Apprentissage supervisé : théorie et algorithmes — cours 2

CES Data Scientist, Télécom ParisTech

Aurélien Bellet

Inria Lille

March 30, 2016

MENU D'AUJOURD'HUI

1. Rappels sur l'apprentissage supervisé

2. Arbres de décision et de régression
   - Une structure efficace : les arbres
   - Séparateurs élémentaires
   - Algorithme CART

3. Sélection et évaluation de modèles
   - Sélection de modèles
   - Évaluation de modèles

RAPPELS SUR L'APPRENTISSAGE SUPERVISÉ

APPRENTISSAGE SUPERVISÉ : CADRE PROBABILISTE ET STATISTIQUE

- X : variable explicative, vecteur aléatoire dans $\mathcal{X} = \mathbb{R}^p$
- Y : variable à prédire, aléatoire dans $\mathcal{Y} = \{1, \ldots, C\}$ (classification) ou $\mathcal{Y} = \mathbb{R}$ (régression)
- P : loi de probabilité jointe de (X, Y), fixée mais **inconnue**
- $\mathcal{S} = \{(x_i, y_i) \in \mathcal{X} \times \mathcal{Y}\}_{i=1}^n$: échantillon i.i.d. tiré selon la loi P
- $\mathcal{H}$: collection de classifieurs / modèles, $h \in \mathcal{H}$
- L : perte mesurant les erreurs d'un classifieur / modèle
  - Exemple (classification) : $L(y, h(x)) = \begin{cases} 1 & \text{si } h(x) \neq y \\ 0 & \text{sinon} \end{cases}$
  - Exemple (régression) : $L(y, h(x)) = (y - h(x))^2$
- **Objectif** : déterminer à partir de $\mathcal{S}$ la fonction $h \in \mathcal{H}$ qui minimise $R(h) = \mathbb{E}_{(X,Y)\sim P}[L(Y, h(X)]$

APPRENTISSAGE SUPERVISÉ : MÉTHODOLOGIE

Définir :

- l'**espace de représentation** des données

APPRENTISSAGE SUPERVISÉ : MÉTHODOLOGIE

Définir :

- l'**espace de représentation** des données
- la **classe des classifieurs** considérés

APPRENTISSAGE SUPERVISÉ : MÉTHODOLOGIE

Définir :

- l'**espace de représentation** des données
- la **classe des classifieurs** considérés
- la **fonction de perte** à minimiser pour obtenir le meilleur classifieur dans cette classe

APPRENTISSAGE SUPERVISÉ : MÉTHODOLOGIE

Définir :

- l'**espace de représentation** des données
- la **classe des classifieurs** considérés
- la **fonction de perte** à minimiser pour obtenir le meilleur classifieur dans cette classe
- l'**algorithme de minimisation** de cette fonction de perte

APPRENTISSAGE SUPERVISÉ : MÉTHODOLOGIE

Définir :

- l'**espace de représentation** des données
- la **classe des classifieurs** considérés
- la **fonction de perte** à minimiser pour obtenir le meilleur classifieur dans cette classe
- l'**algorithme de minimisation** de cette fonction de perte
- une **méthode de sélection de modèle** pour choisir les hyperparamètres

APPRENTISSAGE SUPERVISÉ : MÉTHODOLOGIE

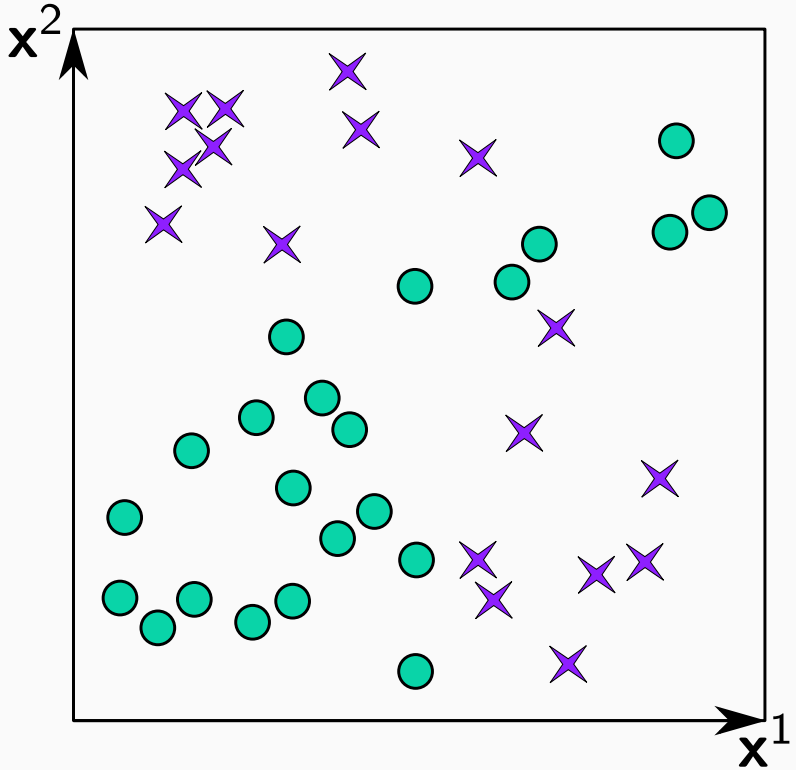
Définir :

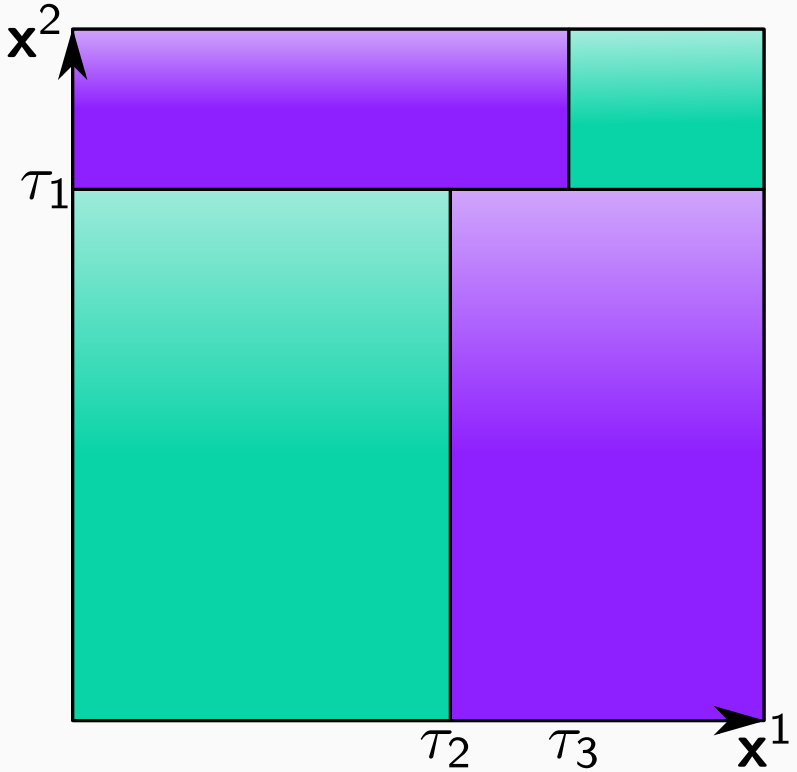
- l'**espace de représentation** des données
- la **classe des classifieurs** considérés
- la **fonction de perte** à minimiser pour obtenir le meilleur classifieur dans cette classe
- l'**algorithme de minimisation** de cette fonction de perte
- une **méthode de sélection de modèle** pour choisir les hyperparamètres
- une **méthode d'évaluation** des performances

ARBRES DE DÉCISION ET DE RÉGRESSION

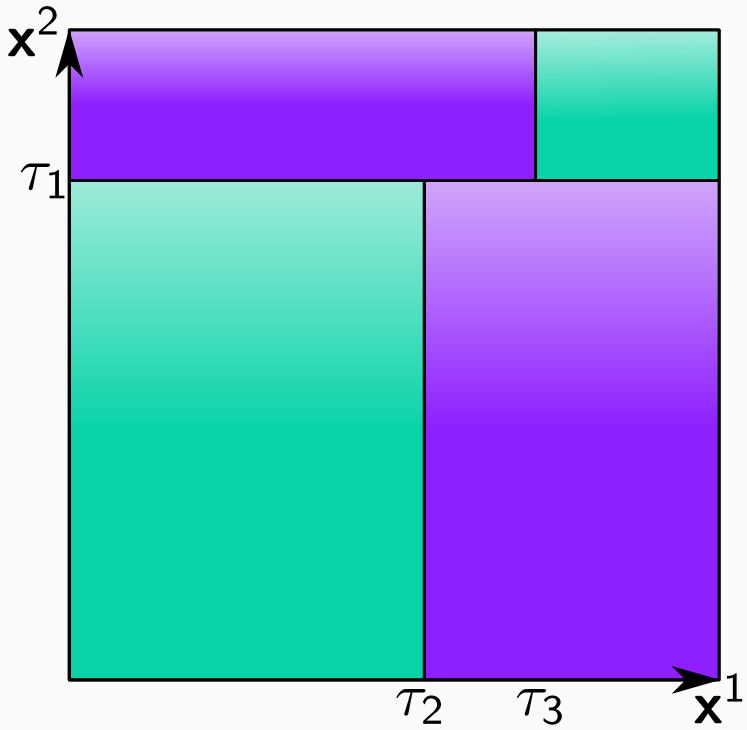
ARBRES DE DÉCISION

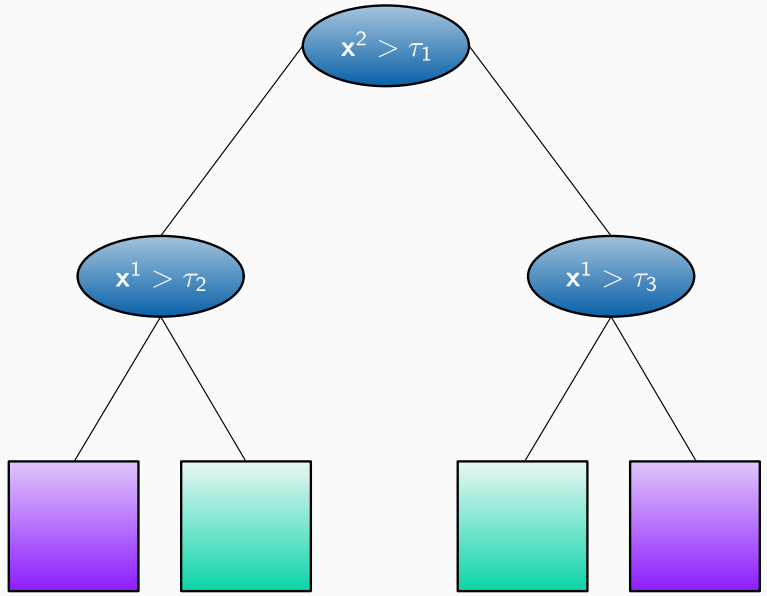
- Invention quasi simultanée entre 1979 et 1983 par L. Breiman et al. (CART, Berkeley, USA) et R. Quinlan (ID3, Sydney, Australie)
- Dans 2 communautés différentes: en statistique (CART), et dans une discipline nouvelle, le *machine learning* (ID3)





ARBRES DE DÉCISION

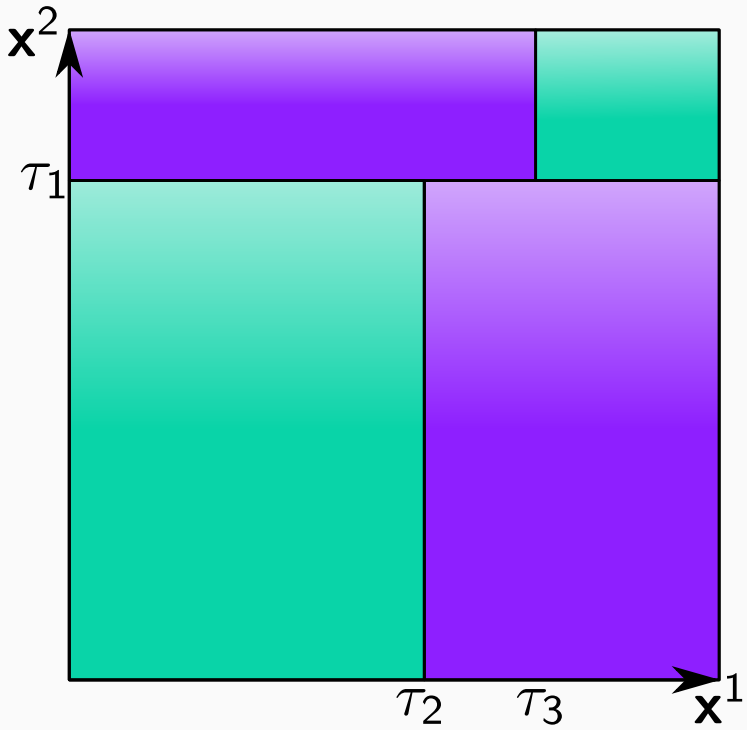


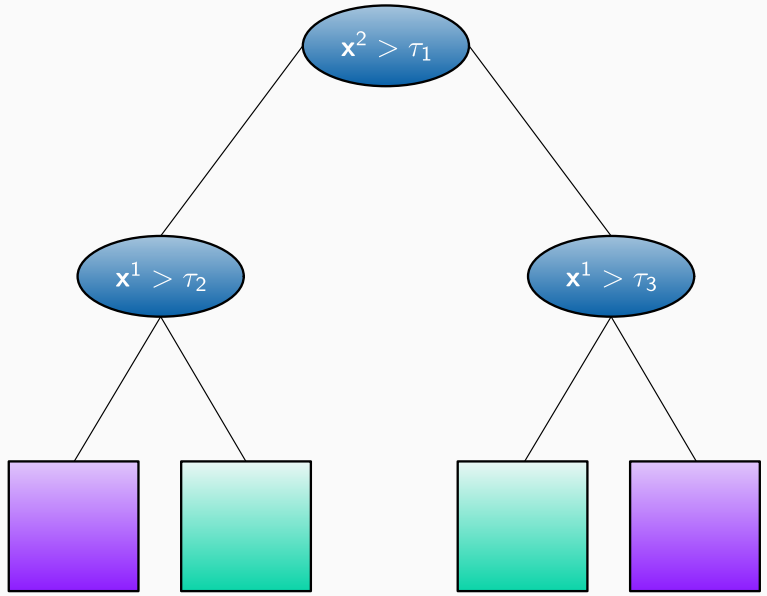


Première idée:

Utiliser non pas un, mais plusieurs séparateurs linéaires pour construire des frontières de décision non linéaires

ARBRES DE DÉCISION

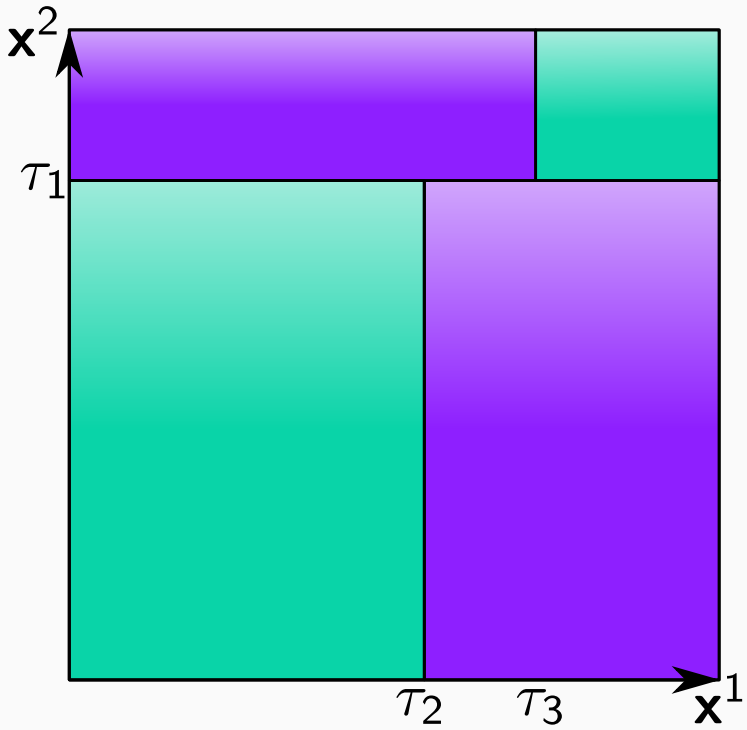


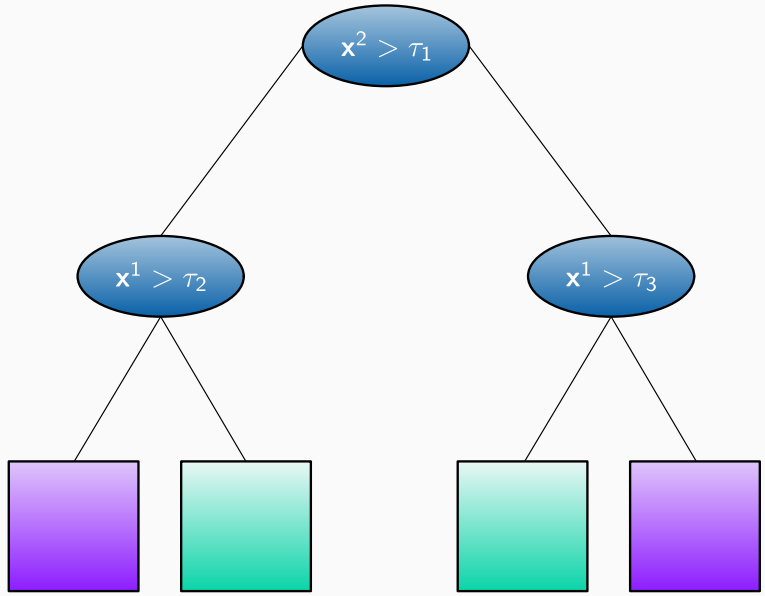


Deuxième idée:

Utiliser des séparateurs linéaires orthogonaux aux axes, i.e. des hyperplans $\{x \in \mathcal{X} : x^j = \tau\}$ pour l'interprétabilité / efficacité

ARBRES DE DÉCISION





Troisième idée:

Utiliser un prédicteur représenté par un arbre: chaque noeud est associé à un hyperplan séparateur $\{x \in \mathcal{X} : x^j = \tau\}$; chaque feuille est associée à une fonction constante, i.e. une classe

SÉPARATEUR LINÉAIRE ORTHOGONAL AUX AXES

- Rappel: $x = (x^1, \ldots, x^p)$, p variables
- Pour une variable continue : j-ème variable x^j, seuil τ:

$$t_{j,\tau}(x) = \text{sign}(x^j - \tau)$$

- Pour une variable catégorielle à M modalités $\{v_1^j, \ldots, v_M^j\}$:

$$t_{j,v,m}(x) = \mathbb{1}(x^j = v_m^j)$$

- L'arbre final encode un ensemble de règles logiques de type:

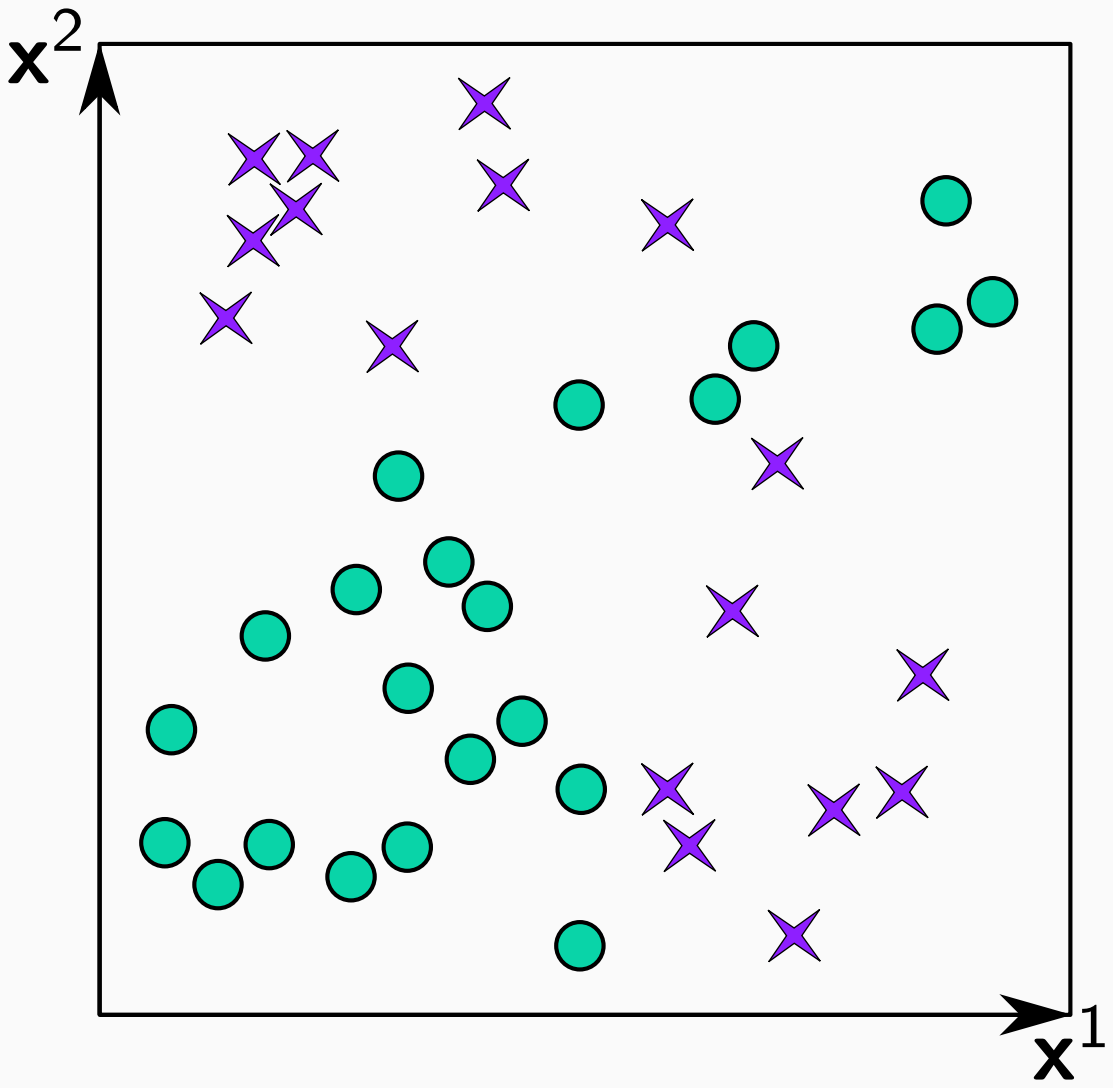
"si $(x^{j_1} > \tau_1)$ et $(x^{j_2} \leq \tau_2)$ et ... alors x est de la classe k"

Algorithme récursif de construction (CART)

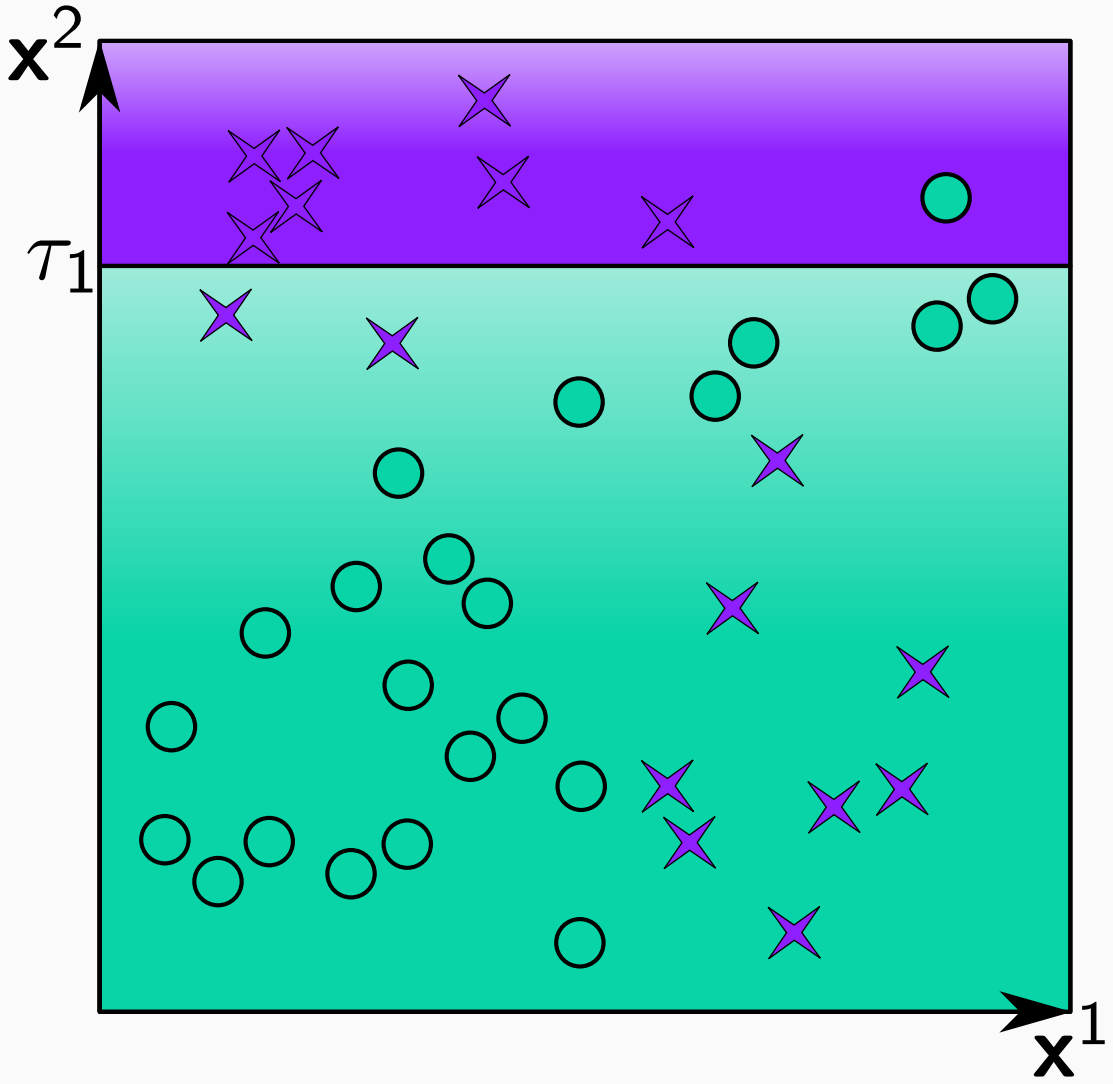
Cas d'un arbre binaire, avec $\mathcal{S}$ ensemble d'apprentissage

1. Construire un noeud racine
2. Chercher la meilleure séparation $t : \mathcal{X} \to \{0, 1\}$ à appliquer sur $\mathcal{S}$ telle que le coût local $L(t, \mathcal{S})$ soit minimal
3. Associer le séparateur choisi au noeud courant et séparer l'ensemble d'apprentissage courant $\mathcal{S}$ en $\mathcal{S}^d$ et $\mathcal{S}^g$ à l'aide de ce séparateur
4. Construire un noeud à droite et un noeud à gauche
5. Mesurer le critère d'arrêt à droite, s'il est vérifié, le noeud droit devient une feuille sinon aller en 3 avec $\mathcal{S}^d$ comme ensemble courant
6. Mesurer le critère d'arrêt à gauche, s'il est vérifié, le noeud gauche devient une feuille sinon aller en 3 avec $\mathcal{S}^g$ comme ensemble courant

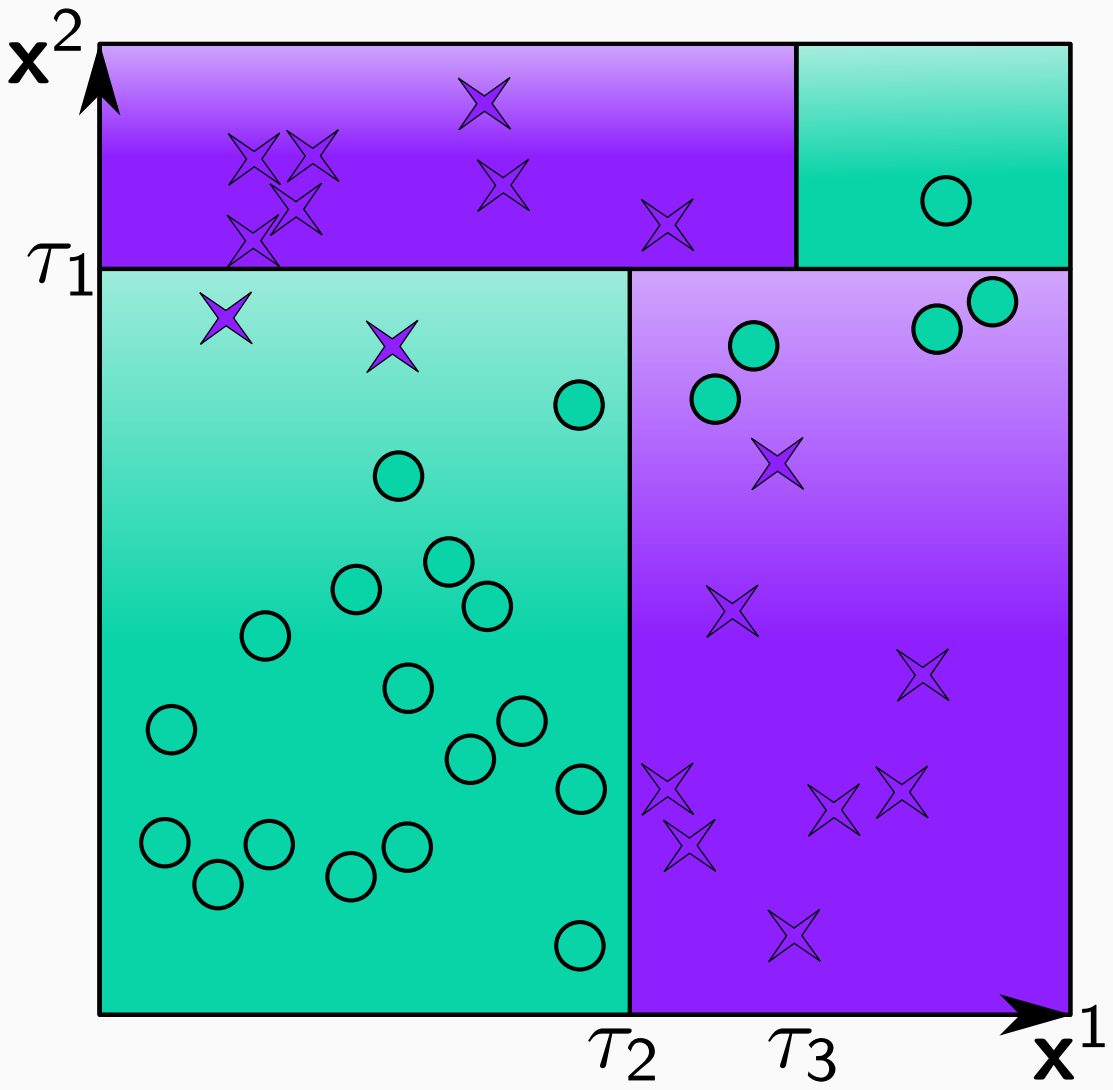
EXEMPLE VISUEL



EXEMPLE VISUEL



EXEMPLE VISUEL



COUPURE

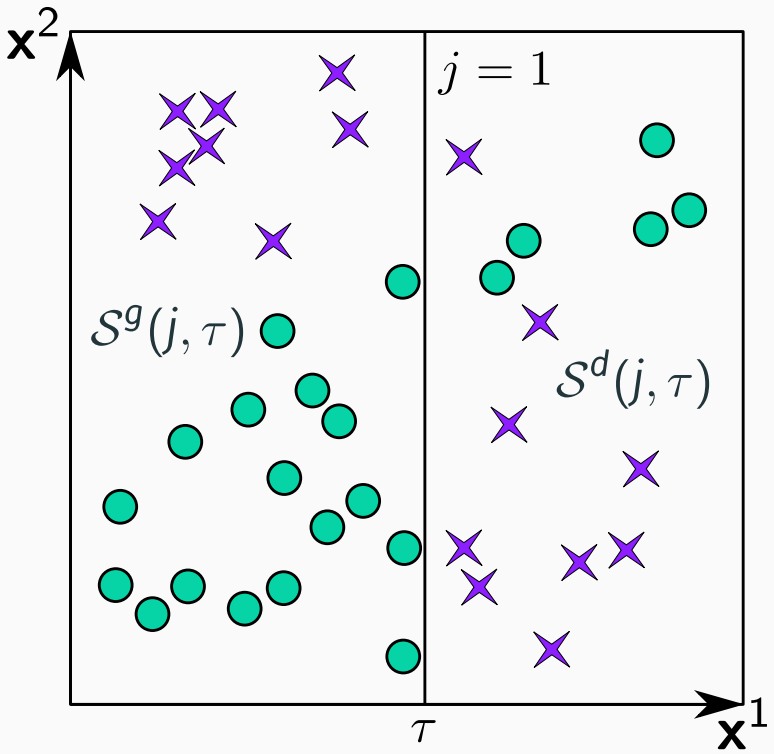
Pour un ensemble d'exemples d'apprentissage $\mathcal{S}$ et une fonction de séparation binaire $t_{j,\tau}$ avec $t_{j,\tau}(x) = \text{sign}(x^j - \tau)$, notons

$$\mathcal{S}^d(j,\tau) = \{(x,y) \in \mathcal{S}, t_{j,\tau}(x) > 0\}$$
$$\mathcal{S}^g(j,\tau) = \{(x,y) \in \mathcal{S}, t_{j,\tau}(x) \leq 0\}$$

COUPURE

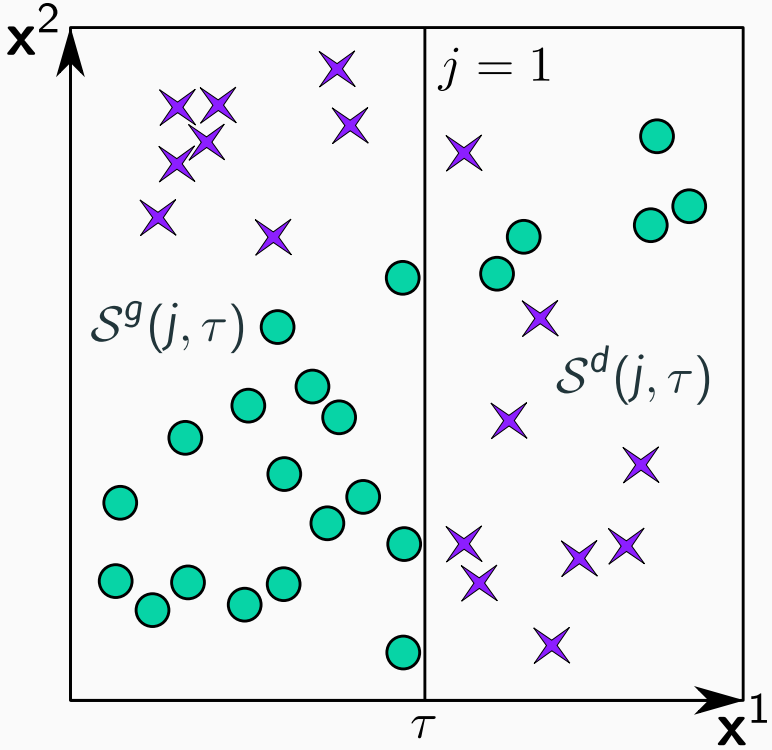
Pour un ensemble d'exemples d'apprentissage $\mathcal{S}$ et une fonction de séparation binaire $t_{j,\tau}$ avec $t_{j,\tau}(x) = \text{sign}(x^j - \tau)$, notons

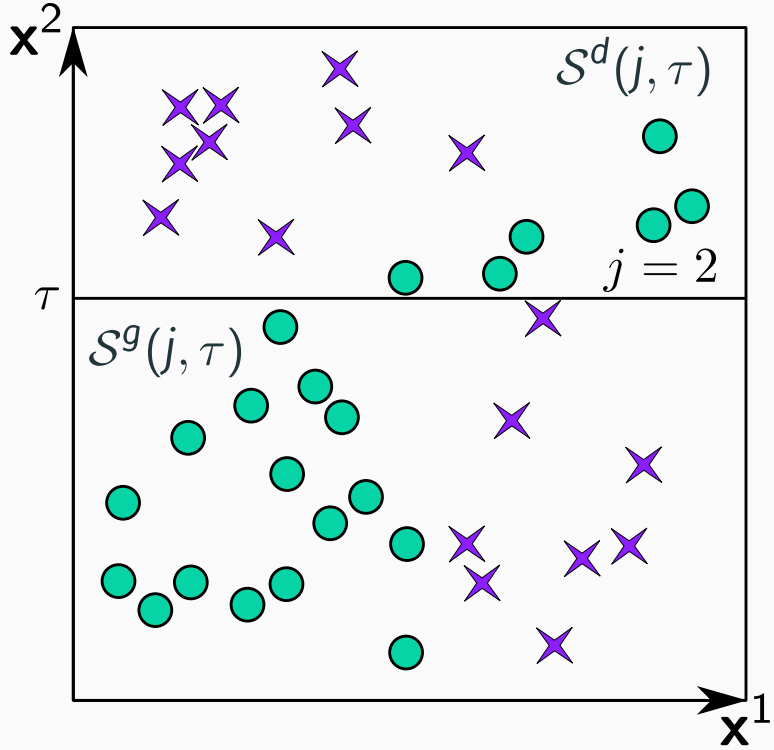
$$\mathcal{S}^d(j,\tau) = \{(x,y) \in \mathcal{S}, t_{j,\tau}(x) > 0\}$$
$$\mathcal{S}^g(j,\tau) = \{(x,y) \in \mathcal{S}, t_{j,\tau}(x) \leq 0\}$$



Pour un ensemble d'exemples d'apprentissage $\mathcal{S}$ et une fonction de séparation binaire $t_{j,\tau}$ avec $t_{j,\tau}(x) = \text{sign}(x^j - \tau)$, notons

$$\mathcal{S}^d(j,\tau) = \{(x,y) \in \mathcal{S}, t_{j,\tau}(x) > 0\}$$
$$\mathcal{S}^g(j,\tau) = \{(x,y) \in \mathcal{S}, t_{j,\tau}(x) \leq 0\}$$





FONCTION DE COÛT LOCALE

- Parmi tous les paramètres $(j, \tau) \in \{1, \dots, p\} \times \{\tau_1, \dots, \tau_r\}$, on cherche $\hat{j}$ et $\hat{\tau}$ qui minimisent une fonction de coût :

$$L(t_{j,\tau}, \mathcal{S}) = \frac{n_g}{n} H(\mathcal{S}^g(j, \tau)) + \frac{n_d}{n} H(\mathcal{S}^d(j, \tau))$$
$$n_g = |\mathcal{S}^g(j, \tau)| \quad \text{et} \quad n_d = |\mathcal{S}^d(j, \tau)|$$

- H est une fonction “d’impureté”

- Le coût total est la somme de l’impureté de chaque sous partie, pondérée par le nombre d’échantillons

Critères de coût pour la classification

- Pour un ensemble $\mathcal{S}$ de n exemples étiquetés, on définit

$$p_c(\mathcal{S}) = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^{n} \mathbb{1}(y_i = c)$$

- **Entropie**

$$H(\mathcal{S}) = -\sum_{c=1}^{C} p_c(\mathcal{S}) \log p_c(\mathcal{S})$$

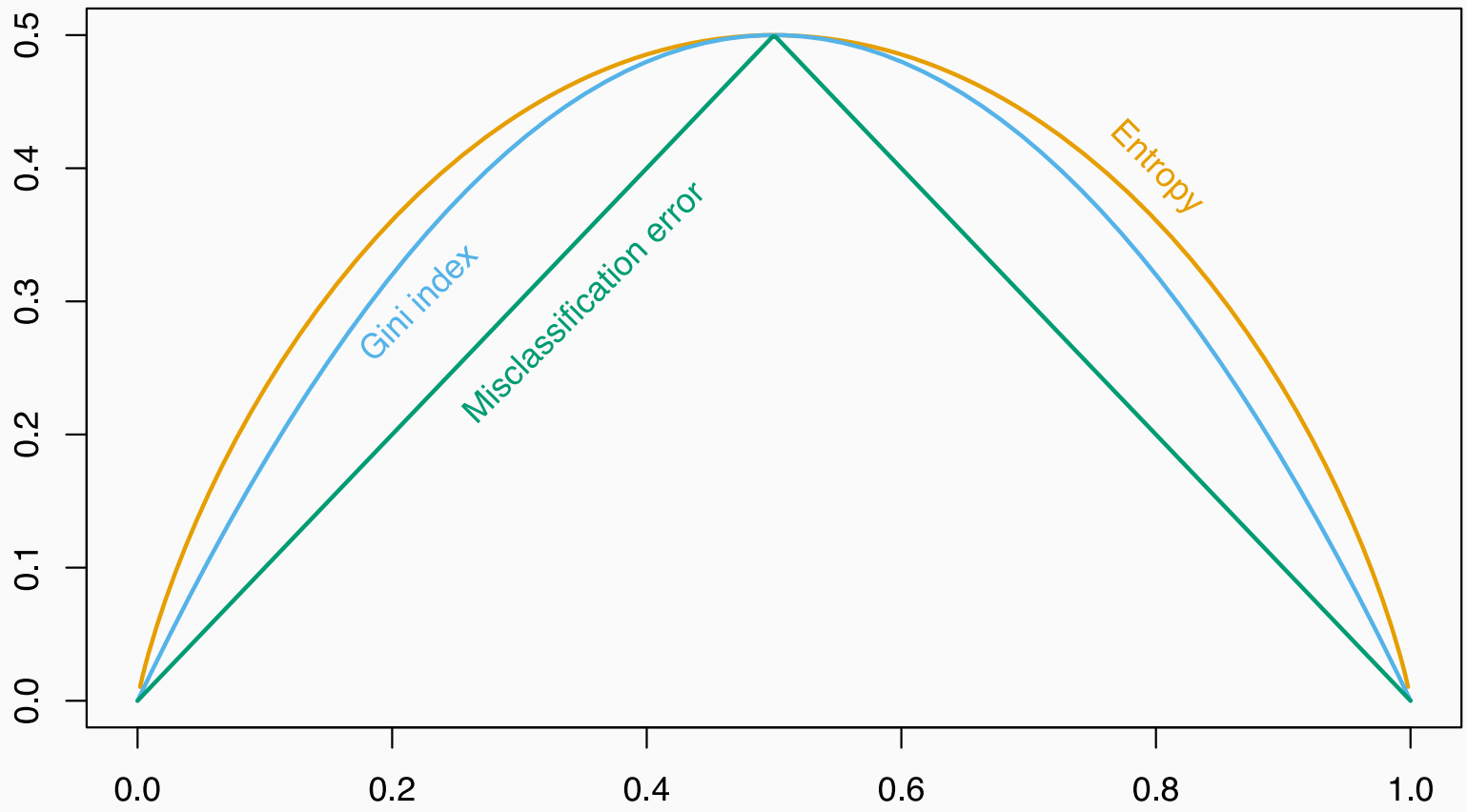
- **Index de Gini**

$$H(\mathcal{S}) = \sum_{c=1}^{C} p_c(\mathcal{S})(1 - p_c(\mathcal{S}))$$

- **Erreur de classification**

$$H(\mathcal{S}) = 1 - p_{c(\mathcal{S})}(\mathcal{S}), \quad c(\mathcal{S}) : \text{classe majoritaire dans } \mathcal{S}$$

CRITÈRES DE COÛT POUR LA CLASSIFICATION



(Hastie, Tibshirani & Friedman, 2009)

CRITÈRES D'ARRÊT

- On peut s'arrêter localement (dans une branche), dès qu'on atteint :
  - la profondeur maximale
  - le nombre maximale de feuilles
  - le nombre minimal d'exemples dans un noeud
- Remarque : si le nombre minimal d'exemples est 1, l'ensemble d'apprentissage est appris jusqu'au bout (dans les limites computationnelles et de mémoire) $\rightarrow$ **risque de sur-apprentissage** !
- Ces hyperparamètres sont à déterminer par **validation croisée** (voir plus loin)

ARBRES DE RÉGRESSION

Le fonctionnement pour la régression est pratiquement identique, pour construire l'arbre, seul le critère de coût change: on minimise

$$L(t_{j,\tau}, \mathcal{S}) = \frac{n_g}{n} H(\mathcal{S}^g(j,\tau)) + \frac{n_d}{n} H(\mathcal{S}^d(j,\tau))$$

avec la variance comme mesure d'impureté

$$H(\mathcal{S}) = \text{Var}(\mathcal{S}) := \frac{1}{|\mathcal{S}|} \sum_{(x_i,y_i)\in\mathcal{S}} (y_i - \bar{y}_n)^2$$

où

$$\bar{y}_n := \frac{1}{|\mathcal{S}|} \sum_{(x_i,y_i)\in\mathcal{S}} y_i$$

Avantages et inconvénients des arbres de décision

Avantages

- Construit une fonction de décision non linéaire, interprétable
- Fonctionne pour le multi-classe
- Prise de décision efficace: $O(\log F)$ (F : nombre de feuilles)
- Fonctionne pour des variables continues et catégorielles

Inconvénients

- Pas d'optimisation globale
- Estimateur à large variance, instabilité : une petite variation dans l'ensemble d'apprentissage engendre un arbre complètement différent

RÉDUIRE LA VARIANCE : LES FORÊTS ALÉATOIRES

- Il s'agit d'une **méthode ensembliste** : on combine les prédictions de plusieurs classifieurs
- Ici on va moyenner les prédictions de B arbres
- Pour améliorer les performances, il faut générer de la **diversité**
- Pour l'arbre $b \in \{1, \ldots, B\}$ à partir de $\mathcal{S}$:
  - On construit $\mathcal{S}_b$ par tirage avec remise dans $\mathcal{S}$ (bootstrap)
  - On applique l'algorithme CART sur $\mathcal{S}_b$, mais à chaque coupure on ne considère qu'un sous-ensemble des attributs tirés aléatoirement
- Très efficace et utilisé en pratique

Sélection et évaluation de modèles

RAPPEL: APPRENTISSAGE SUPERVISÉ PAR APPROCHE RÉGULARISÉE

- Construire une fonction (classifieur, modèle) $\hat{h}$ de $\mathbb{R}^p$ vers $\{-1, 1\}$ (ou $\{1 \dots, C\}$) telle que

$$\hat{h} = \arg\min_{h \in \mathcal{H}} \sum_{i=1}^{n} L(y_i, h(x_i)) + \lambda \Omega(h)$$

  - L est une **fonction de perte** : mesure à quel point $h(x_i)$ est proche de y_i (la valeur de sortie désirée)
  - $\sum_{i=1}^{n} L(y_i, h(x_i))$: terme d'attache aux données
  - $\Omega(h)$: pénalité sur la complexité du modèle h, par exemple la norme au carré du vecteur de paramètres de h

- Note : l'approche régularisée n'est pas la seule approche possible, mais c'est la plus courante !

Sélection ou évaluation de modèle ?

- **Sélection de modèle** : estimer les performances de différents modèles afin de choisir le meilleur hyperparamètre
- **Évaluation de modèle** : ayant appris un modèle (pour un certain choix d'hyperparamètres), estimer ses performances
- Note : on choisit le même critère de performance (ex : erreur de prédiction) pour les deux étapes
- Dans la suite, on va se concentrer sur ces deux questions

SÉLECTION DE MODÈLES : PREMIER EXEMPLE

- On souhaite apprendre un classifieur linéaire dans le plan

$$h_\beta(x) = \text{sign}(\beta_1 x_1 + \beta_2 x_2 + \beta_0)$$

- Formulation du problème d'apprentissage

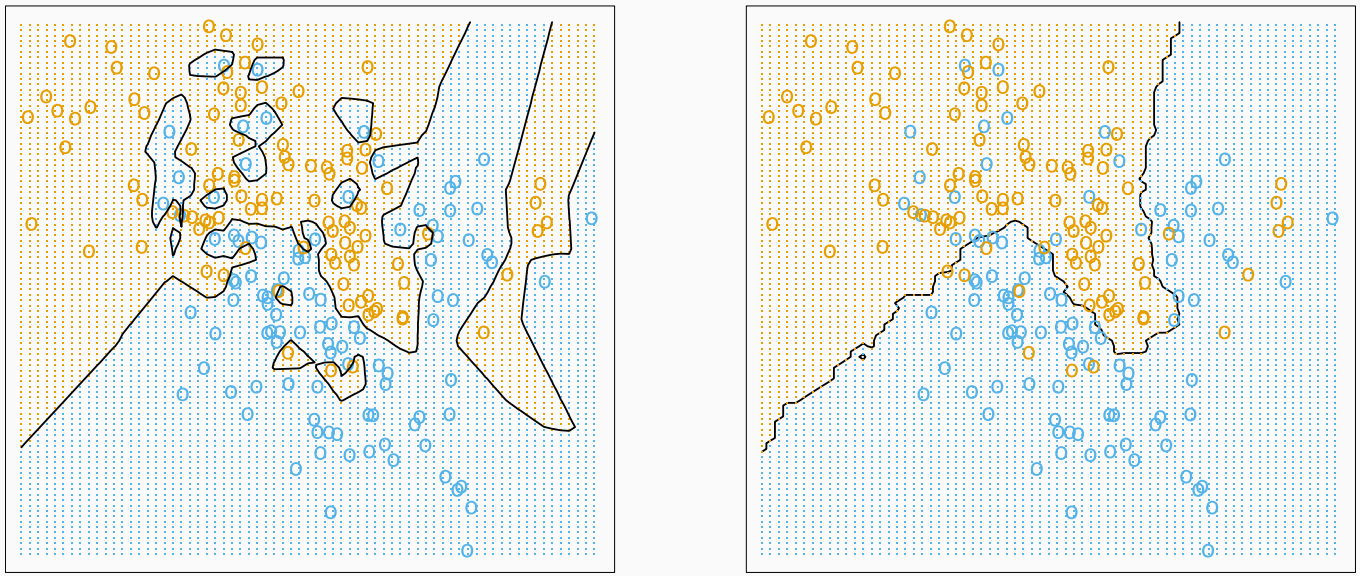
$$\underset{\beta_0,\beta_1,\beta_2 \in \mathbb{R}}{\arg\min} \sum_{i=1}^{n} L(y_i, h_\beta(x_i)) + \lambda \|\beta\|$$

avec $\|\beta\| = \|\beta\|_2^2$ ou $\|\beta\| = \|\beta\|_1$

- **Quelle valeur de λ choisir ?**

SÉLECTION DE MODÈLES : DEUXIÈME EXEMPLE

- On souhaite utiliser un classifieur des K-plus-proches-voisins
- **Comment choisir K ?**
  - K trop petit $\rightarrow$ h trop sensible aux données (variance importante)
  - K trop grand : $\rightarrow$ h peu sensible aux données (biais important)



(Hastie, Tibshirani & Friedman, 2009)

DÉCOMPOSITION BIAIS - VARIANCE

- On suppose $Y = f(X) + \epsilon$ avec ϵ centré et de variance σ_ϵ^2
- Soit $\hat{f}$ la fonction apprise à partir de $\mathcal{S}$, l'échantillon d'apprentissage
- Erreur quadratique (régression) espérée après apprentissage:

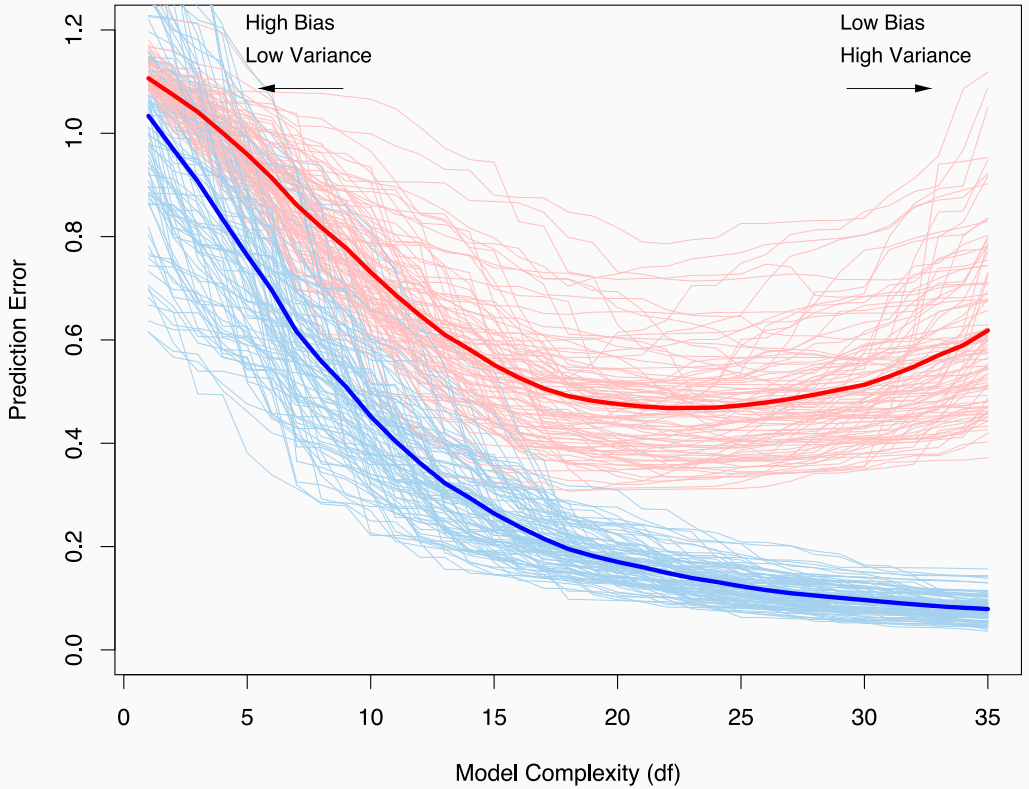
$$\begin{aligned}
\mathop{\mathbb{E}}_{X,Y,\mathcal{S}}[(Y - \hat{f}(X))^2] &= \mathop{\mathbb{E}}_{X}\left[\mathop{\mathbb{E}}_{Y|X,\mathcal{S}}[(Y - \hat{f}(X))^2]\right] \\
&= \mathop{\mathbb{E}}_{X}\left[\mathop{\mathbb{E}}_{Y|X,\mathcal{S}}(Y - f(X))^2 + \mathop{\mathbb{E}}_{Y|X,\mathcal{S}}[(\bar{f}(X) - \hat{f}(X))^2] + \mathop{\mathbb{E}}_{Y|X}[(f(X) - \bar{f})^2]\right] \\
&= \sigma_\epsilon^2 + \mathop{\mathbb{E}}_{X}\left[\mathrm{Var}_{\mathcal{S}}[\hat{f}(X)] + \mathrm{Biais}^2_{\mathcal{S}}[\hat{f}(X)]\right]
\end{aligned}$$

avec $\bar{f}(X) = \mathbb{E}_{\mathcal{S}}\,\hat{f}(X)$

- **Bruit des données** : terme incompressible
- **Biais au carré** : mesure à quel point $\hat{f}$ est loin de la cible
- **Variance de $\hat{f}(X)$** : mesure à quel point $\hat{f}$ est sensible aux données d'apprentissage

DÉCOMPOSITION BIAIS - VARIANCE

- Faisons varier la complexité du modèle



(Hastie, Tibshirani & Friedman, 2009)

- Dépend aussi de la taille n de l'échantillon d'apprentissage $\mathcal{S}$

DÉCOMPOSITION BIAIS - VARIANCE : K-PPV

- Posons $X = x_0$ pour que l'aléa ne vienne pas de x_o. On a

$$\mathbb{E}[(Y - \hat{f}(x_0))^2] = \text{Var}[Y] + \text{Biais}^2[f(x_0)] + \text{Var}(\hat{f}(x_0))$$

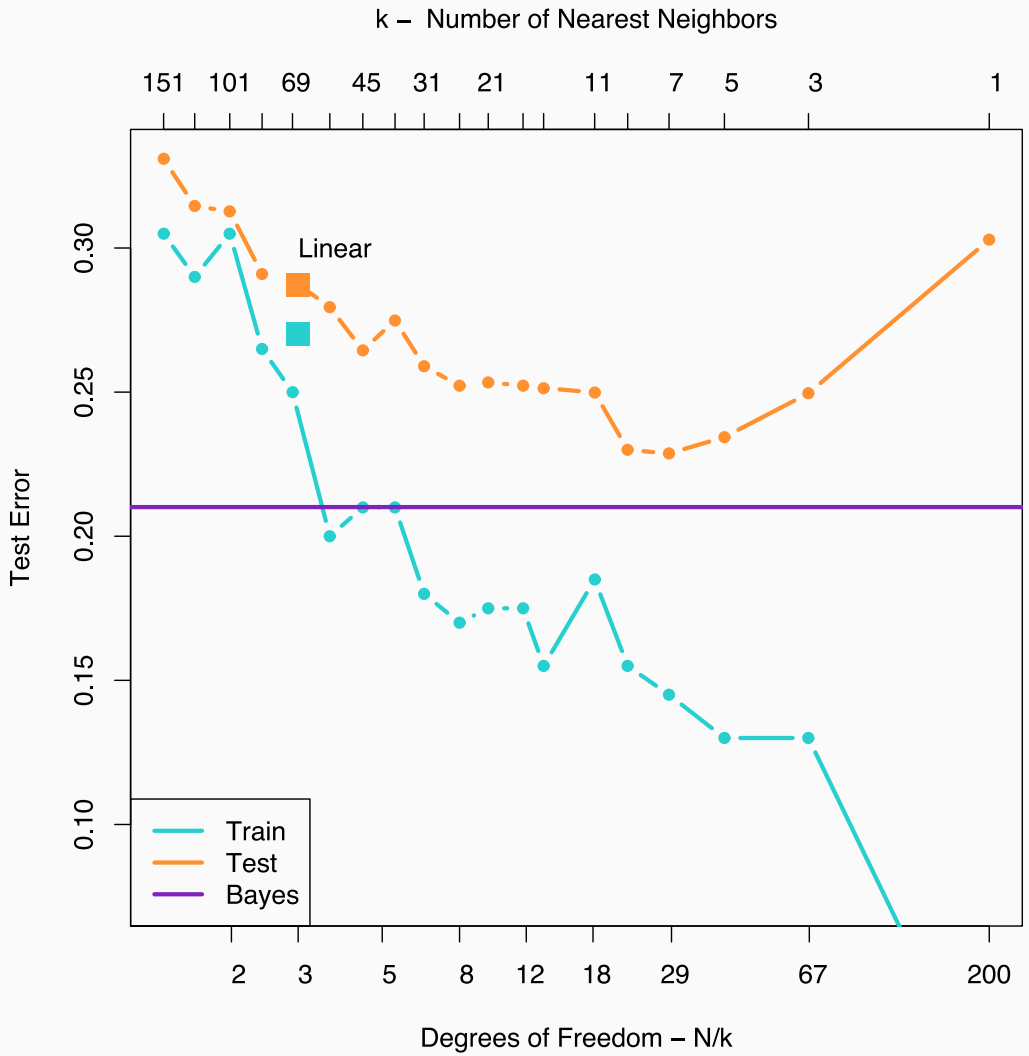
- On fixe $\mathcal{S}$, donc $\hat{f}(x_0)$ est déterministe

$$\mathbb{E}[(Y - \hat{f}(x_0))^2] = \sigma_\epsilon^2 + \left(f(x_0) - \frac{1}{K} \sum_{\ell=1}^{K} f(x_{(\ell)}) \right)^2 + \frac{\sigma_\epsilon^2}{K}$$

- **Dilemme biais-variance**:
  - K contrôle le terme de variance : plus K est grand, plus elle décroit
  - K contrôle aussi le biais : plus K est petit, plus celui-ci est faible

- Le choix de K est donc primordial

Erreur de test en fonction de n/K



(Hastie, Tibshirani & Friedman, 2009)

Décomposition biais - variance : K-PPV

- Le classifieur K-PPV est “paresseux” : pas besoin d’algorithme d’apprentissage !
- On a seulement besoin de $\mathcal{S}$, d’une distance et d’une valeur de K
- Questions
  - Comment choisir K ?
  - Ayant choisi K, comment estimer l’erreur en généralisation de ce classifieur ?

SÉLECTION DE MODÈLE

- Stratégie classique : partager les données disponibles en 3 sous-échantillons
  - **Apprentissage** : données pour entraîner les modèles
  - **Validation** : données pour sélectionner les hyperparamètres
  - **Test** : données pour estimer l'erreur en généralisation du modèle
- Les hyperparamètres sont pris dans une grille finie
- Exemple pour les K-PPV : on sélectionne la valeur de K qui donne l'erreur la plus faible sur l'ensemble de validation
- Comment faire pour "gaspiller" moins de données pour la validation ?

SÉLECTION DE MODÈLE : VALIDATION CROISÉE

1. Créer seulement 2 sous-échantillons : **apprentissage** et **test**
2. Diviser les données $\mathcal{S}_{app}$ en B parties de même taille (approximativement) et disjointes $\mathcal{S}_{app}^1, \ldots, \mathcal{S}_{app}^B$
3. Pour $B \in \{1, \ldots, B\}$
   - Entraîner sur toutes les données de $\mathcal{S}_{app}$ **sauf** $\mathcal{S}_{app}^b$ pour obtenir un modèle $\hat{h}_\lambda^b$
   - Calculer le risque empirique sur les données restantes $\mathcal{S}_{app}^b$

$$R^b(\lambda) = \frac{1}{|\mathcal{S}_{app}^b|} \sum_{i \in \mathcal{S}_{app}^b} L(x_i, y_i, \hat{h}_\lambda^b)$$

4. Risque estimé par validation croisée

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

SÉLECTION DE MODÈLE : VALIDATION CROISÉE

- Répéter la procédure pour tous les λ dans la grille Λ et choisir

$$\hat{\lambda}_{CV}^{B} = \arg\min_{\lambda \in \Lambda} R_{CV}^{B}(\lambda)$$

- R_{app} nous dit à quel point le classifieur a bien réussi à approcher les données d'apprentissage
- R_{CV}^{B} nous dit à quelle erreur en généralisation nous attendre en apprenant sur un ensemble de taille $|\mathcal{S}_{app}| - |\mathcal{S}_{app}|/B$
- R_{test} nous dit à quel point le classifieur réussit à approcher des données nouvelles

ÉVALUATION DE MODÈLES

- On choisit en général comme critère d'évaluation
  - l'erreur quadratique pour la régression
  - l'erreur de prédiction (0-1) pour la classification
- Cependant pour la classification binaire, l'erreur 0-1 est parfois insuffisante
  - classes très déséquilibrées
  - besoin de détails sur la nature des erreurs (faux positifs, faux négatifs, etc)
- On se tourne alors vers la **courbe ROC**, ainsi que son résumé : l'aire sous la courbe ROC

COURBE ROC

	Prédit OUI	Prédit NON
POS	Vrais positifs	Faux négatifs
NEG	Faux positifs	Vrais négatifs

- TPR : taux de vrais positifs

$$TPR = \frac{TP}{TP + FN}$$

- FPR : taux de faux positifs

$$FPR = \frac{FP}{FP + TN}$$

COURBE ROC

- Soit h un classifieur défini par

$$h(x) = \text{sign}(f(x) - s)$$

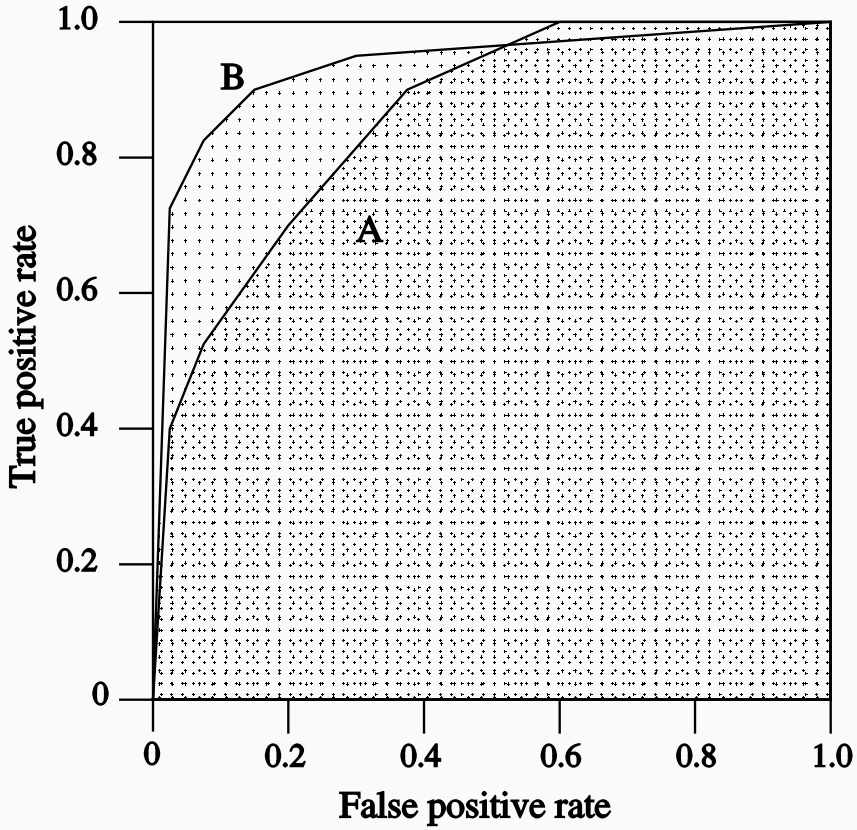
- Habituellement, en classification binaire, $s = 0.5$ si les sorties sont dans $\{0, 1\}$, ou $s = 0$ si dans $\{-1, 1\}$
- Le choix du seuil s fait varier TPR et FPR
- Tracer la courbe ROC consiste à faire varier s et à reporter le point $(FPR(s), TPR(s))$ sur un graphique 2D
- On associe ainsi plusieurs points à une même fonction f issue d'un algorithme d'apprentissage

COMPARER DES CLASSIFIEURS AVEC UNE COURBE ROC

- Sur un ensemble test, pour une fonction f donnée, on mesure $(FPR(s), TPR(s))$ en faisant varier s

AIRE SOUS LA COURBE ROC

- L'aire sous la courbe ROC (AUC) est un résumé de la courbe ROC
  - Compris entre 0 (pire) and 1 (meilleur)
  - Indicateur très utilisé de la qualité d'un classifieur



D'AUTRES MESURES POUR ALLER PLUS LOIN

		True class: p	True class: n
Hypothesized class	Y	True Positives	False Positives
	N	False Negatives	True Negatives
Column totals:		P	N

$$\text{fp rate} = \frac{FP}{N} \qquad \text{tp rate} = \frac{TP}{P}$$

$$\text{precision} = \frac{TP}{TP+FP} \qquad \text{recall} = \frac{TP}{P}$$

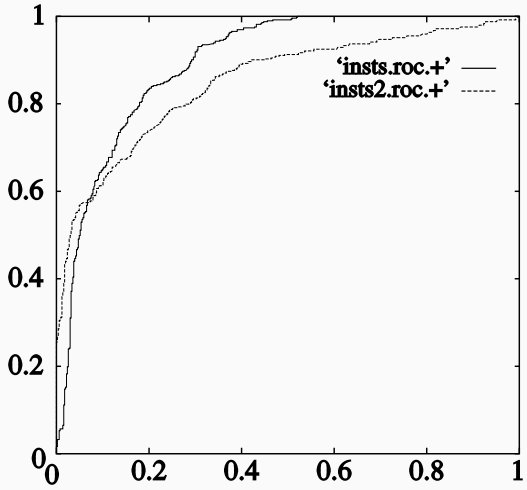
$$\text{accuracy} = \frac{TP+TN}{P+N}$$

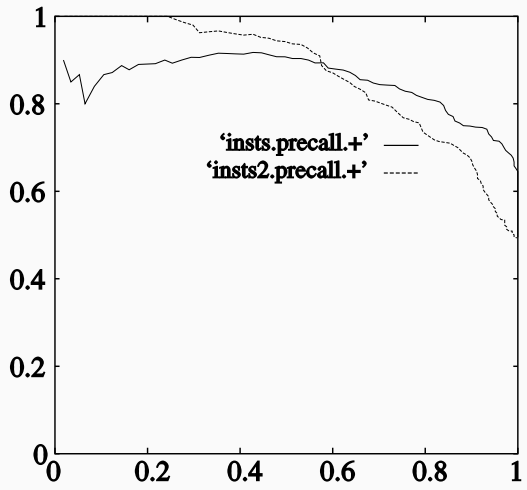
$$\text{F-measure} = \frac{2}{1/\text{precision}+1/\text{recall}}$$

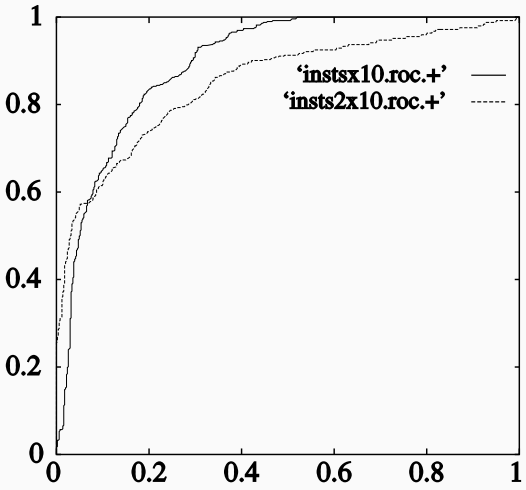
- En recherche d'information, on cherche à bien prédire mais aussi à ne pas manquer d'information pertinente
- Exemple : un moteur de recherche veut retourner une liste de documents pertinents la plus exhaustive possible
- On s'intéresse alors aux courbes Précision-Rappel

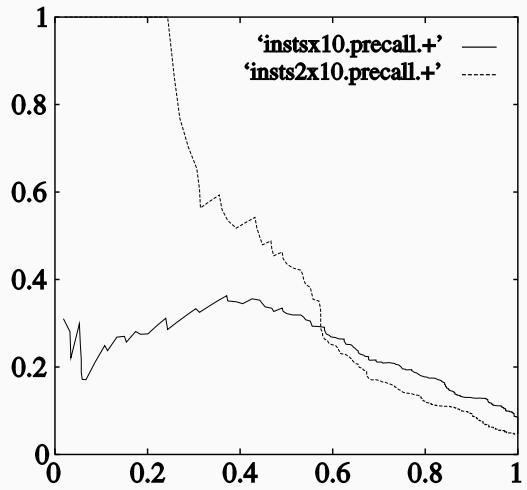
EXEMPLES DE COURBES ROC ET PR

- Les courbes ROC sont insensibles au déséquilibre de classes, alors que les courbes PR le sont









RÉFÉRENCES

- Arbres de décision et de régression
  - Chapitre 9 de **Elements of Statistical Learning** (Hastie, Tibshirani & Friedman, 2009)
  - Article : **Classification and regression trees** (L. Breiman et al., Wadsworth Statistics/Probability Series 1984)
  - Article : **Induction of decision trees** (J. R. Quinlan, Machine Learning 1986)
  - Article : **Random Forests** (L. Breiman, Machine Learning 2001)
- Sélection et évaluation de modèles
  - Chapitres 4 et 7 de **Elements of Statistical Learning** (Hastie, Tibshirani & Friedman, 2009)
  - Article : **Introduction to ROC analysis** (T. Fawcett, Pattern Recognition Letters 2006)