Université de Montréal
Département d'informatique et de recherche opérationnelle

IFT3395/6390
Fondements de l'apprentissage machine

Formalisation des problèmes d'apprentissage
Méthodes de type histogramme
Malédiction de la dimensionalité

Professeur: Pascal Vincent

LISA Laboratoire d'Informatique des Systèmes d'Apprentissage

Au programme aujourd'hui

- Petit rappel de terminologie.
- Ex. de problème de classification, régression, estimation de densité
- Méthodes de type histogramme, illustrées pour classification, régression, estimation de densité.
- Malédiction de la dimensionalité.
- Formalisation du problème de l'apprentissage. Notion de capacité.

D_n Ensemble de données d'entrainement (*training set*)

Dimensionalité de l'entrée: d

Taille de l'ensemble, nombre d'exemples: n

entrées: cibles:

"cheval"

"chat"

etc...

"cheval"

prétraitement, extraction de caractéristiques

preprocessing, feature extraction

entrées: X cibles: Y

(vecteur de traits caractéristiques)

X_1	(3.5, -2, ... , 127, 0, ...)	+1	Y_1
	(-9.2, 32, ... , 24, 1, ...)	-1	
	etc...		
X_n	(6.8, 54, ... , 17, -3, ...)	+1	Y_n

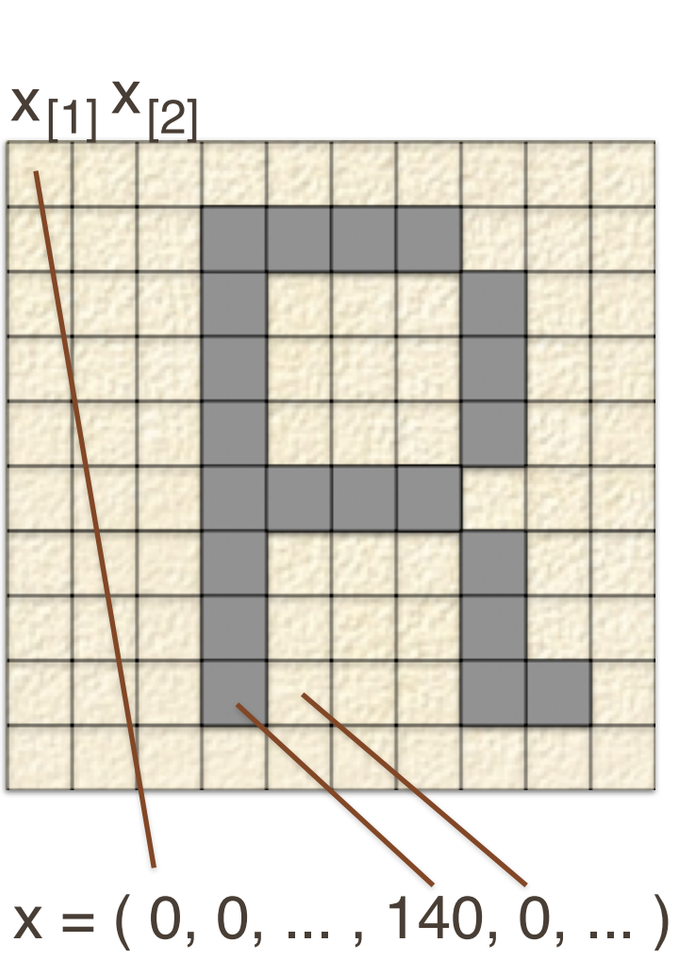
$X_{n,2}$

Point de test:

→ ?

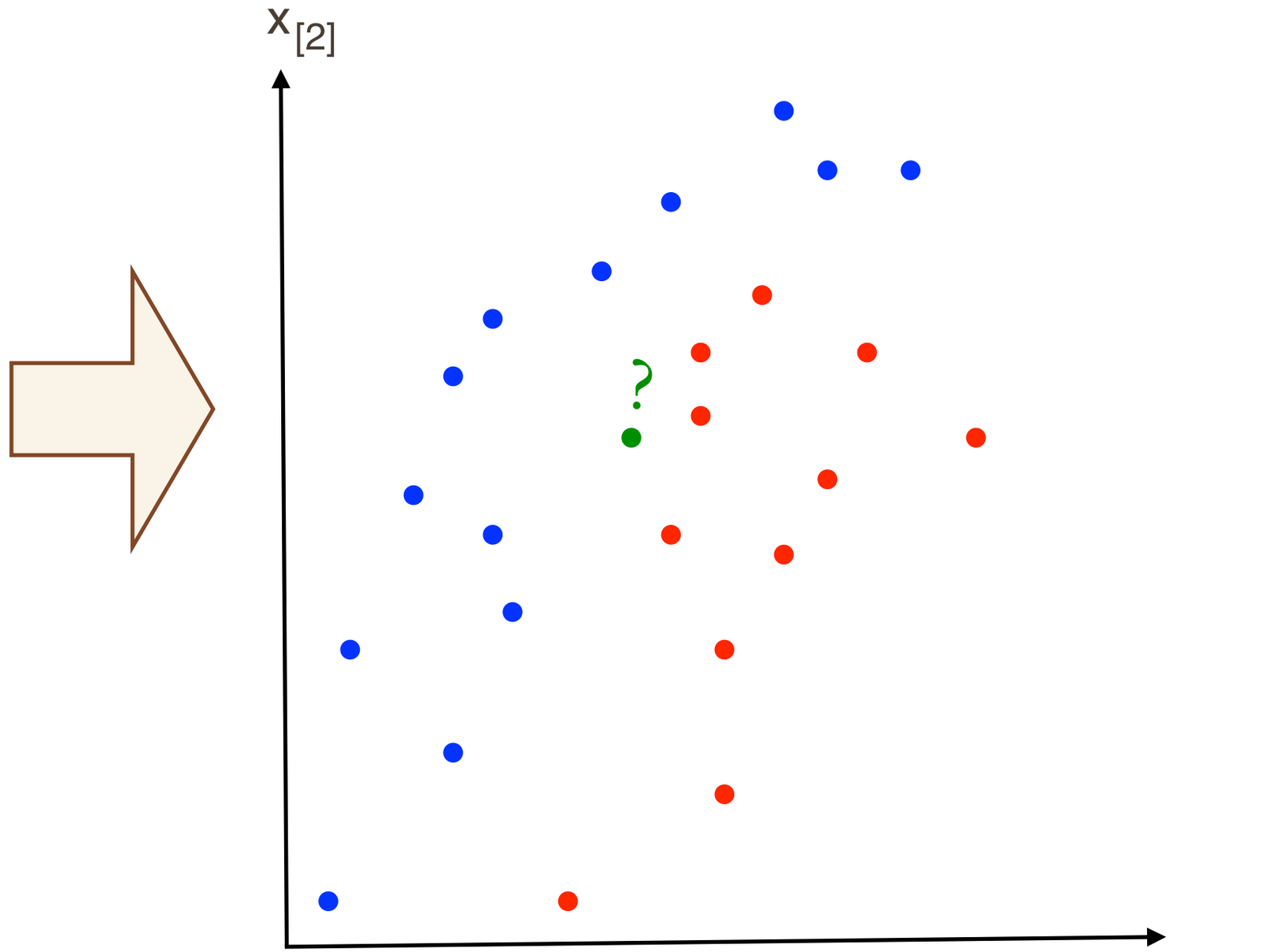
$x =$ (5.7, -27, ... , 64, 0, ...) → ?

Représentation des données



x = (0, 0, ... , 140, 0, ...)

x point de $\mathbb{R}^d$



Un ensemble de données est vu comme un ensemble de points en haute dimension.

Terminologie de l'apprentissage supervisé

Ensemble de données d'entrainement (*training set*)

Une entrée est généralement représentée par un vecteur de dimension d.

$x \in \mathbb{R}^d$

dimensionalité de l'entrée

1	entrée, observation, *input*, x_1	cible, *target*, sortie désirée, y_1
2	entrée, observation, *input*, x_2	cible, *target*, sortie désirée, y_2
3	entrée, observation, *input*, x_3	cible, *target*, sortie désirée, y_3
⋮	*etc…*	⋮
n	entrée, observation, *input*, x_n	cible, *target*, sortie désirée, y_n

taille de l'ensemble, nombre d'exemples, d'échantilons.

point de test → ? ? ?

On cherche un algorithme qui produit une sortie (*output*) qui est une bonne prédiction de la cible.
Cet algorithme trouve une bonne fonction x -> y

Problème d'apprentissage

- Données
  - $D_n = (Z_1, Z_2, \ldots, Z_n)$ générées par la "nature"

    pour l'apprentissage supervisé $Z_i=(X_i,Y_i)$
- IID: "independent and identically distributed"
  - tirés de la même distribution INCONNUE $p(Z)$
  - de manière indépendante

    signifie que l'ordre des exemples ne contient pas d'information
    => on devrait pouvoir les mélanger sans que ça ait d'influence!

(Attention: IID n'est pas valide pour tous les types de données!)

Problème d'apprentissage

- Les trois problèmes considérés
  - classification: $Z = (X, Y) \in \mathbb{R}^d \times$ {-1,1} ou {0,1} classfication binaire
    ou bien {1, ..., m} ou {0, 1, ... , m-1} classification muliclasse
  - régression: $Z = (X, Y) \in \mathbb{R}^d \times \mathbb{R}$
  - estimation de densité: $Z \in \mathbb{R}^d$

- Ensemble de fonctions F (solutions possibles), $f \in F$:
  - classification: $f : \mathbb{R}^d \rightarrow$ {-1,1} ou {0,1} classfication binaire
    ou bien {1, ..., m} ou {0, 1, ... , m-1} classification muliclasse
  - régression: $f : \mathbb{R}^d \rightarrow \mathbb{R}$
  - estimation de densité: F contient des fonctions de densité

Les types de problèmes ou tâches classiques en apprentissage

	supervisé	supervisé	non-supervisé
	Classification	**Régression**	**Estimation de densité**
Signification de la cible y	indique une classe parmi m classes.	une valeur réelle à prédire.	pas de cible y!
Domaine de y	$y \in$ {-1,1} ou $y \in$ {1, ..., m} ou $y \in$ {0, 1, ... , m-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: $L(x,f) = -\log f(x)$

Ex. de problème de classification

Iris flower data set

From Wikipedia, the free encyclopedia

The **Iris flower data set** or **Fisher's Iris data set** is a multivariate data set introduced by Sir Ronald Aylmer Fisher (1936) as an example of discriminant analysis.[1] It is sometimes called **Anderson's Iris data set** because Edgar Anderson collected the data to quantify the geographic variation of *Iris* flowers in the Gaspé Peninsula.[2]

The dataset consists of 50 samples from each of three species of *Iris* flowers (*Iris setosa*, *Iris virginica* and *Iris versicolor*). Four features were measured from each sample, they are the length and the width of sepal and petal, in centimeters. Based on the combination of the four features, Fisher developed a linear discriminant model to distinguish the species from each other. It is used as a typical test for many other classification techniques.

$\mathbf{x} \in \mathbb{R}^4$

Fisher's Iris Data

Y

Sepal Length	Sepal Width	Petal Length	Petal Width	Species
5.1	3.5	1.4	0.2	*setosa*
4.9	3.0	1.4	0.2	*setosa*
4.7	3.2	1.3	0.2	*setosa*
4.6	3.1	1.5	0.2	*setosa*
5.0	3.6	1.4	0.2	*setosa*
5.4	3.9	1.7	0.4	*setosa*
4.6	3.4	1.4	0.3	*setosa*

etc...

5.7	2.8	4.5	1.3	*versicolor*
6.3	3.3	4.7	1.6	*versicolor*
4.9	2.4	3.3	1.0	*versicolor*
6.6	2.9	4.6	1.3	*versicolor*
5.2	2.7	3.9	1.4	*versicolor*
5.0	2.0	3.5	1.0	*versicolor*

etc...

7.7	3.0	6.1	2.3	*virginica*
6.3	3.4	5.6	2.4	*virginica*
6.4	3.1	5.5	1.8	*virginica*
6.0	3.0	4.8	1.8	*virginica*
6.9	3.1	5.4	2.1	*virginica*

etc...

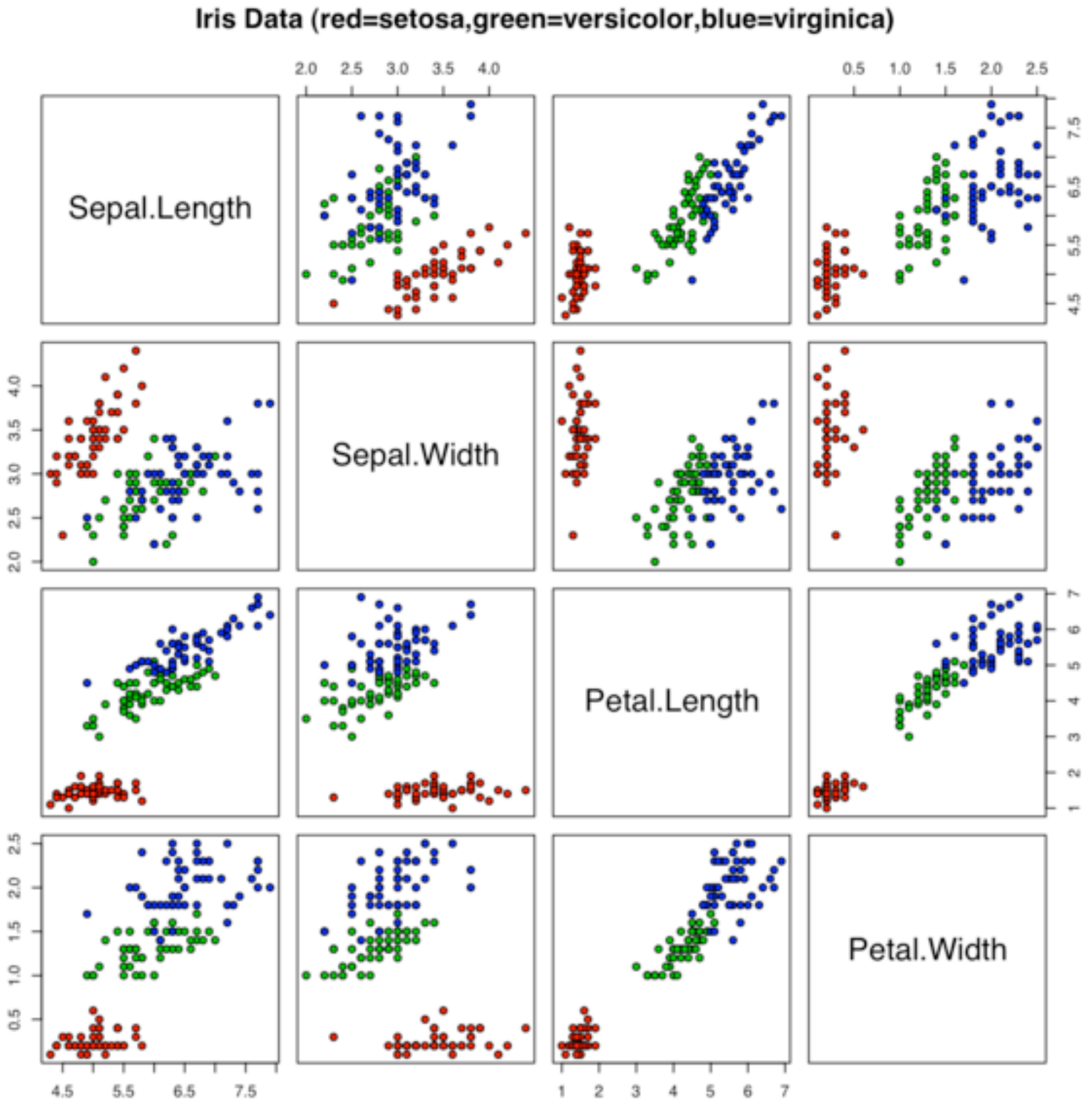
n= 150

Iris setosa

Iris versicolor

Iris virginica

La classe en fonction de 2 traits caractéristiques



Un même ensemble de donnée peut permettre de définir plusieurs tâches différentes!

- Classification: prédire l'espèce d'iris sachant les dimensions du pétale et sépale.

- ex régression:
  prédire les dimensions du pétale sachant les dimensions du sépale et la classe d'iris

- ex estimation de densité de probabilité:
  je mesure les dimensions de pétale et sépale d'une fleur donnée. Ressemblent-elles aux dimensions typiques d'une iris setosa?

Etapes d'un projet utilisant des algorithmes d'apprentissage

- Le problème à résoudre peut-il être reformulé sous la forme d'une des tâches standard de l'apprentissage?
  (classification, régression, estimation de densité, partitionnement, réduction de dimensionalité, ...)
  Quel coût veut-on réellement optimiser dans ce problème?

- Examiner les données dont on peut disposer pour l'entraînement/test. Y a-t-il suffisamment d'exemples?, bien comprendre leur format, leur sémantique.

- Concevoir et coder les étapes de prétraitement des données. Le but est de les transformer dans une forme appropriée pour les algos d'apprentissage qu'on va utiliser.

- Entraîner/tester et évaluer correctement la performance "hors échantillon" des algorithmes considérés. (ex: découpage entraînement/test, validation croisée, ou bootstrap).

Etapes pratiques d'un projet de data-mining

- Identifier clairement le problème à résoudre
- Le formaliser comme une tâche d'apprentissage spécifique basée sur les données.
- Extraire les données et les regrouper (dans un fichier, une table).
- Prétraiter les données pour obtenir une représentation appropriée pour les algorithmes d'apprentissage envisagés.

"data plumbing"

- Modélisation: appliquer plusieurs algorithmes d'apprentissage sur les données.
- Évaluation de la performance de chaque algorithme, pour choisir la meilleure approche.

sélection de modèle

- Déployer le système opérationnel chez le client.

Méthodes de type histogramme

Les algorithmes à base de quadrillages de l'espace
(de type histogramme)

Une idée simple: découper l'espace en petits cubes...

Une idée simple pour la classification

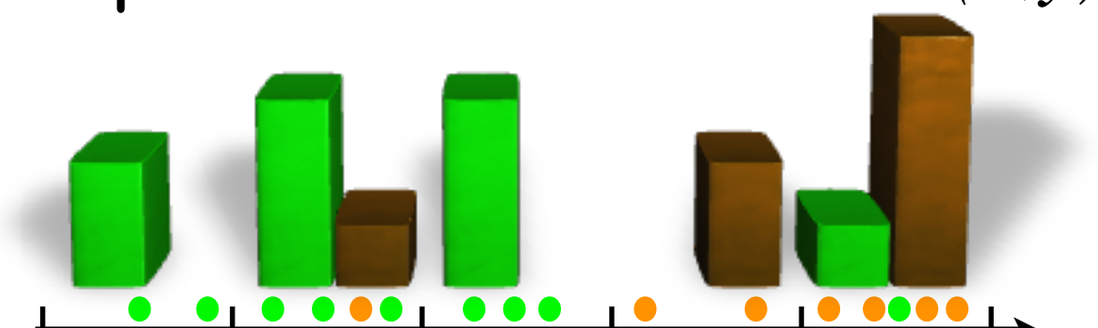
Tout algo d'apprentissage doit pouvoir effectuer une prédiction pour n'importe quel point de test de l'espace d'entrée... (ex: $x \in \mathbb{R}^d$)
Partant de là, voici une idée simple d'algorithme:

- Quadriller l'espace!
- Entraînement: Compter, pour chaque case, combien de points de chaque classe y tombent (parmi les points de l'ensemble d'apprentissage).
- Test: trouver la case dans laquelle tombe le point de test. Répondre la classe majoritaire tombée dans cette case.

Classification

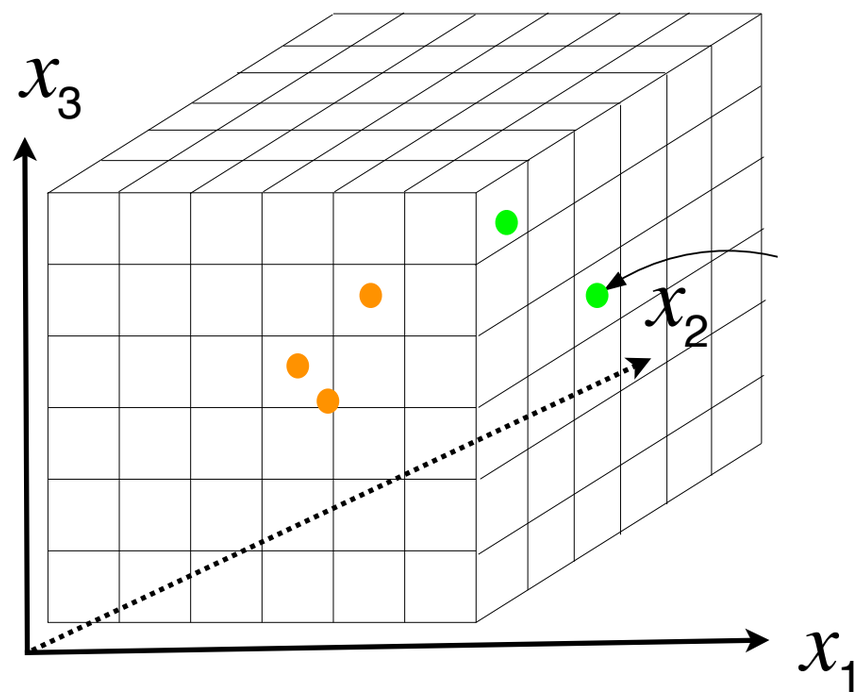
- On suppose qu'il existe un processus inconnu qui génère des paires d'observations (x,y), ou y indique la classe (• ou •)

1D

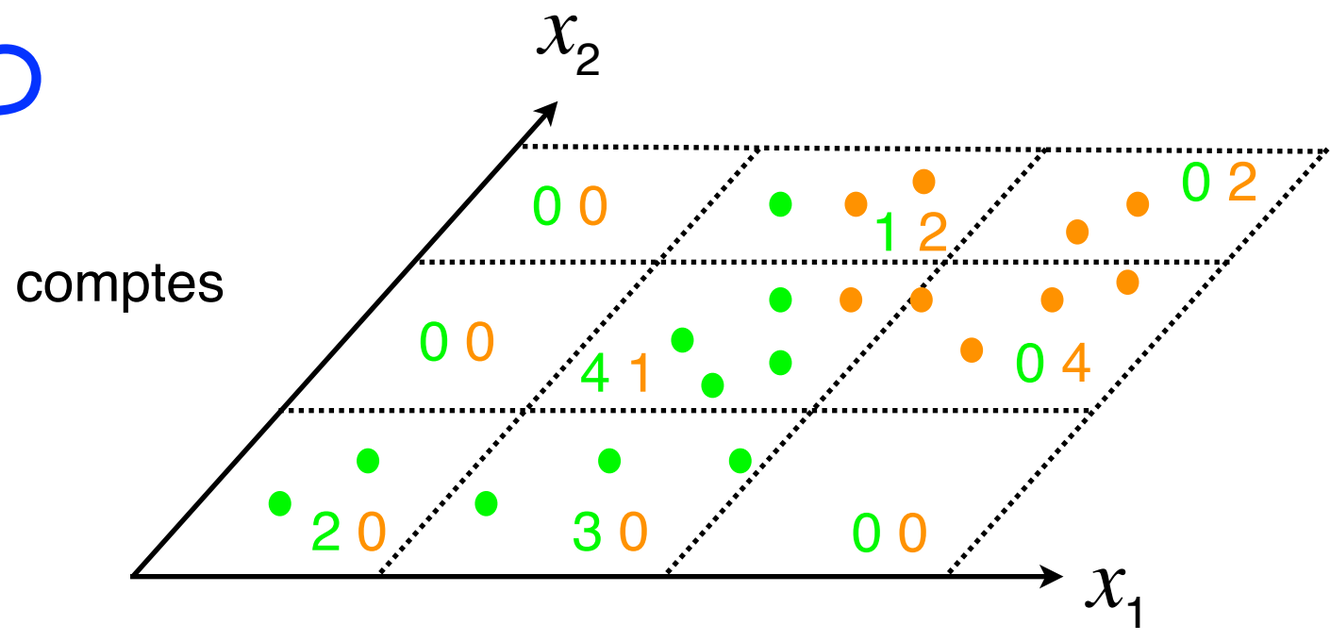


$P(y|x \in case)$ 1 0 |3/4 1/4| 1 0 | 0 1 |1/5 4/5|

3D



2D

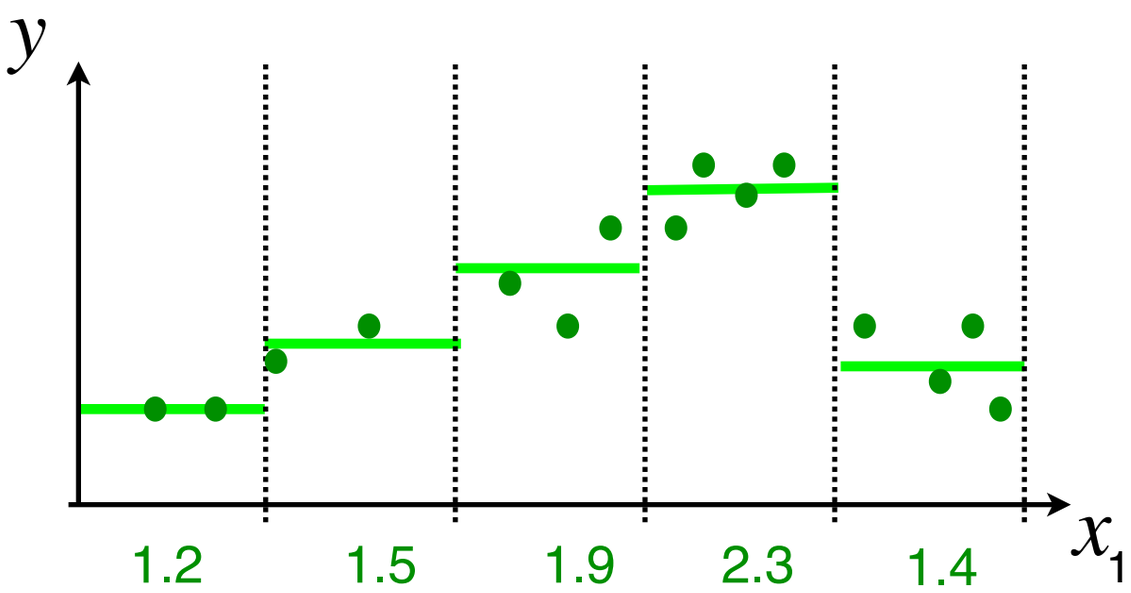


dD ...

Régression

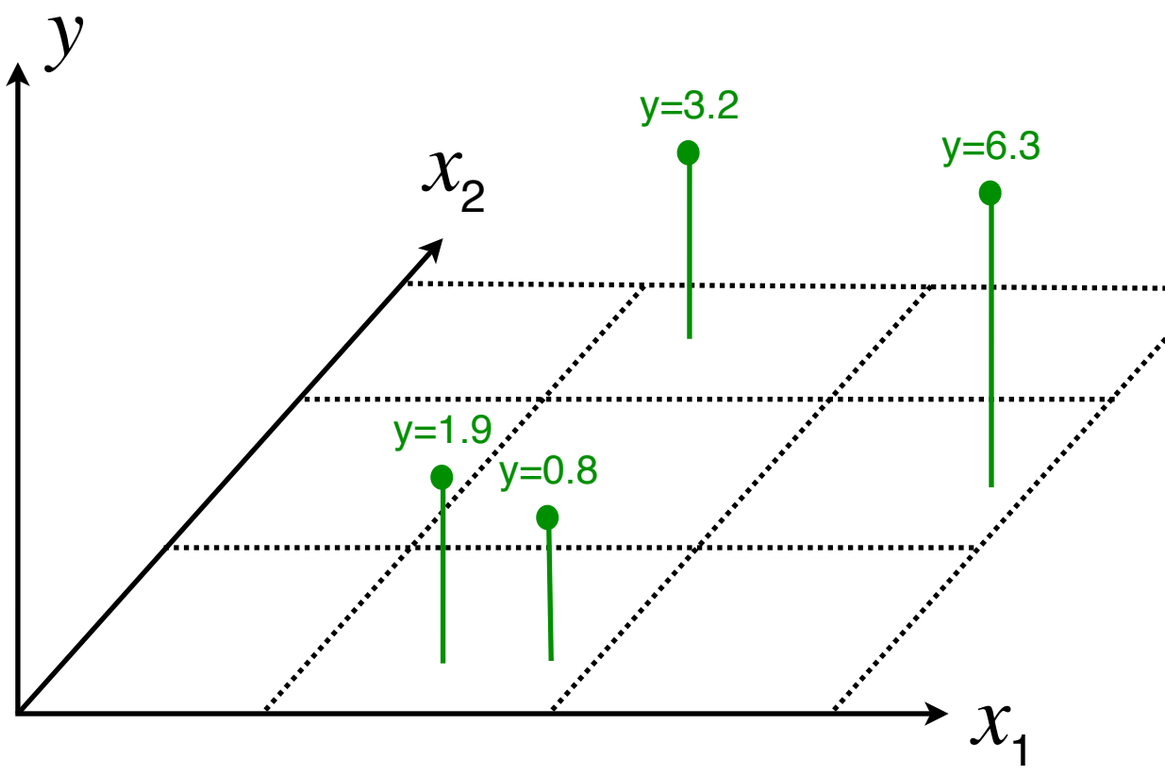
- On suppose qu'il existe un processus inconnu qui génère des paires d'observations (x,y), avec y réel.

1D



moyennes: $E(y|x \in case)$

2D



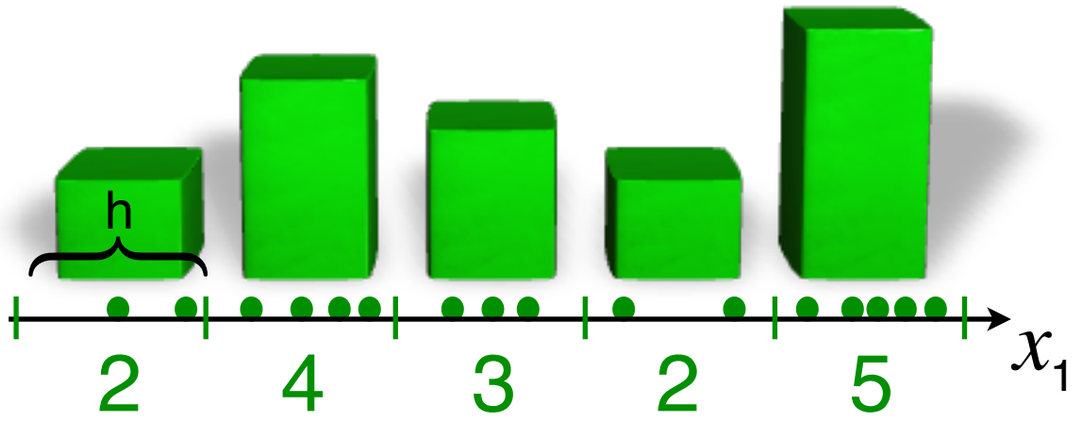
3D …

dD …

Estimation de densité

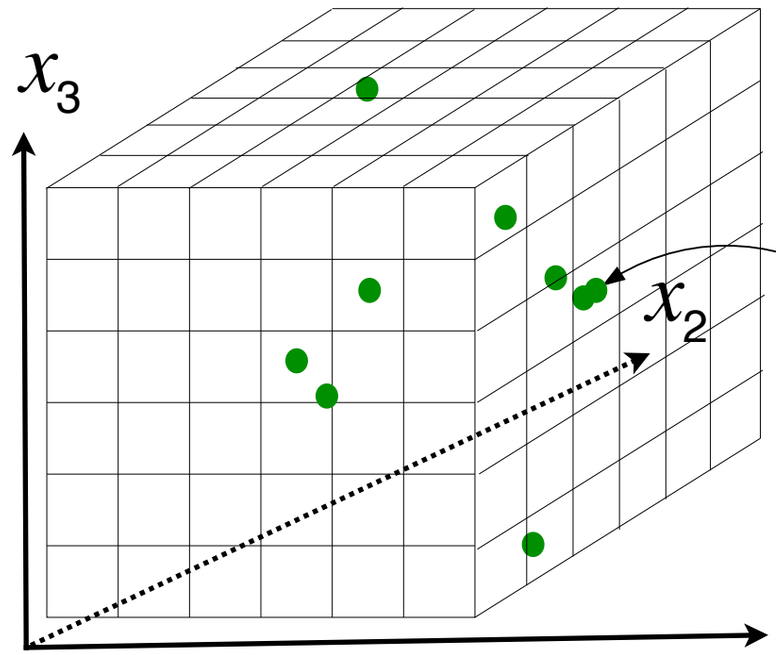
- On suppose qu'il existe un processus inconnu qui génère des observations x.

1D



comptes:	2	4	3	2	5
densité de probabilité: $p(x)$	2/16/h	4/16/h	3/16/h	2/16/h	5/16/h

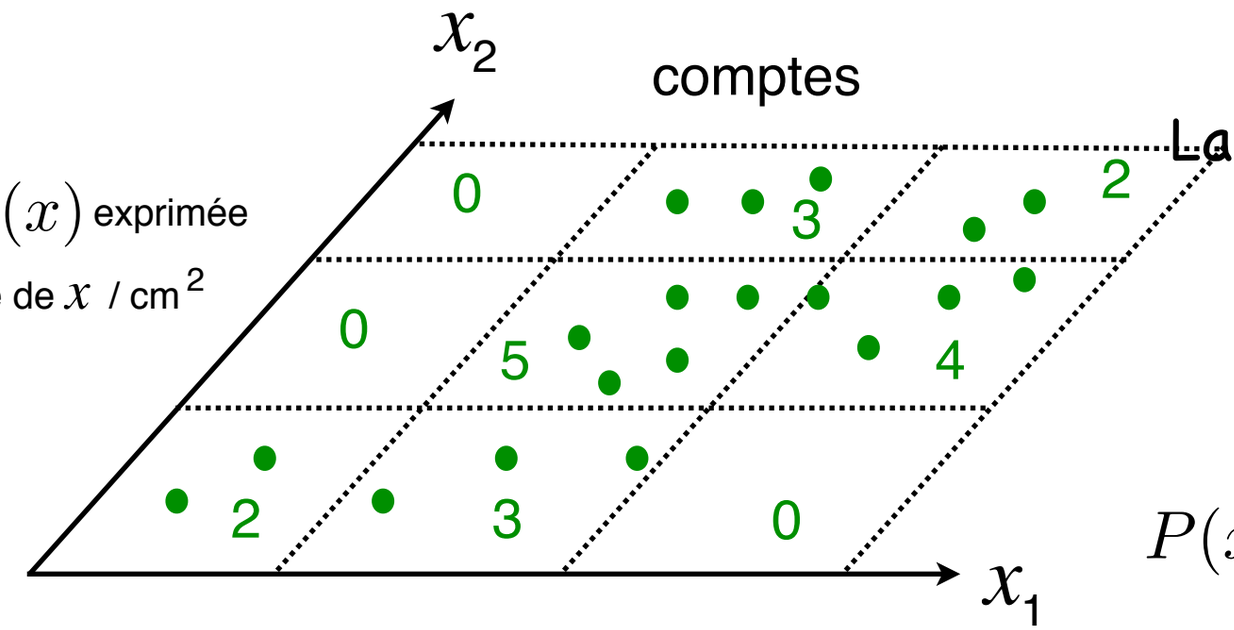
3D



2D

Densité de probabilité $p(x)$ exprimée

par ex. en probabilité de x / cm ^{2}



La densité de prob. doit intégrer à 1 sur tout l'espace:

$$\int p(x)dx = 1$$

$$P(x \in region) = \int_{region} p(x)dx$$

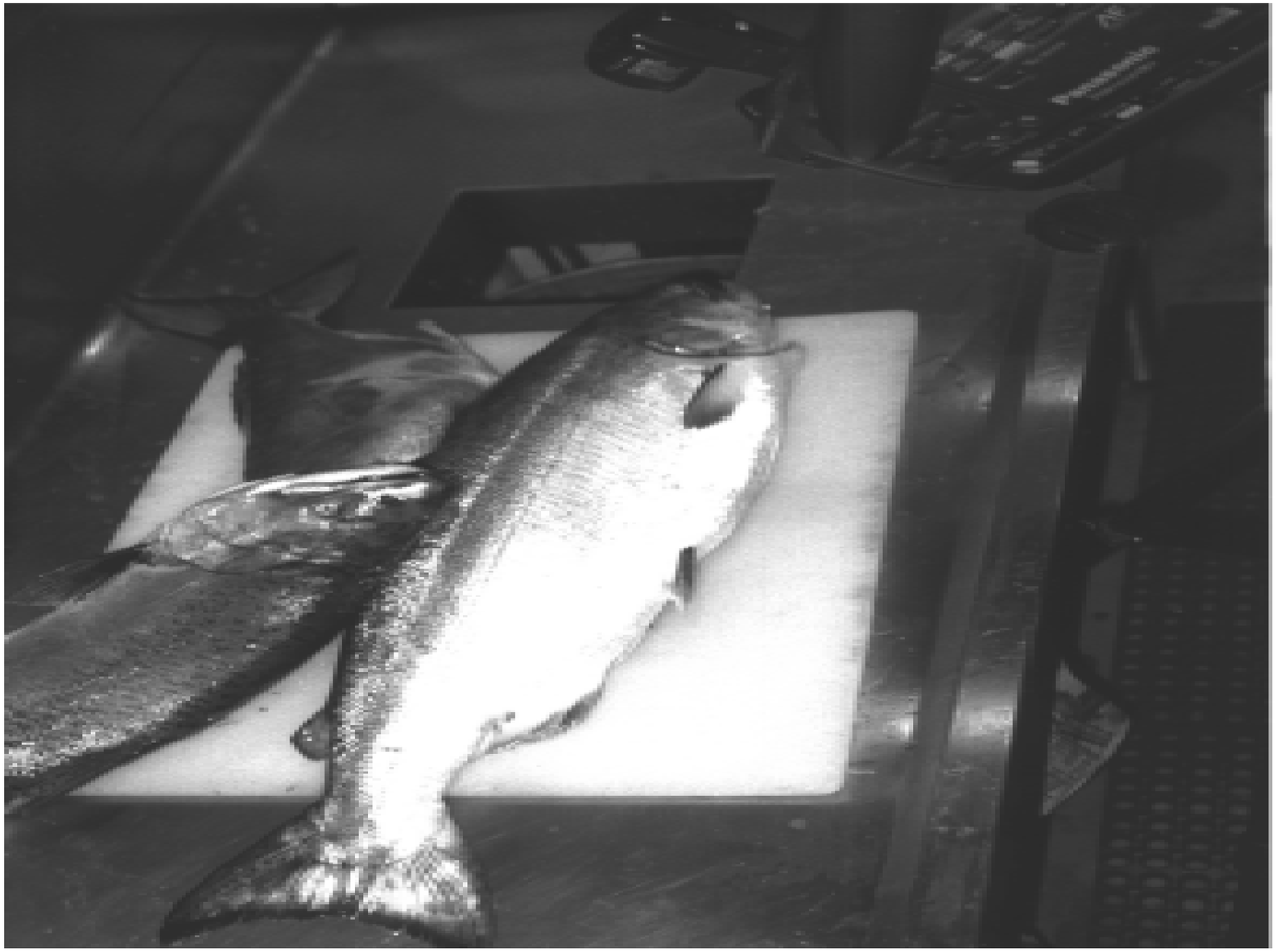
Quelle dimensionalité?

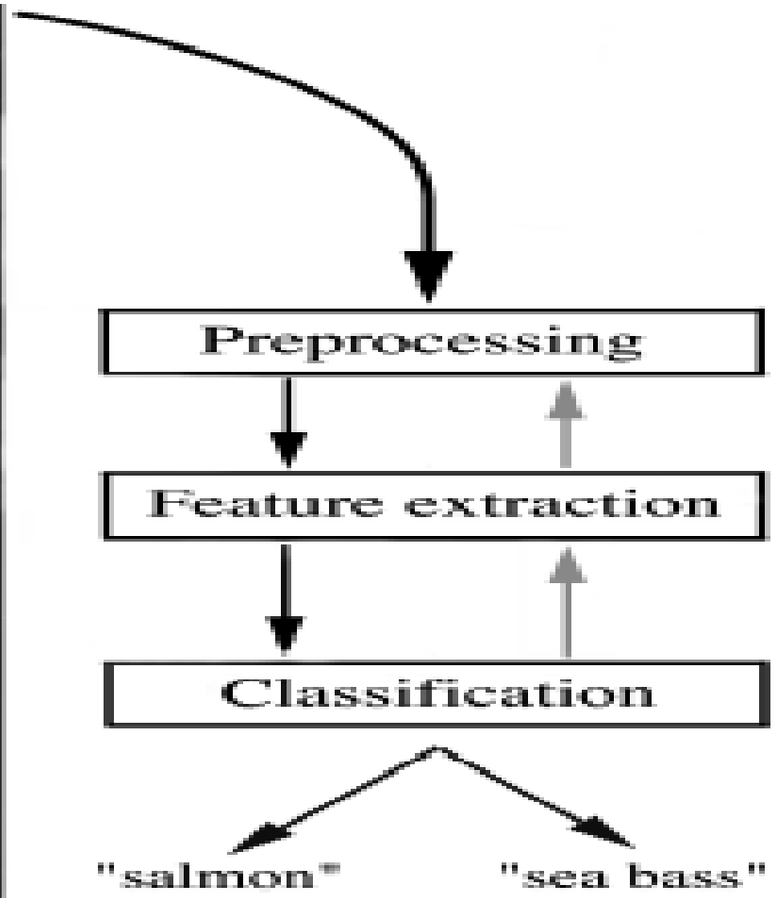
exemple...

Exemple de classification

- Séparer deux types de poissons (saumon et bar) sur un tapis roulant
  - entrée des données (caméra)
  - traitement d'image
  - extraction des caractéristiques/traits (largeur, longueur, luminosité, etc.)
  - design d'une fonction de classification:

$$f : \{\text{vecteur des traits}\} \mapsto \{\text{saumon}, \text{bar}\}$$

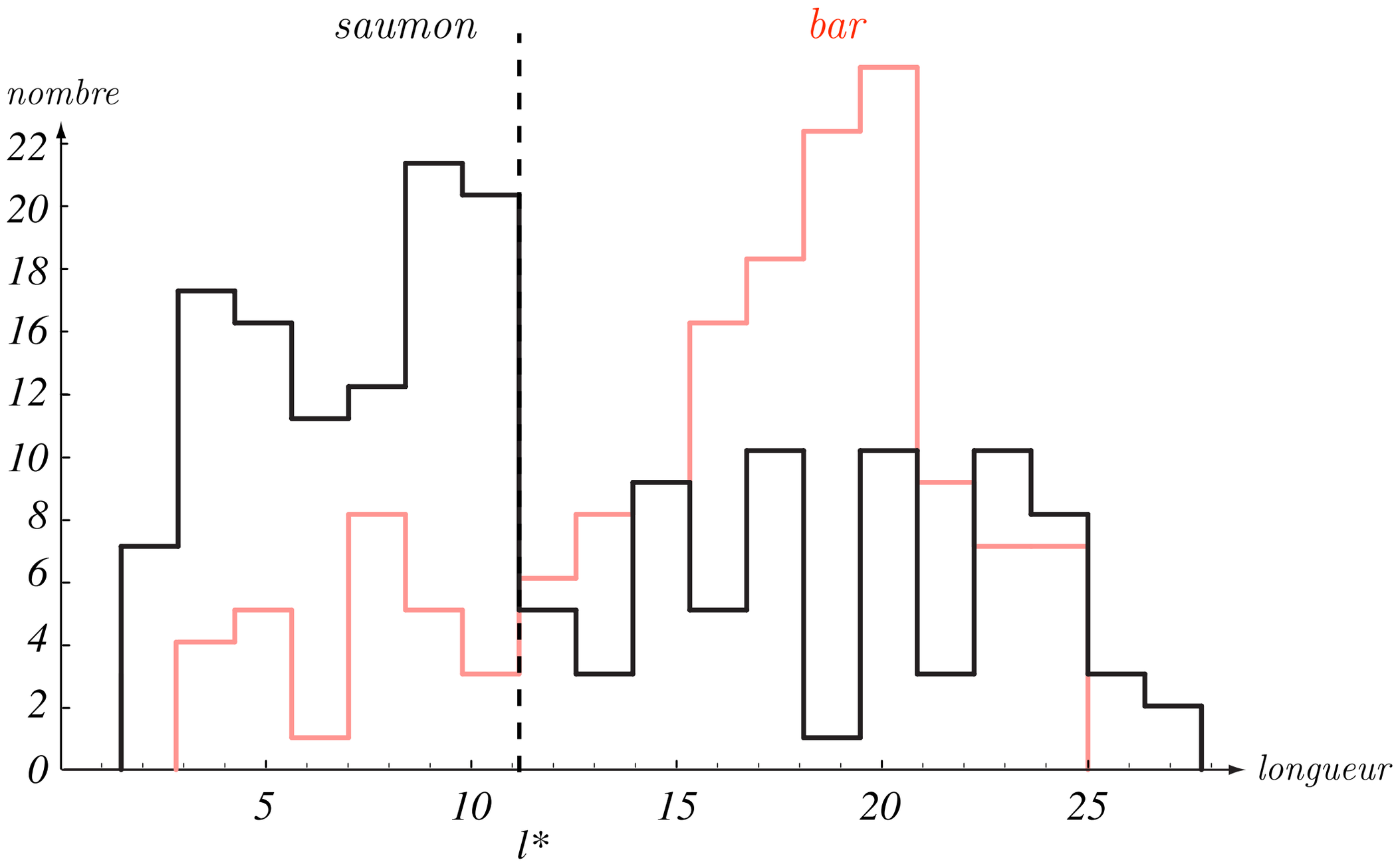




Ex. de traits caractéristiques résultant du prétraitement (preprocessing + feature extraction):

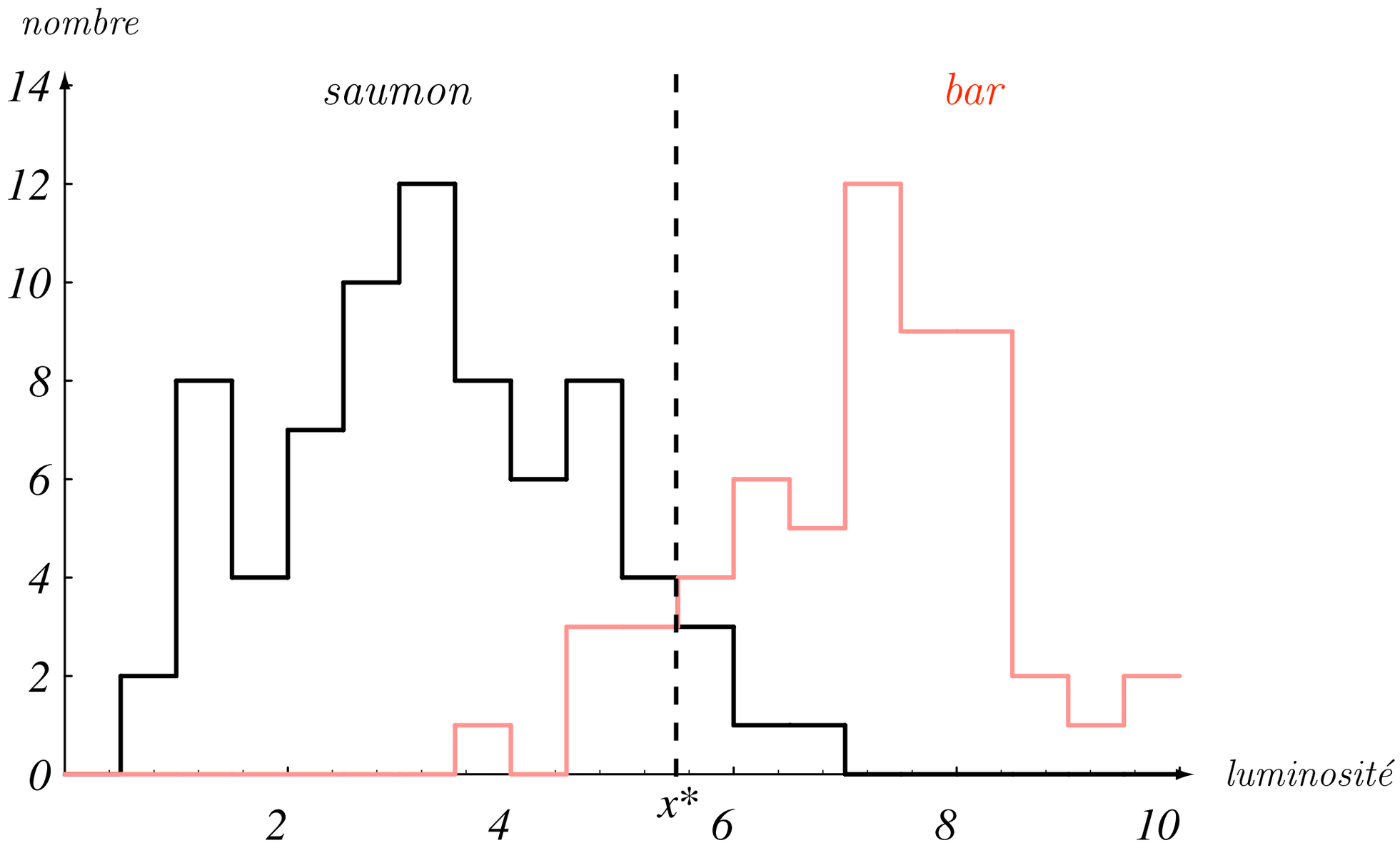
x=(longueur, largeur, luminosité, taille de la nageoire dorsale, position de la bouche, etc...)

- Histogramme obtenu de l'ensemble d'entraînement
  - erreur d'entraînement



Nombre d'erreurs: 26+69 = 95 *pour un classifieur linéaire*

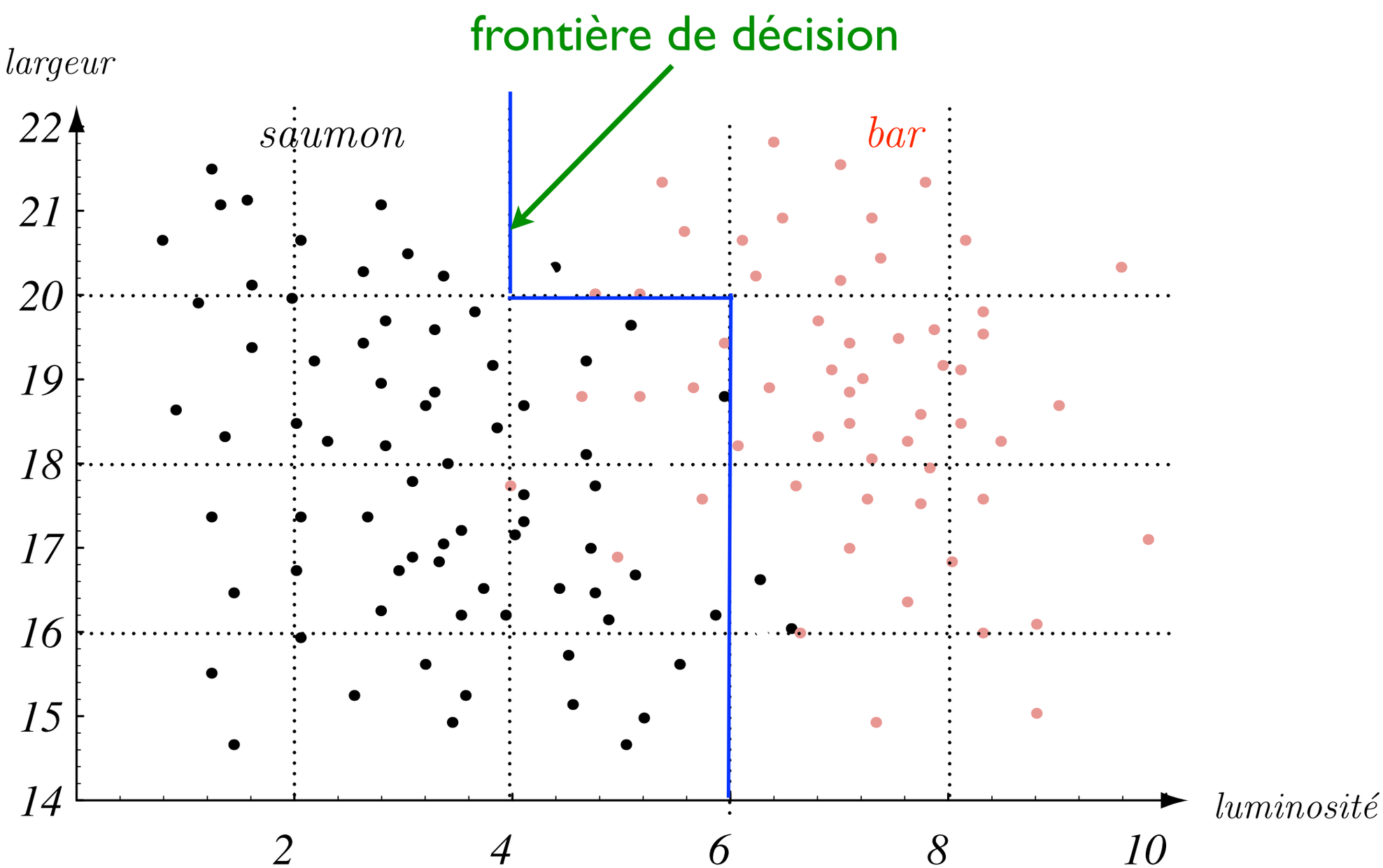
- Une autre variable/trait
  - coût de la mauvaise classification



Nombre d'erreurs: 7+5 = 12

- Deux variables
  - vecteurs de traits, espace de traits, frontière de décision

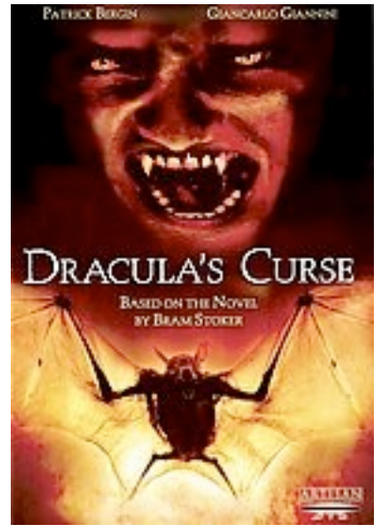
pour un histogramme 2D



Nombre d'erreurs: = 10

- Plus de dimensions (traits caractéristiques) c'est (généralement) plus d'information pour prendre la bonne décision.
- Les classes en sont plus facilement séparables
- C'est bien mais....

Malédiction (fléau) de la dimensionalité
CURSE OF DIMENSIONALITY



Ex: combien de cases pour un quadrillage découpé en 10 en dimension d ?

- d=1 : 10 cases
- d=2 : 10x10=100 cases
- d=3 : 10x10x10=1000 cases
- d=10 : 10^{10} = 10 000 000 000 cases
  dix milliards!
- Pour un quadrillage où chaque dimension est découpée en m, on a m^d cases.

La "taille" de l'espace explorable à modéliser croît exponentiellemet avec la dimensionalité !

Si on a n=100 000 points d'entrainement répartis ± uniformément

- d=1 : 100 000/10 = 10000 points/case
- d=2 : 100 000/100 = 1000 points/case
- d=3 : 100 000/1000 = 100 points/case
- d=10 : 100 000/10^{10} = 10^{-5} points/case
- d=100 : 100 000/10^{100} = 10^{-95} points/case
- En haute dimension, la plupart des cases (où risque d'apparaître un point de test...) vont ête vide!!!

Sensibilité à la malédiction

- Les méthodes de type histogramme (quadrillage) fonctionnent bien en faible dimension (1, 2, voire 3)
- Mais sont catastrophiques en haute dimension!
- La malédiction de la dimensionalité affecte ± tous les algorithmes d'apprentissage, mais certains y sont beaucoup plus sensible que d'autres.

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.

Ex: Histogramme pour la classification

hyper-paramètres

Classifieur Histogramme2D (m1, x1min, x1max, m2, x2min, x2max, nclasses)

C ← tenseur(m1, m2, nclasses) initialisé à 0. paramètres

taille1 = (x1max-x1min)/m1, taille2 = (x2max-x2min)/m2

ensemble d'entraînement

apprends(D_n): # "train"

Pour (x,y) ∈ D_n :

i = floor((x[0]-x1min)/taille1), j = floor((x[1]-x2min)/taille2)

C[i,j,y]++

point de test

class_prob(x): # retourne un vecteur de probabilité que x soit de chaque classe.

i = floor((x[0]-x1min)/taille1), j = floor((x[1]-x2min)/taille2)

comptes = C[i,j]

return comptes / sum(comptes)

point de test

f(x): # classifie x. Retourne l'indice de la classe la plus probable

probs = class_prob(x)

return ArgMax[probs]

Complexité algorithmique
Histogramme pour la classification

Variables

n: nombre d'exemples,

d: dimensionalité de l'entrée

C: nombre de classes

m: nombre de subdivisions,

Complexité mémoire (à l'entraînement et utilisation)

$O(C\ m^d)$

Complexité temps de calcul pour l'entraînement

$O(d\ n)$

Complexité temps de calcul à l'utilisation (f)

$O(d+C)$