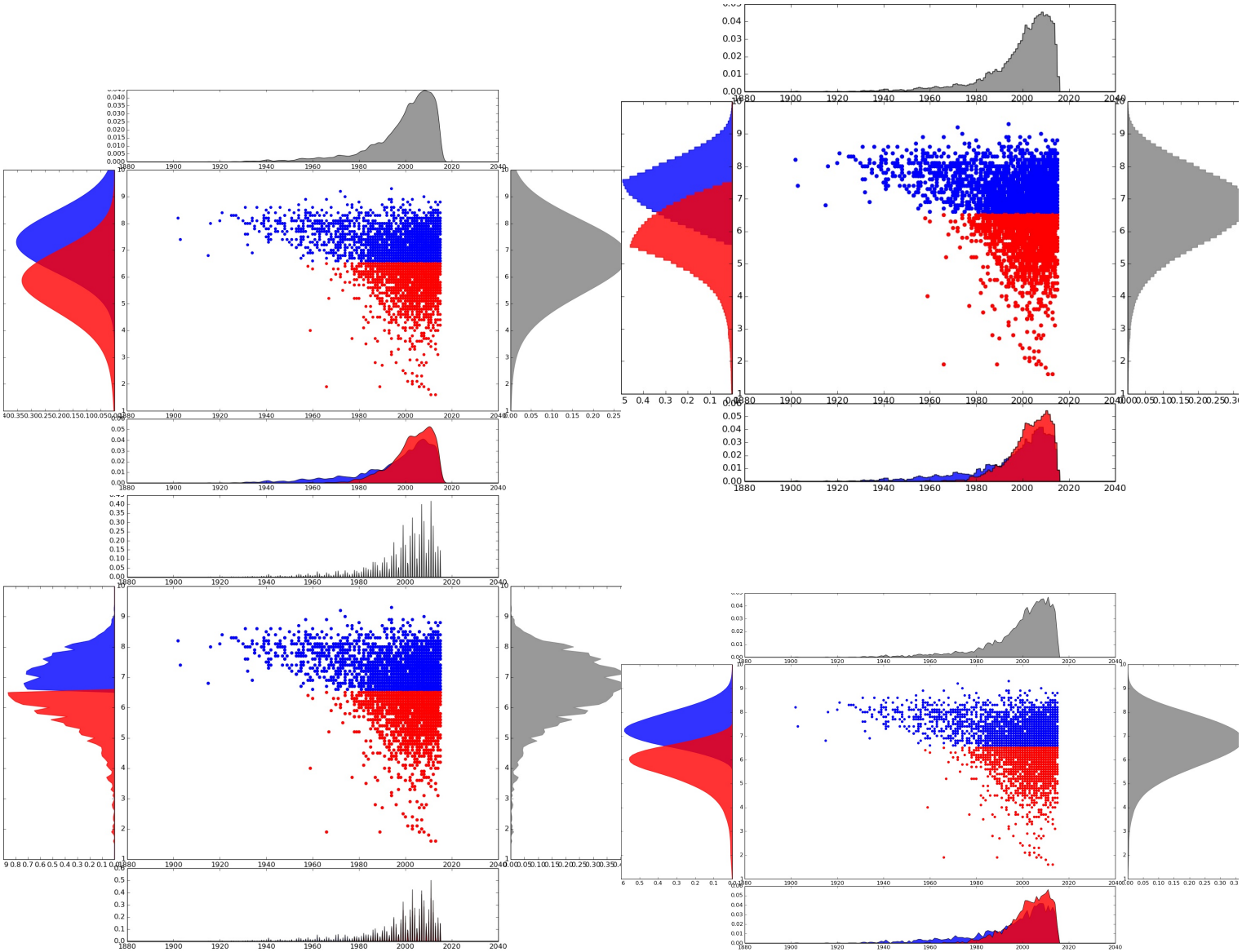


# Discussion : exemples imdb



# Estimateur de Watson-Nadaraya (classification)

## De la densité à la classification

On dispose également d'un label $y_i$ pour chaque $x_i$, $y_i \in \{-1, 1\}1$.

- Classification binaire : déterminer $p(x|y=1)$ et $p(x|y=-1)$
- $p(y|x) = \frac{p(x|y)p(y)}{p(x)} = \frac{\frac{1}{n_y}\sum_{y_i=y}\phi(x-x_i)\frac{n_y}{n}}{\frac{1}{n}\sum_i \phi(x-x_i)}$
- $p(y_+|x) - p(y_-|x) = \frac{\sum_j y_j \phi(x-x_j)}{\sum_i \phi(x-x_i)} = \sum_j y_j \frac{\phi(x-x_j)}{\sum_i \phi(x-x_i)}$
- directement adaptable à la régression

# Plus proches voisins ($k$-nearest Neighbors)

## Principe

- plutôt que de prendre en compte un noyau ou la distance, prendre en compte le voisinage (immédiat ou non) du point
- un paramètre : $k$ le nombre de voisins à prendre en compte
- $p(y|x) = \frac{1}{k} \sum_{j,\ x_j \in \{k\text{- plus proches}\}} y_j$

## Discussion

- Parzen : travail sur le volume, pas de contrôle sur le nombre de points considérés
- Knn : volume libre, mais nombre de points fixe
- dans tous les cas :
  - complexité grande des algorithmes (possible d'utiliser des arbres de partitionnement (KD-tree) et autres heuristiques pour accélérer)
  - des paramètres à choisir . . .
- Comment choisir les paramètres ?

# Plan


1. Rappel MAPSI/Probabilités
2. Classification bayésienne
3. Estimation de densité
4. **Sélection de modèles**

# Sélection de modèles

## Problèmatique

- Très souvent, il faut fixer des paramètres aux algorithmes d'apprentissage
  - profondeur de l'arbre
  - nombre de voisins dans les $k$-nn
  - longueur de l'hypercube, paramètre des noyaux dans les fenêtres de Parzen
- quels effets ont ses paramètres ?
  - ils déterminent généralement le pouvoir expressif du modèle
  - combien le modèle va coller aux données et faire peu d'erreurs sur les données d'apprentissage
  - ou au contraire faire plus d'erreurs mais généraliser

$\Rightarrow$ ils calibrent le *sur-apprentissage* ou le *sous-apprentissage*

- compromis entre l'apprentissage par cœur et l'apprentissage uniforme

# Sélection de modèles empirique

## Choisir le paramètrage en fonction des données

- évaluer les différents paramétrages en fonction de l'évaluation des modèles
- utiliser des données pour évaluer les modèles
- Mais pas n'importe lesquelles !!

## Evaluer un modèle

- Problème : il ne faut jamais évaluer un modèle sur l'ensemble d'apprentissage (pourquoi ?)
- vocabulaire :
  - ensemble d'apprentissage
  - ensemble de calibration/validation (optionnel, dépend des algos)
  - ensemble de test
- Mais comment éviter un biais lors de la construction de ses ensembles ?

# Validation croisée

## Principe

- Partitionner les données en $k$ sous-ensembles
- apprendre le modèle sur $k-1$ sous-ensembles
- évaluer le modèle sur le dernier sous-ensemble
- répéter l'opération $k$-fois, sur toutes les combinaisons possibles, en gardant les sous-ensembles fixes.
- la performance moyenne est la moyenne des $k$ évaluations : $\frac{1}{k}\sum_{i=1}^{k} \ell(p(X_i|X/X_i))$.

## Discussion

- Cas particulier : si $k = n-1 \rightarrow$ *leave-one-out*
- Vaut-il mieux $k$ grand ou petit ?
- Si on dispose de beaucoup (beaucoup) de données, est-ce toujours intéressant ? Et dans le cas de peu (très peu) de données ?
- Inconvénients ?