PFE

Khaled MEDJKOUH
Davidson Lova RAZAFINDRAKOTO

12 avril 2023

Table des matières

1 Introduction **3**
1.1 Réseau de neurones *feedforward* . . . 3
1.2 Source d'incertitudes dans un réseaux de neurones . . . 4
1.2.1 Acquisition des données . . . 4
1.2.2 Structure du modèle . . . 4
1.3 Prédiction . . . 5
1.3.1 Incertitude aléatoire . . . 5
1.3.2 Incertitude épistemique . . . 5

2 Réseau de neurones bayésiens (BNN) **6**
2.1 Méthodes variationelles . . . 6
2.2 Méthode de Laplace . . . 6
2.3 Méthodes par échantillonage ou Monte Carlo . . . 7

3 Algorithme BNN-ABC-SS **8**
3.1 ABC (*Approximate Bayesian Computation*) . . . 8
3.2 SS (*Subset Simulation*) . . . 8
3.3 Pseudo - Code . . . 9

4 Réalisation **11**
4.1 Cosinus perturbé . . . 11
4.2 Sinus perturbé . . . 12
4.3 Maybe more . . . 15

5 Conclusion et perspective **16**

1 Introduction

Aujourd'hui, les applications des modèles/algorithmes d'apprentissage machine à base de réseaux de neurones arrivent à accomplir des tâches variées et de plus en plus complexes. Ce sont des modèles paramètriques souvent avec un nombre très importants de paramètres à ajuster pendant la période d'entrainement. En fonction des conditions de l'entrainement du modèles (données d'entrainement, choix d'hypperamètres), ces paramètres ne seront pas les même et naturelement la sortie du modèle sera affecter par cette variabilité. Comme la fonction du modèle est de sortir la bonne sortie quand on introduit une entrée, il y a un besoin de savoir controler cette variabilité pour avoir une confiance au résultat du modèle. Ce travail va tenter de reproduire un des méthodes qui tempte à controler cette variabilité, proposée dans cette article [3], l'algorithme BNN-ABC-SS.

1.1 Réseau de neurones *feedforward*

Un réseaux des neurones *feedforward* est un fonction non linéaire paramétrée. La fonction prends au niveau de sa couche d'entrée un vecteur d'entrée $x \in \mathcal{X}$, le transforme à travers les couches cachées pour enfin sortir un vecteur de sortie $y \in \mathcal{Y}$ à la couche de sortie.

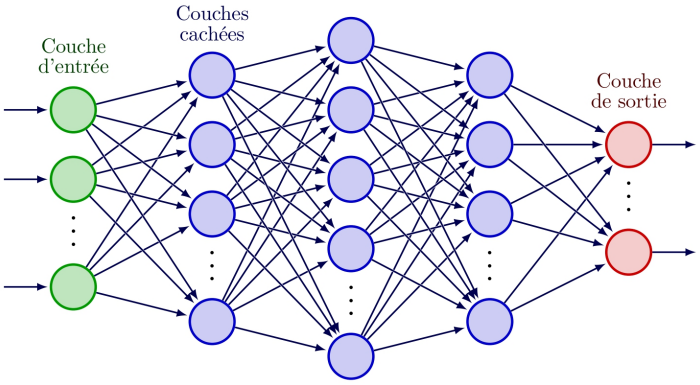


FIGURE 1 – Schéma de réseaux *feedforward* [1]

Pour passer d'une couche à une autre chaque neurones $a_s^{(j+1)}$ de la couche d'arrivée reçoit une contribution des neurones $\{a_i^{(j)}\}_{i=1}^n$ de la couche de départ pondérés par les poids $\{w_{i,s}^{(j)}\}_{i=1}^n$. Cette contribution sera biaisé (avec $b_s^{(j)}$) ensuite transformé par une fonction qu'on appelle *fonction d'activation* noté σ.

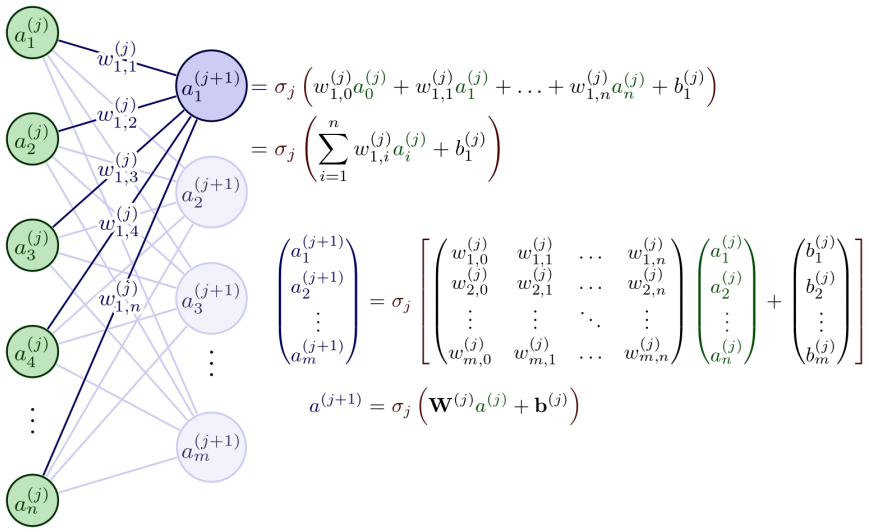


FIGURE 2 – Passe d'une couche à la prochaine [1]

Pour la couche de sortie, en fonction des applications on choisit une fonction d'activation différente de ceux précédents (par exemple l'identité pour la regression et softmax pour la classification).

1.2 Source d'incertitudes dans un réseaux de neurones

On modélise le réseaux de neurones *feedforward* comme la fonction non linéaire

$$f : (x, \theta) \in \mathcal{X} \times \Theta \mapsto f(x, \theta) \in \mathcal{Y}$$

où

— $\mathcal{X} \subset \mathbb{R}^{n_e}$, l'espace des variables d'entrées

— $\mathcal{Y} \subset \mathbb{R}^{n_s}$, l'espace des variables de sorties

— $\Theta \subset \mathbb{R}^{n_p}$, l'espace des paramètres

On se donne maintenant une base de données d'entrainement $D = \{(x_i, y_i)\}_{i=1}^{N} \in (\mathcal{X} \times \mathcal{Y})^N$.

1.2.1 Acquisition des données

Si on prend comme données d'entrées x une mesure d'une quantité réel $\tilde{x}$.

Il y a une variabilité sur la mesure en fonction des circonstances et conditions $\omega \in \Omega$ dans lequel la mesure a été effectué en plus de la précision de l'apareil de mesure.

La sortie y peut aussi subir des erreurs de labelisation (pour le cas d'une tâche de classification) ou aussi de mesure si c'est une quantité mesuré ou issue d'une quantité mesuré.

En somme on a une incertitude sur l'entrée $x|\omega \sim p_{x|\omega}$ et $y|\omega \sim p_{y|\omega}$.

S'ajoute à ça, l'incertitude sur x qui peut se propager sur le y.

1.2.2 Structure du modèle

Les paramètres θ et donc l'espace Θ est variable en fonction du choix de model s.

On a $\theta|D, s \sim p_{\theta|D,s}$

1.3 Prédiction

La prédiction faite à partir d'un réseau entrainé subi alors les incertitudes venant de ces sources. La distribution de la prédiction y^* sachant une entrée x^* est données par

$$p(y^*|x^*, D) = \int_\Theta \underbrace{p(y^*|x^*, \theta)}_{\text{Données}} \underbrace{p(\theta|D)}_{\text{Modèle}} d\theta$$

1.3.1 Incertitude aléatoire

L'incertitude dite aléatoire est dus à la variabilité innée au données d'entrainement du modèle. Elle affecte la partie $p(y^*|x^*, \theta)$ de la tâche de prédiction.

1.3.2 Incertitude épistemique

L'incertitude epsitemique qffecte la partie $p(\theta|D)$ de la tâche de prédiction, elle due :
- à la compléxité du modèle,
- aux erreurs durant la phase d'entrainement,
- à la manque d'information à cause de données manquantes ou la capacité de représentation des donnés d'entrainement.

2 Réseau de neurones bayésiens (BNN)

Les réseaux de neurones bayésiens sont des réseaux de neurones dont les paramètres ($\theta = (w, b)$) sont, non pas des quantités déterministes (comme dans le cas d'un réseau de normales) mais des distributions de probabilité.

A l'initialisation, les paramètres suivent une loi a priori $p(\theta)$, et l'entrainement consiste à évaluer l'a posteriori de cette loi conditionnée aux données d'entrainement $p(\theta|D)$.

Cette méthode permet de tenir compte de l'incertitude sur le modèle utilisé avec une structure donnée, car ici, il s'agit d'évaluer une famille de modèle au lieu d'un seul.

Cependant, à cause de la taille et de la complexité de ces modèles on ne dispose pas, dans le cas générale, d'une formule analytique pour calculer cette distribution a posteriori. Des méthodes numériques ont été développé pour calculer une approximation de cette distribution a posteriori.

Parmis ces méthodes on trouve :

— Méthodes variationelle
— Méthodes par échantillonage ou Monte Carlo (qu'on va voir dans la suite)
— Méthodes de Laplace

2.1 Méthodes variationelles

Ici on approche $p(\theta|D)$ par une famille de distribution paramétrique $\{q^\gamma(\theta)\}_\gamma$ (souvent des gaussiennes). Le but est de choisir γ qui rapproche $q^\gamma(\theta)$ le plus de $p(\theta|D)$ au sens de la divergence de Kullback-Leibler :

$$KL(q||p) = \mathbb{E}_q\left[\log \frac{q^\gamma(\theta)}{p(\theta|D)}\right]$$

Comme on ne connait pas $p(\theta|D)$, on utilise l'ELBO (*evidence lower bound*) qui est égal à la divergence à une constante paramètres

$$L = \mathbb{E}_q\left[\log \frac{p(y|D,\theta)}{q^\gamma(\theta)}\right]$$

(on a en effet $KL(q||p) = -L + \log p(y|D)$)

On résout ici un problème d'optimisation.

2.2 Méthode de Laplace

$\hat{\theta}$ l'estimateur de maximum d'a priori.

$$\log p(\theta|D) \approx \log p(\hat{\theta}|D) + \frac{1}{2}(\theta - \hat{\theta})^T(H + \tau I)(\theta - \hat{\theta})$$

$$p(\theta|D) \sim \mathcal{N}(\hat{\theta}, (H + \tau I)^{-1})$$

2.3 Méthodes par échantillonage ou Monte Carlo

La formule de Bayes nous donne

$$p(\theta|D) = \frac{p(D|\theta)}{p(D)} p(\theta)$$

— $p(D|\theta)$ la vraissemblance des données D sachant le paramètre θ,
— $p(\theta)$ la distribution a priori de θ,
— $p(D)$ la distribution des données d'entrainement.
Il s'agit de faire des tirages de θ pour évaluer ces quantités.

3 Algorithme BNN-ABC-SS

3.1 ABC (*Approximate Bayesian Computation*)

La méthode ABC consiste à evaluer $p(\theta|D)$ sans évaluer la vraissemblance qui peut s'avérer couteux.

Posons $\hat{y} = f(x, \theta)$ la sortie d'une évaluation de x par réseaux de neurones f avec paramètre θ.

La formule de Bayes nous donne

$$p(\theta, \hat{y}|D) \propto p(D|\hat{y}, \theta)p(\hat{y}|\theta)p(\theta)$$

Pour simuler selon la distribution du second membre, on applique l'algorithme de rejet.

— On tire $\theta \sim p(\theta)$

— On evalue $\hat{y} = f(x, \theta) \sim p(\hat{y}|\theta)$

— On accepte le θ si et seulement si $\hat{y} = y$

Comme $\hat{y}$ est une quantité réel (a priori à distribution continue), obtenir exactement $\hat{y} = y$ est une condition trop forte pour être atteinte (en un temps raisonable).

On introduit alors une tolérance ϵ, on remplace $\hat{y} = y$ par $|\hat{y} - y| < \epsilon$.

On remarque que plus ϵ est petit, plus on se rapproche de la condition $\hat{y} = y$, et donc le mieux notre approximation sera.

On note $p_\epsilon(\theta, \hat{y}|D)$ la distribution issue du tirage précédent, et qui approche $p(\theta, \hat{y}|D)$, on a

$$p_\epsilon(\theta, \hat{y}|D) \propto \mathbb{1}_{\mathcal{N}_\epsilon(D)}(\hat{y})p(\hat{y}|\theta)p(\theta)$$

où

$$\mathcal{N}_\epsilon(D) = \{\hat{y} \in \mathcal{Y}, \rho(\eta(\hat{y}), \eta(y)) \leq \epsilon\}$$

où η est une statistique qui caractérise une distribution (par exemple les moments ou les quantiles) et ρ est une mesure de dissimilarité.

En intégrant des deux cotés par $\hat{y}$ on obtient notre approximation de $p(\theta|D)$

$$p_\epsilon(\theta|D) = \int_{\mathcal{Y}} p_\epsilon(\theta, \hat{y}|D)d\hat{y} \propto \int_{\mathcal{Y}} \mathbb{I}_{\mathcal{N}_\epsilon(D)}(\hat{y})p(\hat{y}|\theta)p(\theta)d\hat{y}$$

$$= p(\theta) \int_{\mathcal{Y}} \mathbb{I}_{\mathcal{N}_\epsilon(D)}(\hat{y})p(\hat{y}|\theta)d\hat{y} = \mathbb{P}(\hat{y} \in \mathcal{N}_\epsilon(D)|\theta)p(\theta)$$

Cependant lors de l'algorithme de rejet, tirer les θ de manière générique donne trop rarement des $\hat{y}$ qui tombe dans $\mathcal{N}_\epsilon(D)$ ce qui fait que l'approximation est prend beaucoup de temps à converger. On utilise alors SS (Subset Simulation) pour faire des tirages plus fins.

3.2 SS (*Subset Simulation*)

Soient $\epsilon_1 > \epsilon_2 > ... > \epsilon_m = \epsilon$ des seuils.

Il est clair que $\mathcal{N}_{\epsilon_m}(D) \subset \mathcal{N}_{\epsilon_{m-1}}(D) \subset ... \subset \mathcal{N}_{\epsilon_2}(D) \subset \mathcal{N}_{\epsilon_1}(D)$.

De plus et en conséquence, $\bigcap_{j=1}^{m} \mathcal{N}_{\epsilon_j} = \mathcal{N}_{\epsilon_m} = \mathcal{N}_\epsilon$, ce qui nous donne

$$\mathbb{P}\left(\hat{y} \in \mathcal{N}_\epsilon(D)|\theta\right) = \mathbb{P}\left(\hat{y} \in \bigcap_{j=1}^{m} \mathcal{N}_{\epsilon_j}(D)|\theta\right)$$

$$= \mathbb{P}\left(\hat{y} \in \mathcal{N}_{\epsilon_1}(D)|\theta\right) \prod_{j=2}^{m} \mathbb{P}\left(\hat{y} \in \mathcal{N}_{\epsilon_j}(D)|\hat{y} \in \mathcal{N}_{\epsilon_{j-1}}(D), \theta\right)$$

L'idée de la SS, est de faire des tirages itératifs de plus en plus fins.

Initialement on tire de manière générique avec un ϵ_1 grand.

A chaque itération, on tire à partir (conditionnées) des tirages précédents avec un ϵ_i plus fin.

Après n itérations, on aura tiré avec ϵ_m beaucoup plus petit que ϵ_0.

Cette méthode exploite la décompostion d'un probabilité d'un ordre très petit en un produit de probabilité d'un ordre assez grand pour être calculable en un temps raisonable.

3.3 Pseudo - Code

Algorithme 1 : Pseudo code BNN - ABC - SS

Entrées : $N \in \mathbb{N}^*$: le nombre de tirage à chaque itération
$l_{\max} \in \mathbb{N}^*$: le nombre d'itération maximale
P_0 la proportion de nos tirages qu'on grade pour générer à la prochaine itération
ϵ : la tolérance finale
x : la variable d'entrée
y : la variable de sortie

Sorties : $\left[\theta_1^{(n)}, ..., \theta_N^{(n)}\right]$

$NP_0 \leftarrow N * p_0$;
$iP_0 \leftarrow p_0^{-1}$;
$\left[\theta_1^{(0)}, ..., \theta_N^{(0)}\right]$, N tirage de $\theta \sim p(\theta)$;
$\left[\hat{y}_1^{(0)}, ..., \hat{y}_1^{(0)}\right] \leftarrow \left[f(x, \theta_1^{(0)}), ..., f(x, \theta_N^{(0)})\right]$;
$\left[\gamma_1^{(0)}, ..., \gamma_1^{(0)}\right] \leftarrow \left[\rho(\eta(y), \eta(\hat{y}_1^{(0)})), ..., \rho(\eta(y), \eta(\hat{y}_N^{(0)}))\right]$;
pour $j \in \{1, ..., l_{max}\}$ **faire**
  On ordonne $\left[\gamma_1^{(j-1)}, ..., \gamma_1^{(j-1)}\right]$ dans l'ordre croissant ;
  On réordonne $\left[\theta_1^{(j-1)}, ..., \theta_N^{(j-1)}\right]$ dans cette ordre ;
  $\epsilon_j \leftarrow \gamma_{NP_0}^{(j-1)}$ (ou $\frac{1}{2}(\gamma_{NP_0}^{(j-1)} + \gamma_{NP_0+1}^{(j-1)})$) ;
  pour $k \in \{1, ..., NP_0\}$ **faire**
    On choisit une graine $\theta_k^{(j-1),1} = \theta_k^{(j-1)}$ tq $\hat{y}_k^{(j-1)} \in \mathcal{N}_{\epsilon_j}(D)$
    On génère iP_0 états d'une chaine de markov de θ tq $\hat{y} \in \mathcal{N}_{\epsilon_j}(D)$:
    $\left[\theta_k^{(j-1),1}, ..., \theta_k^{(j-1),iP_0}\right]$ et avec ça $\left[\gamma_k^{(j-1),1}, ..., \gamma_k^{(j-1),iP_0}\right]$
  fin
  $[\theta_1^{(j)}, ..., \theta_N^{(j)}] \leftarrow [\theta_k^{(j-1),l}, k \in \{1, ..., NP_0\}, l \in \{1, ..., iP_0\}]$
  $[\gamma_1^{(j)}, ..., \gamma_N^{(j)}] \leftarrow [\gamma_k^{(j-1),l}, k \in \{1, ..., NP_0\}, l \in \{1, ..., iP_0\}]$
  si $\epsilon_j \leq \epsilon$ **alors**
    Fin de l'algorithme ;
  fin
fin

4 Réalisation

On se donne un base de données à étudier avec une comparasion avec des méthodes déja existante [2, 3, 4] Ici on propose de reproduire un résultat vu dans l'article [3].

4.1 Cosinus perturbé

Les données d'entrainement $D = \{x_i, y(x_i)\}_{i=1}^{200}$, avec $(x_i)_{i=1}^{N}$ une discrétisation uniforme de $[-3, 3]$ et $y(x) = \cos(x) + \zeta$ où $\zeta \sim \mathcal{N}(0, 0.1)$.

Les paramètres de l'algorithme $N : 5000$, $l_{max} : 6$, $P_0 : 0.2$ et $\epsilon : 0.1$.

Le réseau de neurones pris ici a une couche d'entrée, un couche cachée à deux cellules et une couche de sortie ce qui fait 7 paramètres avec la fonction sigmoïde comme fonction d'activation. La mesure de dissimilarité choisi est la MSE (*Mean Squared Error*).

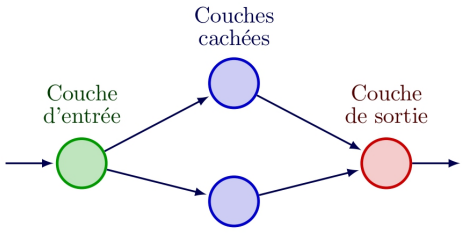
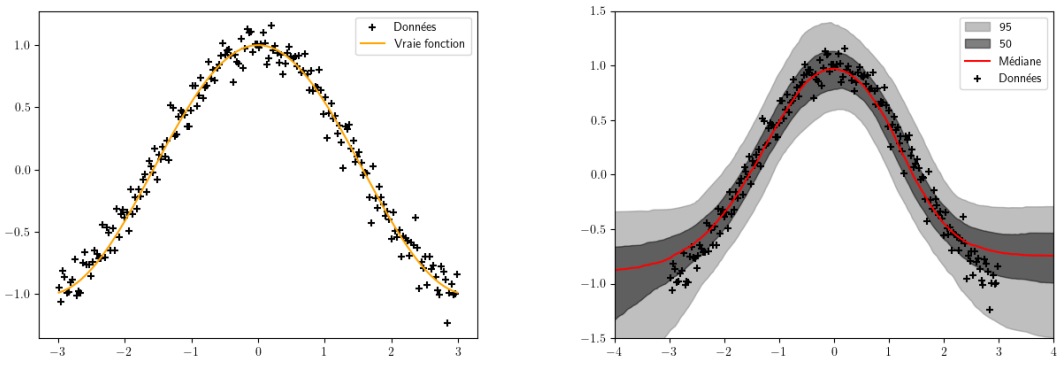
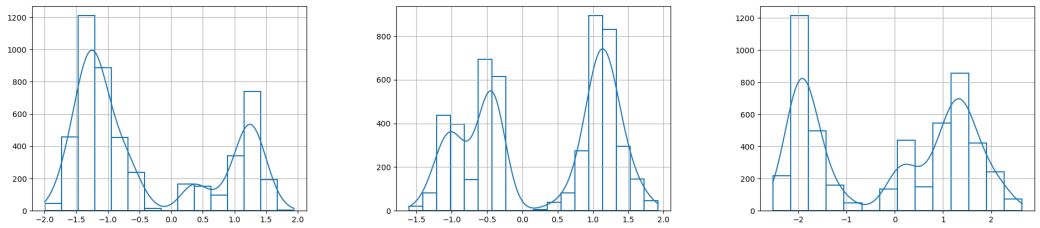


FIGURE 3 – Réseau de neurones pour la fonction cos



(a) Données d'entrainement (b) Résultat

FIGURE 4 – Résultat de l'algorithme BNN-ABC-SS



(a) $w_{1,1}^{(1)}$ (b) $w_{1,2}^{(1)}$ (c) $b_1^{(1)}$

FIGURE 5 – Exemple de distribution a posteriori des poids et biais

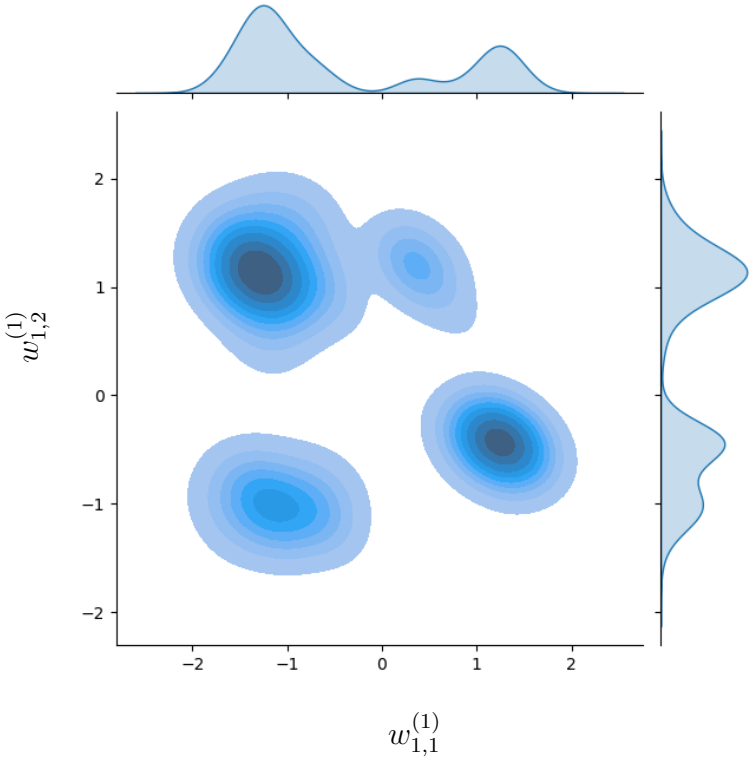


FIGURE 6 – Distribution a posteriori de $w_{1,1}^{(1)}$ et $w_{1,2}^{(1)}$

4.2 Sinus perturbé

Les données d'entrainement $D = \{x_i, y(x_i)\}_{i=1}^{100}$, avec $(x_i)_{i=1}^{N}$ une discrétisation uniforme de $[-0.5, 0.5]$ et $y(x) = 10\sin(2\pi x) + \zeta$ où $\zeta \sim \mathcal{N}(0.1)$ Les paramètres de l'algorithme $N : 20000$, $l_{max} : 20$, $P_0 : 0.1$ et $\epsilon : 0.1$.

Le réseau de neurones pris ici a une couche d'entrée, deux couche cachées à 15 cellules et une couche de sortie ce qui fait 286 paramètres avec la fonction ReLu comme fonction d'activation. La mesure de dissimilarité choisi est la MSE (*Mean Squared Error*).

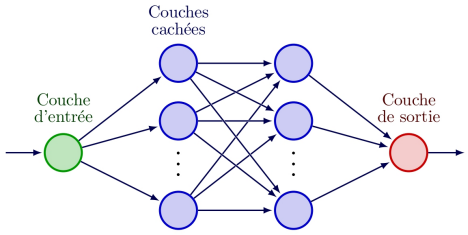
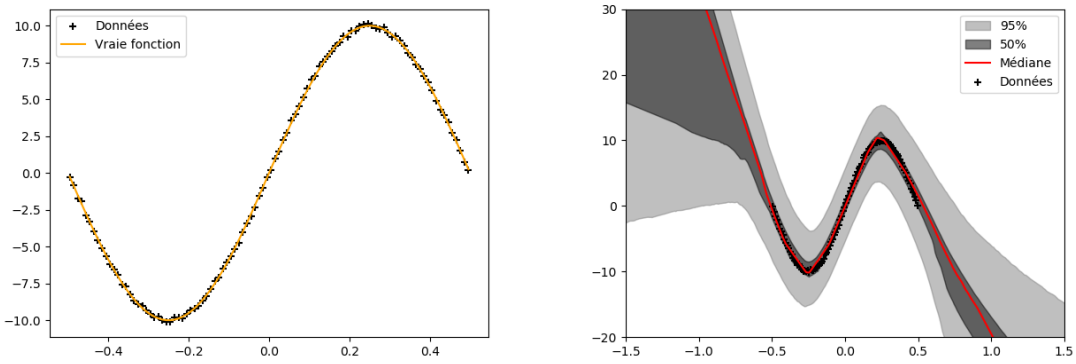
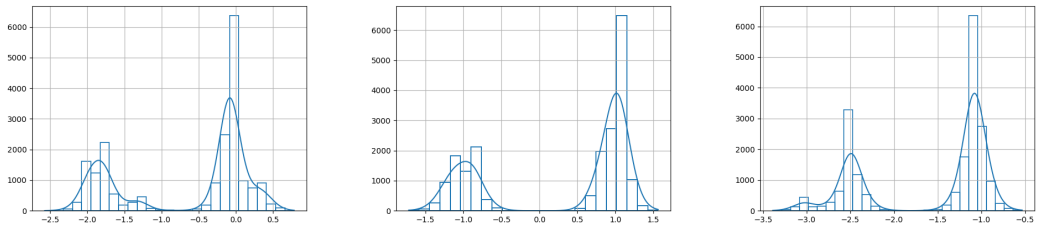


FIGURE 7 – Réseau de neurones pour la fonction sin



(a) Données d'entrainement (b) Résultat

FIGURE 8 – Résultat de l'algorithme BNN-ABC-SS



(a) (b) (c)

FIGURE 9 – Exemple de distribution a posteriori des poids et biais

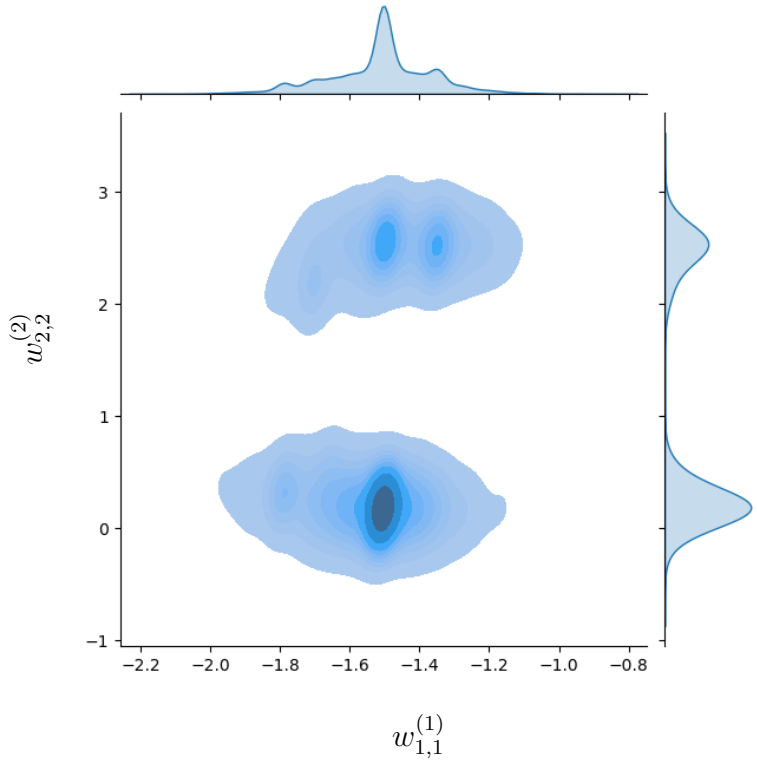


FIGURE 10 – Distribution a posteriori de $w_{1,1}^{(1)}$ et $w_{2,2}^{(2)}$

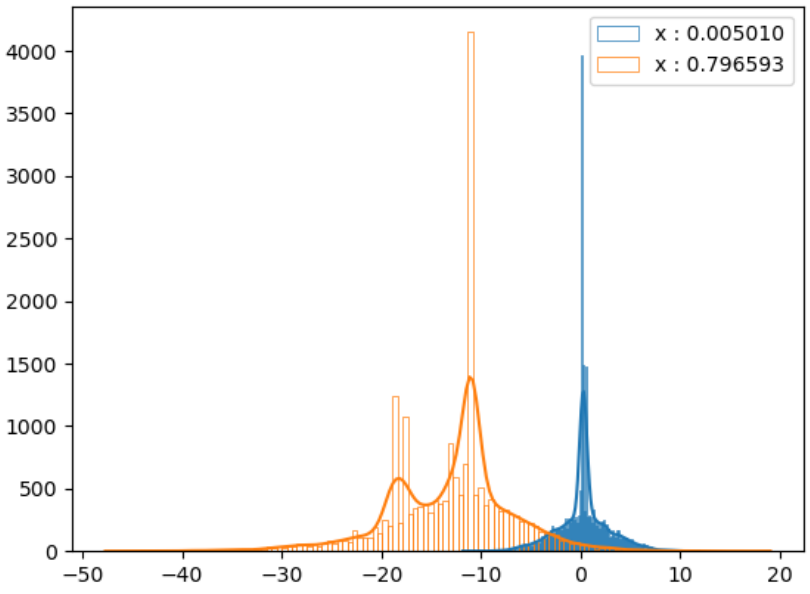


FIGURE 11 – Distribution sur la sortie pour $x \approx 0$ dans le domaine et et $x \approx 0.8$ hors du domaine

4.3 Maybe more

Insert im here
list hypperametters
Insert res here

5 Conclusion et perspective

On a vu ici l'implémentation d'une méthode d'approximation sur l'incertitude sur la sorite qui poura être utilisé par la suite dans ....

Références

[1] `https://tikz.net/neural_networks/`.

[2] Manuel Chiachio, James L. Beck, Juan Chiachio, and Guillermo Rus. Approximate bayesian computation by subset simulation. *SIAM Journal on Scientific Computing*, 36(3) :A1339–A1358, January 2014.

[3] Juan Fernández, Manuel Chiachío, Juan Chiachío, Rafael Muñoz, and Francisco Herrera. Uncertainty quantification in neural networks by approximate bayesian computation : Application to fatigue in composite materials. *Engineering Applications of Artificial Intelligence*, 107 :104511, January 2022.

[4] Jakob Gawlikowski, Cedrique Rovile Njieutcheu Tassi, Mohsin Ali, Jongseok Lee, Matthias Humt, Jianxiang Feng, Anna Kruspe, Rudolph Triebel, Peter Jung, Ribana Roscher, Muhammad Shahzad, Wen Yang, Richard Bamler, and Xiao Xiang Zhu. A survey of uncertainty in deep neural networks, 2021.