université PARIS-SACLAY

SYSTÈME DE CLASSIFICATION BAYESIEN NAÏF

Vincent Guigue, Romain Thoreau
vincent.guigue@agroparistech.fr

Exemple introductif : classification automatique de chiffres manuscrits

Un programme informatique peut-il reconnaitre des chiffres ?

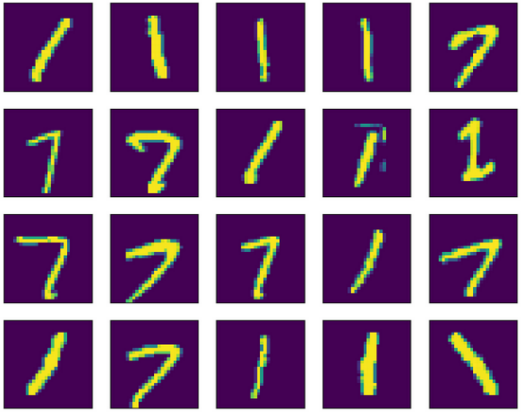


Figure 1: Exemples de chiffres manuscrits du jeu de données MNIST

Plan du cours

Lois de probabilités

Loi de Bernoulli

Définition

Épreuve de Bernoulli = expérience aléatoire qui ne peut prendre que deux résultats (*succès* et *échec*)

p = proba de succès, et $q = 1 - p$ = proba d'échec.

Loi de Bernoulli

Définition

Épreuve de Bernoulli = expérience aléatoire qui ne peut prendre que deux résultats (*succès* et *échec*)

p = proba de succès, et $q = 1 - p$ = proba d'échec.

Loi de Bernoulli

Variable X à support $\mathcal{X} = \{0, 1\}$ telle que:

$P(X = 1) = p$ et $P(X = 0) = 1 - p$

$E(X) = p \quad V(X) = p(1 - p)$

$\Longrightarrow X =$ le nombre de succès de l'épreuve de Bernoulli

Loi binomiale

Définition

Épreuve binomiale = expérience aléatoire telle que:

1. on répète n fois la même épreuve de Bernoulli,
2. les probas p et q restent inchangées pour chaque épreuve de Bernoulli,
3. les épreuves de Bernoulli sont toutes réalisées indépendamment les unes des autres.

Loi binomiale

Définition

Épreuve binomiale = expérience aléatoire telle que:

1. on répète n fois la même épreuve de Bernoulli,
2. les probas p et q restent inchangées pour chaque épreuve de Bernoulli,
3. les épreuves de Bernoulli sont toutes réalisées indépendamment les unes des autres.

Loi binomiale de paramètres n et p

- X = nombre de succès de l'épreuve binomiale
- $X \sim \mathcal{B}(n, p)$
- $P(X = k) = C_n^k \ p^k \ (1-p)^{n-k}, \forall k = 0, \ldots, n$
- $E(X) = np \quad V(X) = np(1-p)$

Loi normale

⚠ Loi extrêmement importante : souvent une très bonne approximation de la loi réelle

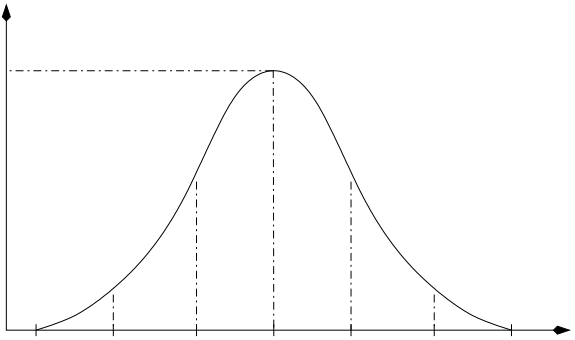
Définition : loi normale de paramètres μ et σ^2

- notée $\mathcal{N}(\mu, \sigma^2)$
- s'applique pour des variables aléatoires continues
- densité positive sur tout $\mathbb{R}$:

$$f(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}.\sigma} \exp\left\{-\frac{1}{2}\left(\frac{x-\mu}{\sigma}\right)^2\right\}$$

- $E(X) = \mu \quad V(X) = \sigma^2$

Fonction de densité de la loi normale



Quelques reflexes:

- $2/3$ de la masse entre $+\sigma$ et $-\sigma$
- Support infini...

  Mais empiriquement $\sim$ toutes les observations entre $+3\sigma$ et -3σ
- Facile à dériver, à tronquer, ...

Loi normale en pratique

Théorème

$X \sim \mathcal{N}(\mu; \sigma^2)$

Alors la variable $Y = aX + b$ obéit à la loi $\mathcal{N}(a\mu + b; a^2\sigma^2)$.

$\Longrightarrow$ toute transformée affine d'une variable aléatoire suivant une loi normale suit aussi une loi normale

Loi normale en pratique

Théorème

$X \sim \mathcal{N}(\mu; \sigma^2)$

Alors la variable $Y = aX + b$ obéit à la loi $\mathcal{N}(a\mu + b; a^2\sigma^2)$.

$\Longrightarrow$ toute transformée affine d'une variable aléatoire suivant une loi normale suit aussi une loi normale

Corollaire

- X une variable aléatoire obéissant à une loi $\mathcal{N}(\mu; \sigma^2)$

  $\Longrightarrow Z = \frac{X - \mu}{\sigma}$ suit la loi $\mathcal{N}(0; 1)$
- Z suit une loi normale centrée (à cause de la moyenne en 0) réduite (à cause du σ^2 égal à 1)

Loi normale en pratique (2)

Théorème

$X_1 \sim \mathcal{N}(\mu_1; \sigma_1^2), \qquad X_2 \sim \mathcal{N}(\mu_2; \sigma_2^2)$

Si les variables sont indépendantes, alors la variable $Y = X_1 + X_2$ obéit à la loi $\mathcal{N}(\mu_1 + \mu_2; \sigma_1^2 + \sigma_2^2)$.

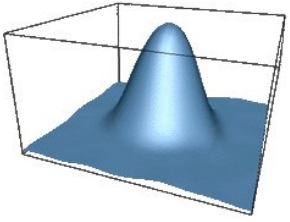
Loi normale bi-dimensionnelle

Définition : loi normale bi-dimensionnelle

- couple de variables (X, Y)
- densité dans $\mathbb{R}^2$:

$$f(x,y) = \frac{1}{2\pi\sigma_x\sigma_y\sqrt{1-\rho^2}} \times \exp\left\{-\frac{1}{2(1-\rho^2)}\left[\left(\frac{x-\mu_x}{\sigma_x}\right)^2 - 2\rho\frac{(x-\mu_x)(y-\mu_y)}{\sigma_x\sigma_y} + \left(\frac{y-\mu_y}{\sigma_y}\right)^2\right]\right\}$$

où $\rho = \frac{cov(X,Y)}{\sigma_x\sigma_y}$ = **coefficient de corrélation linéaire**

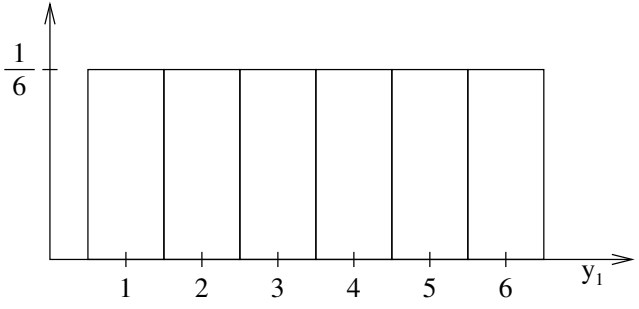


Loi normale = limite d'autres lois (1/4)

Lancés de dés à 6 faces

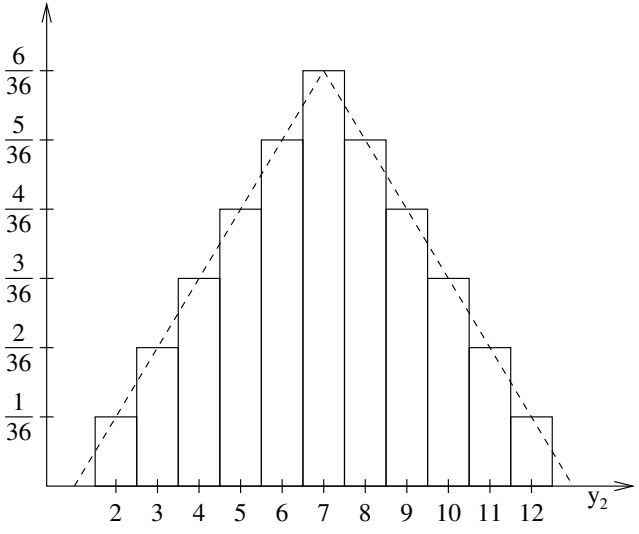
$\Longrightarrow$ on compte la somme des résultats des dés

Somme pour 1 jet de dé



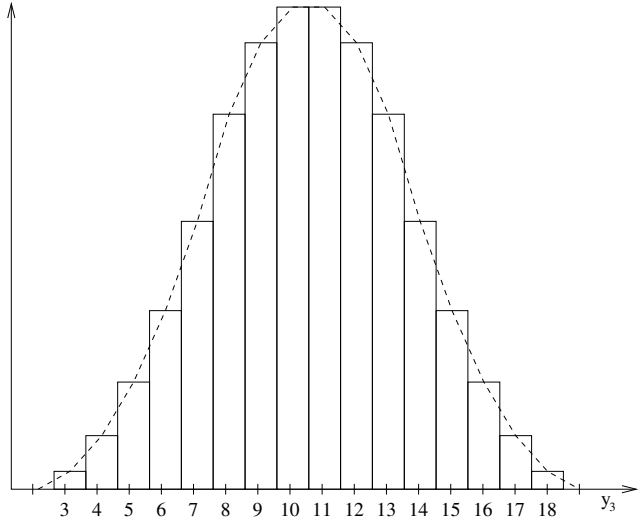
Loi normale = limite d'autres lois (2/4)

Somme pour 2 jets de dés



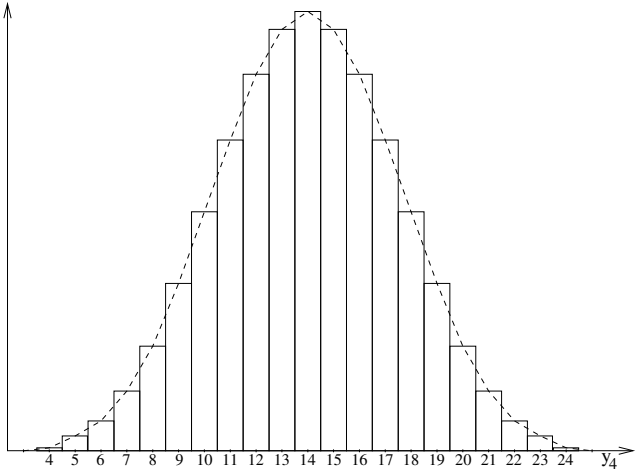
Loi normale = limite d'autres lois (3/4)

Somme pour 3 jets de dés

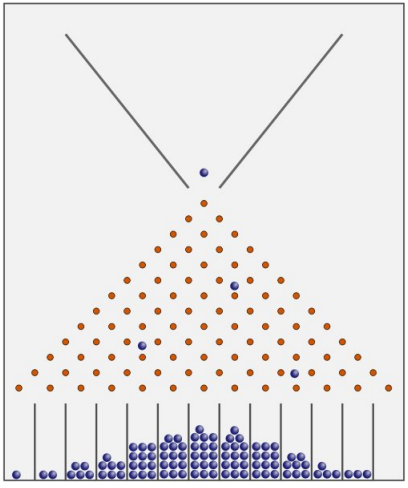


Loi normale = limite d'autres lois (4/4)

Somme pour 4 jets de dés

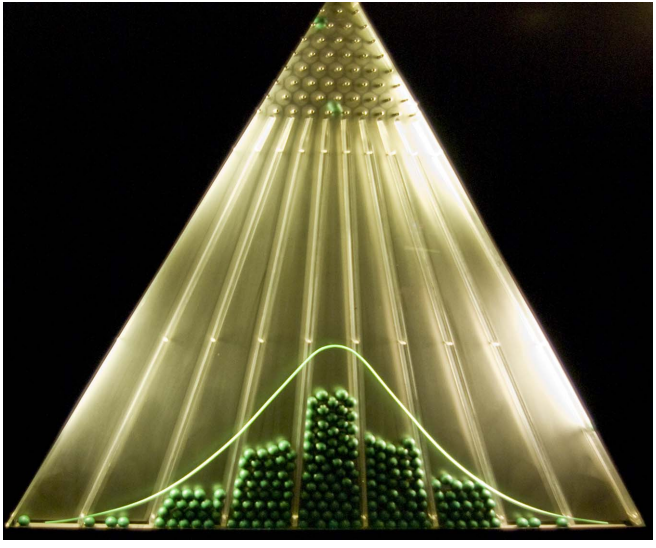


La planche de Galton



- chaque niveau $\Longrightarrow$ expérience de Bernoulli
- $\Longrightarrow X \sim$ loi binomiale

La planche de Galton



Théorème central-limite

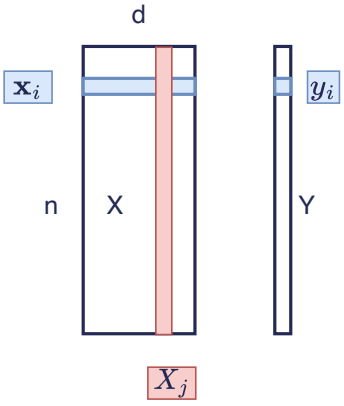
Théorème central-limite

- $(X_n)_{n\in\mathbb{N}}$: suite de variables
  - de même loi
  - d'espérance μ
  - de variance σ^2
  - **mutuellement** indépendantes
- alors la suite des moyennes empiriques centrées réduites $\frac{\overline{X}_n-\mu}{\sigma/\sqrt{n}}$ tend en loi vers la loi normale centrée réduite :

$$\frac{\overline{X}_n-\mu}{\sigma/\sqrt{n}} \overset{loi}{\to} \mathcal{N}(0,1)$$

Naive Bayes

Notations et représentation des données



X matrice des données

- composée de n individus $\mathbf{x}_i \in \mathcal{X}$
- presque toujours, $\mathcal{X} = \mathbb{R}^d$

Y étiquettes des données, $y_i \in \mathcal{Y}$

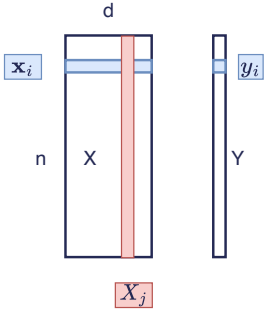
- $y_i \in \mathbb{R}$ $\Rightarrow$ régression
- $y_i \in \{1, \ldots, C\}$ $\Rightarrow$ classification en C catégories

Apprentissage automatique

A partir des données, construire une fonction f telle que:

$$\forall (\mathbf{x}, y) \in \mathcal{X} \times \mathcal{Y}, \qquad f(\mathbf{x}) \approx y$$

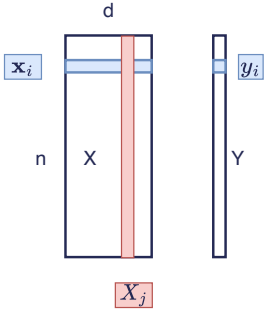
Algorithme bayesien naïf



Hypothèse d'indépendance des variables descriptives X_j

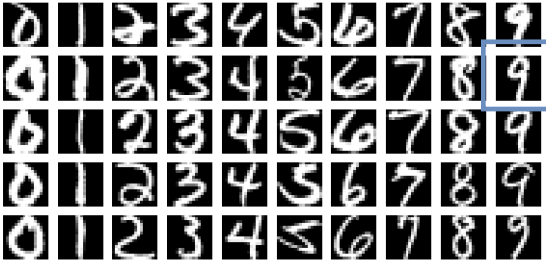
Pourquoi c'est très naïf?

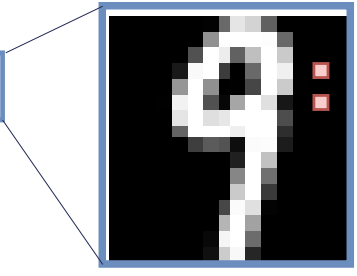
Algorithme bayesien naïf



Hypothèse d'indépendance des variables descriptives X_j

Pourquoi c'est très naïf?

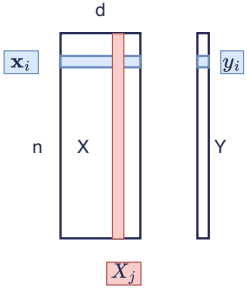




$x_{ij} \sim X_j$

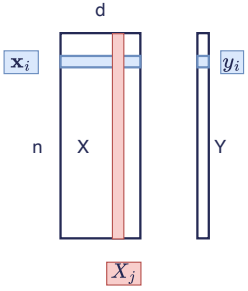
$x_{ik} \sim X_k$

Hypothèse variable par variable



1. Choix loi de probabilité pour (une ou toutes les) X_j
   e.g Bernoulli pour une image binaire: $X_j \sim Ber(p_j)$

Hypothèse variable par variable



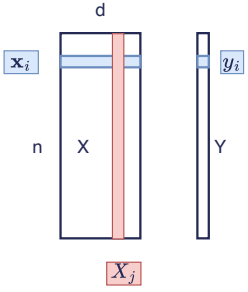
1. Choix loi de probabilité pour (une ou toutes les) X_j
   e.g Bernoulli pour une image binaire: $X_j \sim Ber(p_j)$

   $P(X_j = 1) = p_j \qquad P(X_j = 0) = 1 - p_j$

   Vraisemblance de l'observation x_{ij}:
   $P(X_j = x_{ij}) = p_j^{x_{ij}}(1 - p_j)^{(1-x_{ij})}$

2. Une variable descriptive $X_j \Rightarrow 1$ paramètre p_j
   On regroupe les paramètres : $\Theta = \{p_1, \ldots, p_d\}$
3. Optimisation des paramètres par max de vraisemblance

Hypothèse variable par variable



1. Choix loi de probabilité pour (une ou toutes les) X_j
   e.g Bernoulli pour une image binaire: $X_j \sim Ber(p_j)$

   $P(X_j = 1) = p_j \qquad P(X_j = 0) = 1 - p_j$

   Vraisemblance de l'observation x_{ij}:
   $P(X_j = x_{ij}) = p_j^{x_{ij}}(1 - p_j)^{(1-x_{ij})}$

2. Une variable descriptive $X_j \Rightarrow 1$ paramètre p_j
   On regroupe les paramètres : $\Theta = \{p_1, \ldots, p_d\}$

3. Optimisation des paramètres par max de vraisemblance

   Echantillon i.i.d + NB $\Rightarrow \mathcal{L}(X) = \prod_{i=1}^{n} \prod_{j=1}^{d} P(x_{ij}|\Theta)$

   Optimisation: $p_j^\star = \arg\max_{p_j} \mathcal{L}(X)$

Apprentissage statistique

Identification des paramètres optimaux correspondant aux observations

Calcul de la vraisemblance

- Pour une **valeur descriptive** , sous l'hypothèse de Bernoulli:

$$P(X_j = x_{ij}) = P(X_j = x_{ij}|p_j) = p_j^{x_{ij}}(1-p_j)^{(1-x_{ij})}$$

- Pour un **individu**, avec indépendance des variables descriptives:

$$P(\mathbf{x}_i) = P(\mathbf{x}_i|\Theta) = \prod_{j=1}^{d} P(X_j = x_{ij})$$

- Pour l'**échantillon** entier, sous hypothèse i.i.d:
$\mathcal{L}(X) = \prod_{i=1}^{n}\prod_{j=1}^{d} P(x_{ij}|\Theta) = \prod_{i=1}^{n}\prod_{j=1}^{d} p_j^{x_{ij}}(1-p_j)^{(1-x_{ij})}$

Vraisemblance *vs* log-Vraisemblance

$\mathcal{L}(X) \Rightarrow \log \mathcal{L}(X)$

La vraisemblance a en générale vocation à être dérivée pour trouver les paramètres optimaux... Comme le log est une fonction croissante:

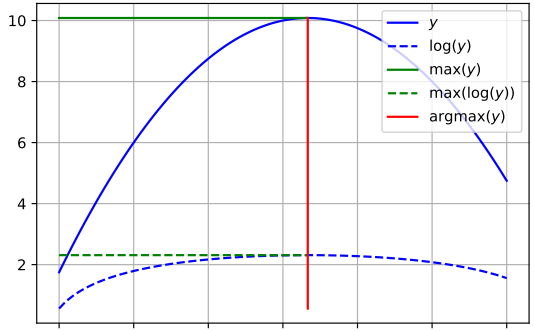
$$\arg\max_{\Theta} \mathcal{L}(X) = \arg\max_{\Theta} \log \mathcal{L}(X)$$

$\Rightarrow$ On travaille donc sur la log-vraisemblance, bien plus facile à dériver

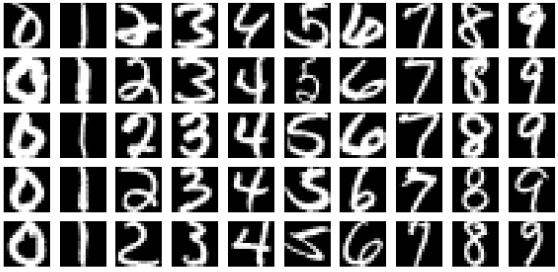
$$\mathcal{L}(X) = \prod_{i=1}^{n} \prod_{j=1}^{d} p_j^{x_{ij}} (1 - p_j)^{(1-x_{ij})}$$

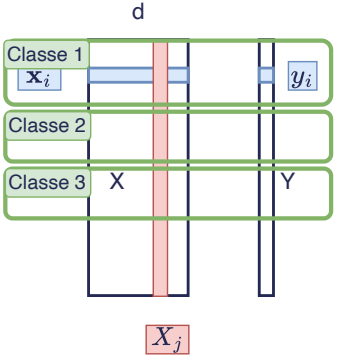
$$\log \mathcal{L}(X) =$$

$$\sum_{i=1}^{n} \sum_{j=1}^{d} x_{ij} \log(p_j) + (1 - x_{ij}) \log(1 - p_j)$$



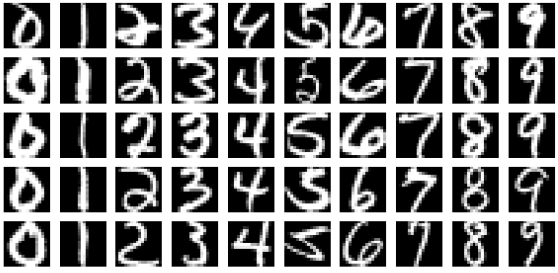
Cas de la classification bayesienne naïve

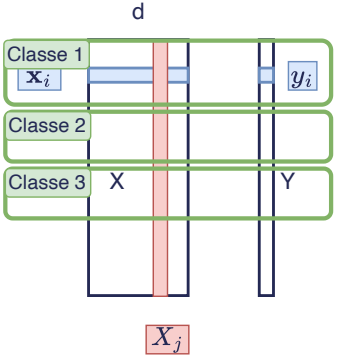




- 1 classe $C = 1$ sous-ensemble de données $= 1$ modèle optimisé ($=$ un ensemble de paramètre Θ_c)
- C ($\times d$) problèmes d'optimisation distincts
- Combien de paramètres avec une modélisation de Bernoulli sur $d = 256$ pixels?

Cas de la classification bayesienne naïve





- 1 classe $C = 1$ sous-ensemble de données $= 1$ modèle optimisé ($=$ un ensemble de paramètre Θ_c)
- C ($\times d$) problèmes d'optimisation distincts
- Combien de paramètres avec une modélisation de Bernoulli sur $d = 256$ pixels?
- $\Theta_c = \{p^\star_{c,1}, \ldots, p^\star_{c,d}\}$ et $\Theta = \{\Theta_1, \ldots, \Theta_c, \ldots, \Theta_C\} \Rightarrow$ 2560 paramètres

Apprentissage du modèle

Comment résoudre :
$p_j^\star = \arg\max_{p_j} \mathcal{L}(X) = \arg\max_{p_j} \sum_{i=1}^{n} \sum_{j=1}^{d} x_{ij} \log(p_j) + (1 - x_{ij}) \log(1 - p_j)$?

Solution 1

$$\frac{\partial \mathcal{L}_j(X)}{\partial p_j} = 0 \Leftrightarrow \ldots$$

$$p_j^\star = \ldots$$

Solution 2

Apprentissage du modèle

Comment résoudre :
$p_j^\star = \arg\max_{p_j} \mathcal{L}(X) = \arg\max_{p_j} \sum_{i=1}^{n} \sum_{j=1}^{d} x_{ij} \log(p_j) + (1 - x_{ij}) \log(1 - p_j)$?

Solution 1

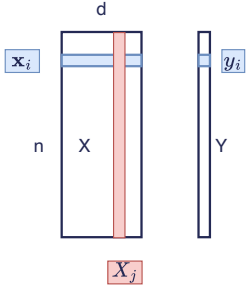
$$\frac{\partial \mathcal{L}_j(X)}{\partial p_j} = 0 \Leftrightarrow \ldots$$

$$p_j^\star = \ldots$$

Solution 2

Je connais la loi de Bernoulli
(ou j'ai accès à wikipedia)

$$p_j^\star = \frac{\sum_i x_{ij}}{n}$$

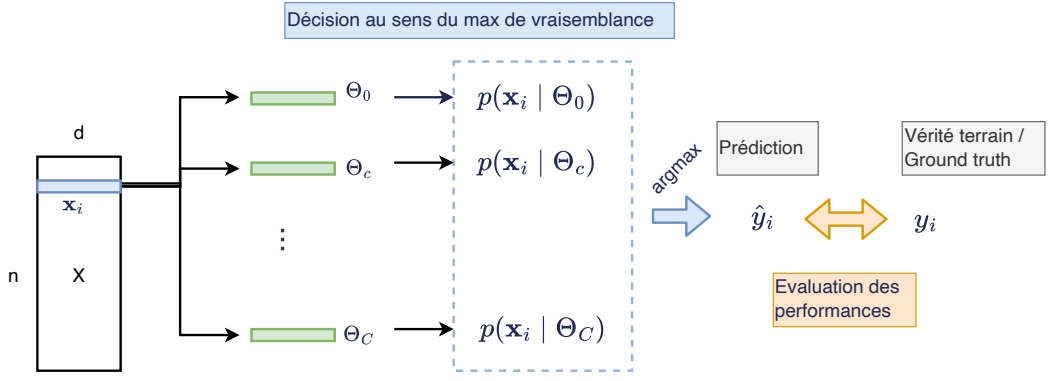


Inférence

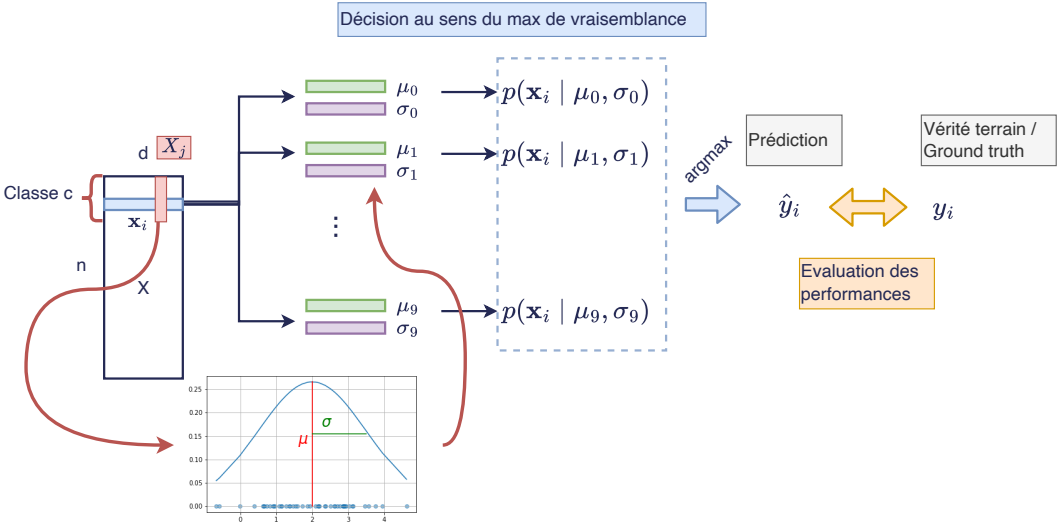
On utilise le modèle optimisé pour prédire la classe :

$$\hat{y}_i = \arg\max_k p(y_i = k|\mathbf{x}_i, \Theta_k).$$

De manière équivalente, est-ce que la donnée $\mathbf{x}_i$ est plus vraisemblable sous le modèle de la classe 0, 1, ... ou C ?



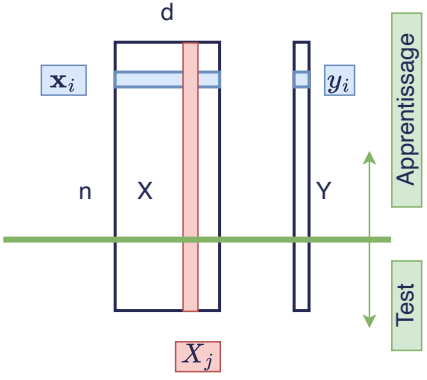
Passage à la gaussienne



Evaluation du modèle / Sélection de modèle

!! L'évaluation est aussi importante que l'apprentissage !!

- Evaluer sur les données d'apprentissage (=qui ont servi à régler les paramètres)
  $\Rightarrow$ **Tricherie, surestimation des performances**
- Evaluer sur des données vierges = OK



Problème de la répartition entre apprentissage et test

- La validation croisée

Evaluation du modèle / Sélection de modèle

!! L'évaluation est aussi importante que l'apprentissage !!

- Evaluer sur les données d'apprentissage (=qui ont servi à régler les paramètres)
  $\Rightarrow$ **Tricherie, surestimation des performances**
- Evaluer sur des données vierges = OK
- La validation croisée