

Prédiction Conforme III

Université Lyon 2

2024/2025

Rémi Vaucher

PhD Advisor: Stéphane Chrétien
HALIAS & ERIC Lab.



La fonction score

Pour avoir une couverture adaptative, il est souvent intéressant d'avoir une fonction score conditionnée en x :

$$s(x, y) = \frac{|y - \hat{f}(x)|}{u(x)} \Leftrightarrow s(x, y)u(x) = |y - \hat{f}(x)|$$

où $u(x)$ permet d'estimer le caractère conditionnel de la variance. Une manière de faire est de prendre:

$$u(x) = \sqrt{\text{Var}(Y|X = x)}$$

Pour autant, estimer la variance conditionnelle n'est pas simple. Il convient parfois d'entraîner un nouveau modèle juste à cet effet (on pourra penser à un modèle du max de vraisemblance). Toutefois, si l'on dispose de beaucoup de données (resserrées) alors on peut juste calculer l'écart type sur un intervalle $[x - \varepsilon; x + \varepsilon]$

Certaines étapes de l'algo changent!

- On calcule l'ensemble des scores de conformités:

$$S(\mathcal{Cal}) = \left\{ \frac{s(X_i, Y_i)}{u(X_i)}, \quad 1 \leq i \leq n \right\}$$

- On calcule l'ensemble de prédiction:

$$\mathcal{C}(X_{n+1}) = [\hat{f}(X_{n+1} - q_{1-\alpha}u(X_{n+1}); \hat{f}(X_{n+1} + q_{1-\alpha}u(X_{n+1}))$$

Le véritable problème/défi est d'estimer la fonction u . Nous présentons ici les plus simples (pour la régression), mais d'autres existent:

- u représente la variabilité conditionnelle : il suffit alors d'estimer un écart interquartile conditionnel $Q_{1-\alpha/2} - Q_{1-\alpha}$.
- u représente la variance de prédiction a de petites perturbations : on calcule $Var\{\hat{f}(x + \epsilon), \epsilon \sim \mathcal{N}(0, \sigma^2)\}$.
- u représente la variance sur un ensemble de modèle : on calcule $Var\{\hat{f}(x), \hat{f} \in \text{Prédicteurs}\}$

En prédiction :

- u représente l'entropie de la distribution prédite :

$$u(x) = - \sum_{y \in Y} \hat{p}(y|x) \log(\hat{p}(y|x))$$

- u représente la marge de confiance de l'algorithme : $u(x) = p(y_1|x) - p(y_2|x)$ où y_1 et y_2 représente les deux probas estimées les plus élevées.

Le problème du Jackknife+ et CV+

Comme nous avons pu le voir, ces deux modèles créent un ensemble de prédiction pour une nouvelle donnée. Mais avec un gros volume de données, où un modèle à entraînement "long", cela peut vite devenir compliqué si la manoeuvre doit être faite à chaque nouvelle donnée. Il est possible alors d'entraîner un modèle (réseau de neurones) pour reproduire les sorties de la prédiction conforme.

Pour être exact, on peut essayer d'entraîner deux types de modèles:

- Un modèle qui prends x en entrée, et ressort directement l'ensemble de prédiction. Pour cela, il faut créer un set d'entrainement $(X_{train}, \mathcal{C}(X_{train}))$.
- Un modèle qui prends x_{new} et x_i et qui prédit le score de conformité (pour le jackknife par exemple).

Group-Balanced Conformal Prediction

Parfois, on va vouloir que notre prédiction conforme possède le même taux de couverture conditionnellement à une variable catégorielle. Par exemple, on va vouloir que le taux de couverture de régression en médical soit le même chez les femmes et les hommes.

Attention, cela n'est pas vrai (en général) si la prédiction conforme est faite en globalité. Pour cela, il faut appliquer la prédiction conforme au sein de chaque groupe. L'objectif est d'obtenir un quantile conditionnel à la classe C_i .

Outlier detection

L'objectif ici est de labelliser une nouvelle donnée X . Voici l'algorithme permettant de faire ceci:

- On construit une fonction $\mathcal{C} : \mathcal{X} \rightarrow \{\text{inlier}, \text{outlier}\}$ telle que, sur X , on a

$$\mathbb{P}[\mathcal{C}(X) = \text{outlier}] \leq \alpha$$

- On calcule les score de conformités sur un ensemble de données X "clean".
- On calcule le quantile \hat{q} à hauteur $1 - \alpha$ des scores de conformités.
- On obtient:

$$\mathcal{C}(x) = \begin{cases} \text{inlier} & \text{si } s(x) \leq \hat{q} \\ \text{outlier} & \text{si } s(x) > \hat{q} \end{cases}$$