APPRENTISSAGE SUPERVISÉ
TROISIÈME PARTIE

Les méthodes dites "boîtes noires"

Nous parlerons dans ce cours de deux types de méthodes : les **SVM** et les **réseaux de neurones**. Elles ont ceci en commun qu'on parle de ces méthodes comme des **boîtes noires** :

- elles reposent sur des calculs complexes
- les résultats sont difficilement interprétables
- elles sont populaires car performantes

Le modèle de **Random Forests** (cours 7) peut aussi être considéré comme une boîte noire.

De manière générale, les avis sur la question "tel modèle est-il une boîte noire?" ne trouve pas de consensus (comme toute question qui implique l'interprétation humaine).

Outline

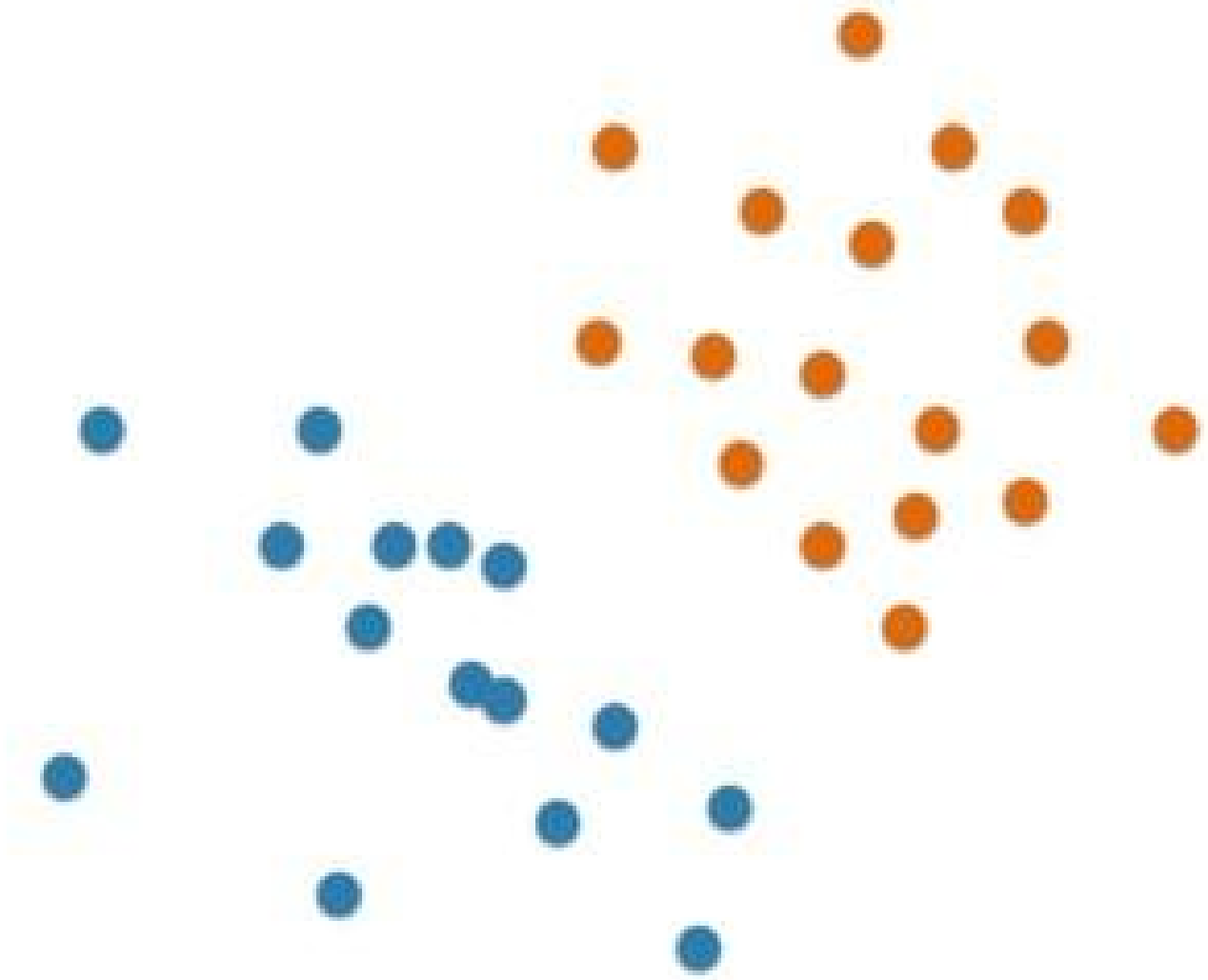
Introduction

L'arrivée des **SVMs** en **1992** marque un tournant dans l'histoire du **machine learning**.

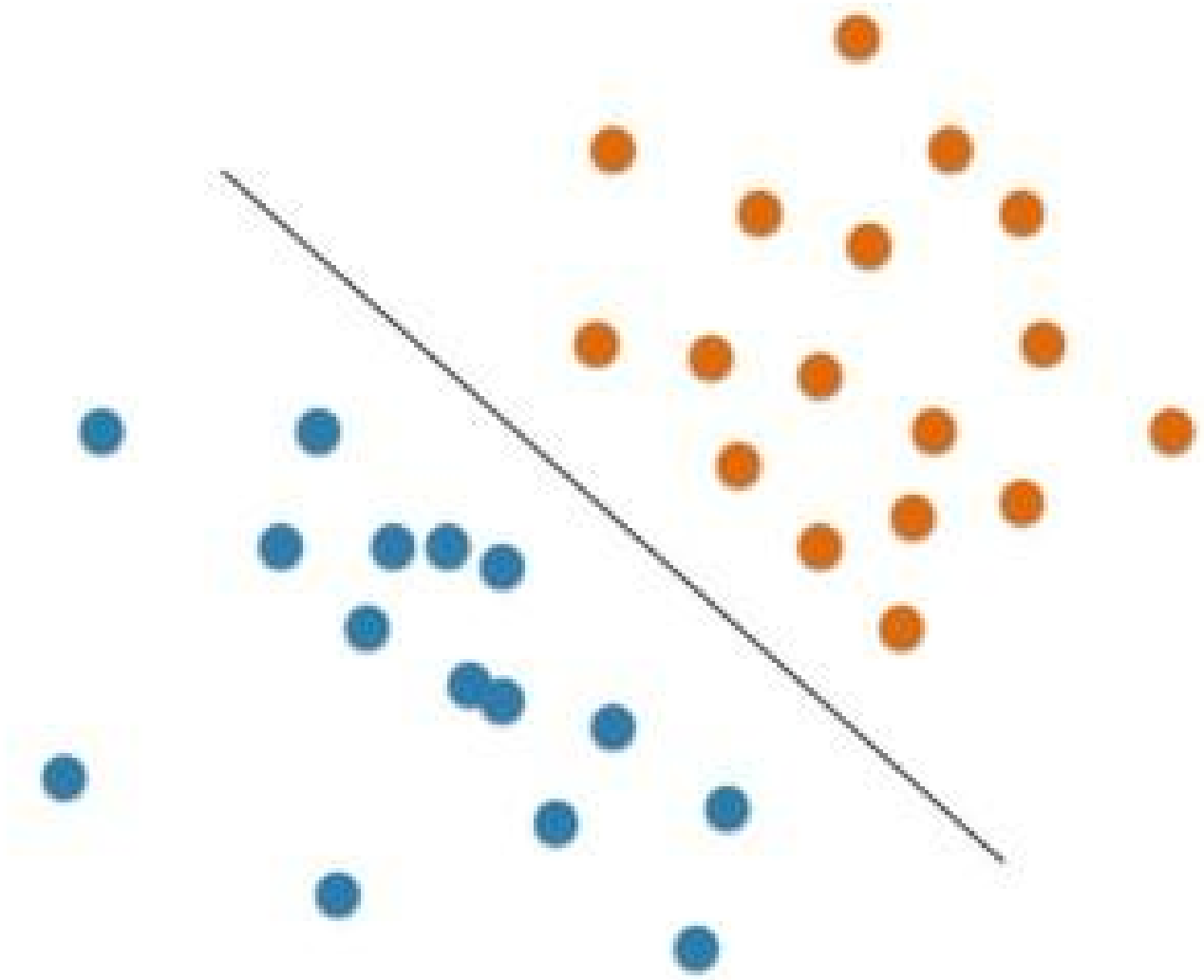
La théorie de laquelle ces méthodes sont issues est alors nouvelle, intuitive et permet de résoudre des problèmes complexes dans un **nouveau paradigme**.

Les notions mathématiques à la base des SVMs sont difficiles. Nous n'aborderons dans ce cours que les concepts.

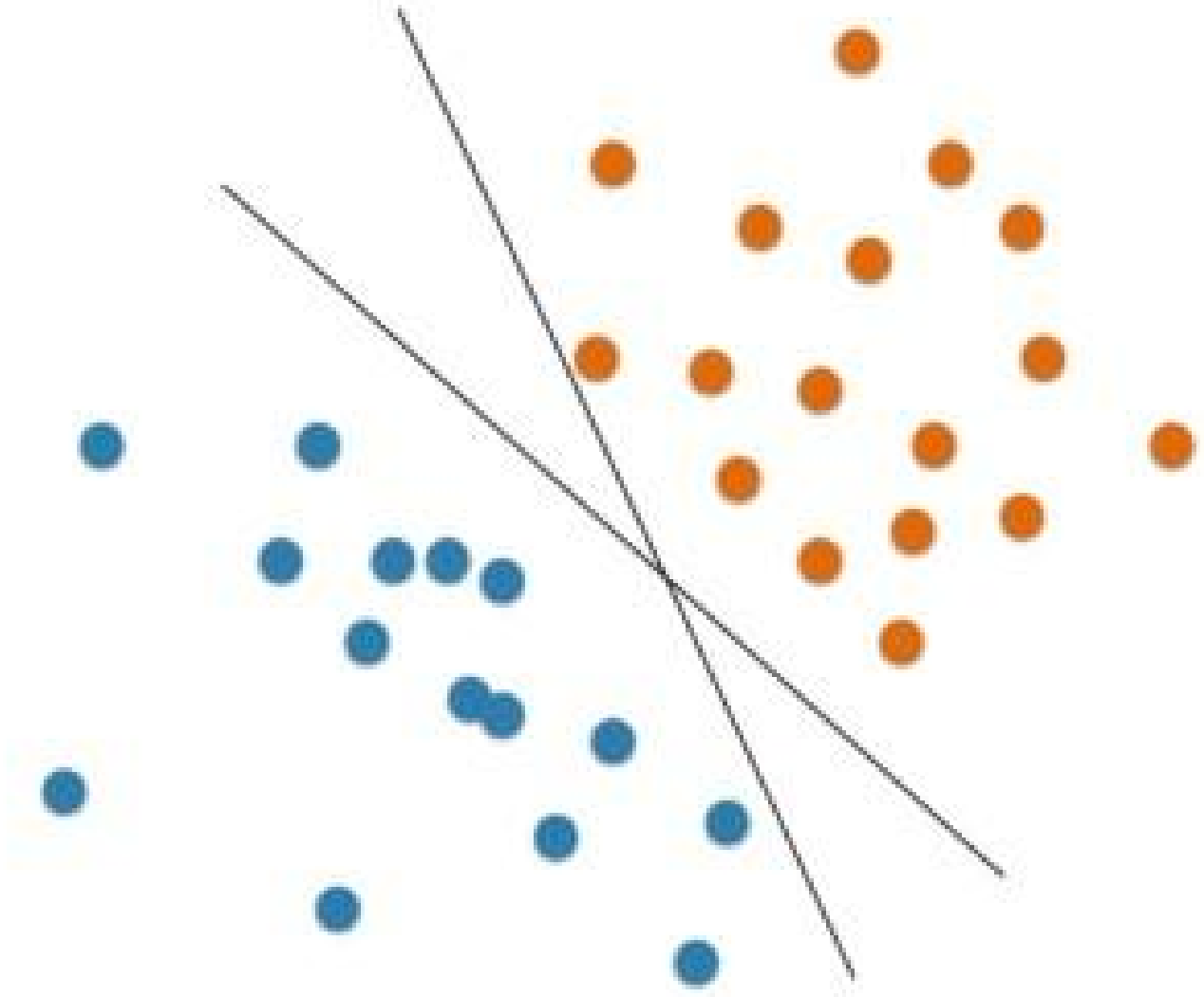
Les classifieurs à vaste marge : cas de données linéairement séparables



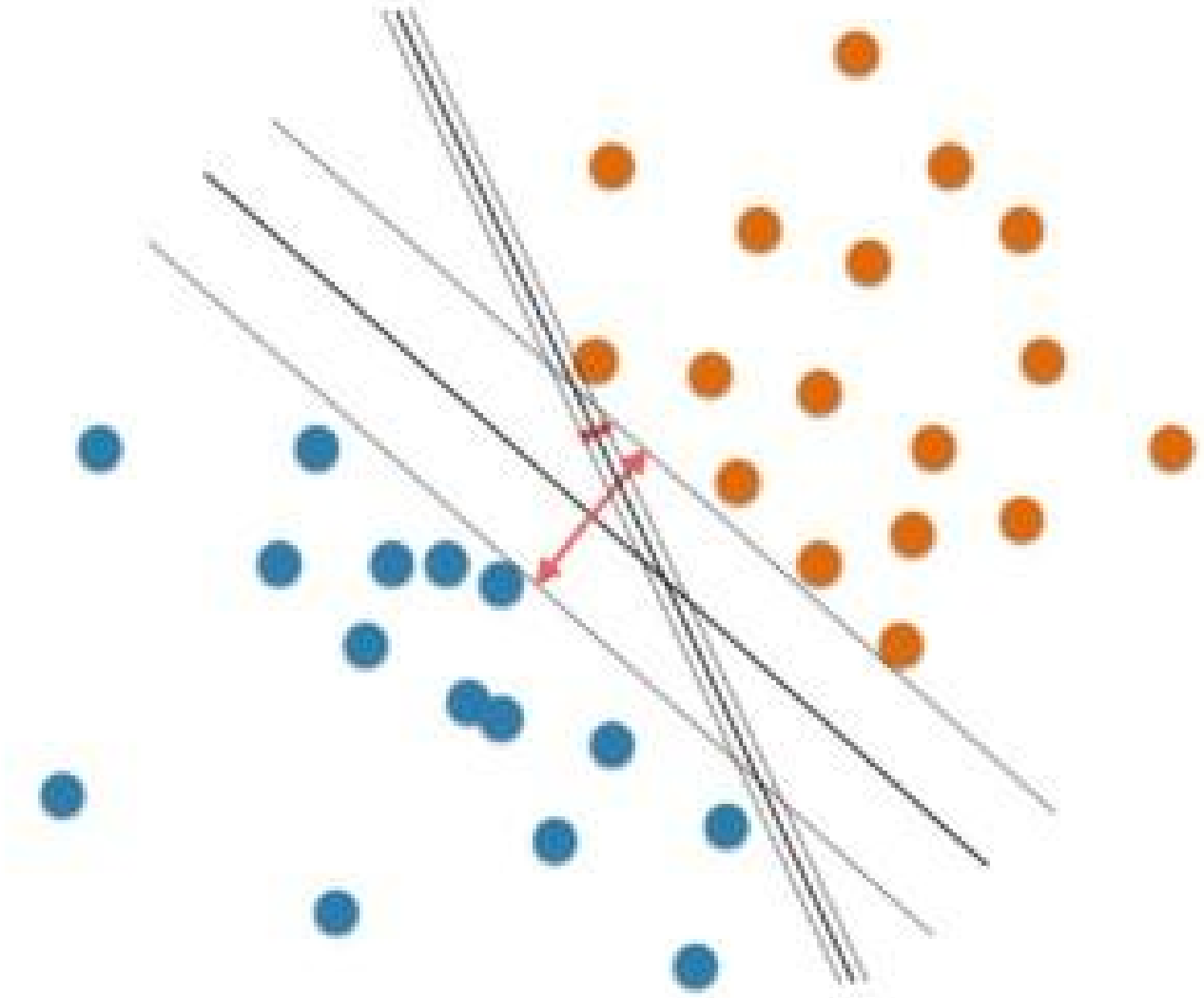
Les classifieurs à vaste marge : cas de données linéairement séparables



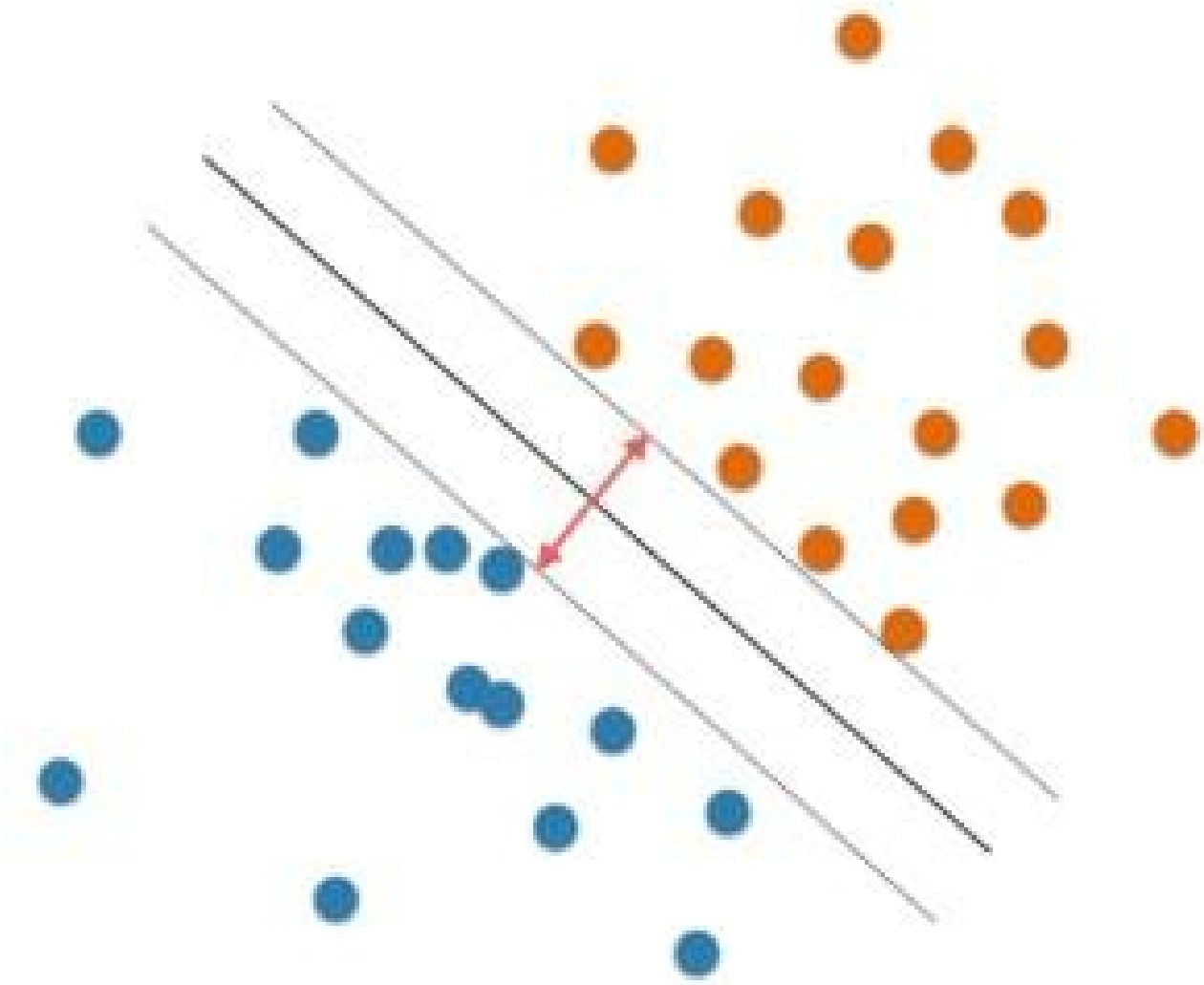
Les classifieurs à vaste marge : cas de données linéairement séparables



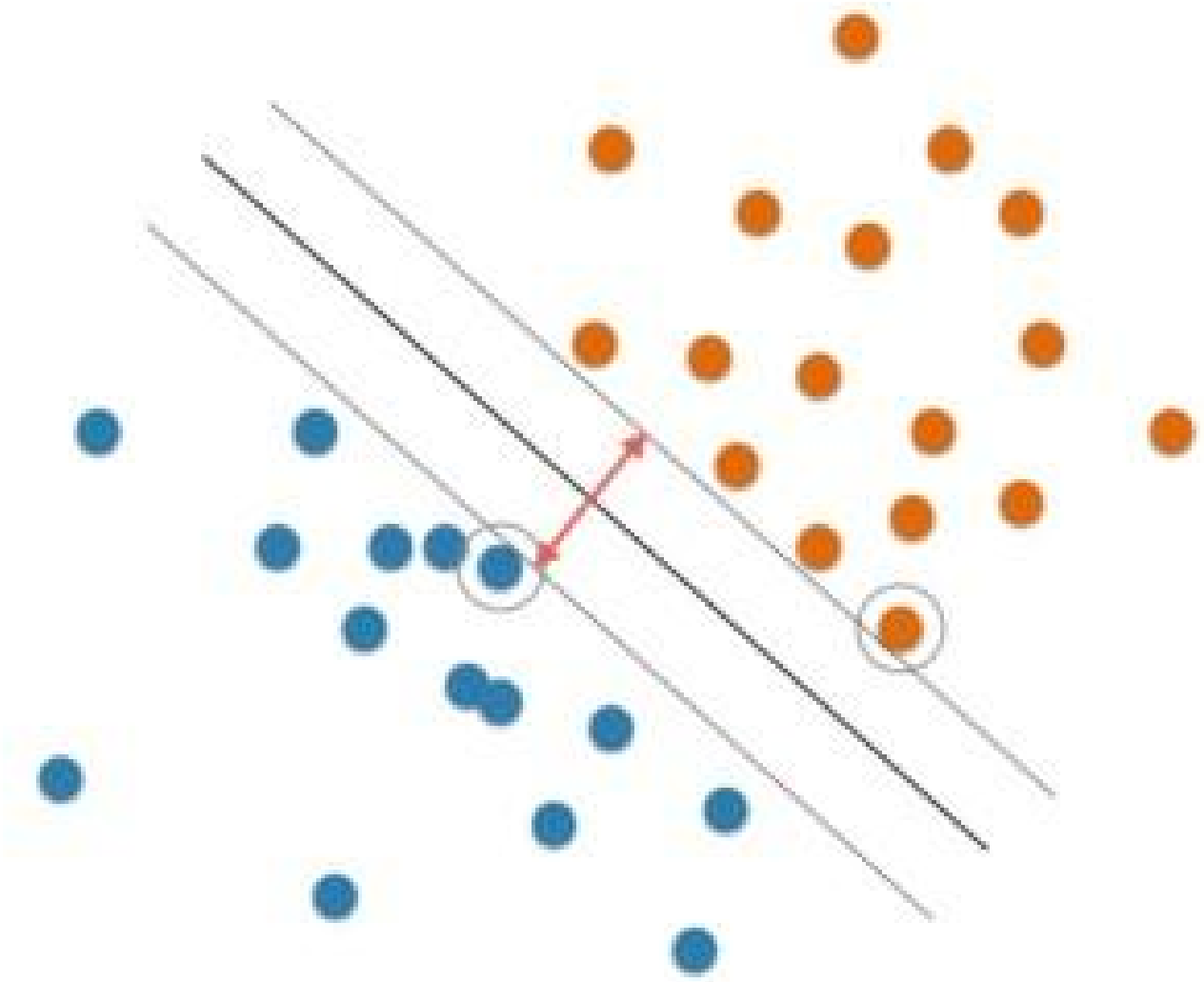
Les classifieurs à vaste marge : cas de données linéairement séparables



Les classifieurs à vaste marge : cas de données linéairement séparables

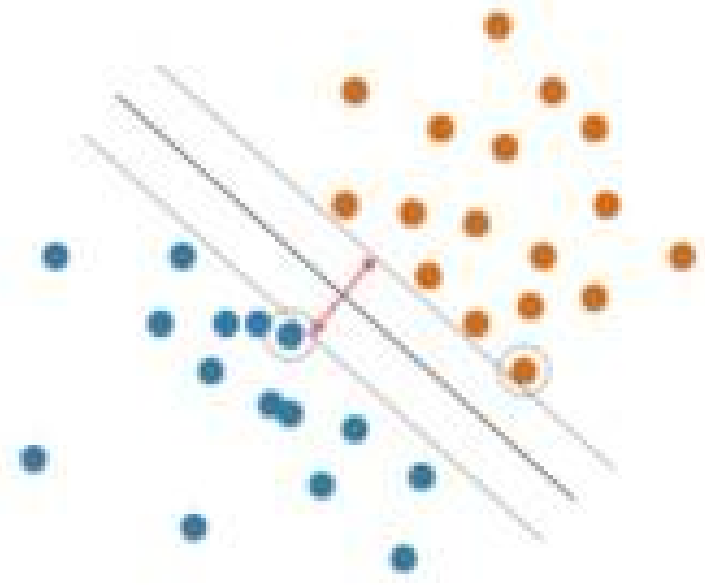


Les classifieurs à vaste marge : cas de données linéairement séparables



Les classifieurs à vaste marge : cas de données linéairement séparables

- Il existe une **infinité** de droites séparant les points.
- On cherche la **séparation linéaire** qui donne la plus grande **marge**.
- Les "bords" de cette marge s'appuient sur des **vecteurs supports**.
- On trouve cette séparation en résolvant un problème d'**optimisation convexe**.



Intuition

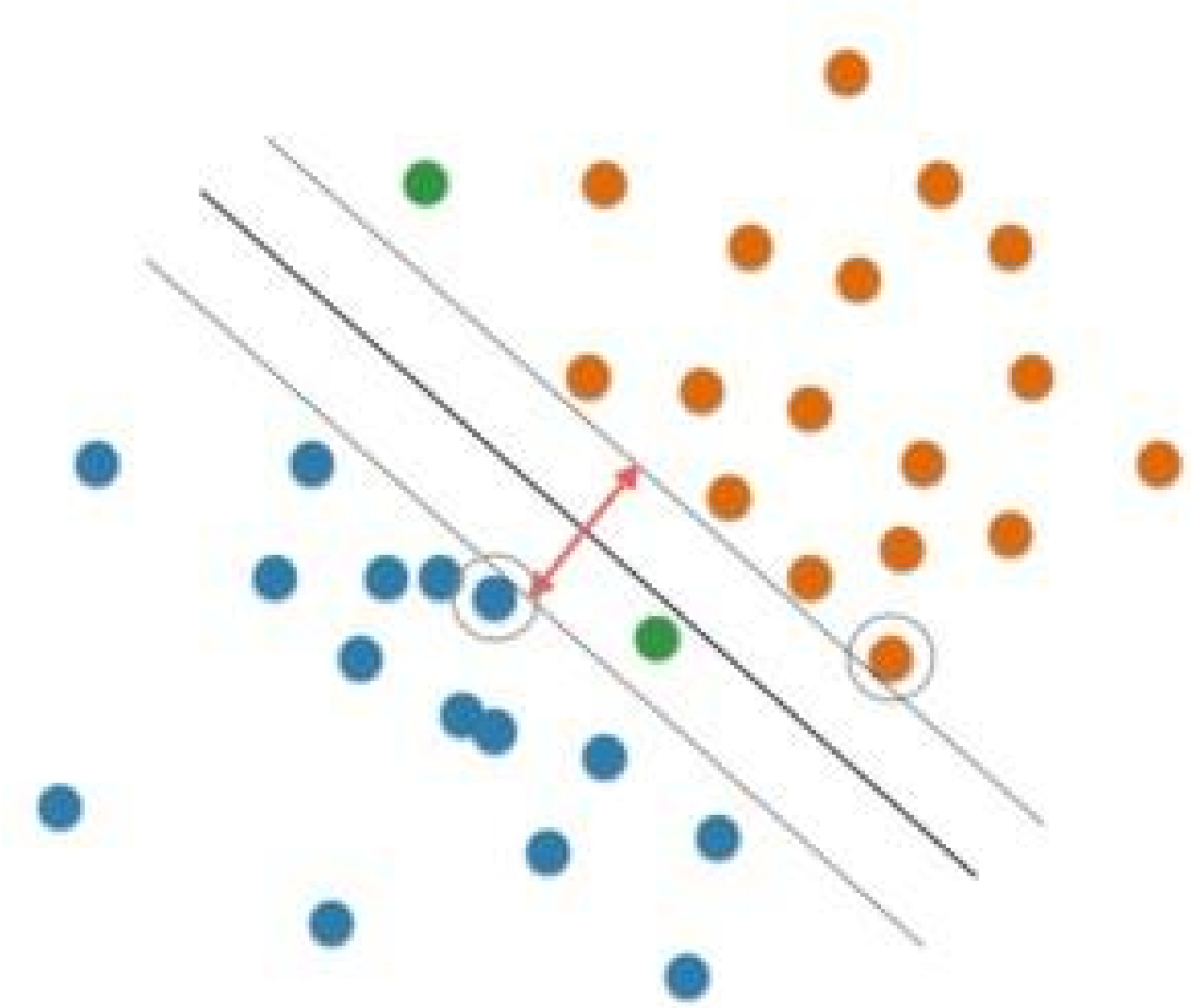
Les **vecteurs supports** sont les points les plus **ambigus** et donc les plus **difficiles à classifier**.

Ce sont ces points qui influencent le choix de la **meilleure droite** : si ces points changent, la droite change.

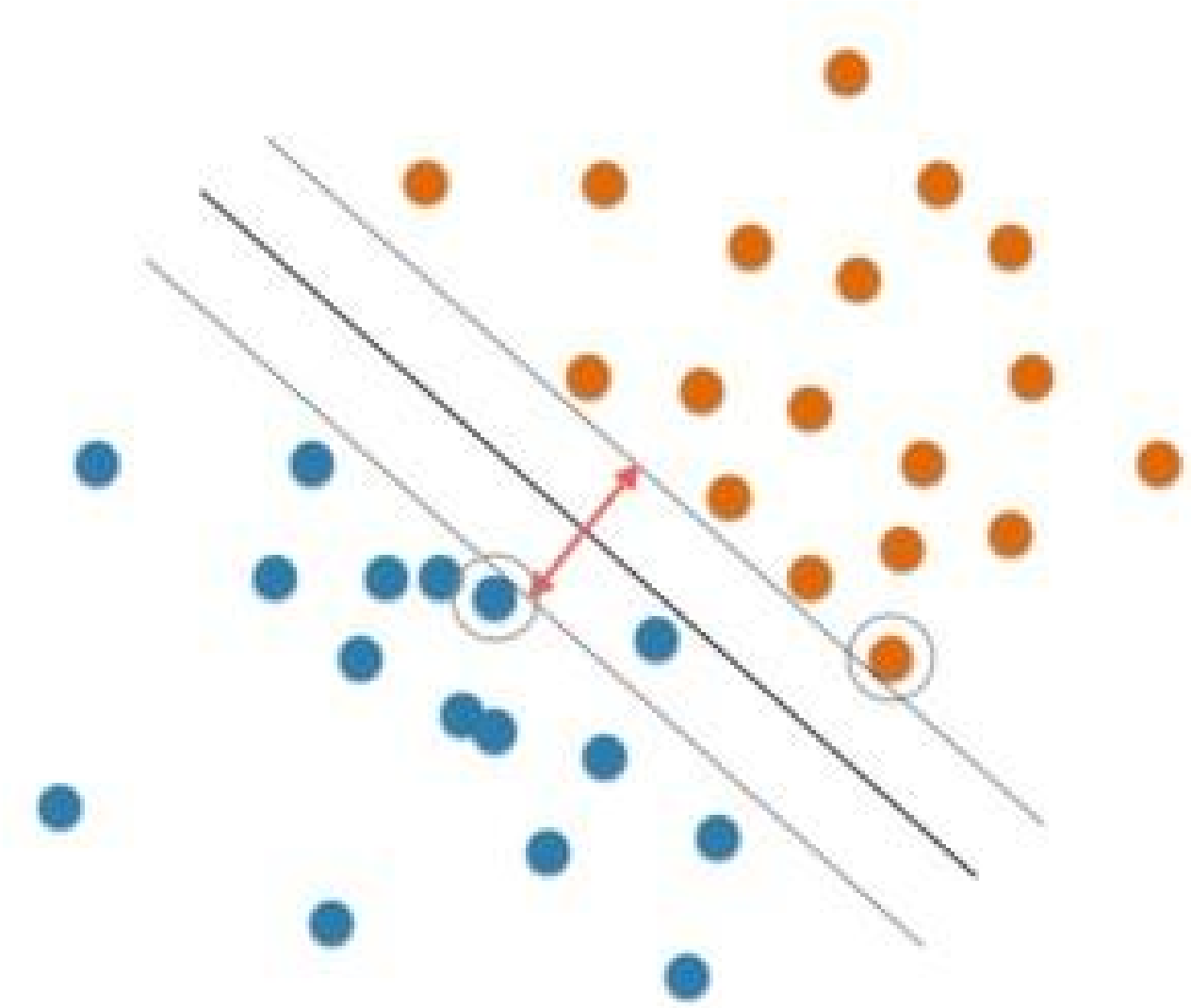
En quelque sorte, on se met dans un "worst-case" scenario : puisque l'on sait classifier les points les plus ambigus, le système devrait être **robuste**.

Plus la marge est grande, plus l'on est sûrs de nous.

Phase de test



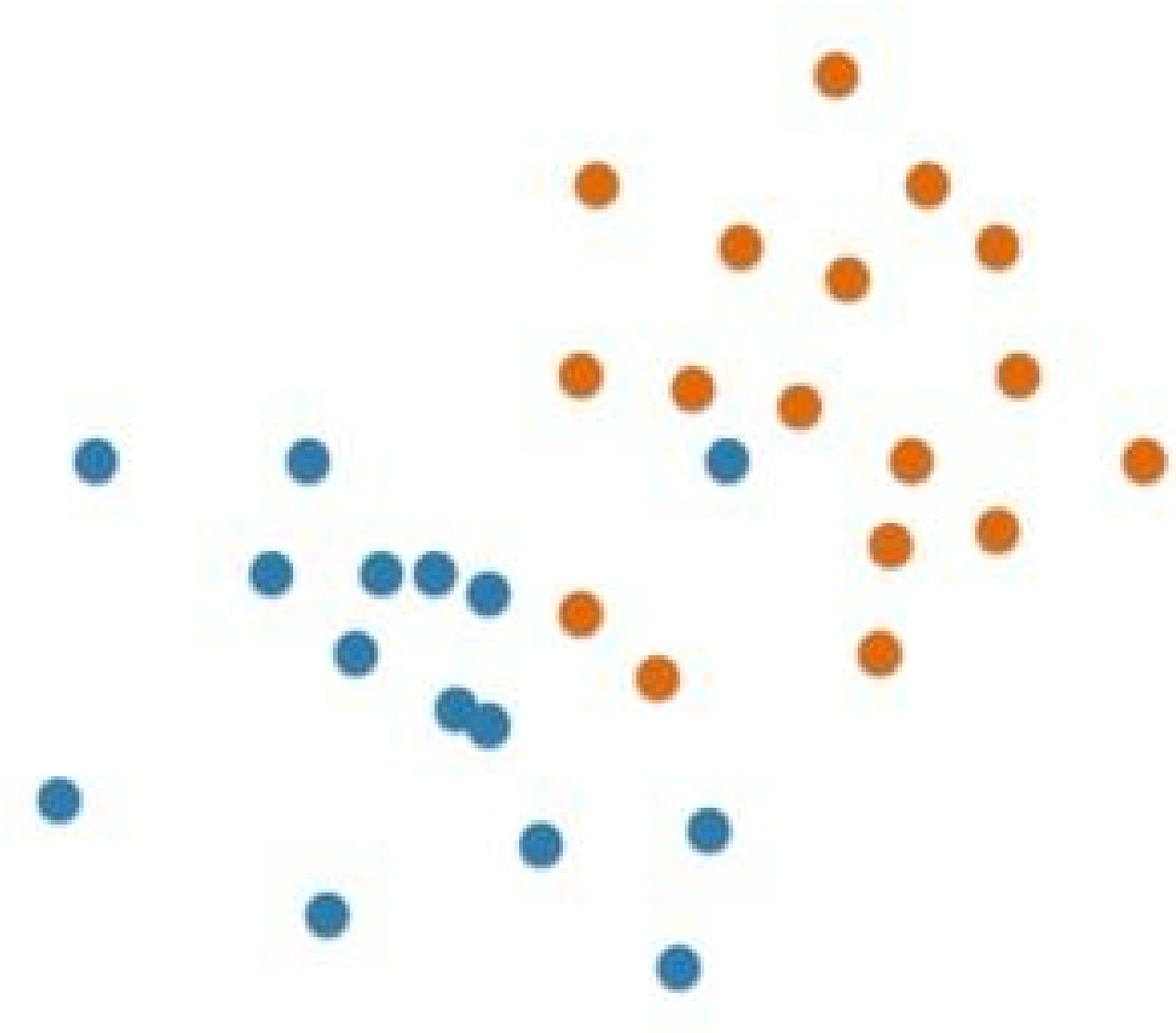
Phase de test



Mais...

Les données sont rarement aussi simples !

Cas de données non linéairement séparables

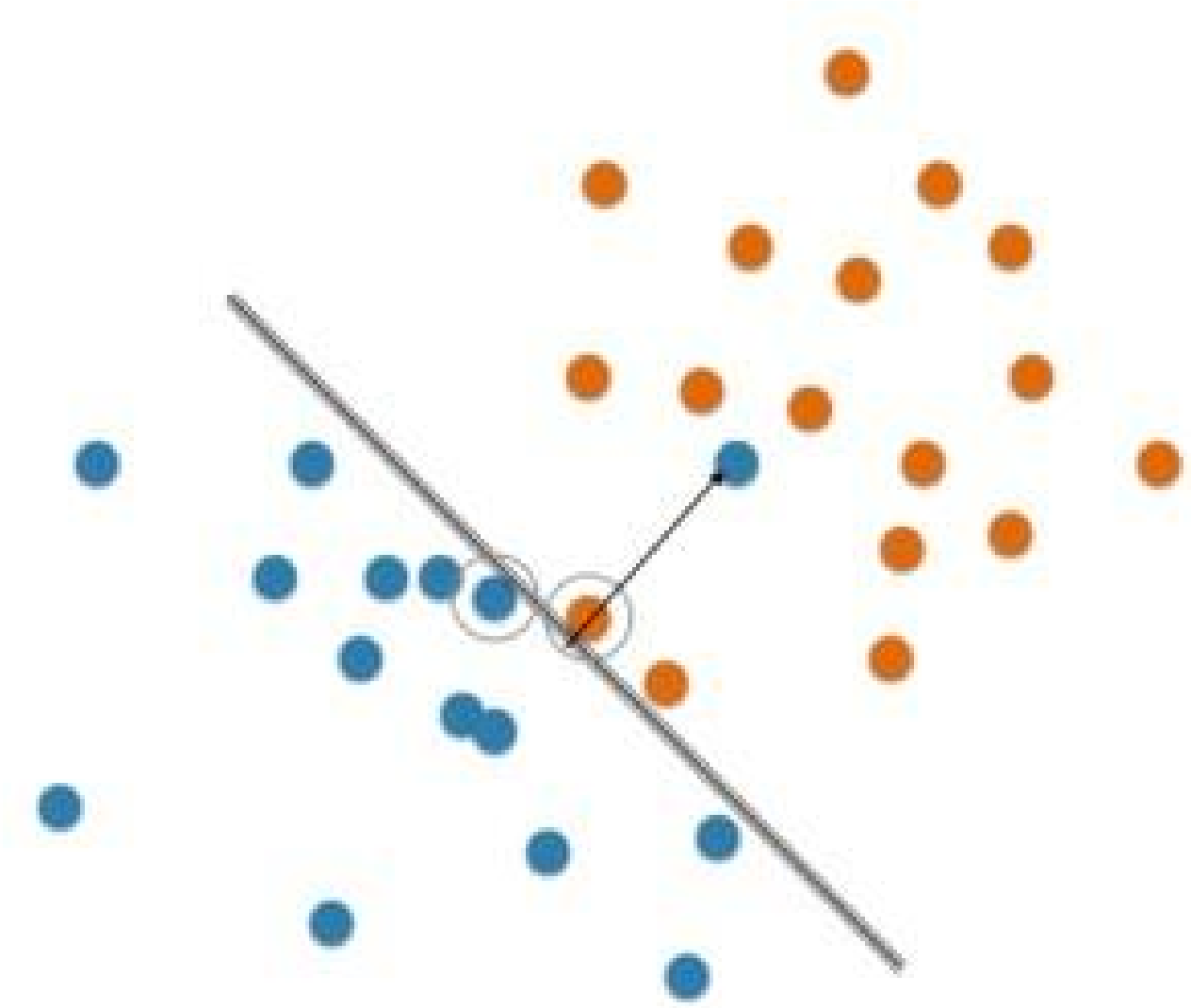


Cas de données non linéairement séparables

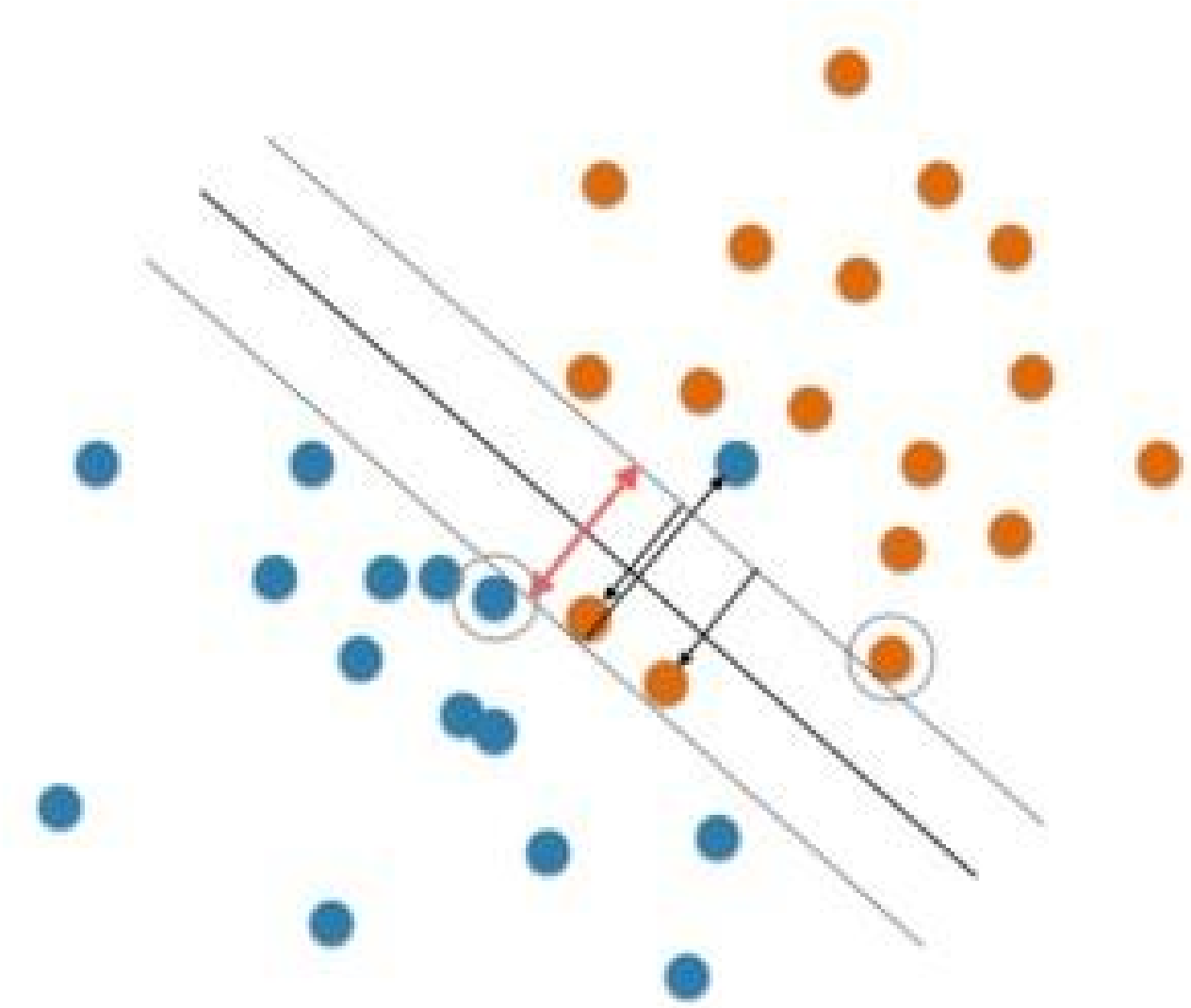
On **autorise** des erreurs de classification sur l'**ensemble d'entraînement**. Il sera moins sensible aux **outliers** et donc plus robuste.

Mais jusqu'à quel point autoriser ces erreurs ?

Cas de données non linéairement séparables

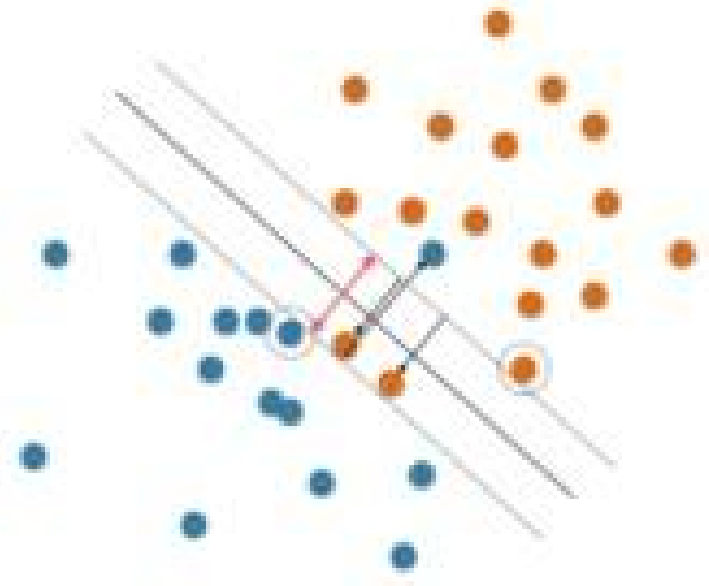


Cas de données non linéairement séparables



Cas de données non linéairement séparables

- C'est un **paramètre de régularisation** qui décide à quel point on peut faire des erreurs.
  Plus il est grand, plus les erreurs sont autorisées et plus la marge est large (ou l'inverse selon les définitions).
- On préfère des erreurs sur l'ensemble d'entraînement plutôt que du **sur-apprentissage**.
- Il faut trouver le bon **compromis** entre peu d'erreurs et une marge importante.
- Le paramètre de régularisation est optimisé en **validation croisée**.

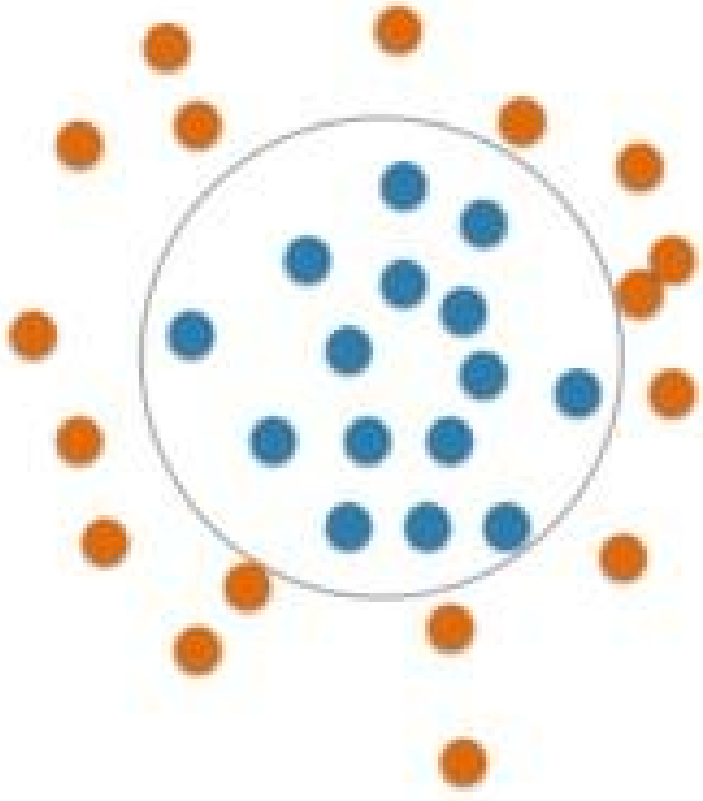


Démo

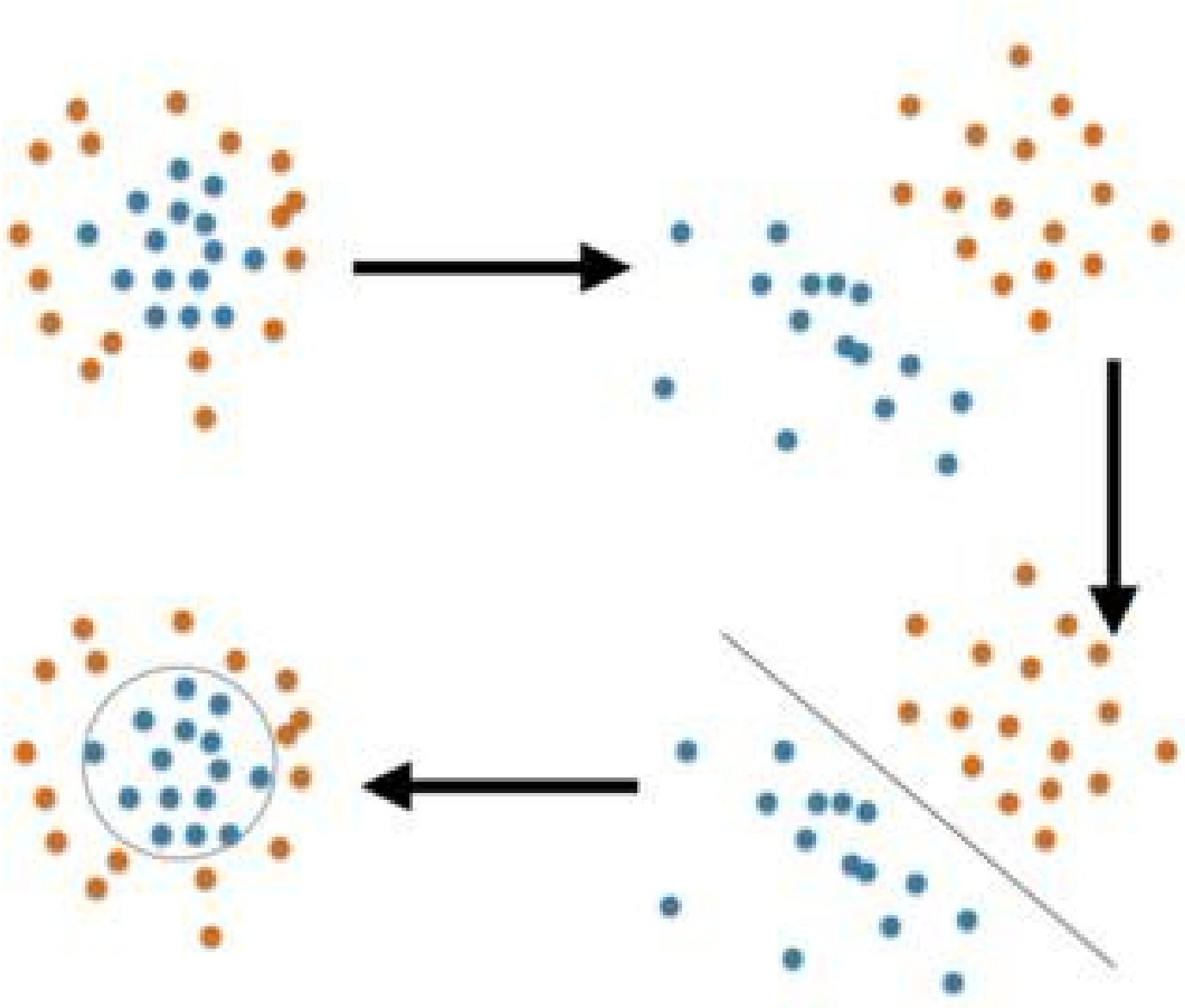
Démo

Et si le cas linéaire n’est pas adapté?

Et si le cas linéaire n’est pas adapté?



Et si le cas linéaire n’est pas adapté?



Les noyaux

- L'idée est donc d'appliquer une **transformation** aux données pour se trouver dans un cas où le problème redevient linéaire.
- Cette transformation passe par ce qu'on appelle un **noyau**.
- Un noyau est une mesure de **similarité** souvent notée K (kernel) qui mesure à quel point deux vecteurs sont proches.
- En réalité, on n'applique pas la transformation à chaque vecteur directement mais à leur similarité deux à deux.
- Il existe différents types de noyaux. Il faut choisir celui qui est le plus adpté aux données.

Quelques noyaux

- Le noyau **linéaire**

$$K(x, y) = x_1y_1 + x_2y_2 + \ldots + x_ny_n$$

- Le noyau **RBF**

$$K(x, y) = \exp(-\gamma((x_1 - y_1)^2 + (x_2 - y_2)^2 + \ldots + (x_n - y_n)^2))$$

- Le noyau **polynomial**

$$K(x, y) = (x_1y_1 + x_2y_2 + \ldots + x_ny_n + c)^q$$

- Et surtout : le noyau customisé ! Sans même savoir décrire les objets, il suffit de savoir décrire leur similarité par un noyau pour faire fonctionner un SVM.

Les noyaux **déforment** donc les distances entre les points et changent par conséquent la forme du problème. Nous n'irons pas plus loin dans l'explication car l'intuition s'arrête là!

Démo

Démo

Conclusion sur les SVMs

Avantages :

- Très performants.
- Ne nécéssitent que la similarité des objets en entrée et non les objets en eux-mêmes. On peut donc traiter images, séquences biologiques, vidéos... Il n'y a pas de limite.
- Très efficaces en grande dimension.

Inconvénients :

- Il faut pouvoir fournir un noyau intelligent, sans quoi le modèle échoue.
- Difficiles à interpréter
- Dépendent souvent de paramètres à optimiser.
- Parfois long !

En Python :

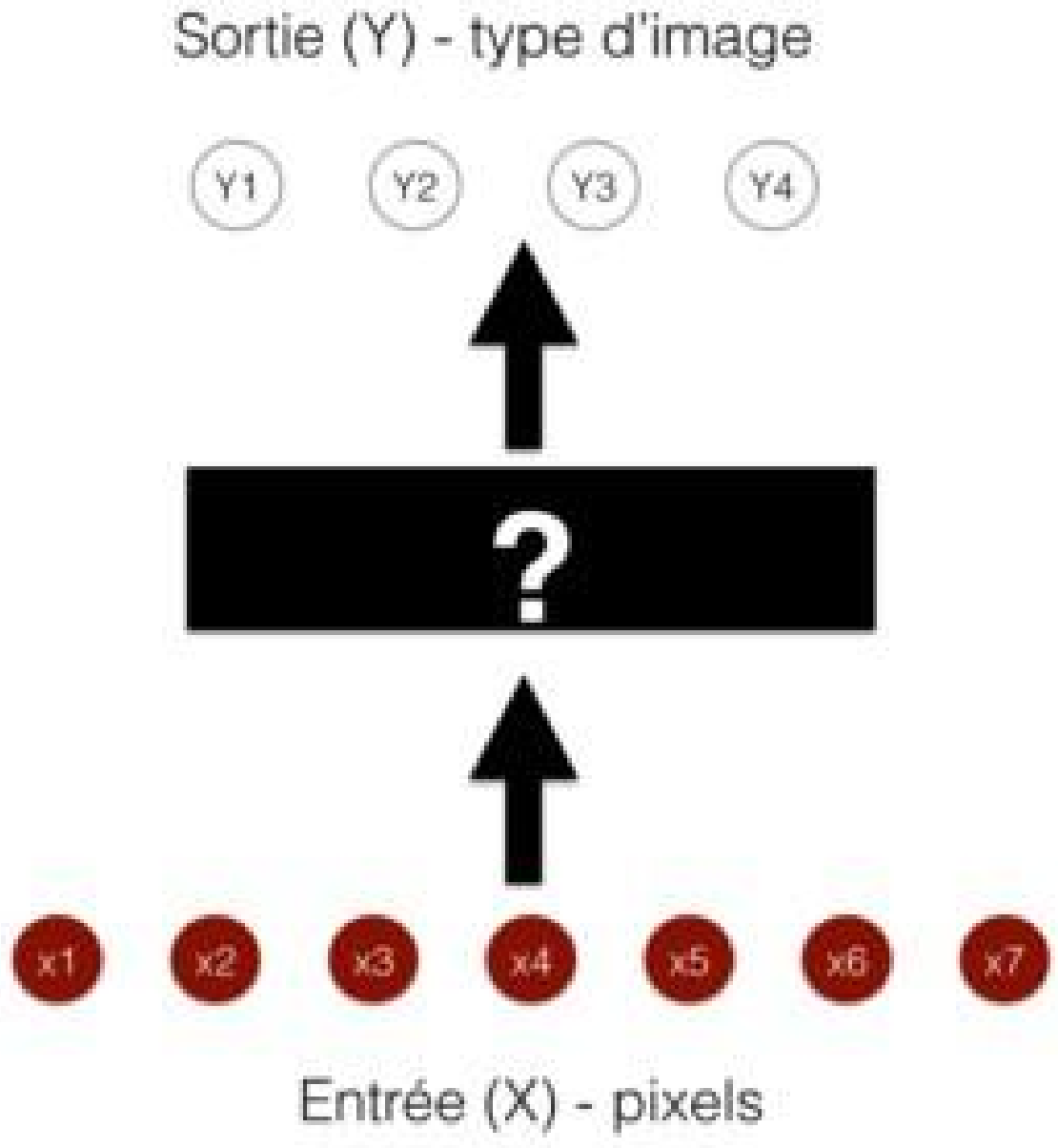
```
from sklearn.svm import SVC
model = SVC(C=1, kernel = 'linear')
model.fit(Xtrain,Ytrain)
predictions = model.predict(Xtest)
```

Outline

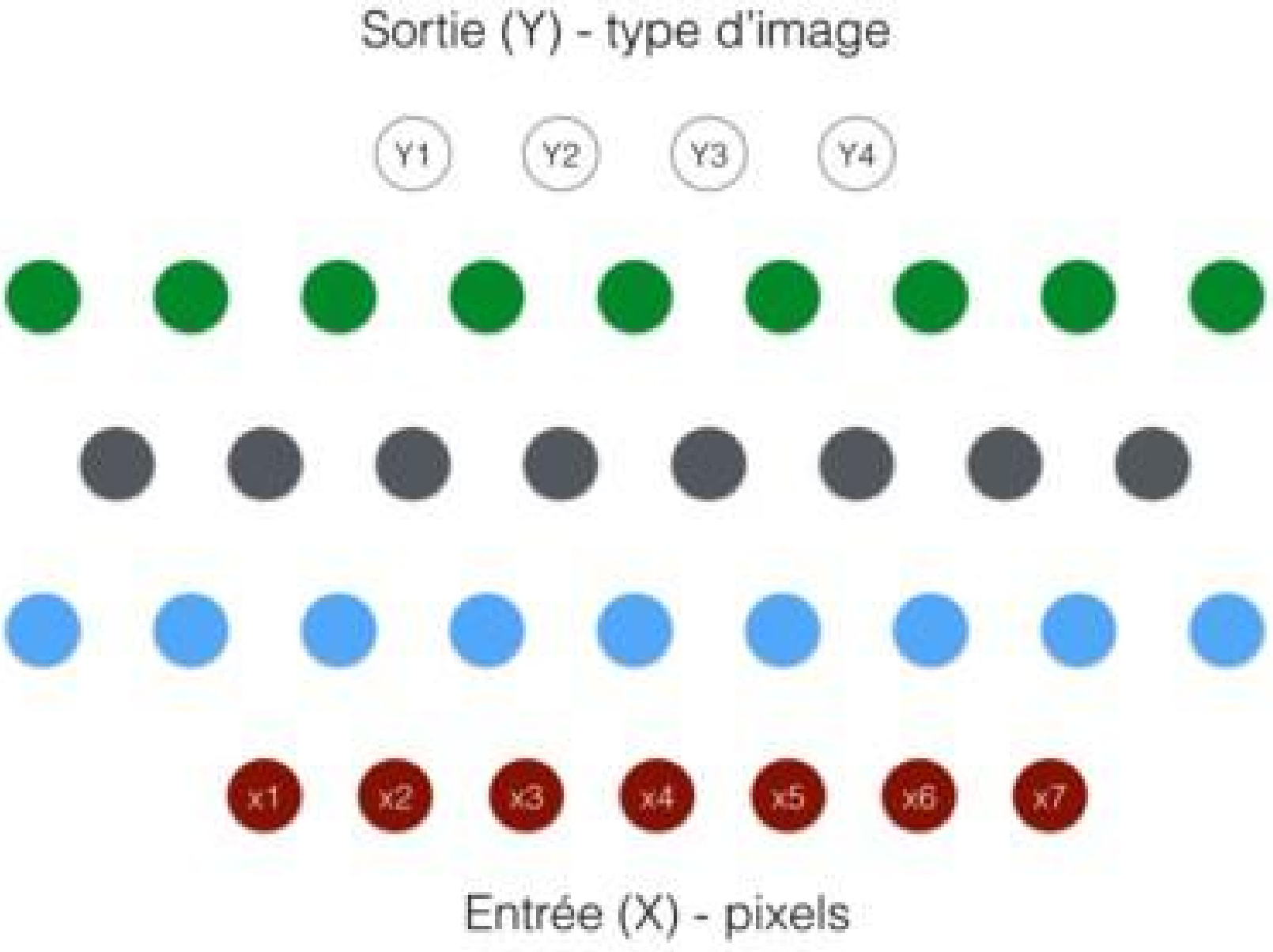
Histoire

- Premières idées dans les années 50 : basé sur le fait de "copier" le fonctionnement des neurones du cerveau.
- Modèle courant aujourd'hui : **perceptron multi-couches** introduit en 1986.
- **Théorème (Cybenko, 1989)** : Toute fonction continue bornée est estimable, avec une précision arbitraire, par un réseau à deux couches.
- Aujourd'hui : extension au **deep learning**.
- **Black box** par excellence : il est impossible de les interpréter.

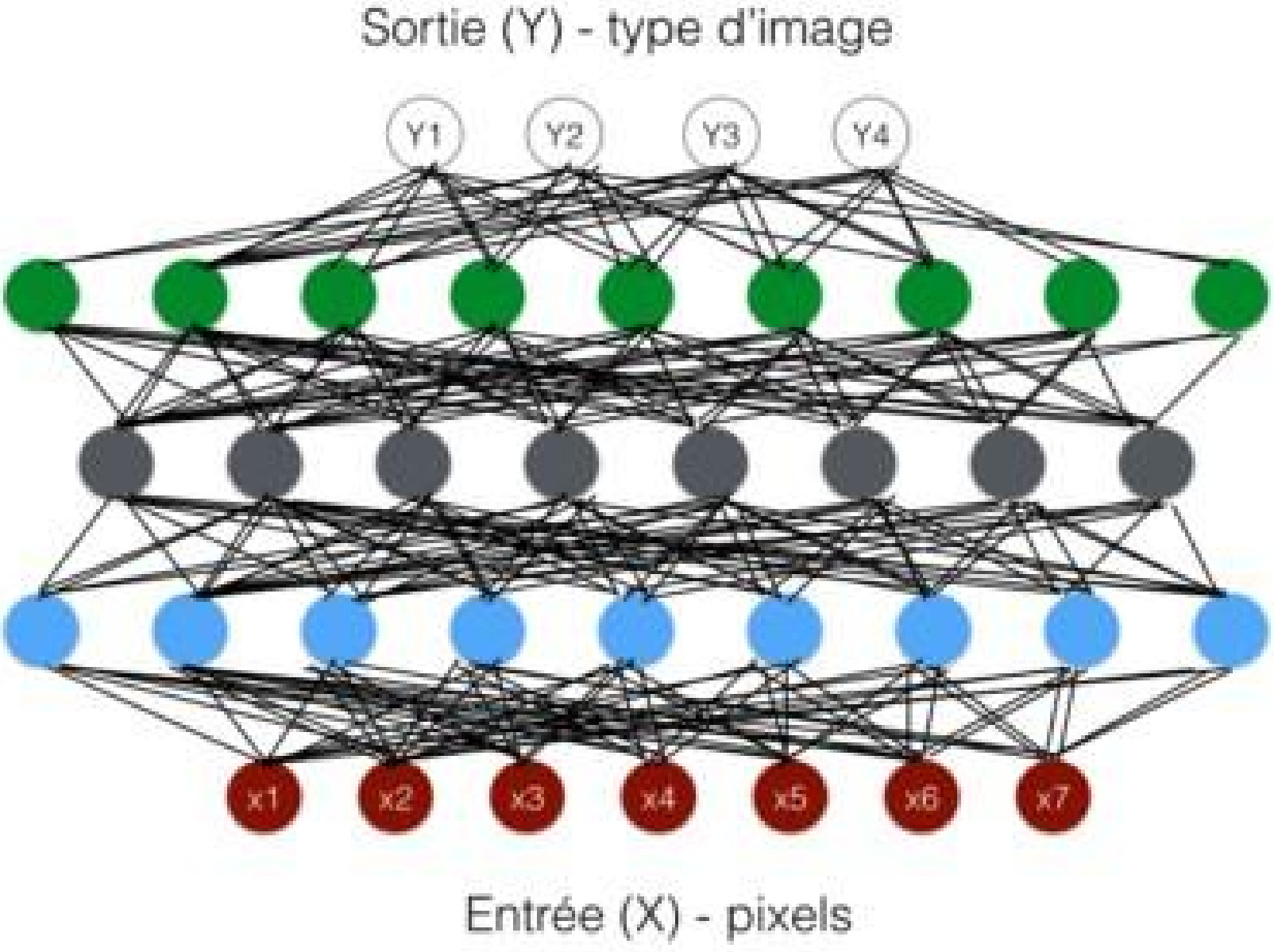
Principe


Sortie (Y) - type d'image
Y1
Y2
Y3
Y4
?
x1
x2
x3
x4
x5
x6
x7
Entrée (X) - pixels

Principe

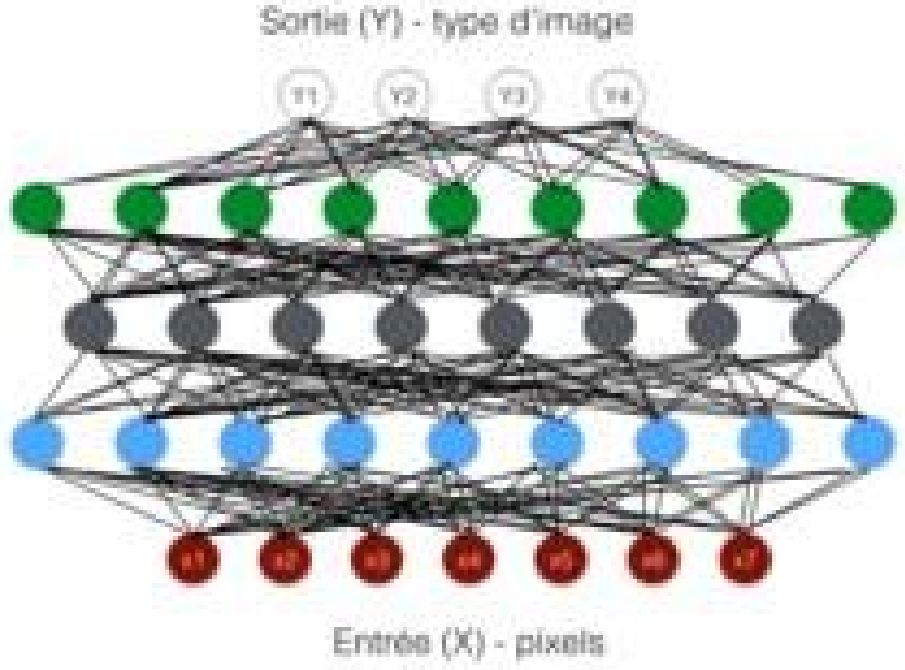

Sortie (Y) - type d'image
Y1
Y2
Y3
Y4
x1
x2
x3
x4
x5
x6
x7
Entrée (X) - pixels

Principe


Sortie (Y) - type d'image
Y1
Y2
Y3
Y4
x1
x2
x3
x4
x5
x6
x7
Entrée (X) - pixels

Principe

- Entre la **couche d'entrée** et la **couche de sortie** on trouve des **couches cachées**.
- A partir de la première couche cachée, chaque neurone est une **fonction des neurones précédents**.



- On cumule ainsi les transformations jusqu'à la couche de sortie. La réponse est donc une **aggrégation de fonctions** de fonctions (de fonctions de fonctions de fonctions) de l'entrée.
- Le vocabulaire du cerveau est utilisé ici : neurones, connexions, activation.

Plus précisément... Comment ça marche?

- Chaque fonction interne est **paramétrée**, c'est-à-dire qu'elle dépend, par exemple, d'un parmaètre par neurone.
- Il faut **optimiser** ces paramètres, i.e. trouver ceux qui expliquent le mieux le passage de l'entrée à la sortie.
- On utilise des techniques d'optimisation type descente de gradient, gradient stochastique, etc. pour faire ce qu'on appelle la **rétro-propagation** (backpropagation) : pour chaque neurone du réseau et pour chaque exemple d'entrée, on utilise la valeur de la sortie et on apporte cette information, étage par étage, à toutes les fonctions.
- Autrement dit, on utilise la réponse (Y) pour **corriger** les paramètres. Plus on a d'observations, plus le réseau prédit bien la sortie.

Exemple

- Je reçois une **nouvelle** image, je **prédis** grâce à mon réseau qu'il s'agit d'un chat.
- Une fois au niveau de la **sortie**, je m'aperçois que c'est en fait un camion.
- Je **rétro-propage** cette information pour **updater** la valeur de mes (millions de) paramètres.
- Plus le réseau voit d'exemples labélisés, plus il emmagasine de connaissances et devient "bon".

Lien avec l'apprentissage par renforcement

L'**apprentissage par renforcement** est un ensemble de techniques qui permettent d'apprendre **au cours du temps** grâce à un principe de **récompenses**.

Au départ, l'**agent** ne sait rien. Il doit **explorer**, les résultats sont mauvais. A la fin de chaque tour d'entraînement il reçoit une récompense s'il a réussit. Exemple : DeepMind et les jeux vidéos.

Pour faire évoluer l'agent, on utilise le principe de **rétro-propagation**. Beaucoup de ces méthodes utilisent d'ailleurs des réseaux de neurones lors de l'apprentissage.

(Démo)

Les paramètres globaux

Il faut choisir un certain nombre de choses pour son réseau:

- La complexité:
  - Le nombre de **couches** : plus elles sont nombreuses, plus on pourra prédire des choses compliquées, plus le temps de calcul est long. Si elles sont trop nombreuses, on tombe dans le **sur-apprentissage**.
  - Le nombre de **neurone** : idem !
- Les **fonctions** entre les neurones : on en propose un certain nombre. Elles dépendent en partie du type de sortie (par exemple : classification binaire vs multi-classes)
- Le **learning rate** : le taux d'apprentissage. S'il est trop élevé, chaque exemple va influer beaucoup sur le réseau et on peut tomber dans un optimum **local**. S'il est faible, le réseau va être très long à optimiser. On choisit souvent un paramètre dynamique : il baisse au fur et à mesure de l'apprentissage.

Application à la reconnaissance d'images

L'avantage des réseaux de neurones est que l'on n'a pas besoin de **pré-processer** les entrées : c'est lui qui va créer les patterns/features intéressantes.

Dans le cas de la reconnaissance d'images, on peut ne lui donner en entrée que des pixels et non des résumés de l'image obtenus manuellement (handcrafted).

Démo

Démo

L’apprentissage par batch et l’apprentissage online

Bien que l’on ait accès à de puissants serveurs de calculs, on peut vouloir limiter l’utilisation de la mémoire pour entraîner ces algorithmes très lourds.

On peut alors envisager de ne fournir les données au réseau que **par batchs**. Ainsi, il ne traite qu’une seule partie des données à la fois, sans avoir besoin de stocker les autres. Il update les paramètres à la fin de chaque batch.

Afin que le réseau continue d’apprendre et s’améliore **au fur et à mesure**, on peut utiliser le **online learning** : le réseau reste en phase d’apprentissage "toute sa vie" et les paramètres sont updatés à chaque nouvel exemple.

Conclusion sur les réseaux de neurones

Avantages :

- Potentiellement extrêmement performants, en particulier dans certains domaines comme la reconnaissance d'images ou du language.
- Flexibles sur la complexité.

Inconvénients :

- Peu/pas de résultats théoriques pour expliquer la performance.
- Impossibles à interpréter.
- Calculs extrêmement lourds.
- Complexité difficile à calibrer : gros risques de **sur-apprentissage**.

En Python :

- PyBrain
- neurolab