MAPSI — cours 10 : Introduction au machine learning Focus sur la Regression logistique

Nicolas Thome
Transparents de Vincent Guigue
nicolas.thome@isir.upmc.fr

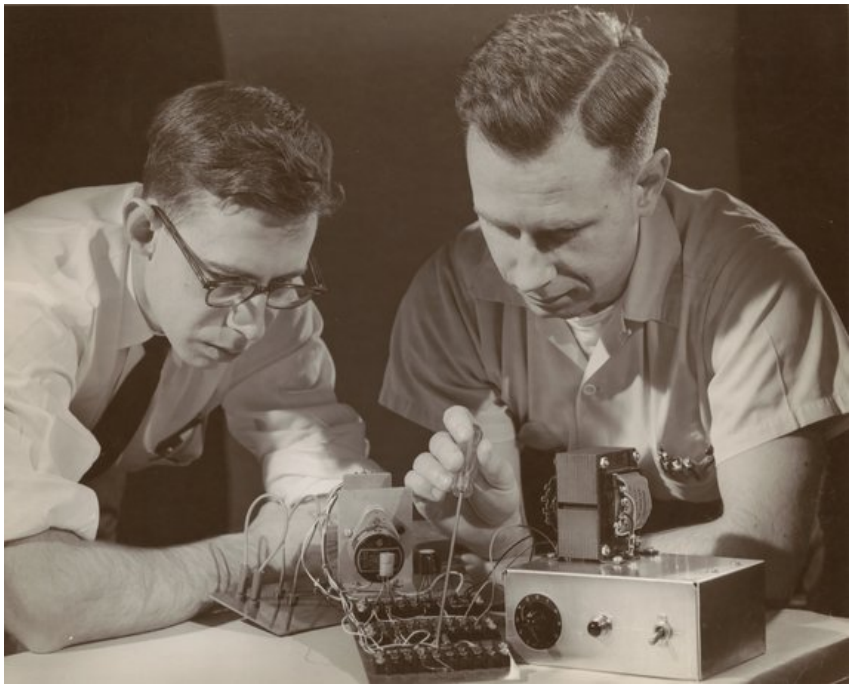
LIP6 / ISIR – Sorbonne Université, France

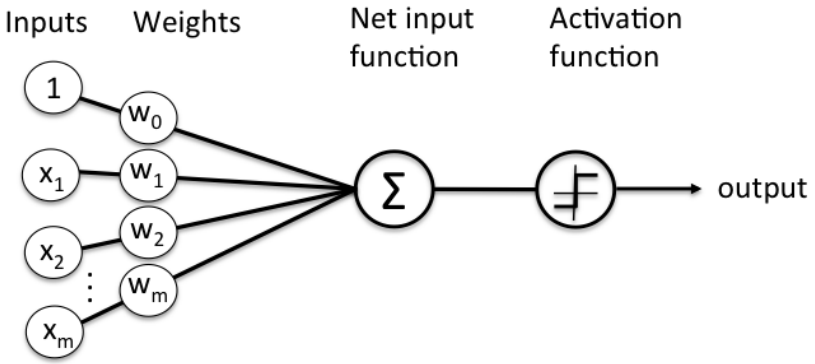
Perceptron

Nicolas Thome
Transparents de Vincent Guigue
nicolas.thome@isir.upmc.fr

LIP6 / ISIR – Sorbonne Université, France

Historique (1957, 10 ans avant la disquette ou le PC ! !)





Schematic of Rosenblatt's perceptron.

$$f(\mathbf{x}_i) = \sum_j x_{ij} w_j, \qquad C = \sum_{i=1}^{N} (-y_i \mathbf{x}_i \mathbf{w})_+$$

Formulation discriminante

Liberté de la fonction de coût, comparaison des approches :

- Moindres carrés :
  - pas bien adapté à la classification
- Hinge (= charnière)
  - Limité au cas binaire, mais mieux adapté à la classification

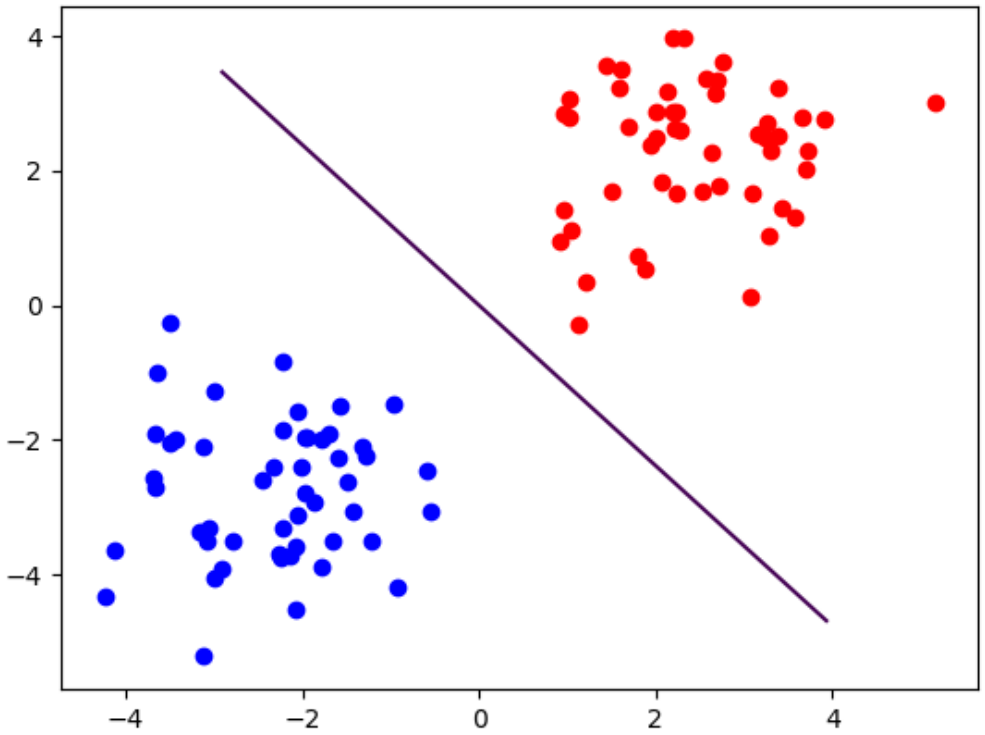
Descente de gradient

1. Initialiser $\mathbf{w}_0$
2. Bouclage jusqu'à cvg
   - Calcul de $\nabla_{\mathbf{w}} C = \sum_{i|y_i f(x_i) \leq 0} -y_i x_i^T$
   - MAJ : $\mathbf{w}^{t+1} = \mathbf{w}^t - \epsilon \nabla_{\mathbf{w}} C$

Algorithme stochastique

1. Initialiser $\mathbf{w}_0$
2. Bouclage jusqu'à cvg
   - Tirage aléatoire d'un échantillon i
   - Si $y_i \mathbf{x}_i \mathbf{w} \leq 0$
     - Calcul de $\nabla_{\mathbf{w}} C_i = -y_i x_i^T$
     - MAJ : $\mathbf{w}^{t+1} = \mathbf{w}^t - \epsilon \nabla_{\mathbf{w}} C_i$

Hinge/charnière : attention aux différentes fonctions optimales



$$C = \sum_{i=1}^{N} (-y_i \mathbf{x}_i \mathbf{w})_+$$

- Super frontière... Optimale ($C = 0$)...
- Mais est-ce la seule frontière optimale ?

Logique de marge

Renforcer la classification des points limites :

$$f(\mathbf{x}_i) = \sum_j x_{ij} w_j, \qquad C = \sum_{i=1}^{N} (1 - y_i \mathbf{x}_i \mathbf{w})_+$$

Logique de marge

Renforcer la classification des points limites :

$$f(\mathbf{x}_i) = \sum_j x_{ij} w_j, \qquad C = \sum_{i=1}^{N} (1 - y_i \mathbf{x}_i \mathbf{w})_+$$

$\Rightarrow$ aucun impact si $\mathbf{x}_i \mathbf{w}$ n'est pas normalisé, la fonction de score est définie à un facteur près.

Logique de marge

Renforcer la classification des points limites :

$$f(\mathbf{x}_i) = \sum_j x_{ij} w_j, \qquad C = \sum_{i=1}^{N} (1 - y_i \mathbf{x}_i \mathbf{w})_+$$

$\Rightarrow$ aucun impact si $\mathbf{x}_i \mathbf{w}$ n'est pas normalisé, la fonction de score est définie à un facteur près.
$\Rightarrow$ imposer la marge + contraindre la norme de fonction de score :

$$f(\mathbf{x}_i) = \sum_j x_{ij} w_j, \qquad C = \sum_{i=1}^{N} (1 - y_i \mathbf{x}_i \mathbf{w})_+ + \lambda \|\mathbf{w}\|^2$$

Regression Logistique

Nicolas Thome
Transparents de Vincent Guigue
nicolas.thome@isir.upmc.fr

LIP6 / ISIR – Sorbonne Université, France

Rappel sur les modèles génératifs

1. Choix d'une modélisation des données : $p(\mathbf{x}|\theta)$
2. Apprentissage = trouver θ
3. Application possible : décision bayesienne

$$r(\mathbf{x}) = \arg\max_k p(\theta_k|\mathbf{x}) = \frac{p(\mathbf{x}|\theta_k)p(\theta_k)}{p(\mathbf{x})}$$

4. Application bis : génération de $\tilde{\mathbf{x}} \sim \mathcal{D}(\theta_k)$

Apprentissage d'un modèle génératif $\Leftrightarrow$ Estimation de densité

- Estimer θ_k = estimer une densité de probabilité d'une classe k
- Hypothèse (forte) : les θ_k sont supposés indépendants
- Techniques d'estimation des θ_k

Maximum de vraisemblance

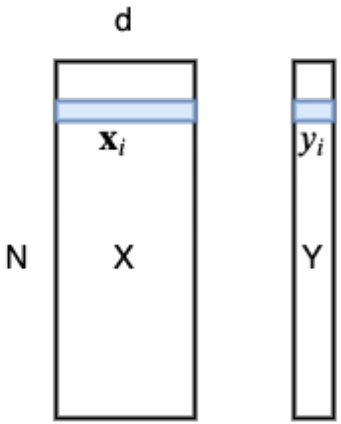
- $D_k = \{\mathbf{x}_1, \ldots, \mathbf{x}_N\}$ exemples supposés générés par $p(\mathbf{x}|\theta_k)$
  Seulement pour la classe k
- *Faire coller* le modèle au données

$$\mathcal{L}(D_k, \theta_k) = p(D_k|\theta_k) = \prod_{i=1}^{N} p(\mathbf{x}_i|\theta_k)$$

- Optimisation : $\theta_k^\star = \arg\max_{\theta_k}(\log\mathcal{L}(D_k, \theta_k))$
- Résolution :
  - Analytique : $\frac{\partial\mathcal{L}(D,\theta)}{\partial\theta} = 0$ ou Approchée : EM, gradient...
- Inférence sur une nouvelle donnée $\mathbf{x}$:

$$decision = k^\star = \arg\max_k p(\mathbf{x}|\theta_k)$$

Modèles génératifs

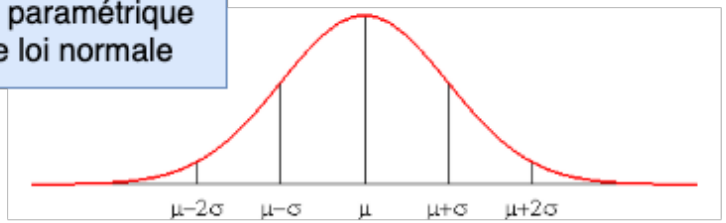


$\mathbf{x}_i \in \mathbb{R}^d$

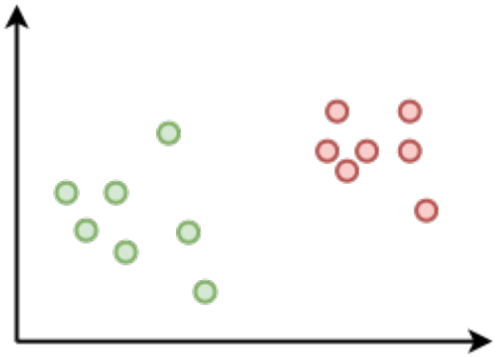
$y_i \in \{0, ..., C\}$

1

Expert: choix d'un modèle paramétrique e.g. une loi normale

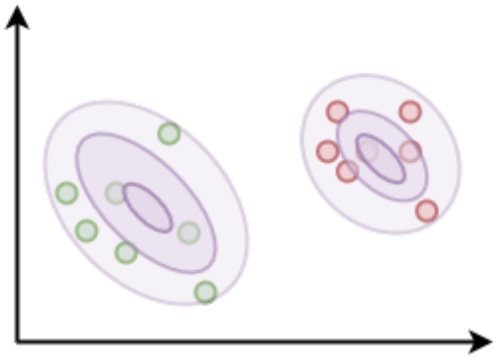


Visualisation de 2 variables aléatoires



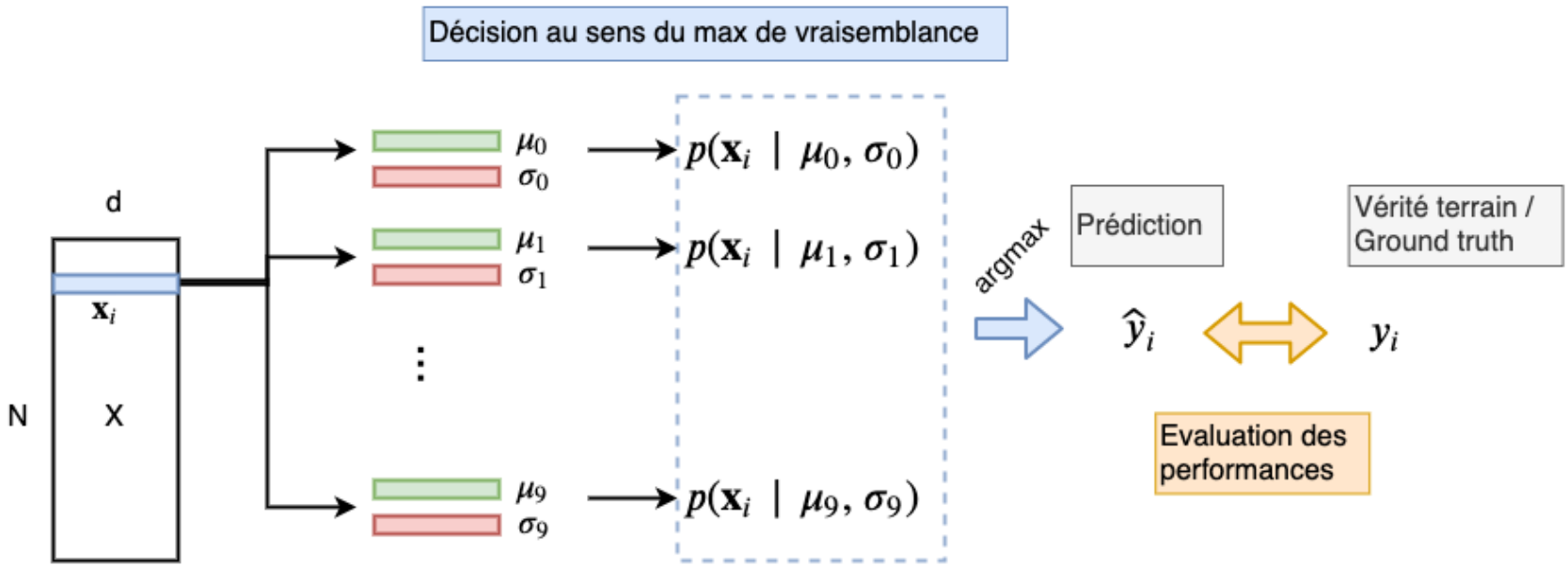
2

Adaptation optimale des paramètres aux observations



1 jeu de paramètres par classe

Modèles génératifs



Limite du modèle génératif pour la classification

- Approche **générative** : travail classe par classe

Quel modèle colle le mieux à mon observation ?

- Approche **discriminante** : travail classe *i* *VS* classe *j*

Qu'est ce qui distingue la classe *i* de la classe *j* ?

Idée : travailler sur les $p(Y|X)$
Modèle (le plus connu) : **Régression logistique**

Formulation du problème

- Echantillons $\{\mathbf{x}_i\}_{i=1,\ldots,n}, \mathbf{x} \sim X$
- Deux classes : $Y = 0$ ou $Y = 1$. Réalisation des $y_i \sim Y$
- En fait : $D = (\mathbf{x}_1, y_1), \ldots, (\mathbf{x}_N, y_N)$
- Comment modéliser $p(Y|X)$?

Formulation du problème

- Echantillons $\{\mathbf{x}_i\}_{i=1,\ldots,n}, \mathbf{x} \sim X$
- Deux classes : $Y = 0$ ou $Y = 1$. Réalisation des $y_i \sim Y$
- En fait : $D = (\mathbf{x}_1, y_1), \ldots, (\mathbf{x}_N, y_N)$
- Comment modéliser $p(Y|X)$?

1. On repère une variable de Bernoulli
   $p(Y = 1|X = \mathbf{x}) = 1 - p(Y = 0|X = \mathbf{x})$
2. On choisit de modéliser *arbitrairement* :

$$p(Y = 1|X = \mathbf{x}) =$$

$$f(\mathbf{x}) = \frac{1}{1 + \exp(-(\mathbf{x}\mathbf{w} + b))}$$

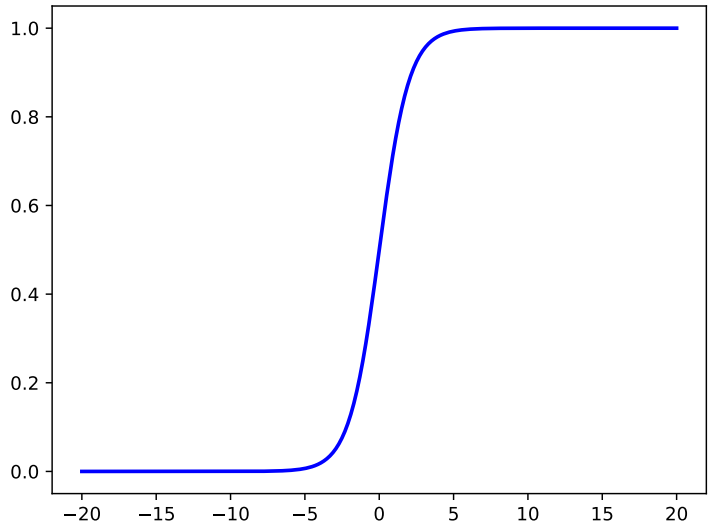
Formulation du problème

- Echantillons $\{\mathbf{x}_i\}_{i=1,\ldots,n}, \mathbf{x} \sim X$
- Deux classes : $Y = 0$ ou $Y = 1$. Réalisation des $y_i \sim Y$
- En fait : $D = (\mathbf{x}_1, y_1), \ldots, (\mathbf{x}_N, y_N)$
- Comment modéliser $p(Y|X)$?

1. On repère une variable de Bernoulli
   $p(Y = 1|X = \mathbf{x}) = 1 - p(Y = 0|X = \mathbf{x})$
2. On choisit de modéliser *arbitrairement* :

$$p(Y = 1|X = \mathbf{x}) =$$

$$f(\mathbf{x}) = \frac{1}{1 + \exp(-(\mathbf{x}\mathbf{w} + b))}$$

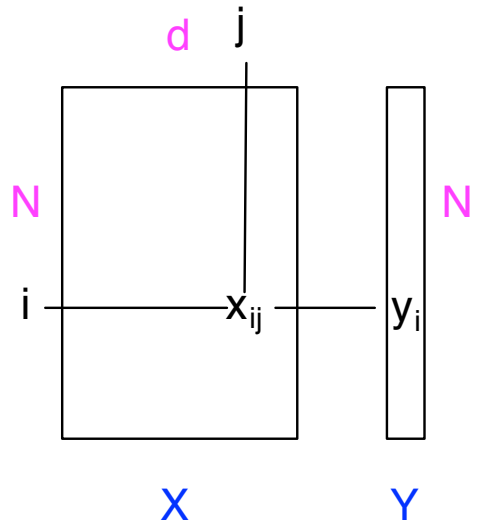


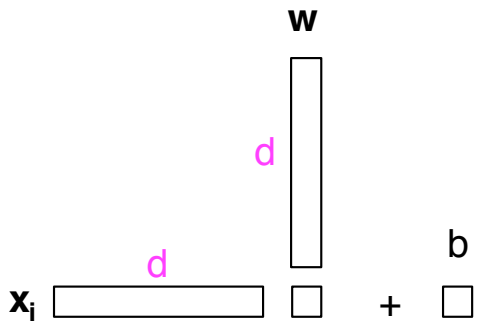
Dimension des éléments en présence

- Données : X, Y
- Modèle :
  $p(Y = 1|X = \mathbf{x}) = f(\mathbf{x}) = \frac{1}{1+\exp(-(\mathbf{x}\mathbf{w}+b))}$
- Bornes du modèle :
  - $\lim_{\mathbf{x}\mathbf{w}+b \to -\infty} f(\mathbf{x}) = 0$
  - $\lim_{\mathbf{x}\mathbf{w}+b \to \infty} f(\mathbf{x}) = 1$

Dimension des éléments en présence

- Données : X, Y
- Modèle :
  $p(Y = 1|X = \mathbf{x}) = f(\mathbf{x}) = \frac{1}{1+\exp(-(\mathbf{xw}+b))}$
- Bornes du modèle :
  - $\lim_{\mathbf{xw}+b \to -\infty} f(\mathbf{x}) = 0$
  - $\lim_{\mathbf{xw}+b \to \infty} f(\mathbf{x}) = 1$
  - Si : $\mathbf{xw} + b = 0 \Rightarrow f(\mathbf{x}) = 0.5$





Comment trouver les $\mathbf{w}^\star$?

Comment trouver les $\mathbf{w}^\star$?

$\Rightarrow$ **Par maximum de vraisemblance (conditionnelle) !**
Vraisemblance (conditionnelle) -indépendance entre échantillons-

$$L = \Pi_{i=1}^{N} p(Y = y_i | X = \mathbf{x}_i)$$

- Truc de Bernoulli :

$$p(Y = y_i | X = \mathbf{x}_i) = p(Y = 1 | X = \mathbf{x}_i)^{y_i} (1 - p(Y = 1 | X = \mathbf{x}_i))^{1 - y_i}$$

- Passage au log
- Remplacement des $p(Y = 1 | X = \mathbf{x})$ par des $f(\mathbf{x})$
- Nouvelle formulation :

$$\mathbf{w}^\star, b^\star = \arg\max_{\mathbf{w}, b} \sum_{i=1}^{N} [y_i \log(f(\mathbf{x}_i)) + (1 - y_i) \log(1 - f(\mathbf{x}_i))]$$

Résolution

Données : $D = (\mathbf{x}_1, y_1), \ldots, (\mathbf{x}_N, y_N)$

$$\mathbf{w}^\star, b^\star = \arg\max_{\mathbf{w},b} \sum_{i=1}^{N} [y_i \log(f(\mathbf{x}_i)) + (1 - y_i) \log(1 - f(\mathbf{x}_i))]$$

On remplace $f(x)$ par sa valeur et on développe le coût...

... [quelques lignes de calcul] ...

Résolution

Données : $D = (\mathbf{x}_1, y_1), \ldots, (\mathbf{x}_N, y_N)$

$$\mathbf{w}^\star, b^\star = \arg\max_{\mathbf{w},b} \sum_{i=1}^{N} [y_i \log(f(\mathbf{x}_i)) + (1 - y_i) \log(1 - f(\mathbf{x}_i))]$$

On remplace $f(x)$ par sa valeur et on développe le coût...

... [quelques lignes de calcul] ...

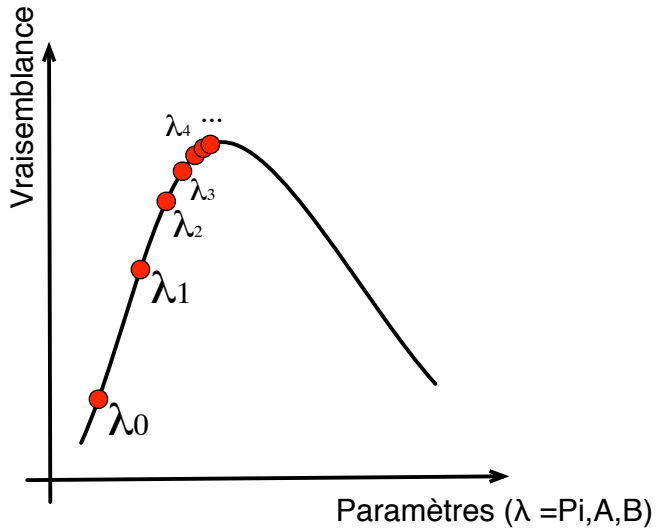
$$\frac{\partial}{\partial w_j} L_{\log} = \sum_{i=1}^{N} x_{ij} \left(y_i - \frac{1}{1 + \exp(-(\mathbf{w} \cdot \mathbf{x}_i + b))} \right)$$

$$\frac{\partial}{\partial b} L_{\log} = \sum_{i=1}^{N} \left(y_i - \frac{1}{1 + \exp(-(\mathbf{w} \cdot \mathbf{x}_i + b))} \right)$$

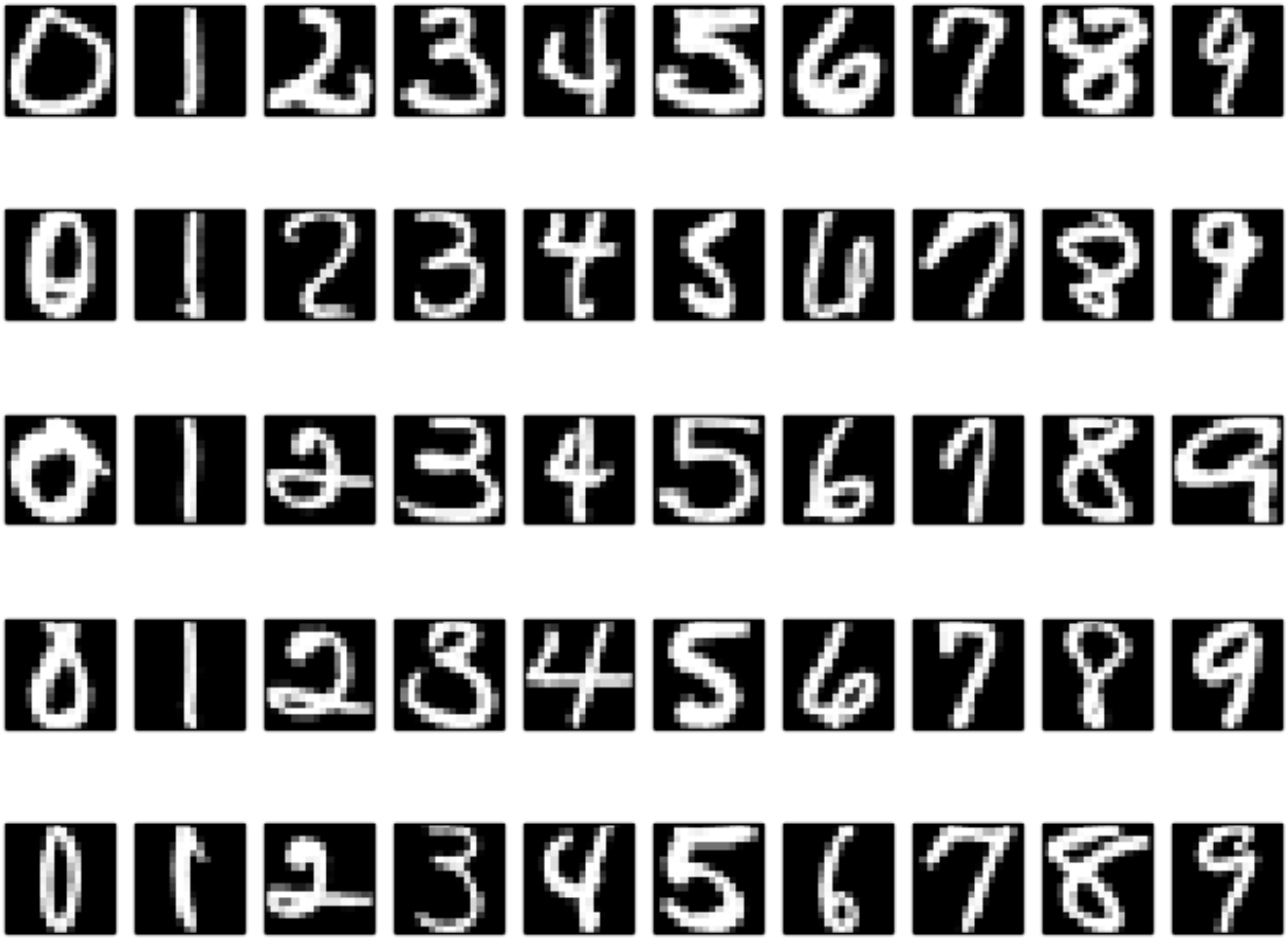
Résolution

- Annulation directe du gradient **impossible**
- $\Rightarrow$ Algorithme itératif :
  - Init des paramètres $\mathbf{w}_0, b_0$
  - Tant que convergence non atteinte
    - Calcul des : $\frac{\partial L_{\log}}{\partial b}$, $\frac{\partial L_{\log}}{\partial w_j}$
    - Mise à jour (montée de gradient) : $\theta^t = \theta^{t-1} + \epsilon \frac{\partial L_{\log}}{\partial \theta}$

Cas convexe :



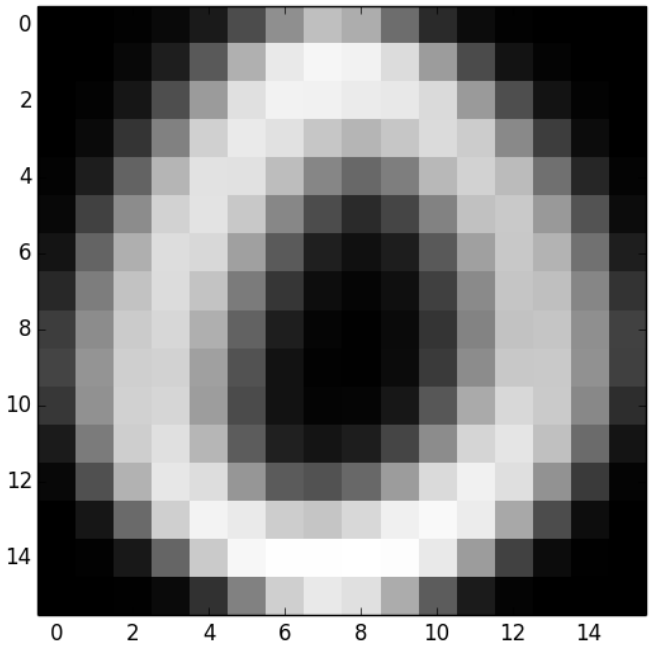
USPS : génératif *VS* discriminant



USPS : génératif *VS* discriminant

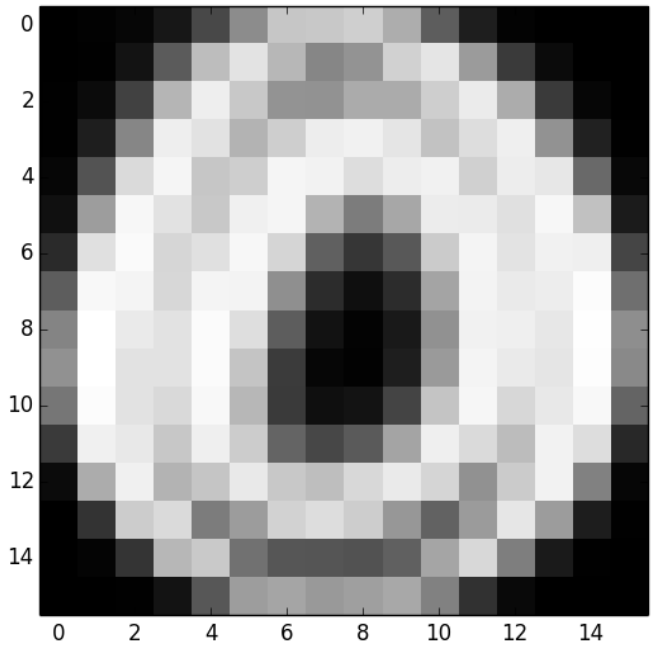
Modèle génératif gaussien : classe 0

Visualisation de la moyenne de la classe :



μ + reshape

Visualisation de la variance de la classe :

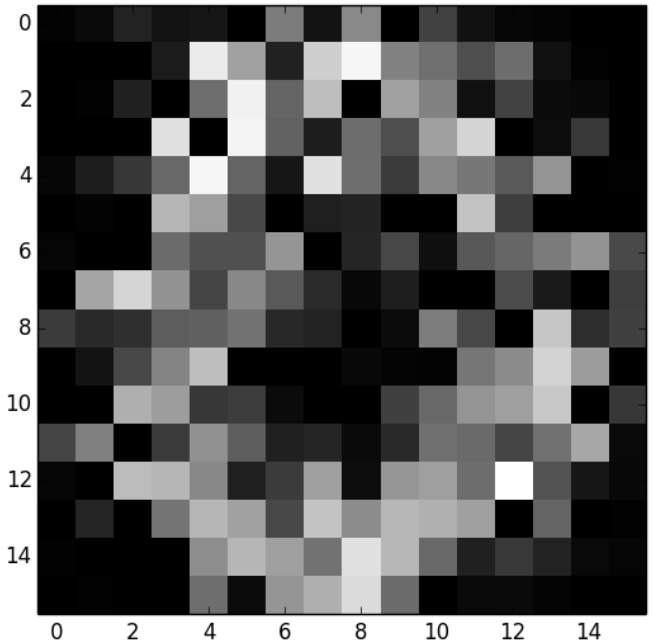


σ + reshape

USPS : génératif *VS* discriminant

Possibilité de générer un échantillon :

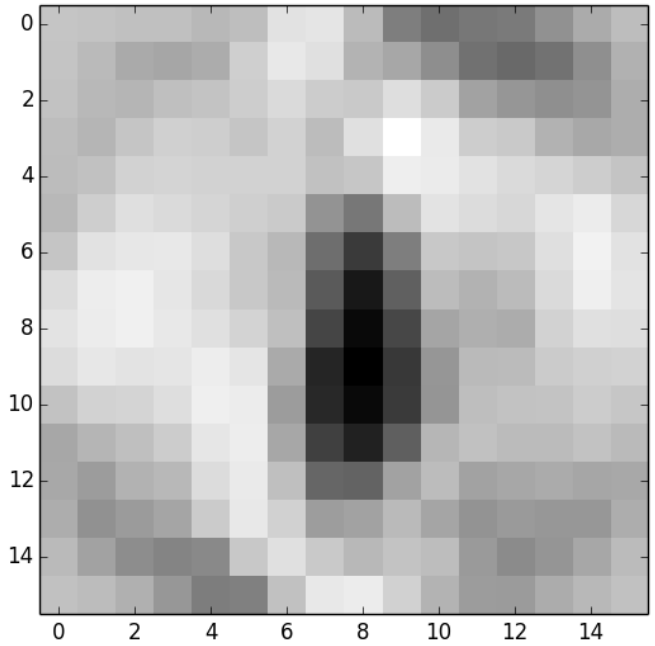
Tirage d'une valeur gaussienne pour chaque pixel...



Mais hypothèse d'indépendance des pixels $\Rightarrow$ qualité BOF

USPS : génératif *VS* discriminant

En régression logistique : classe 0 *VS* toutes les autres



Mise en évidence des zones qui ne sont utilisées **que** par les 0

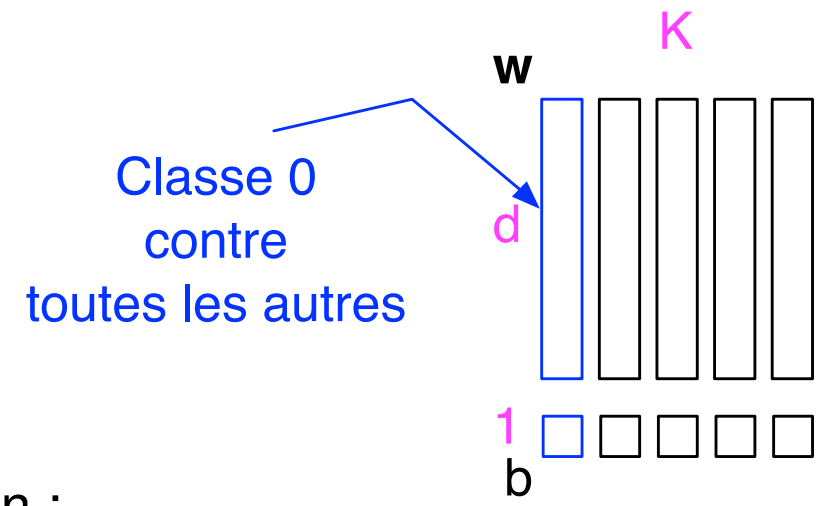
USPS : génératif *VS* discriminant

- Apprentissage : 7291 images
- Test : 2007 images

```
Naive Bayes (modèle de pixel gaussien)

Taux bonne classif. en apprentissage : 0.785
Taux bonne classif. en test : 0.739

Regression logistique

Taux bonne classif. en apprentissage : 0.943
Taux bonne classif. en test : 0.903
```

Comment passer au multi-classes ?

un contre tous (*one against all*) :
K classes $\Rightarrow$ K classifieurs appris séparément sur **toutes les données**



- $f(\mathbf{x}) \Rightarrow f_k(\mathbf{x})$ et critère de décision :

$$k^\star = \arg\max_k f_k(\mathbf{x})$$

Quelle classe veut **le plus** l'échantillon **x** ?

- Critères de rejet :
  - pas de $f_k(\mathbf{x}) > 0.5$
  - plusieurs $f_k(\mathbf{x}) > 0.5$

Système de recommandation

Nicolas Thome
Transparents de Vincent Guigue
nicolas.thome@isir.upmc.fr

LIP6 / ISIR – Sorbonne Université, France

On considère un examen, pour lequel un étudiant s peut répondre à la question q correctement, ce qui est noté $x_{qs} = 1$ ou incorrectement, $x_{qs} = 0$. On suppose que la chance de succès dépend de la capacité de l'étudiant α_s et de la difficulté de la question δ_q. On postule le modèle de réponse suivant :

$$p(x_{qs} = 1|\alpha_s, \delta_q) = \sigma(\alpha_s - \delta_q), \quad \text{avec : } \sigma(x) = \frac{1}{1 + \exp(-x)}$$

Question

$$p(x_{qs} = 1|\alpha_s, \delta_q) = \sigma(\alpha_s - \delta_q), \quad \text{avec : } \sigma(x) = \frac{1}{1 + \exp(-x)}$$

1. Etudier rapidement la fonction σ et conclure qu'elle permet effectivement de modéliser une probabilité.
2. A quelle condition un étudiant s a-t-il autant de chance répondre correctement que de se tromper à une question q ?
3. Quelle loi permet de modéliser la variable x_{qs} ? Montrer que :

$$p(x_{qs}|\alpha_s, \delta_q) = \sigma(\alpha_s - \delta_q)^{x_{qs}}(1 - \sigma(\alpha_s - \delta_q))^{(1-x_{qs})}$$

où x_{qs} peut prendre les valeurs 0 ou 1.

Du cas jouet au cas réel

- Limites du modèle proposé :
  un exercice est simple ou dur dans l'absolu, un étudiant est fort ou faible toujours en absolu...
- Trouver une approche plus riche :

Du cas jouet au cas réel

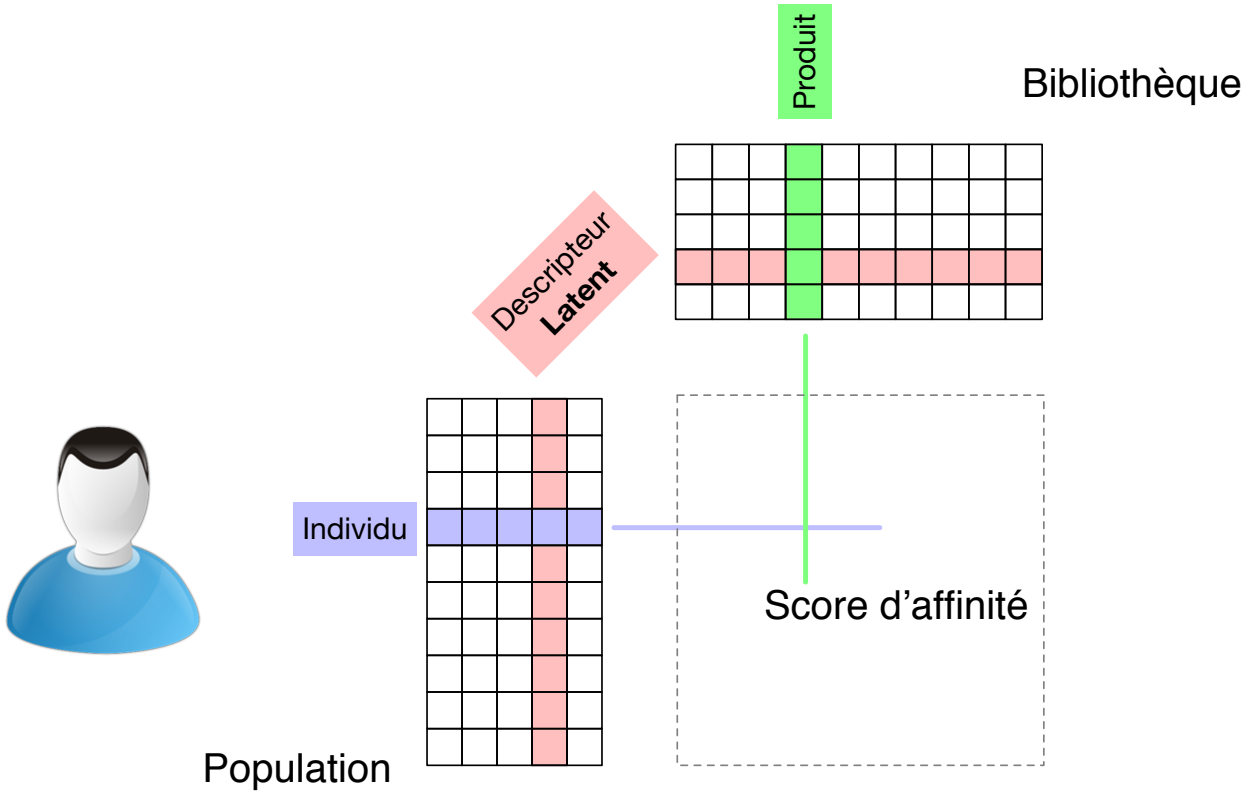
- Limites du modèle proposé :
  un exercice est simple ou dur dans l'absolu, un étudiant est fort ou faible toujours en absolu...
- Trouver une approche plus riche :

$$\mathbf{s}, \mathbf{q} \in \mathbb{R}^d, \qquad p(x_{qs} = 1 | \mathbf{s}, \mathbf{q}) = \frac{1}{1 + \exp(-\mathbf{s} \cdot \mathbf{q})}$$

  Travail dans un espace vectoriel :
  - un match sur une dimension $\Rightarrow \mathbf{s} \cdot \mathbf{q} \nearrow$
  - vecteurs orthogonaux $\mathbf{s} = [0, 1, 0], \mathbf{q} = [1, 0, 1] \Rightarrow \mathbf{s} \cdot \mathbf{q} = 0$

Du cas jouet au cas réel

- Limites du modèle proposé :
  un exercice est simple ou dur dans l'absolu, un étudiant est fort ou faible toujours en absolu...
- Trouver une approche plus riche :



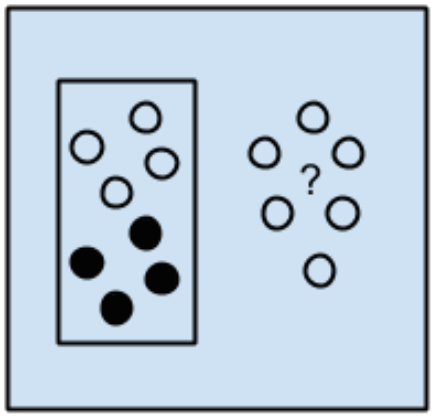
MAPSI et le machine learning

Nicolas Thome
Transparents de Vincent Guigue
nicolas.thome@isir.upmc.fr

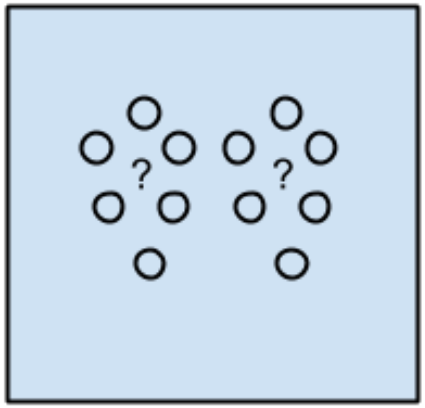
LIP6 / ISIR – Sorbonne Université, France

Différents cadres de machine learning

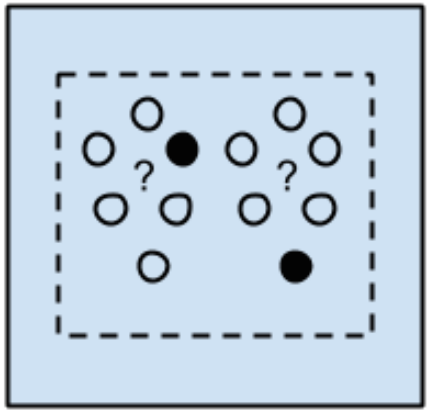
Supervisé | **Non-**supervisé | **Semi-**supervisé | Renforcement



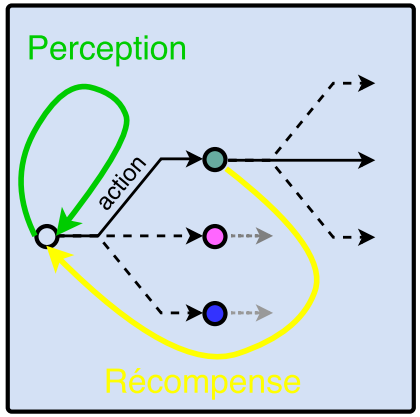
Supervised Learning Algorithms



Unsupervised Learning Algorithms



Semi-supervised Learning Algorithms

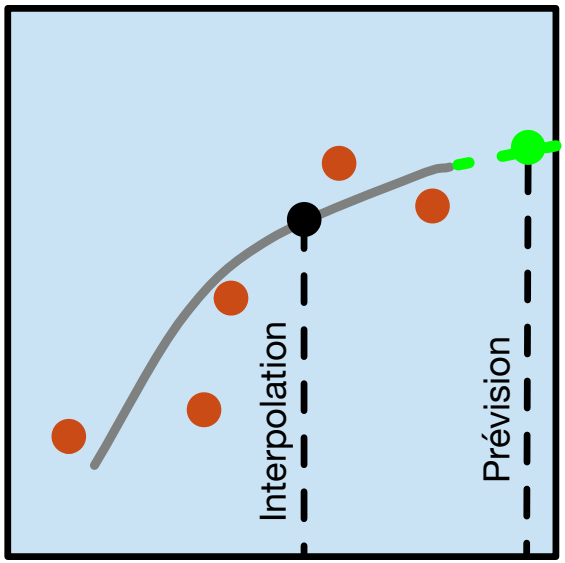


Jason Brownlee

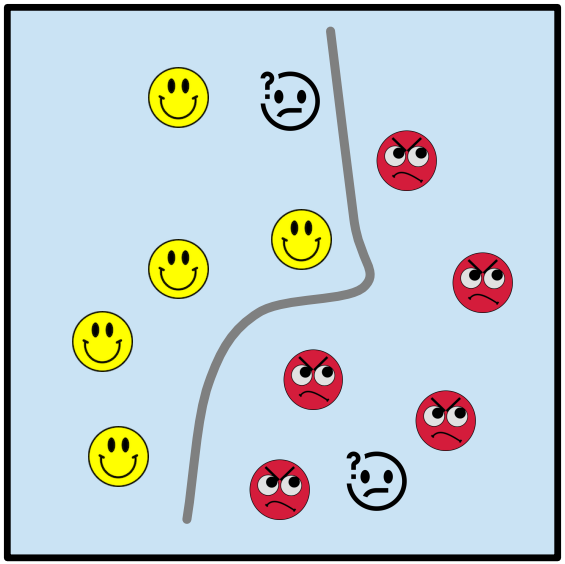
- Différents algorithmes... ... et différentes évaluations
- Différentes **données**, différents **coûts**...
  Et une nouvelle donne avec *Amazon Mechanical Turk*

Grande familles de problématiques

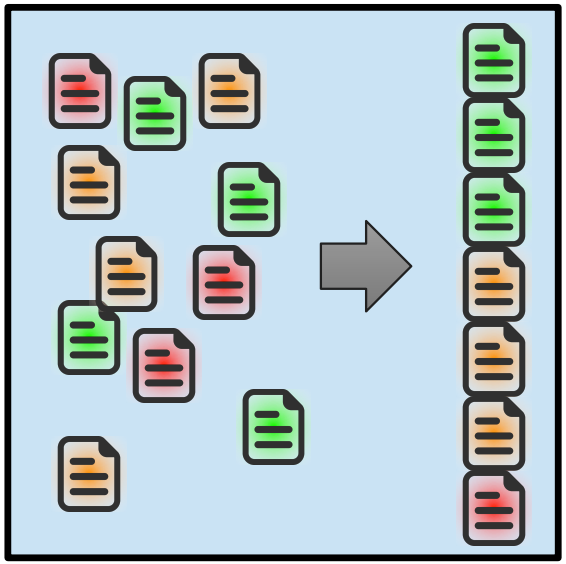
Régression



Classification



Ordonnancement



Les familles d'algorithmes (1/3)

Modéles génératifs

apprentissage Bayesien

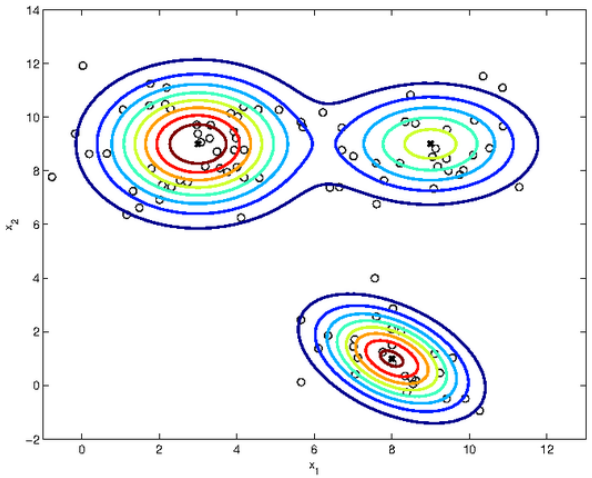
1. Choix d'un modéle paramétrique

   e.g. mixture de 3 Gaussiennes

2. Apprentissage des paramétres

   maximum de vraisemblance

3. Exploitation = inférence



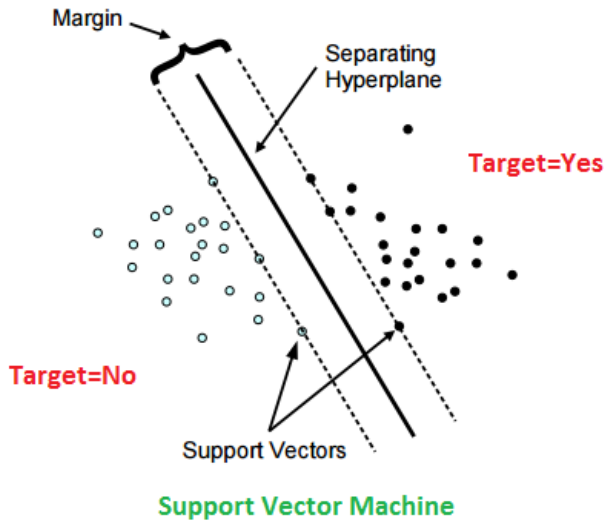
e.g. Mixtures, Naive Bayes, MM, HMM...
Usages : extraction thématique, classification de spam

Modélisation discriminante (classification)

1. Apprentissage d'une frontière

   i.e. chercher les différences dans les caractéristiques

2. Classification de nouveaux points

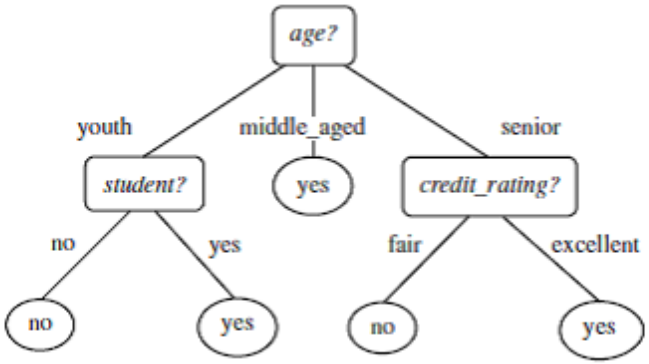


e.g. Perceptron, SVM, Régression logistique,...
Usages : classification de signaux, de textes, ...

Les familles d'algorithmes (2/3)

Arbre de décision

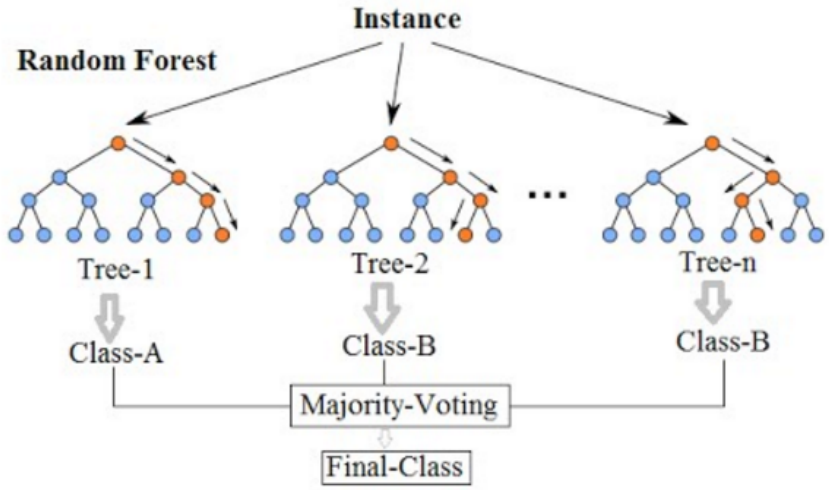
1. Sélectionner un caractéristique
2. Couper
3. Décider



e.g. C4.5
Usages : besoin d'une décision expliquée

Approches ensemblistes

1. Multiplier les classifieurs
2. Fusionner les décisions

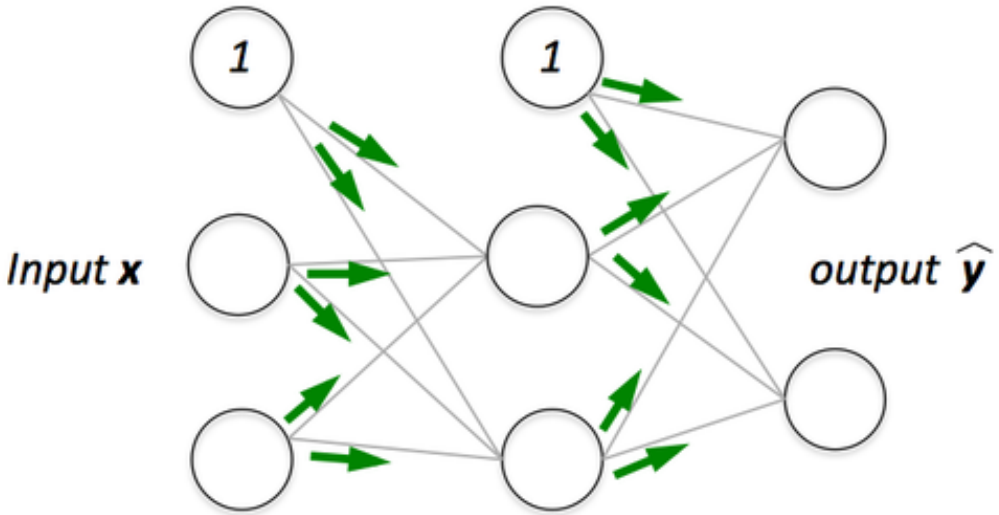


e.g. Random Forest, Boosting, Bagging
Usages : classification robuste, parallélisable

Les familles d'algorithmes (3/3)

Les réseaux de neurones

1. Au départ, un **opérateur paramétrique complexe**...
   Et un algorithme d'apprentissage efficace.
2. une chaine de traitements capable
   d'**extraire des caractéristiques pertinentes automatiquement**

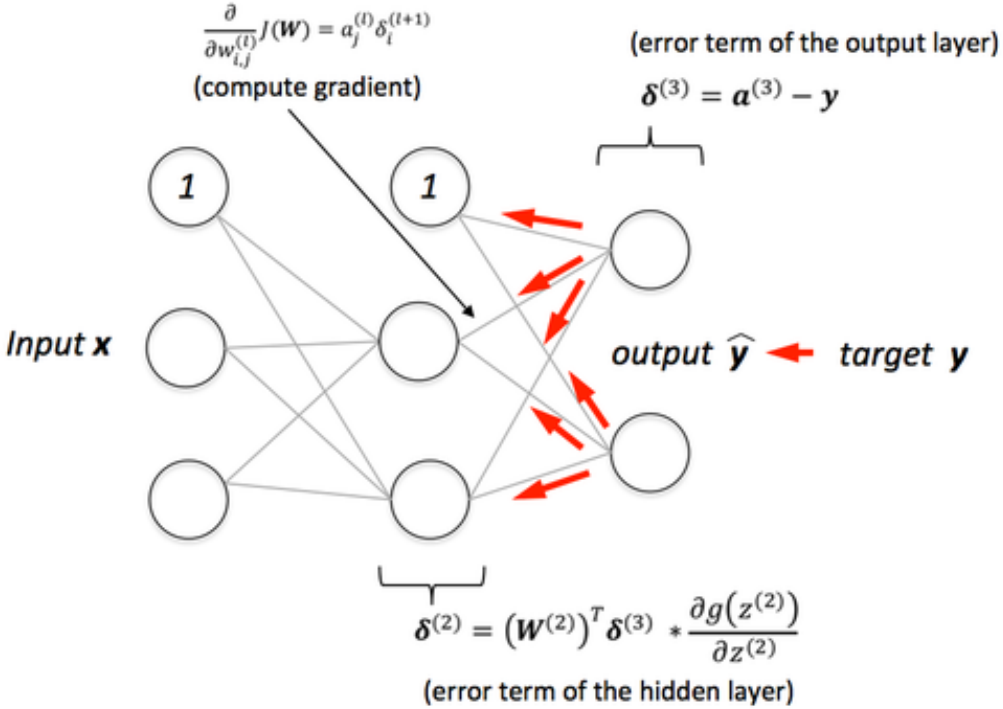


Sebastian Raschka

Les familles d'algorithmes (3/3)

Les réseaux de neurones

1. Au départ, un **opérateur paramétrique complexe**...
   Et un algorithme d'apprentissage efficace.
2. une chaine de traitements capable
   d'**extraire des caractéristiques pertinentes automatiquement**



Sebastian Raschka

Chaine de traitements

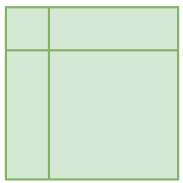
Toutes les étapes comptent...

Surtout les premières pour les performances !

Choisir & optimiser un modèle n'est qu'une partie du travail...

Raw data

Scrapping, reading, data bases



Formated/cleaned data

Relevant feature selection/building

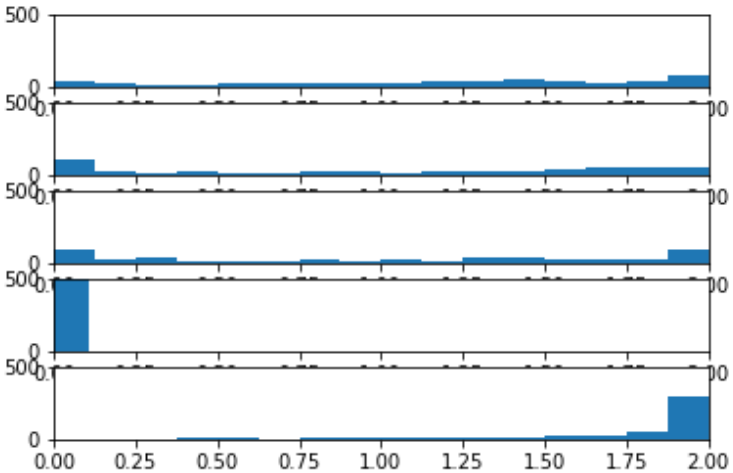
Machine learning

+ perf. evaluation

⇒ Valoriser vos compétences d'informaticien !

[MAPSI] Analyses préliminaires des données

- Histogramme de répartition des classes
  - Critique pour la définition des *a priori*
- Histogramme de d'analyse des valeurs d'une variable
  - Comprendre les données
  - Choisir un modèle pour coller à cette variable en fonction de l'Histogramme
  - Faire marcher les arbres de décision –plus tard :)–



Distribution de différents pixels dans une base USPS

[MAPSI] Identifier des classes de problèmes

- Supervisé/non-supervisé
- Complétion de données manquante
- Classification / régression
- Compléter des données manquantes

(est-ce une classe de problème ?)

Exemple :

- Prédire les ventes de parfum lors des prochaines soldes
- Reconnaitre qu'une image contient un chat

[MAPSI] Optimiser un modèle bayesien

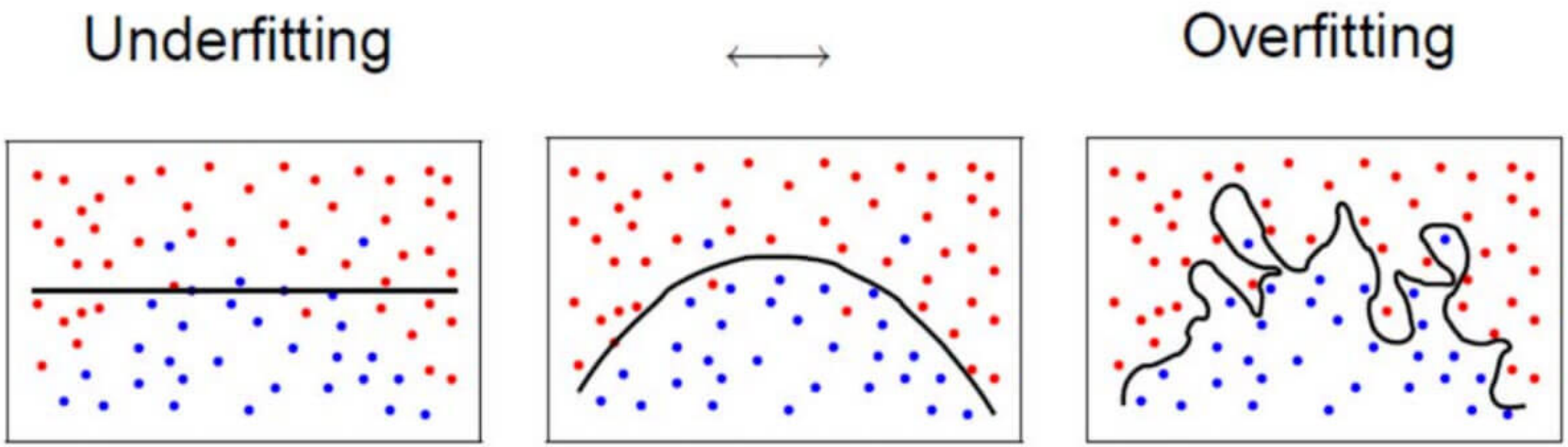
- Choisir une ou plusieurs loi de proba. pour les données
- Formuler la vraisemblance
- Optimiser la vraisemblance
  - Trouver les paramètres optimaux des lois usuelles sur wikipedia
  - Sinon, annuler la dérivée de la vraisemblance
  - Sinon, maximiser itérativement la vraisemblance
- Traiter de nouvelles données en inférence (les faire passer dans le modèle optimisé)

[MAPSI] Optimiser un modèle basé sur une fonction de coût

- Choisir une représentation des données, un modèle
- Choisir une fonction de cout
- Optimiser le cout
  - Annuler la dérivée du cout
  - Sinon, minimiser itérativement le cout
- Traiter de nouvelles données en inférence (les faire passer dans le modèle optimisé)

[MAPSI] Evaluation & sur-apprentissage

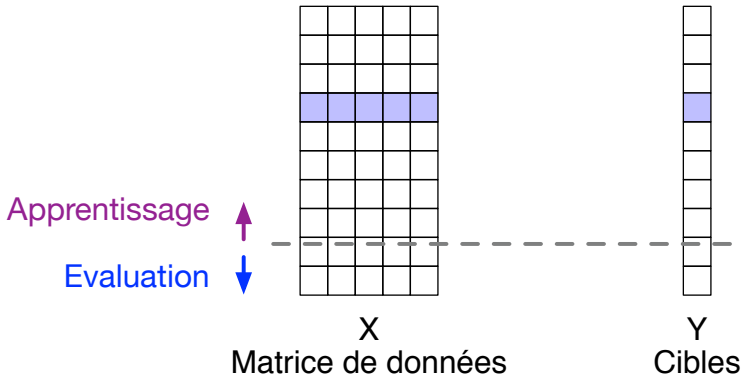
- **Apprendre** un modèle est aussi important que de **l'évaluer**
- **Apprendre** et **évaluer** sur les mêmes données est aberrant



Tom Robertshaw

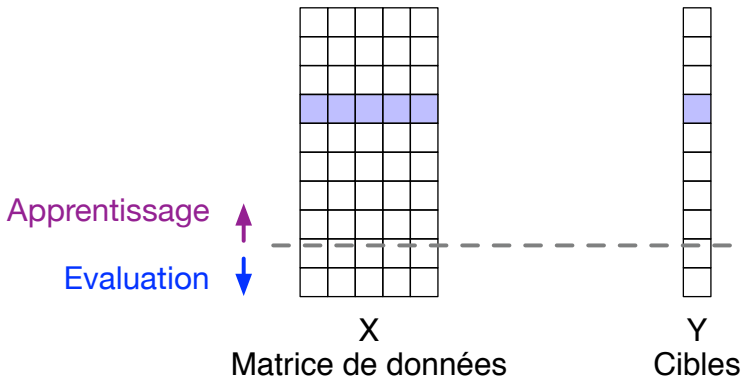
- **Apprendre** un modèle est aussi important que de **l'évaluer**
- **Apprendre** et **évaluer** sur les mêmes données est aberrant

Dilemme de répartition des données :



- **Apprendre** un modèle est aussi important que de **l'évaluer**
- **Apprendre** et **évaluer** sur les mêmes données est aberrant

Dilemme de répartition des données :

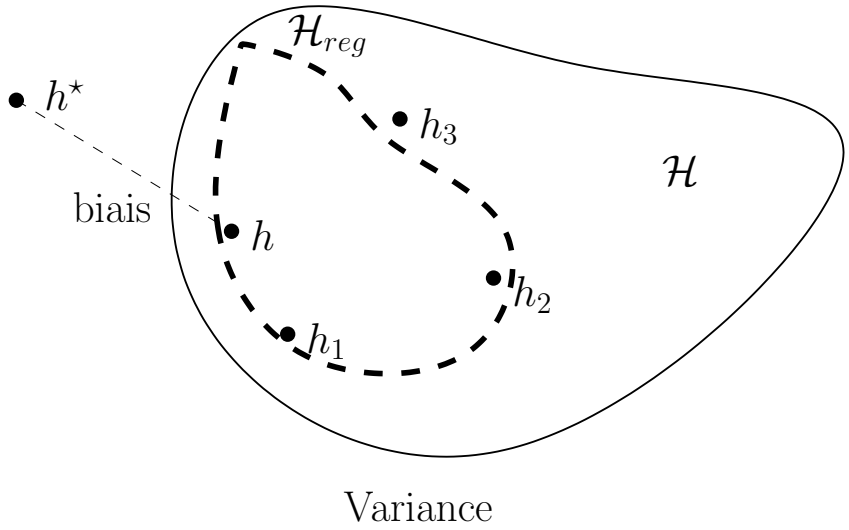


Solution = validation croisée

Golden Helix

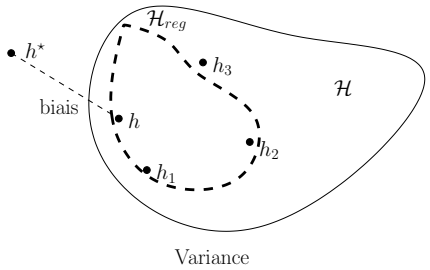
Mais pourquoi aller plus loin ? ? ?

Une proposition d'analyse avec le dilemme biais-variance



- Variance = taille de l'espace de recherche du modèle
  - Représentation des données + complexité du modèle (paramètres & hyper-paramètres)
- Biais = distance entre le meilleur modèle et le modèle retenu

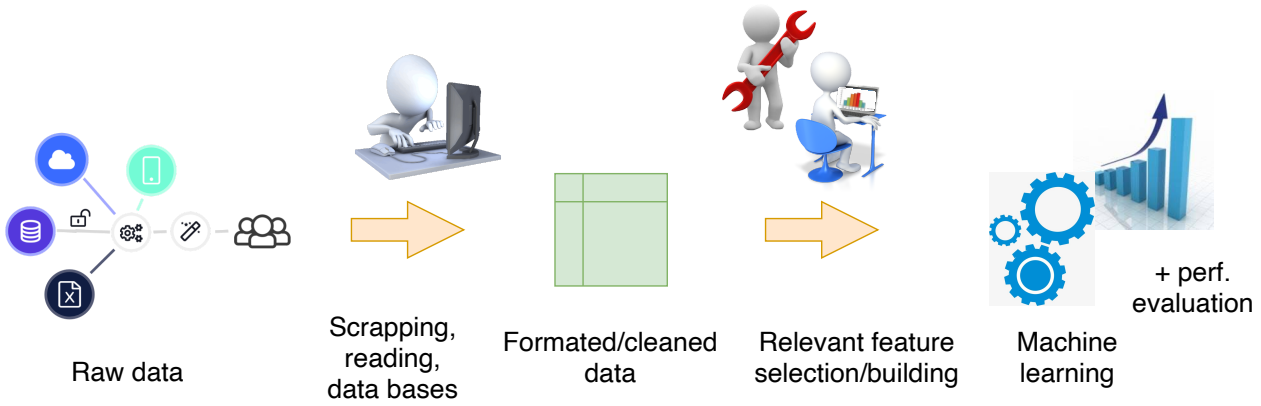
Différents paradigmes au fil des époques (1/4)



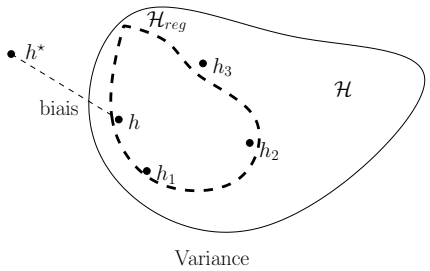
Exploiter seulement des informations pertinentes proposées/construites par un expert

- Efficace très vite
- Peu de bruit = les modèles simples marchent bien

$\Rightarrow$ Approches très rentables... Que vous êtes déjà en mesure d'implémenter !



Différents paradigmes au fil des époques (2/4)



Générer [automatiquement] plein de caractéristique... Puis sélectionner celles qui sont utiles

A priori Critères de sélection/transformation de variables

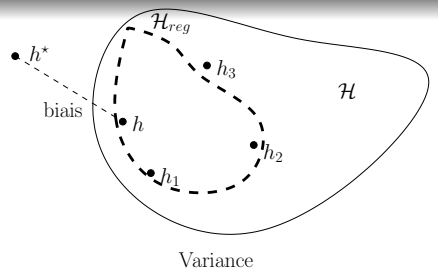
- ACP
- Sélection de variables sur critère de séparabilité des données

On Line Apprendre ce qui est utile ou pas = **régularisation** Soit des données $X \in \mathbb{R}^{N \times d}$ avec d très grand et une fonction de décision/régression linéaire $f(\mathbf{x}) = \mathbf{x} \cdot \mathbf{w}$

$$\arg\min_{\mathbf{w}} \mathcal{C} + \lambda\Omega(\mathbf{w}), \Omega(\mathbf{w}) = \begin{cases} \sum_j w_j^2 & \text{régul. } L_2 \\ \sum_j |w_j| & \text{régul. } L_1 \end{cases}$$

$\Rightarrow \lambda$ devient un hyper-paramètre critique !

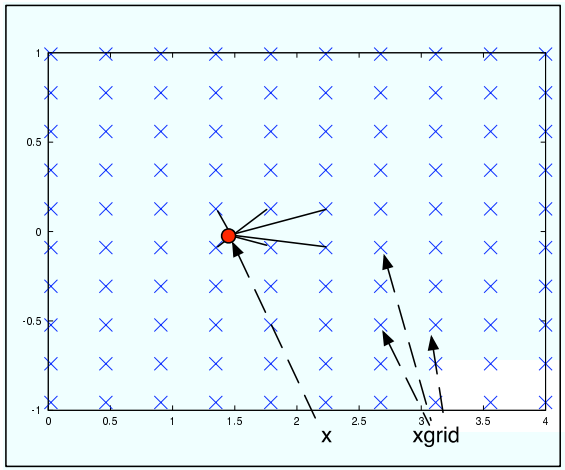
Différents paradigmes au fil des époques (3/4)

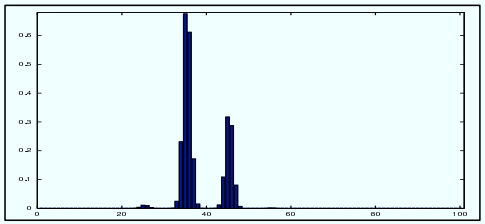


Les méthodes à noyaux et les espaces de représentation universel

- Moins travailler sur les descripteurs = moins besoin d'expertise externe.
- Avoir des fonctions à la fois simple à apprendre [formulation convexe, régularisation] mais capable de traiter des cas complexe.

$$f(\mathbf{x}) = \sum_i w_i k(\mathbf{x}, \mathbf{x}_i), \text{où } k \text{ est une fonction de similarité}$$

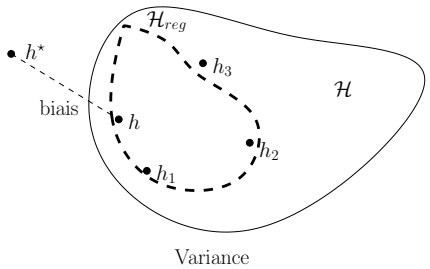




Représentation en histogramme des similarités gaussiennes entre un point (rond rouge) et tous les points de la grille

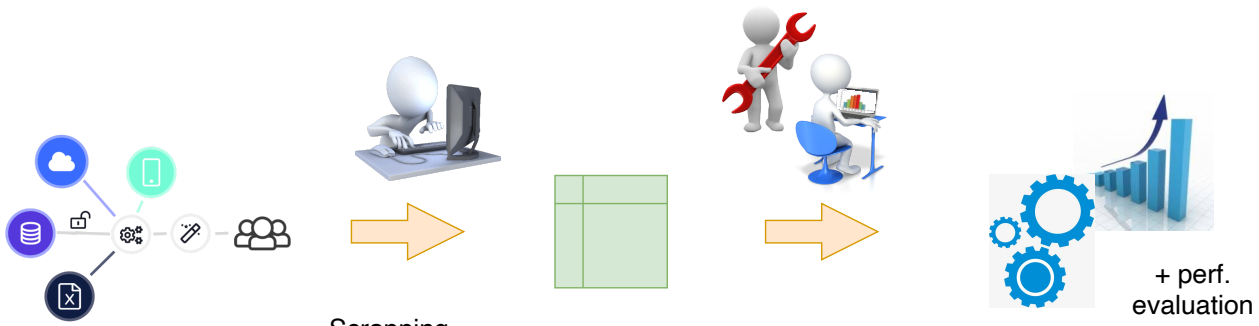
$$\phi(\mathbf{x})_j = \exp(-\frac{\|\mathbf{x} - \mathbf{xgrid_j}\|^2}{2\sigma^2})$$

Différents paradigmes au fil des époques (4/4)



Créer des opérateurs super-complexes... Mais efficaces

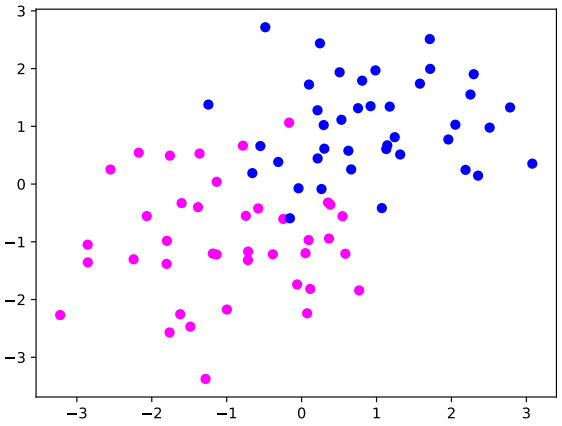
- Réseaux de neurones
  - La promesse d'une extraction de caractéristiques automatiques
  - L'apprentissage de représentation et la sémantique
- XGBoost



Curse of dimensionality

A classical toy example to illustrate the curse of dimensionality :

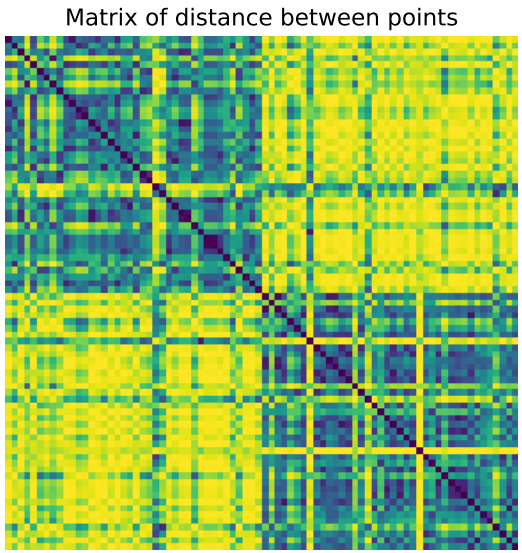
Original dataset :



Matrix view

Matrix of raw points

Distance matrix

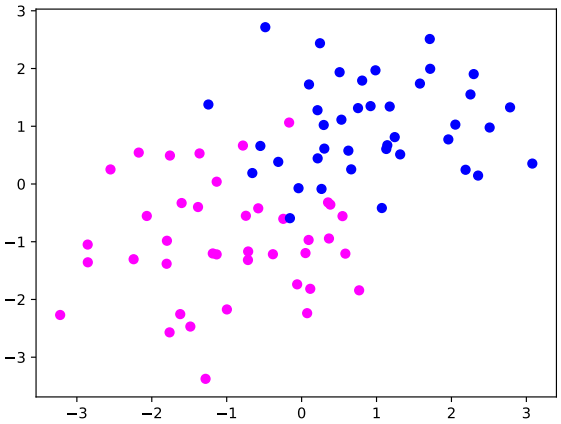


Easy problem / classes are clearly separated

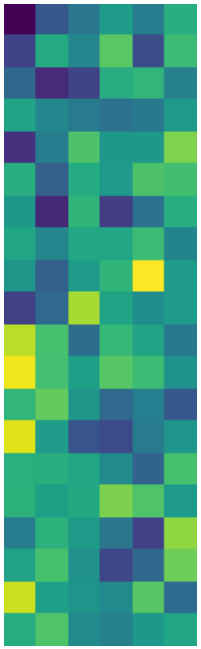
Curse of dimensionality

A classical toy example to illustrate the curse of dimensionality :

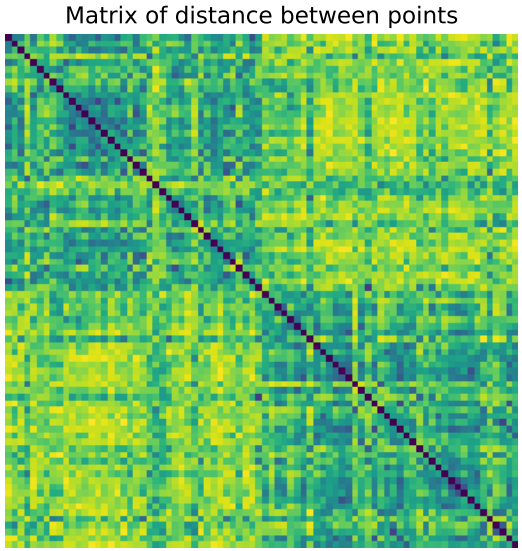
Original dataset :



Matrix view



Distance matrix

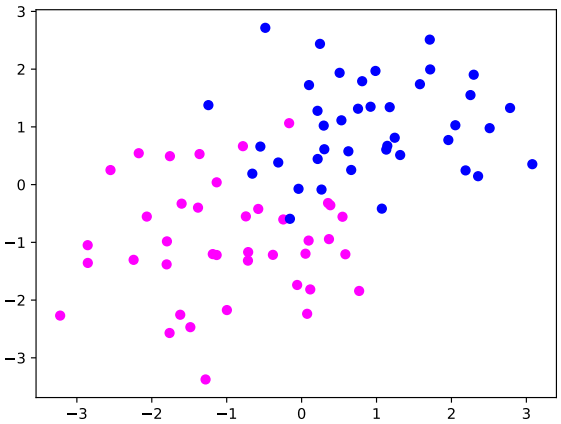


Adding some noisy dimensions in the dataset

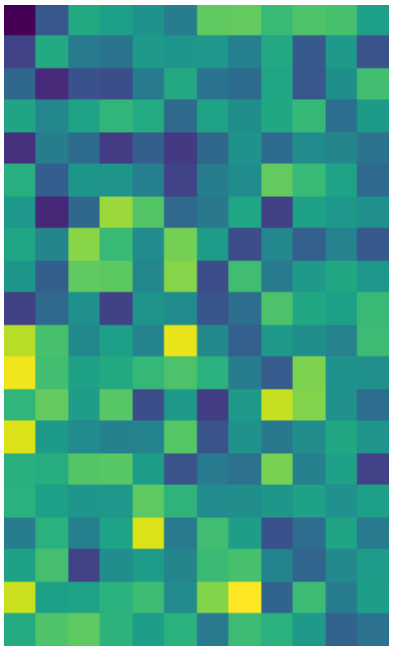
Curse of dimensionality

A classical toy example to illustrate the curse of dimensionality :

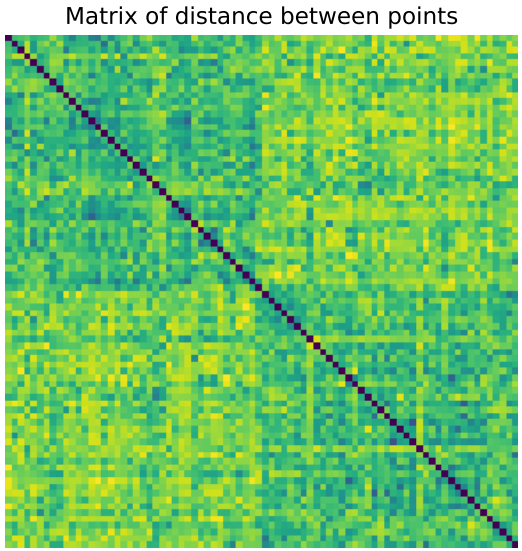
Original dataset :



Matrix view



Distance matrix

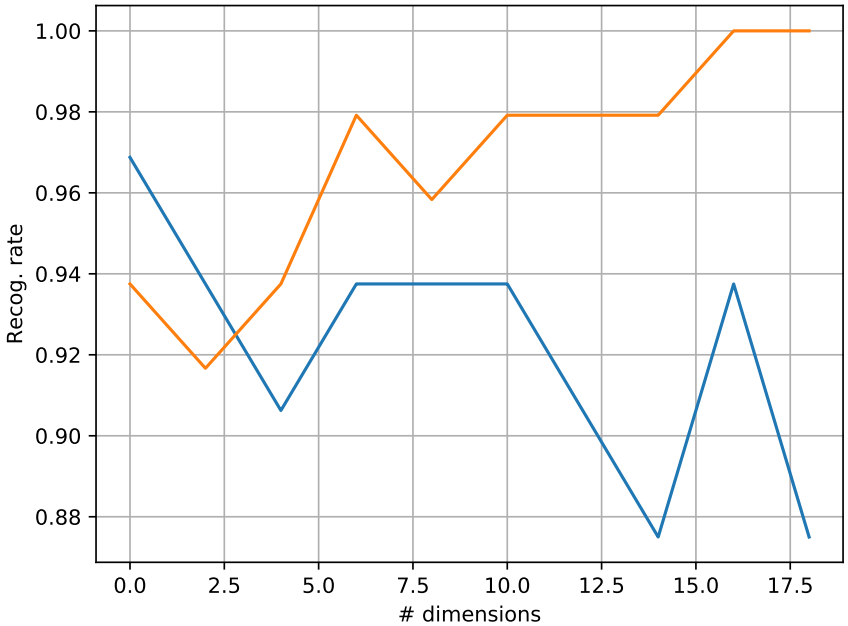


Adding **more** noisy dimensions in the dataset
$\Rightarrow$ Euclidian distance is very sensitive to the dimensionality issue

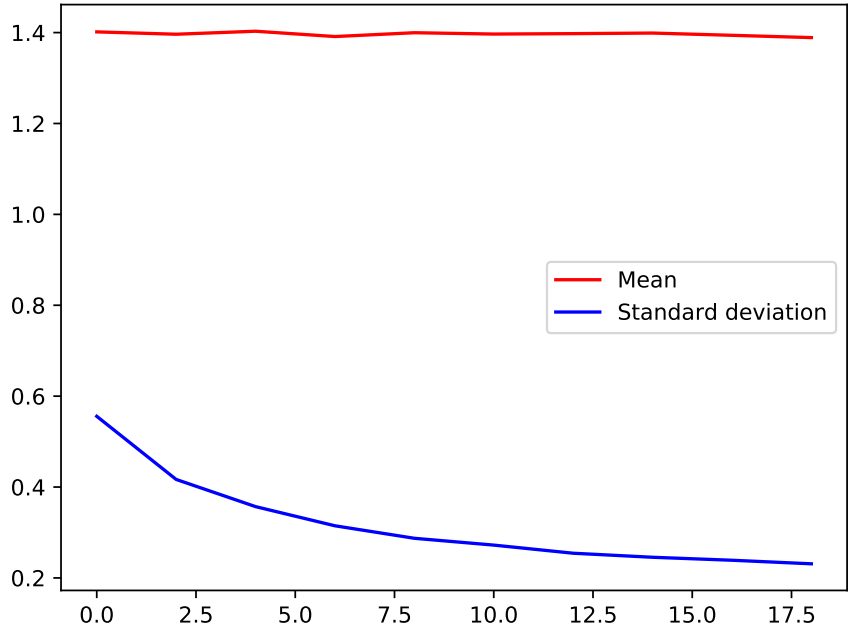
Curse of dimensionality

A classical toy example to illustrate the curse of dimensionality :

Basic classifier on those datasets



Distances between points in the dataset



$\Rightarrow$ Learn accuracy $\nearrow$, test accuracy $\searrow$ = **overfitting**

$\Rightarrow$ All points tend to lay on an hypersphere (they become equidistant)