# **Basics of Machine Learning**

SD 210 - P3 Lecture 2 - Linear classifiers

Florence d'Alché-Buc

Contact: florence.dalche@telecom-paristech.fr, 2A Filière SD, Télécom ParisTech,Université of Paris-Saclay, France

#### **Table of contents**

- 1. Introduction
- 2. Perceptron
- 3. Analyse discriminante linéaire
- 4. Algorithme des k-plus-proches voisins
- 5. Evaluation et sélection de modèles (à lire en plus)
- 6. References

## **Outline**

#### Introduction

Perceptron

Analyse discriminante linéaire

Algorithme des k-plus-proches voisins

Evaluation et sélection de modèles (à lire en plus)

References

## Statistical learning: a methodology

- Three main problems to be solved :
  - Representation problem: determine in which representation space the data will be encoded and determine which family of mathematical functions will be used
  - Optimization problem (focus of the course): formulate the learning problem as an optimization problem, develop an optimization algorithm
  - Evaluation problem: provide a performance estimate

## Statistical learning for supervised classification

#### Two main family of approaches:

- 1. Discriminant approaches : just find a classifier which does not estimate the Bayes classifier
- 2. Generative probabilistic approaches that are built to model  $h(x) = \hat{P}(Y=1|x)$  using  $\hat{p}(x|Y=1)$ ,  $\hat{p}(x|Y=-1)$  and prior probabilities.

## **Outline**

Introduction

#### Perceptron

Analyse discriminante linéaire

Algorithme des k-plus-proches voisins

Evaluation et sélection de modèles (à lire en plus)

References

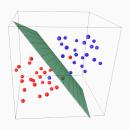
#### Classifieur linéaire

#### **Définition**

Supposons  $\mathbf{x} \in \mathbb{R}^p$ 

$$f(\mathbf{x}) = \operatorname{signe}(h(\mathbf{x})) = \operatorname{signe}(\mathbf{w}^T \mathbf{x} + w_0)$$

L'équation :  $\mathbf{w}^T \mathbf{x} + w_0 = 0$  définit un hyperplan dans l'espace euclidien  $\mathbb{R}^p$ 



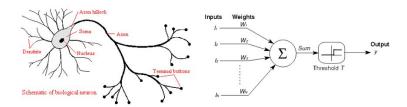
#### How to learn a linear classifier?

- Model: perceptron or formal neuron (Rosenblatt 1957, 1959)
- Learning algorithm: formerly, perceptron rule, then (stochastic) gradient descent algorithm for perceptron

## A linear classifier: the formal neuron and perceptron

- First model proposed by McCullogh and Pitts (physiologists) in 1943 to model the activity of a neuron
- Input signals represented by a vector x is processed by a neuron whose weighted synapses are linked to the input
- The neuron computes a weighted sum of the components of the signal
- Rosenblatt proposed a learning rule in 1959

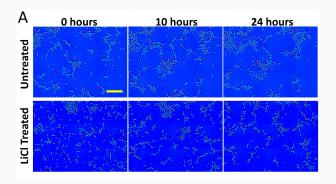
# Le neurone



Neurone biologique

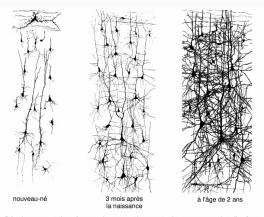
Neurone artificiel

## Neuron network growth over 24 hours



In 2014, the group of Gabriel Popescu at Illinois U. visualized a growing net of stem cell neurons using spatial light interference microscopy (SLIM). Ref: http://light.ece.illinois.edu/wp-content/uploads/2014/03/Mir\_SRep\_2014.pdf
Video: https://youtu.be/KjKsU 4sOnE

## Développement des réseaux de neurones chez l'enfant



Développement des réseaux de connections entre les neurones chez l'enfant.

Re: Museum de Toulouse http://www.museum.toulouse.fr/-/connecte-a-vie-notre-cerveau-le-meilleur-des-reseaux-2-3-

## Formal neuron and perceptron

- $h_{perc}(\mathbf{x}) = \operatorname{sign}(\mathbf{w}^T \mathbf{x})$
- sign(a) = 1 if  $a \ge 0$  and -1 otherwise

#### Données d'apprentissage:

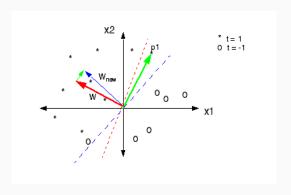
- $S = \{(x_1, y_1), ..., (x_n, y_n)\}$
- $\mathbf{x}_i \in \mathbb{R}^{p+1}$ : the  $0^{th}$  component is fixed to 1.
- $y_i \in \{-1, +1\}$

## Algorithme classique du perceptron

## Algorithme (pseudo code)

- Continue = 1
- Fixer T nombre maximal d'itérations
- $w_0 = 0$
- k = 0
- ϵ << 1</li>
- TANT QUE (continue  $> \epsilon$ ) ou (nk < T) FAIRE
  - Pour i=1 à n
    - k = k + 1
    - Si  $y_i \neq sign(\mathbf{w}^T\mathbf{x}_i)$ , alors je corrige:  $\mathbf{w}(k+1) = \mathbf{w}(k) + y_i.\mathbf{x}_i$
    - Sinon pas de correction
  - CONT =  $\|\mathbf{w}(k+1) \mathbf{w}(k)\|$

## Correction effectuée par le perceptron



Inteprétation en terme de "loss function":

$$\ell(y, \mathbf{w}^T x) = \max(0, -y \mathbf{w}^T \mathbf{x}))$$

## Convergence de l'algorithme du perceptron

L'algorithme converge si les données sont exactement linéairement séparables.

#### Théorème de convergence

Supposons qu'il existe un paramètre  $\mathbf{w}^*$  tel que  $\|\mathbf{w}^*\|=1$ , et  $\gamma>0$  tels que pour tout  $i=1,\ldots n$ :

$$y_i(\mathbf{x}_i^T\mathbf{w}^*) \geq \gamma$$

et qu'il existe R > 0:  $\|\mathbf{x}_i\| \le R$ ,

Alors l'algorithme du perceptron converge en au plus  $\frac{R^2}{\gamma^2}$  itérations.

## Preuve 1/2

- $\mathbf{w}(0) = 0$
- Supposons que la k-ieme erreur est faite sur l'exemple d'indice t, nous avons:

$$\mathbf{w}(k+1)^{T}\mathbf{w}^{*} = (\mathbf{w}(k) + y_{t}\mathbf{x}_{t})^{T}\mathbf{w}^{*}$$

$$= \mathbf{w}(k)^{T}\mathbf{w}^{*} + y_{t}\mathbf{x}_{t}^{T}\mathbf{w}^{*}$$

$$\geq \mathbf{w}(k)^{T}\mathbf{w}^{*} + \gamma$$

Par récurrence sur  $k: \mathbf{w}(k+1)^T \mathbf{w}^* \geq k \gamma$  (Par Cauchy-Schwartz:  $\|\mathbf{w}(k+1)^T \mathbf{w}^*\| \leq \|\mathbf{w}(k+1)\| \|\mathbf{w}^*\| \leq \|\mathbf{w}(k+1)\|$ ) donc :  $\|\mathbf{w}(k+1)\| \geq \|\mathbf{w}(k+1)^T \mathbf{w}^*\| \geq k \gamma$ 

## Preuve 2/2

On dérive ensuite une majoration pour  $\|\mathbf{w}(k+1)\|$ :

$$\|\mathbf{w}(k+1)\|^{2} = \|\mathbf{w}(k) + y_{t}\mathbf{x}_{t}\|^{2}$$
$$= \|\mathbf{w}(k)\|^{2} + y_{t}^{2}\|\mathbf{x}_{t}\|^{2} + 2y_{t}\mathbf{x}_{t}^{T}\mathbf{w}(k)$$

le terme de correction  $2y_t\mathbf{x}_t^T\mathbf{w}(k)$  est par définition négatif donc:

$$\|\mathbf{w}(k+1)\|^2 \le \|\mathbf{w}(k)\|^2 + R^2$$

Par récurrence sur k, on a :

$$\|\mathbf{w}(k+1)\|^2 \le kR^2$$

Au final, en prenant les deux inégalités:

on a : 
$$k^2\gamma^2 \le \|w(k+1)\|^2 \le kR^2$$
 donc :  $k \le \frac{R^2}{\gamma^2}$ 

Si k est borné par  $\frac{R^2}{\gamma^2}$ , cela veut dire qu'en au plus  $\frac{R^2}{\gamma^2}$  itérations, on n'a plus de corrections à faire.

## Limitations du perceptron

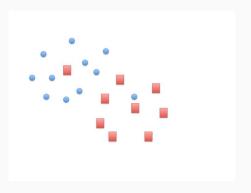
#### Non séparabilité linéaire:

- 1. Données presque "linéairement séparables": quelques "outliers" dans les données, qu'il vaut mieux éviter d'apprendre à classer : la règle du perceptron ne converge pas
- 2. Données séparables mais avec une frontière non linéaire : la règle du perceptron ne converge pas
- 3. NB : on cumule en général les deux difficultés

## Limites d'un perceptron 1

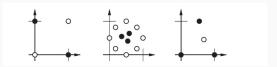
#### Exemple 1 de données non séparables:

Outliers dans les données : mieux vaut éviter de les



## Limites d'un perceptron 2

Exemple 2 : des données non séparables linéairement mais il existe une frontière non linéaire:

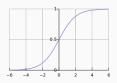


- Premier problème : XOR problem
- Un perceptron seul ne peut implémenter une fonction XOR, ni aucun des deux autres problèmes ci-dessus
- Solution :
  - Soit on rajoute une couche de neurones avant le neurone de sortie perceptron multi-couches (algorithme d'apprentissage par rétro-propagation du gradient), Werbos 1974, Le Cun 1985, Rumelhart et al. 1986.
  - Soit on transforme les données en les plongeant dans un espace où elles sont linéairement séparables (see Practical session)

## Apprendre un perceptron(vue plus générale)

Remplacer la fonction signe par une sigmoide différentiable

• 
$$sigm(x) = \frac{1}{1 + exp(-\frac{1}{2}x)}$$



- Définir une fonction de perte différentiable
  - $\ell_i(\mathbf{w}) = (y_i sigm(\mathbf{w}^T x_i))^2$
  - $L(\mathbf{w}) = \sum_{i} \ell_{i}(\mathbf{w})$

## Apprendre un perceptron (vue plus générale)

# Algorithme d'apprentissage du perceptron par gradient local stochastique

```
\begin{aligned} &\mathsf{STOP} = \mathsf{faux} \\ &\epsilon; \; \mathsf{nblter}; \; j = 0; \, t = 0 \\ &\mathsf{Initialiser} \; \mathbf{w}_0 \\ &\mathsf{Jusqu'à} \; \mathsf{ce} \; \mathsf{que} \; \mathsf{STOP} \; \mathsf{soit} \; \mathsf{vrai}   \end{aligned}
```

- 1. Pour j = 1 jusqu'à n:
  - Tirer uniformément un indice i parmi  $\{1,\ldots,n\}$
  - $\mathbf{w}^{\mathsf{t}+1} = \mathbf{w}^{\mathsf{t}} \eta 
    abla_{\mathsf{w}} \ell_{\mathsf{i}}(\mathsf{w})$
  - $t \rightarrow t+1$
- 2. STOP =  $(L(||\mathbf{w}(t) \mathbf{w}(t-1)|| < \epsilon)$  et  $(nblter \le nbMax)$

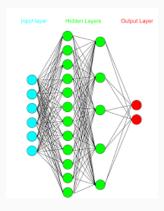
#### Perceptron

- Early stopping: arrêter avant de sur-apprendre (nblter petit)
- Eviter le sur-apprentissage : contrôler la norme du vecteur w pendant l'apprentissage
  - La fonction de perte devient :  $L(\mathbf{w}) = \sum_{i} \ell_{i}(\mathbf{w}) + \lambda ||\mathbf{w}||^{2}$
  - La mise à jour locale devient :  $\mathbf{w}^{t+1} = \mathbf{w}^t(1-2\lambda) \eta \nabla_{\mathbf{w}} \ell_i(\mathbf{w})$

#### Passer au non linéaire

- Définir  $\phi: \mathcal{X} \to \mathcal{F}$  une fonction non linéaire de re-description (en anglais *feature map*)
- Empiler les couches de neurones, chaque couche de neurone étant vue comme une redescription des entrées

## Réseau de neurones formels (perceptron multi-couches)



## **Outline**

Introduction

Perceptron

## Analyse discriminante linéaire

Algorithme des k-plus-proches voisins

Evaluation et sélection de modèles (à lire en plus)

References

## Analyse Discriminante Linéaire (en anglais, LDA) : 2 classes

La plus simple des approches génératrices !

 $ICI: \mathcal{X} = \mathbb{R}^p$ 

#### **LDA**

- 1. p(x|Y=+1) and p(x|Y=-1), densités supposées gaussiennes de matrice de covariance égales
- 2. P(Y = +1) = 1 P(Y = -1) supposés connus

$$h_{LDA}(x)=1$$
 if  $\log\left(rac{P(Y=+1|x)}{P(Y=-1|x)}
ight)\geq 0$ , -1, sinon

## Analyse discriminante linéaire : 2 classes

Question: quelle est la forme géométrique de la frontière de décision définie par le classifieur LDA ?

Notations et définitions

- $\mu_+ \in \mathbb{R}^p$ ,  $\mu_- \in \mathbb{R}^p$
- Σ: matrice symétrique définie positive

i

$$p(x|Y=+1) = \frac{1}{2\pi^{p/2}|\Sigma|^{1/2}} \exp(-\frac{1}{2}(x-\mu_+)^T \Sigma^{-1}(x-\mu_+)) \quad (1)$$

• 
$$P(Y = +1) = p_1$$

$$p(x|Y=-1) = \frac{1}{2\pi^{p/2}|\Sigma|^{1/2}} \exp(-\frac{1}{2}(x-\mu_{-})^{T}\Sigma^{-1}(x-\mu_{-}))$$
 (2)

• 
$$P(Y=-1)=1-p_1$$

## Réponse

Formule de Bayes:

$$P(Y=i|x) = \frac{p(x|Y=i)P(Y=i)}{p(x)}$$

Puis, on cherche à définir la frontière de décision induite par le classifieur LDA:

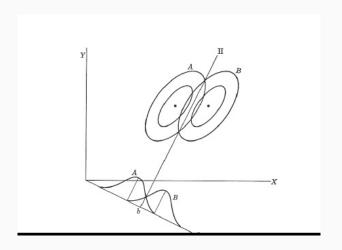
## Analyse Discriminante Linéaire

$$\begin{split} \log\left(\frac{P(Y=+1|x)}{P(Y=-1|x)}\right) &= 0\\ \text{soit } \log\left(\frac{p(x|Y=1)P(Y=1)}{p(x|Y=-1)P(Y=-1)}\right) &= 0 \end{split}$$

$$\begin{split} \log(\frac{\rho_1}{1-\rho_1}) + \log(\frac{1}{(2\pi)^{\frac{\rho}{2}}|\Sigma|^{\frac{1}{2}}}) - \frac{1}{2}(x-\mu_+)^T \Sigma^{-1}(x-\mu_+) - \log(\frac{1}{(2\pi)^{\frac{\rho}{2}}|\Sigma|^{\frac{1}{2}}}) + \frac{1}{2}(x-\mu_-)^T \Sigma^{-1}(x-\mu_-) = 0 \\ \times^T \Sigma^{-1}(\mu_+ - \mu_-) + \log(\frac{\rho_1}{1-\rho_1}) - \frac{1}{2}(\mu_+ - \mu_-)^T \Sigma^{-1}(\mu_+ - \mu_-) = 0 \end{split}$$

## Analyse Discriminante Linéaire

Le cas de deux classes aux matrices de covariances identiques



## Estimation des paramètres (LDA)

Maximum de vraisemblance pour chaque sous-échantillon correspondant à une classe.

On se rappelle que la moyenne empirique (resp. la covariance empirique) est exactement l'estimateur de l'espérance par Maximum de vraisemblance.

## Estimation des paramètres (LDA)

- Prendre les estimations empiriques définies à partir des données
- $S_+ = \{(x_i, y_i) \in S, \text{ s.t } y_i = 1\}$
- $S_- = \{(x_i, y_i) \in S, \text{ s.t } y_i = -1\}$

$$\hat{\mu_{+}} = \frac{1}{|S_{+}|} \sum_{x_{i} \in S_{+}} x_{i}$$

$$\hat{\mu_{-}} = \frac{1}{|S_{-}|} \sum_{x_{i} \in S_{-}} x_{i}$$

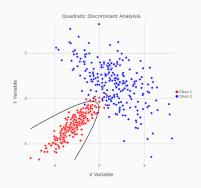
$$\hat{\Sigma} = \frac{1}{2} \left( \frac{1}{|S_{+}|} \sum_{x_{i} \in S_{+}} (x_{i} - \hat{\mu}_{+})(x_{i} - \hat{\mu}_{+})^{T} + \frac{1}{|S_{-}|} \sum_{x_{i} \in S_{-}} (x_{i} - \hat{\mu}_{-})(x_{i} - \hat{\mu}_{-})^{T} \right)$$

## Calculs pour LDA

- 1. Transformer les données (sphere the data) selon la covariance commune diagonalisée:
  - $\widehat{\Sigma} = UDU^T$
  - $X^* = D^{-1/2}U^TX$
- 2. Les données de chaque classe ont pour covariance l'identité: simplification de la fonction  $f_{LDA}$  avec covariance = identité
- 3. Alors, pour prédire la classe d'un nouveau point, l'associer au "centre" de la classe la plus proche modulo l'effet des *a priori*.

## Analyse Discriminante Quadratique

Cas de matrices de covariance différentes. Le terme quadratique en x reste dans l'équation.



#### **Outline**

Introduction

Perceptron

Analyse discriminante linéaire

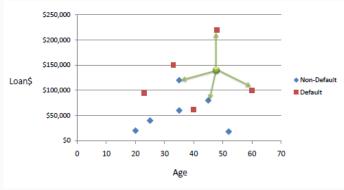
Algorithme des k-plus-proches voisins

Evaluation et sélection de modèles (à lire en plus)

References

## Deuxième exemple

#### Le classifieur des k-plus-proches voisins:



## Régression par K-plus-proches voisins

K-PPV (en anglais K-Nearest neighbors: K-NN)

$$\hat{f}_{KNN}(x) = \frac{1}{L} \sum_{\ell=1}^{K} y_{(\ell)}$$

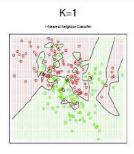
avec:

- Soit K un entier strictement positif.
- Soit d une métrique définie sur ×
- $S = \{(x_i, y_i), i = 1, ..., n\}$
- Pour une donnée x, on définit la permutation d'indices  $(\cdot)$  dans  $\{1, \ldots, n\}$  telle que:
  - $d(x, x_{(1)}) \leq d(x, x_{(1)}) \ldots \leq d(x, x_{(n)})$
- $S_x^K = \{x_{(1)}, \dots, x_{(K)}\}$ : K premiers voisins de x

### Le paramètre de lissage K

Comment choisir K? K: trop petit : la fonction f est trop sensible aux données : large variance

 $\mathsf{K}:\mathsf{trop}\ \mathsf{large}:\mathsf{la}\ \mathsf{fonction}\ f\ \mathsf{devient}\ \mathsf{trop}\ \mathsf{peu}\ \mathsf{sensible}\ \mathsf{aux}\ \mathsf{donn\acute{e}es}:\mathsf{biais}$  important



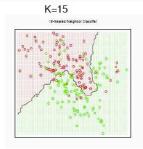


Fig 2.2, 2.3 of HTF01

Book

of Hastie, Tibshirani and Friedman (The elements of statistical learning, Springer) Question: Tracer la frontière de décision lorsque K=50

#### Décomposition biais-variance

On suppose:  $Y = f(X) + \epsilon$  avec  $\epsilon$  centré et de variance  $\sigma_{\epsilon}^2$ . x est fixé.

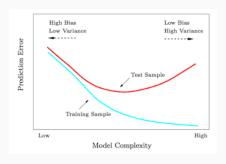
$$\begin{split} \mathbb{E}_{S,Y}[(Y-\hat{f}(x))^2] &= \mathbb{E}_{S,Y}[Y^2+\hat{f}(x)-2Y\hat{f}(x)] \\ &= \mathbb{E}[Y^2] + \mathbb{E}_S[\hat{f}(x)^2] - 2\mathbb{E}_S[Y\hat{f}] \\ &= VarY + \mathbb{E}[Y]^2 + Va\hat{r}(x) + \mathbb{E}_S[\hat{f}]^2 - 2\mathbb{E}[f(x) + \epsilon]\mathbb{E}_S[\hat{f}(x)] \\ &= \sigma_{\epsilon}^2 + \mathbb{E}[f(x) + \epsilon]^2 + \mathbb{E}_S[\hat{f}]^2 - 2\mathbb{E}_S[f(x)]\mathbb{E}_S[\hat{f}(x)] + Va\hat{r}(x) \\ &= \sigma_{\epsilon}^2 + \mathbb{E}_S[\hat{f}(x) - f(x)]^2 + Va\hat{r}f(x) \\ &= \sigma_{\epsilon}^2 + \mathbb{B}iais^2 + variance \end{split}$$

Terme incompressible : bruit des données

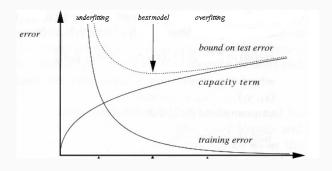
Biais au carré: mesure à quel point  $\hat{f}$  est loin de la cible

Variance de  $\hat{f}(x)$ : mesure à quel point  $\hat{f}(x)$  est sensible aux données

### Dilemne Biais variance



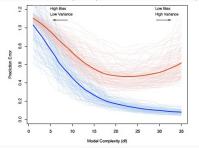
### Dilemne Biais variance et risque structurel



complexité de la famille de fonctions

#### Biais variance - Vision empirique

Soit M datasets  $S_1, \ldots, S_M$  de même taille n. Apprenons pour chacun d'entre eux, une fonction  $\hat{f}$  sous différentes contrainte de complexité (ici nombre degré de libertés n/K). On a tracé sur cette figure la courbe des erreurs en apprentissage (bleue) et des erreurs en test (rouge) pour chacune



des fonctions construites:

Book of Hastie, Tibshirani and Friedman (The elements of statistical learning, Springer)

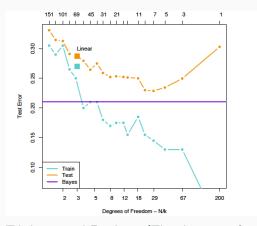
#### Décomposition biais-variance des k-plus-proches voisins

Posons  $x_0$ . L'aléa vient de l'échantillon utilisé pour apprendre  $\hat{f}$  et de Y. On peut montrer que:

$$E_{S,Y}[(Y - \hat{f}(x_0))^2] = \sigma_{\epsilon}^2 + (f(x_0) - \frac{1}{K} \sum_{\ell=1}^K f(x_{(\ell)})^2 + \frac{\sigma_{\epsilon}}{K})^2$$

K contrôle le terme de variance : plus grande est la valeur de K, plus la variance décroit; mais K contrôle aussi le biais, plus petite est la valeur de K, plus petit est le biais : nous sommes en plein *dilemne biais-variance*.

# Erreur de test en fonction de $\frac{n}{K}$



Book of Hastie,

Tibshirani and Friedman (The elements of statistical learning, Springer)

#### Questions

- Quelle est la force de cette méthode ?
- Quelle est sa faiblesse ?

#### **Outline**

Introduction

Perceptron

Analyse discriminante linéaire

Algorithme des k-plus-proches voisins

Evaluation et sélection de modèles (à lire en plus)

References

- Définir
  - l'espace de représentation des données

- Définir
  - l'espace de représentation des données
  - la classe des fonctions de classification binaire considérées

- Définir
  - l'espace de représentation des données
  - la classe des fonctions de classification binaire considérées
  - la fonction de coût à minimiser pour obtenir le meilleur classifieur dans cette classe

- Définir
  - l'espace de représentation des données
  - la classe des fonctions de classification binaire considérées
  - la fonction de coût à minimiser pour obtenir le meilleur classifieur dans cette classe
  - l'algorithme de minimisation de cette fonction de coût

- Définir
  - l'espace de représentation des données
  - la classe des fonctions de classification binaire considérées
  - la fonction de coût à minimiser pour obtenir le meilleur classifieur dans cette classe
  - l'algorithme de minimisation de cette fonction de coût
  - une méthode de sélection de modèle pour définir les hyperparamètres

- Définir
  - l'espace de représentation des données
  - la classe des fonctions de classification binaire considérées
  - la fonction de coût à minimiser pour obtenir le meilleur classifieur dans cette classe
  - l'algorithme de minimisation de cette fonction de coût
  - une méthode de sélection de modèle pour définir les hyperparamètres
  - une méthode d'évaluation des performances

#### Sélection ou évaluation de modèle ?

- Estimer les performances de différents modèles afin de choisir le meilleur : sélection de modèle
- Ayant choisi un modèle, estimer son erreur en généralisation (le vrai risque) : évaluation de modèle

Aujourd'hui, nous nous concentrons sur ces deux questions.

### Premier exemple

Un classifier linéaire dans le plan:

$$h(x) = \operatorname{signe}(\beta_1 x_1 + \beta_2 x_2 + \beta_0)$$
(3)

Apprendre  $h_{\beta}$  en minimisant:  $\sum_{i=1}^{n} L(y_i, h(x_i)) + \lambda \|\beta\|_2^2$  OU  $\sum_{i=1}^{n} L(y_i, h(x_i)) + \lambda \|\beta\|_1$  Quelle valeur de  $\lambda$  choisir ?

### Premier exemple

- 1. Quelle valeur de  $\lambda$  choisir ? Algorithme de sélection  $\,\tilde{\lambda}\,$
- 2. Une fois que  $\tilde{\lambda}$  est choisi, j'applique mon algorithme d'apprentissage et j'obtiens  $\hat{h}_{\tilde{\lambda}}$ : comment évaluer ses performances ?

### Deuxième exemple

Le classifieur des k-plus-proches voisins: classifier paresseux : pas besoin d'algorithme d'apprentissage ! J'ai besoin des données dites d'apprentissage, d'une métrique et de la valeur de k.

- Comment choisir la valeur de K ?
- Ayant choisi  $\tilde{K}$ , comment estimer l'erreur en généralisation de ce K-NN ?

#### Validation croisée 1

Nota Bene :  $\mathcal{S}$  ensemble de données dédié à la construction du modèle En aucun cas, l'ensemble de TEST !

Diviser les données  $\mathcal{S}$ , réservés à la validation, en B parties de même taille et disjointes  $S_{b=1},\ldots,D_{b=B}$  avec  $|D_b|=n/B$ . Les données sont réparties par tirage uniforme sans remise.

#### Validation croisée

- 1. Pour  $b \in \{1, ..., B\}$ :
  - Entrainer le modèle issu de paramètre  $\lambda$  sur toutes les données sauf  $D_b$  pour obtenir un estimateur  $\hat{h}_{\lambda,n}^b$
  - Calculer sur les données restantes  $D_b$  (test) le risque empirique

$$R_{n,b}(\lambda) = \frac{1}{n/B} \sum_{j \in D_b} L(x_j, y_j, \hat{h}_{\lambda,n}^b)$$

2. Calculer le risque empirique moyen de  $\lambda$  (dit 'de cross-validation')

$$R_{n,CV}^{B}(\lambda) = \frac{1}{B} \sum_{b=1}^{k} R_{n,b}(\lambda)$$

#### Trouver $\lambda$

Répéter cette procédure sur tous les  $\lambda \in \Lambda$  considérés (ou sur une grille sur  $\lambda$  est un paramètre continu) et choisir

$$\hat{\lambda}_{n,B} = \arg\min_{\lambda \in \Lambda} R_{n,CV}(\lambda). \tag{4}$$

## Sélection Erreur d'apprentissage / Erreur de test

On sélectionne sur  $\mathcal{S}_{val}$  On apprend sur  $\mathcal{S}_{app}$  en utilisant  $\tilde{\lambda}$  On teste sur  $\mathcal{S}_{test}$ 

 ${\rm Err}_{CV,val}$  nous dit à quel type d'erreur en généralisation nous attendre en apprenant sur un ensemble de taille  $n_{val}-n_{val}/B.$   ${\rm Err}_{\mathcal{S}_{app}}$  nous dit à quel point le classifieur a bien réussi à approcher les données d'apprentissage  ${\rm Err}_{\mathcal{S}_{test}}$  nous dit à quel point le classifieur a bien réussi à approcher les données (nouvelles) de test

### Sélection Erreur d'apprentissage / Erreur de test

Dans de nombreux articles :  $\mathcal{S}_{\textit{val}} = \mathcal{S}_{\textit{app}}$ 

On sélectionne le modèle (la valeur de  $\lambda$ ) sur  $\mathcal{S}_{app}$  par validation croisée On apprend sur  $\mathcal{S}_{app}$  en utilisant  $\tilde{\lambda}$  obtenu de la validation croisée On teste sur  $\mathcal{S}_{test}$ 

 ${\rm Err}_{CV,val}$  nous dit à quel type d'erreur en généralisation nous attendre en apprenant sur un ensemble de taille  $n_{val}-n_{val}/B$ .  ${\rm Err}_{\mathcal{S}_{app}}$  nous dit à quel point le classifieur a bien réussi à approcher les données d'apprentissage  ${\rm Err}_{\mathcal{S}_{test}}$  nous dit à quel point le classifieur a bien réussi à approcher les données (nouvelles) de test

#### **Outline**

Introduction

Perceptron

Analyse discriminante linéaire

Algorithme des k-plus-proches voisins

Evaluation et sélection de modèles (à lire en plus)

References

#### References

- Formal neuron / Perceptron
  - Léon Bottou: http: //cilvr.cs.nyu.edu/diglib/lsml/bottou-sgd-tricks-2012.pdf
- Performance evaluation / model selection
  - Chapter 4 and 7 of Elements of statistical learning, Hastie, Tlbshirani and Friedman.
  - A.-L. Boulesteix, Ten rules for reducing overoptimistic reporting in methodological computational research, http://journals.plos.org/ploscompbiol/article/file?id=10. 1371/journal.pcbi.1004191&type=printable