# Machine Learning Cours 1: Introduction

Stéphanie Bricq stephanie.bricq@u-bourgogne.fr

Université de Bourgogne

09/2022

### Module Outils de l'IA

#### Organisation

- 4 CM (8h)
- 4 TD (8h)
- 4 TP (8h)

#### Evaluation

- QCM/ CR TP/projet
- Examen : 1 feuille A4 recto-verso manuscrite autorisée

#### Ressources

• en ligne sur la plateforme PLUBEL

### Bibliographie

- [Cornuéjols18] Apprentissage artificiel: deep learning, concepts et algorithmes,
   A. Cornuéjols, L. Miclet, V. Barra, Paris, Eyrolles, 2018
- [Mueller18] Le Machine Learning avec Python, A. Mueller, S. Guido, First Interactive, 2018
- [Géron17] Hands-On Machine Learning with Scikit-Learn and TensorFlow:
   Concepts, Tools, and Techniques to Build Intelligent Systems, A. Géron, O'Reilly Media, Inc, USA, 2017
- [Goodfellow16] Deep Learning, I. Goodfellow, Y. Bengio and A. Courville, MIT Press, 2016
- [Lantz19] Machine learning with R, Expert techniques for predictive modeling, B. Lantz, 3rd Edition, Packt Publishing, 2019
- [Mathivet21] Machine Learning, Implémentation en Python avec Scikit-learn, V. Mathivet, Eni Editions, 2021.
- MOOC INRIA Scikit-learn
  https://inria.github.io/scikit-learn-mooc/
- Cours d'Eric Leclercq

### Contenu

- Différentes approches de l'intelligence artificielle
- Principales techniques de machine learning
- Introduction au deep learning

### Plan

- Intelligence artificielle
  - Machine learning
  - Deep learning
- Machine learning
  - Introduction
  - Types de systèmes
  - Difficultés
  - Test et validation
- Critères pour évaluer la performance

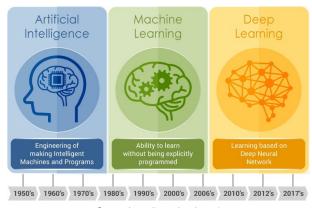
### Introduction

- volume de données important
- données de types plus variés (nombres, textes, images, vidéos, ...)
- grande quantité de données nécessite des méthodes automatisées d'analyse des données.
- ⇒ apprentissage automatique

### Intelligence artificielle

- développement du domaine de l'intelligence artificielle
- Certains problèmes difficiles pour l'homme ont été résolus par un ordinateur
- Mais d'autres tâches qui peuvent être très faciles à faire pour les humains mais difficiles à décrire formellement sont plus difficiles à résoudre avec une machine.

# Intelligence artificielle



Source : https ://www.viatech.com/

8/81

- certains systèmes ont besoin de pouvoir acquérir leurs propres connaissances en extrayant des modèles à partir de données brutes
- s'appuient sur des observations passées pour apprendre de l'expérience
- ⇒ apprentissage automatique (Machine learning)

9/81

- a permis aux ordinateurs d'aborder des pbs impliquant la connaissance du monde réel
- et de prendre des décisions qui semblent subjectives

S. Bricq (UB) Machine Learning 09/2022 10/81

- a permis aux ordinateurs d'aborder des pbs impliquant la connaissance du monde réel
- et de prendre des décisions qui semblent subjectives
- Exemples
  - régression logistique pour déterminer s'il faut recommander ou non une césarienne [Mor-Yosef90]
  - algo bayésien naïf pour séparer les courriels légitimes des spams

S. Bricq (UB) Machine Learning 09/2022 10/81

- a permis aux ordinateurs d'aborder des pbs impliquant la connaissance du monde réel
- et de prendre des décisions qui semblent subjectives
- Exemples
  - régression logistique pour déterminer s'il faut recommander ou non une césarienne [Mor-Yosef90]
  - algo bayésien naïf pour séparer les courriels légitimes des spams
- performance de ces algos dépend de la représentation des données qui leur sont transmises
- caractéristique (feature, ou variable)

S. Bricq (UB) Machine Learning 09/2022 10/81

### Machine learning

- performances liées à la représentation des données
- nécessité de définir des variables (ou caractéristiques)

S. Bricq (UB) Machine Learning 09/2022 11/81

### Machine learning

- performances liées à la représentation des données
- nécessité de définir des variables (ou caractéristiques)
- ex : compagnie d'assurance

S. Bricq (UB) Machine Learning 09/2022 11/81

### Machine learning

- performances liées à la représentation des données
- nécessité de définir des variables (ou caractéristiques)
- ex : compagnie d'assurance
- L'algorithme apprend comment chacune des caractéristiques est en corrélation avec certains résultats, mais il ne peut pas influencer la manière dont les caractéristiques sont définies.

S. Bricq (UB) Machine Learning 09/2022 11/81

### Deep learning

### Apprentissage profond

- introduit des représentations qui s'expriment en termes d'autres représentations plus simples
- concepts complexes à partir de concepts plus simples

S. Bricq (UB) Machine Learning 09/2022 12/81

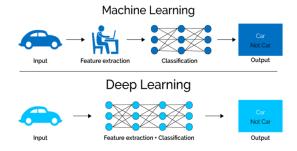
### Deep learning

### Apprentissage profond

- introduit des représentations qui s'expriment en termes d'autres représentations plus simples
- concepts complexes à partir de concepts plus simples
- Exemple : Comment représenter le concept d'image d'une personne ?

S. Bricq (UB) Machine Learning 09/2022 12/81

# Machine Learning vs Deep learning



S. Bricq (UB) Machine Learning 09/2022 13/81

### Deep learning

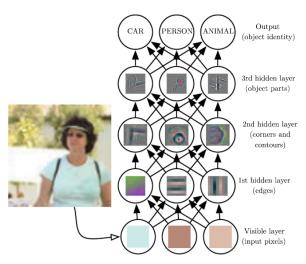


Fig. Illustration d'un modèle d'apprentissage profond [Goodfellow]

S. Bricq (UB) Machine Learning 09/2022 14/81

### Deep learning

### Exemple: perceptron multicouche (PMC)

- PMC ou réseau de neurones profond à propagation avant
- fonction mathématique qui associe un ensemble de valeurs d'entrée à des valeurs de sortie
- fonction formée par la composition de nb fonctions + simples

S. Bricq (UB) Machine Learning 09/2022 15/81

### Plan

- Intelligence artificielle
  - Machine learning
  - Deep learning
- Machine learning
  - Introduction
  - Types de systèmes
  - Difficultés
  - Test et validation
- 3 Critères pour évaluer la performance

S. Bricq (UB) Machine Learning 09/2022

16/81

#### **Définitions**

• "Discipline donnant aux ordinateurs la capacité d'apprendre sans qu'ils soient explicitement programmés" (Arthur Samuel, 1959)

S. Bricq (UB) Machine Learning 09/2022 17/81

#### **Définitions**

- "Discipline donnant aux ordinateurs la capacité d'apprendre sans qu'ils soient explicitement programmés" (Arthur Samuel, 1959)
- "Etant donnée une tâche T et une mesure de performance P, on dit qu'un programme informatique apprend à partir d'une expérience E si les résultats obtenus sur T, mesurés par P, s'améliorent avec l'expérience E" (Tom Mitchell, 1997)

S. Bricq (UB) Machine Learning 09/2022 17/81

#### **Définitions**

- "Discipline donnant aux ordinateurs la capacité d'apprendre sans qu'ils soient explicitement programmés" (Arthur Samuel, 1959)
- "Etant donnée une tâche T et une mesure de performance P, on dit qu'un programme informatique apprend à partir d'une expérience E si les résultats obtenus sur T, mesurés par P, s'améliorent avec l'expérience E" (Tom Mitchell, 1997)

### Exemple: filtre anti-spam:

 programme d'apprentissage automatique pouvant apprendre à identifier les emails frauduleux à partir d'ex de spam et de message normaux (ham)

S. Bricq (UB) Machine Learning 09/2022 17/81

#### **Définitions**

- jeu d'entraînement (training set) : exemples utilisés par le système pour son apprentissage
- échantillon ou observation d'entraînement

S. Bricq (UB) Machine Learning 09/2022 18/81

#### **Définitions**

- jeu d'entraînement (training set) : exemples utilisés par le système pour son apprentissage
- échantillon ou observation d'entraînement

Exemple: filtre anti-spam:

#### **Définitions**

- jeu d'entraînement (training set) : exemples utilisés par le système pour son apprentissage
- échantillon ou observation d'entraînement

#### Exemple: filtre anti-spam:

• tâche T : identifier les emails frauduleux parmi les nouveaux emails

18/81

#### **Définitions**

- jeu d'entraînement (training set) : exemples utilisés par le système pour son apprentissage
- échantillon ou observation d'entraînement

#### Exemple: filtre anti-spam:

- tâche T : identifier les emails frauduleux parmi les nouveaux emails
- expérience E : données d'entraînement

09/2022

18/81

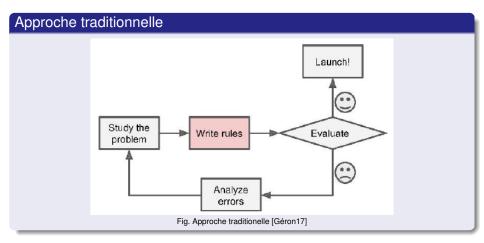
#### **Définitions**

- jeu d'entraînement (training set) : exemples utilisés par le système pour son apprentissage
- échantillon ou observation d'entraînement

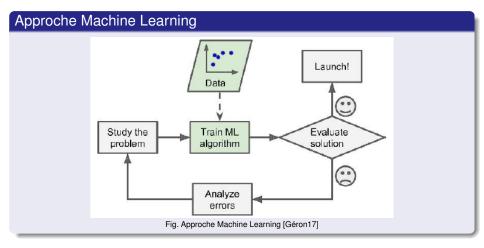
#### Exemple: filtre anti-spam:

- tâche T : identifier les emails frauduleux parmi les nouveaux emails
- expérience E : données d'entraînement
- mesure de performance P doit être définie
  - par ex : % de courriels correctement classés
  - mesure de performance appelée exactitude (*accuracy*) souvent utilisée dans les tâches de classification

S. Bricq (UB) Machine Learning 09/2022 18/81

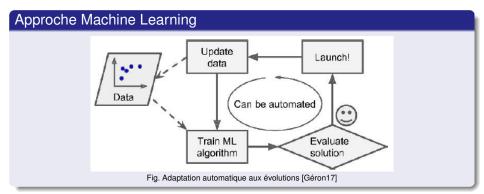


S. Bricq (UB) Machine Learning 09/2022 19/81



pgm plus court, plus facile à maintenir

S. Bricq (UB) Machine Learning 09/2022 20/81



S. Bricq (UB) Machine Learning 09/2022 21/81

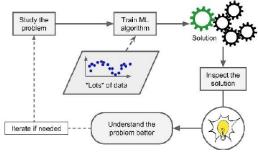


Fig. Apprentissage automatique peut aider les humains à apprendre [Géron17]

• peut révéler des corrélations insoupçonnées ou de nouvelles tendances, permettant ainsi d'avoir une meilleure compréhension du pb

S. Bricq (UB) Machine Learning 09/2022 22/81

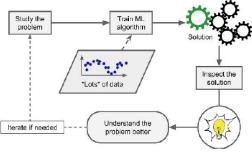


Fig. Apprentissage automatique peut aider les humains à apprendre [Géron17]

- peut révéler des corrélations insoupçonnées ou de nouvelles tendances, permettant ainsi d'avoir une meilleure compréhension du pb
- appliquer des techniques d'apprentissage automatique pour explorer de gros volumes de données peut permettre d'y découvrir certains éléments de structuration qui n'étaient pas immédiatement apparents perploration de données (data mining)

#### En résumé, utile dans les cas suivants

 pour les pb pour lesquels les solutions existantes nécessitent bcp d'ajustements manuels ou de longues listes de règles

S. Bricq (UB) Machine Learning 09/2022 23/81

#### En résumé, utile dans les cas suivants

- pour les pb pour lesquels les solutions existantes nécessitent bcp d'ajustements manuels ou de longues listes de règles
- pour les pb complexes pour lesquels il n'existe aucune bonne solution si on adopte une approche traditionnelle

S. Brica (UB) Machine Learning 09/2022 23/81

## Apprentissage automatique

#### En résumé, utile dans les cas suivants

- pour les pb pour lesquels les solutions existantes nécessitent bcp d'ajustements manuels ou de longues listes de règles
- pour les pb complexes pour lesquels il n'existe aucune bonne solution si on adopte une approche traditionnelle
- pour les environnements fluctuants

## Apprentissage automatique

#### En résumé, utile dans les cas suivants

- pour les pb pour lesquels les solutions existantes nécessitent bcp d'ajustements manuels ou de longues listes de règles
- pour les pb complexes pour lesquels il n'existe aucune bonne solution si on adopte une approche traditionnelle
- pour les environnements fluctuants
- pour l'exploitation des pb complexes et des gros volumes de données

23/81

## Quelques exemples d'applications

- Identification de spams dans les emails
- Segmentation du comportement des clients pour de la publicité ciblée
- Prévisions météorologiques
- Prédiction du résultat des élections
- Développement d'algorithmes pour le pilotage automatique de drones ou pour la conduite automatique de voitures
- Optimisation énergétique des maisons et immeubles
- Découverte de séquences génétiques liées à des maladies

S. Bricq (UB) Machine Learning 09/2022 24/81

### Plan

- Intelligence artificielle
  - Machine learning
  - Deep learning
- Machine learning
  - Introduction
  - Types de systèmes
  - Difficultés
  - Test et validation
- 3 Critères pour évaluer la performance

S. Bricq (UB) Machine Learning 09/2022 25/81

Classement en catégories

S. Bricq (UB) Machine Learning 09/2022 26 / 81

#### Classement en catégories

• apprentissage *supervisé*, *non supervisé*, *semi-supervisé* ou avec renforcement

S. Bricq (UB) Machine Learning 09/2022 26/81

#### Classement en catégories

- apprentissage supervisé, non supervisé, semi-supervisé ou avec renforcement
- apprentissage en ligne ou apprentissage groupé

S. Bricq (UB) Machine Learning 09/2022 26 / 81

#### Classement en catégories

- apprentissage supervisé, non supervisé, semi-supervisé ou avec renforcement
- apprentissage en ligne ou apprentissage groupé
- apprentissage à partir d'observations ou à partir d'un modèle

Critères non exclusifs, possibilité de les combiner

S. Bricq (UB) Machine Learning 09/2022 26 / 81

## Apprentissage supervisé/non supervisé

- 4 catégories majeures :
  - apprentissage supervisé,
  - apprentissage non supervisé,
  - apprentissage semi-supervisé
  - apprentissage avec renforcement

S. Bricq (UB) Machine Learning 09/2022 27/81

 données d'entraînement fournies à l'algo comportent les solutions désirées, appelées étiquettes (labels)

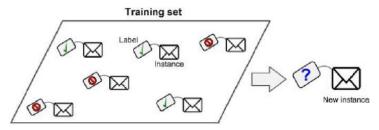


Fig. Jeu d'entraînement étiqueté pour apprentissage supervisé [Géron17]

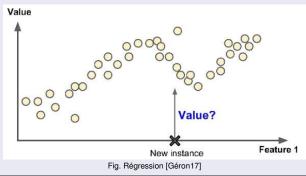
## Exemple de tâche

classification



#### Exemple de tâche

- classification
- prédiction d'une valeur numérique cible (target) à partir des valeurs d'un certain nb d'attributs ou variables : régression. Ces valeurs sont appelées les caractéristiques d'une observation.



S. Bricq (UB) Machine Learning 09/2022 29/81

09/2022

30/81

## Apprentissage supervisé

#### Exemples

- K plus proches voisins
- Régression linéaire
- Régression logistique
- Machines à vecteurs de support
- Arbres de décisions et forêts aléatoires
- Réseaux neuronaux

S. Bricq (UB) Machine Learning

• les données d'apprentissage ne sont pas étiquetées

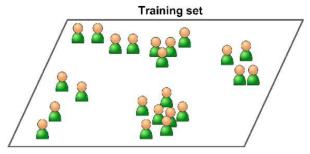


Fig. Jeu d'entraînement non étiqueté pour apprentissage non supervisé [Géron17]

#### Exemples

- Partitionnement
  - K-moyennes (clustering)
  - Partitionnement hiérarchique
- Visualisation et réduction de dimension
  - Analyse en composants principales
- Détection d'anomalies ou de nouveauté
  - One-class SVM
  - Isolation Forest
- Apprentissage par association de règles
  - A priori
  - Eclat

S. Bricq (UB) Machine Learning 09/2022

32/81

#### Exemples

Partitionnement (clustering)

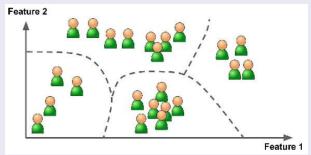


Fig. Partitionnement [Géron17]

#### Exemples

Partitionnement (clustering)

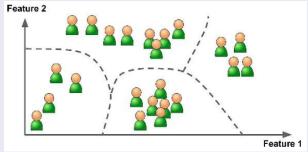


Fig. Partitionnement [Géron17]

 Partitionnement hiérarchique : chaque groupe en groupes plus petits

S. Bricq (UB) Machine Learning 09/2022 33/81

### Exemples

Détection d'anomalies

S. Bricq (UB) Machine Learning 09/2022 34/81

#### Exemples

- Détection d'anomalies
  - entrainement du système avec des observations normales
  - quand on lui fournit une nouvelle observation, le système peut dire si elle paraît normale ou si c'est vraisemblablement une anomalie.

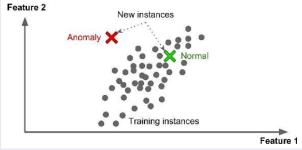


Fig. Détection d'anomalies [Géron17]

S. Bricq (UB) Machine Learning 09/2022 34/81

#### Exemples

- Apprentissage par association de règle
  - Objectif:
    - explorer de larges ensembles de données
    - pour découvrir des relations entre les variables
  - ex : gestion d'un supermarché

S. Bricq (UB) Machine Learning 09/2022 35/81

## Apprentissage semi-supervisé

Données d'apprentissage partiellement étiquetées

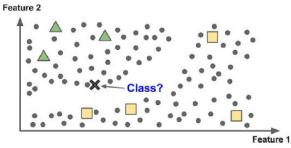


Fig. Apprentissage semi-supervisé [Géron17]

- ex :services d'hébergement d'images (Google Photos)
- souvent des combinaisons d'algos non supervisés et supervisés

S. Bricg (UB) Machine Learning 09/2022 36/81

## Apprentissage par renforcement

- ullet  $\neq$  des autres types
- dans ce contexte, système d'apprentissage appelé agent

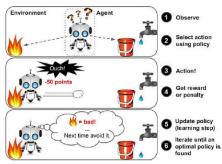


Fig. Apprentissage par renforcement [Géron17]

## Apprentissage par renforcement

- ≠ des autres types
- dans ce contexte, système d'apprentissage appelé agent

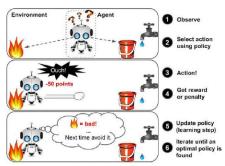


Fig. Apprentissage par renforcement [Géron17]

• ex : robots pour apprendre à marcher

## Apprentissage groupé et en ligne

 Autre critère pour classer les systèmes d'apprentissage automatique : peuvent-ils apprendre ou non progressivement à partir d'un flux de données entrantes

S. Bricq (UB) Machine Learning 09/2022 38/81

## Apprentissage groupé et en ligne

- Autre critère pour classer les systèmes d'apprentissage automatique : peuvent-ils apprendre ou non progressivement à partir d'un flux de données entrantes
  - apprentissage groupé (ou batch)
  - apprentissage en ligne

S. Bricq (UB) Machine Learning 09/2022

38/81

## Apprentissage groupé (batch)

- pas d'apprentissage progressif, système entraîné avec toutes les données dispos
- nécessite bcp de temps et de ressources informatiques

S. Bricq (UB) Machine Learning 09/2022 39/81

## Apprentissage groupé (batch)

- pas d'apprentissage progressif, système entraîné avec toutes les données dispos
- nécessite bcp de temps et de ressources informatiques
- > tâche effectuée en différé : apprentissage hors-ligne

 système entraîné progressivement en l'alimentant peu à peu avec des observations soit une à une soit par petits groupes (mini-lots, mini-batches)

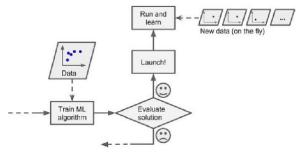


Fig. Apprentissage en ligne [Géron17]

 système entraîné progressivement en l'alimentant peu à peu avec des observations soit une à une soit par petits groupes (mini-lots, mini-batches)

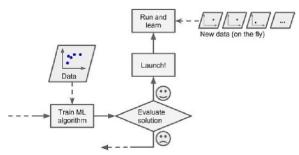


Fig. Apprentissage en ligne [Géron17]

- pour des systèmes recevant des données en flux continu
- ou dans le cas de ressources informatiques limitées

S. Bricq (UB) Machine Learning 09/2022 40/81

 pour l'entrainement sur des gros jeux de données ne pouvant tenir en mémoire principale

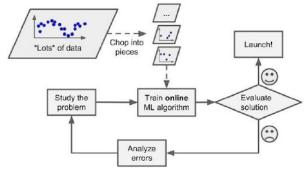


Fig. Apprentissage en ligne [Géron17]

S. Bricq (UB) Machine Learning 09/2022 41/81

- Paramètre : taux d'apprentissage (learning rate)
  - rythme auquel ils doivent s'adapter à l'évolution des données
  - si taux élevé

S. Bricq (UB) Machine Learning 09/2022 42/81

- Paramètre : taux d'apprentissage (learning rate)
  - rythme auquel ils doivent s'adapter à l'évolution des données
  - si taux élevé
    - ⇒ adaptation rapide aux nouvelles données
    - oubli rapide des anciennes

S. Bricq (UB) Machine Learning 09/2022 42/81

- Paramètre : taux d'apprentissage (learning rate)
  - rythme auquel ils doivent s'adapter à l'évolution des données
  - si taux élevé
    - ⇒ adaptation rapide aux nouvelles données
    - → oubli rapide des anciennes
  - inversement, si taux faible, le système a une plus grande inertie
    - ⇒ apprentissage plus lent
    - moins sensible aux parasites dans les nouvelles données

S. Bricq (UB) Machine Learning 09/2022 42/81

- Paramètre : taux d'apprentissage (learning rate)
  - rythme auquel ils doivent s'adapter à l'évolution des données
  - si taux élevé
    - ⇒ adaptation rapide aux nouvelles données
    - → oubli rapide des anciennes
  - inversement, si taux faible, le système a une plus grande inertie
    - ⇒ apprentissage plus lent
    - moins sensible aux parasites dans les nouvelles données
- Difficulté :
  - en cas d'introduction de mauvaises données dans le système, dégradation progressive des résultats

09/2022

42/81

# Apprentissage à partir d'observations ou à partir d'un modèle

- classement sur leur mode de généralisation
- à partir d'exemples d'apprentissage, le système doit pouvoir généraliser à des exemples non vus auparavant

S. Bricq (UB) Machine Learning 09/2022 43/81

# Apprentissage à partir d'observations ou à partir d'un modèle

- classement sur leur mode de généralisation
- à partir d'exemples d'apprentissage, le système doit pouvoir généraliser à des exemples non vus auparavant
- 2 approches :
  - Apprentissage à partir d'observations
  - Apprentissage à partir d'un modèle

S. Bricq (UB) Machine Learning

09/2022

43/81

# Apprentissage à partir d'observations

- système apprend les exemples
- généralisation en utilisant une mesure de similarité
- → Apprentissage à partir d'observations

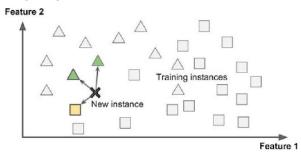


Fig. Apprentissage à partir d'observations [Géron17]

# Apprentissage à partir d'un modèle

- construire un modèle de ces exemples
- utilisation du modèle pour faire des prédictions
- → Apprentissage à partir d'un modèle

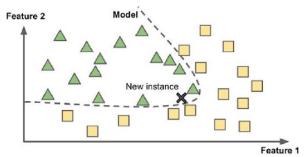


Fig. Apprentissage à partir d'un modèle [Géron17]

# Apprentissage à partir d'un modèle

#### **Etapes**

- étude des données
- sélection d'un modèle
- entraînement du modèle sur des données d'entraînement
- application du modèle pour effectuer des prédictions sur des nouveaux cas ⇒ inférence

### Plan

- Intelligence artificielle
  - Machine learning
  - Deep learning
- Machine learning
  - Introduction
  - Types de systèmes
  - Difficultés
  - Test et validation
- Critères pour évaluer la performance

# Principales difficultés de l'apprentissage automatique

- Tâche principale : sélectionner un algorithme d'apprentissage et l'entraîner sur certaines données
- 2 écueils
  - "Mauvais algorithme"
  - "Mauvaises données"

48/81

09/2022

- Données d'apprentissage en nb insuffisant
  - nécessité d'avoir un grand nb de données

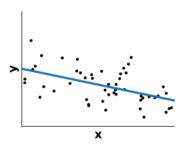
- Données d'apprentissage en nb insuffisant
- Données d'entraînement non représentatives
  - nécessité d'avoir un jeu d'entraînement représentatif
    - si l'échantillon est trop petit ⇒ bruit d'échantillonnage : données non représentatives résultant du hasard
    - échantillons très importants peuvent être non représentatifs en cas de méthode d'échantillonnage défectueuse ⇒ biais d'échantillonnage

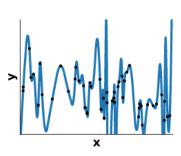
- Données d'apprentissage en nb insuffisant
- Données d'entraînement non représentatives
- Données de mauvaise qualité
  - jeu d'entraînement peut contenir des erreurs, des données aberrantes et du bruit
  - ⇒ moins bons résultats
  - → nettoyer les données d'apprentissage
    - si données aberrantes ⇒ suppression ou correction manuelle
    - si qq valeurs manquantes dans les observations, il faut décider si on ignore la variable ou ces observations, ou si on remplit la valeur manquante (par ex avec la moyenne des autres valeurs ...)

- Données d'apprentissage en nb insuffisant
- Données d'entraînement non représentatives
- Données de mauvaise qualité
- Variables non pertinentes
  - nécessité de choisir un bon ensemble de variables sur lesquelles s'entraîner ⇒ ingénierie des variables (feature engineering)
    - sélection de variables
    - extraction de variables : combiner plusieurs variables existantes pour en produire une autre qui sera plus utile
    - introduction de nouvelles variables grâce à la collecte de nouvelles données

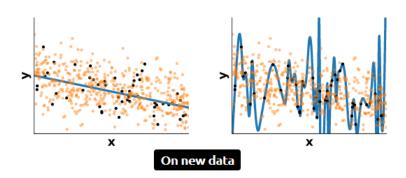
- Surajustement des données d'entraînement (overfitting)
- Sous-ajustement des données d'entraînement (underfitting)

# Quel ajustement?

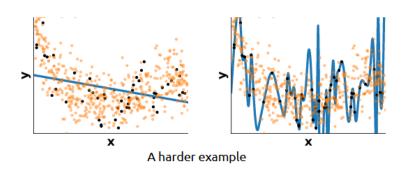




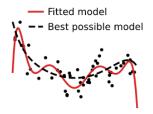
# Quel ajustement?



# Quel ajustement?



# Surajustement / Overfitting



- Modèle trop complexe pour les données :
  - Son meilleur ajustement possible se rapprocherait bien du processus génératif
  - Cependant, sa flexibilité capture le bruit
- pb rencontré quand :
  - pas assez de données
  - ou trop de bruit

#### Surajustement des données d'entraînement (overfitting)

- lorsque le modèle est trop complexe par rapport à la quantité de données d'apprentissage et au bruit qu'elles contiennent
- Plusieurs solutions :

#### Surajustement des données d'entraînement (overfitting)

- lorsque le modèle est trop complexe par rapport à la quantité de données d'apprentissage et au bruit qu'elles contiennent
- Plusieurs solutions :
  - simplifier le modèle
    - en sélectionnant moins de paramètres
    - en réduisant le nb d'attributs des données d'entraînement
    - ou en imposant des contraintes au modèle (régularisation)

#### Surajustement des données d'entraînement (overfitting)

- lorsque le modèle est trop complexe par rapport à la quantité de données d'apprentissage et au bruit qu'elles contiennent
- Plusieurs solutions :
  - simplifier le modèle
    - en sélectionnant moins de paramètres
    - en réduisant le nb d'attributs des données d'entraînement
    - ou en imposant des contraintes au modèle (régularisation)
  - rassembler davantage de données d'apprentissage

#### Surajustement des données d'entraînement (overfitting)

- lorsque le modèle est trop complexe par rapport à la quantité de données d'apprentissage et au bruit qu'elles contiennent
- Plusieurs solutions :
  - simplifier le modèle
    - en sélectionnant moins de paramètres
    - en réduisant le nb d'attributs des données d'entraînement
    - ou en imposant des contraintes au modèle (régularisation)
  - rassembler davantage de données d'apprentissage
  - réduire le bruit dans ces données
    - en corrigeant les erreurs
    - en supprimant les données aberrantes

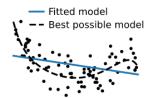
S. Bricq (UB)

#### Surajustement des données d'entraînement (overfitting)

- lorsque le modèle est trop complexe par rapport à la quantité de données d'apprentissage et au bruit qu'elles contiennent
- Plusieurs solutions :
  - simplifier le modèle
    - en sélectionnant moins de paramètres
    - en réduisant le nb d'attributs des données d'entraînement
    - ou en imposant des contraintes au modèle (régularisation)
  - rassembler davantage de données d'apprentissage
  - réduire le bruit dans ces données
    - en corrigeant les erreurs
    - en supprimant les données aberrantes

niveau de régularisation peut être contrôlé par un **hyperparamètre** : param de l'algorithme d'apprentissage

# Sous-ajustement / underfitting



- Modèle trop simple pour les données :
  - Son meilleur ajustement ne se rapproche pas bien du processus génératif
  - mais capture peu de bruit
- pb rencontré quand :
  - il y a beaucoup de données par rapport à la complexité du modèle
  - ou dans des situations à faible bruit.

#### Sous-ajustement des données d'entraînement (underfitting)

- lorsque le modèle est trop simple pour découvrir la structure sous-jacente des données
- Plusieurs solutions :

#### Sous-ajustement des données d'entraînement (underfitting)

- lorsque le modèle est trop simple pour découvrir la structure sous-jacente des données
- Plusieurs solutions :
  - choisir un modèle plus puissant avec plus de paramètres
  - fournir de meilleures variables à l'algorithme d'apprentissage
  - réduire les contraintes sur le modèle

- apprentissage automatique
  - consiste à rendre une machine capable de mieux accomplir une tâche grâce à un entraînement sur des données
  - de nombreux types différents de systèmes d'apprentissage automatique
    - supervisés ou non
    - en différé ou en ligne
    - à partir de modèles ou à partir d'observations

S. Brica (UB) Machine Learning

09/2022

58/81

• Etapes:

- Etapes:
  - Rassembler des données dans un jeu d'entraînement

- Etapes :
  - Rassembler des données dans un jeu d'entraînement
  - Alimenter l'algorithme d'apprentissage avec ce jeu

- Etapes :
  - Rassembler des données dans un jeu d'entraînement
  - Alimenter l'algorithme d'apprentissage avec ce jeu
  - Puis
    - Si l'apprentissage s'effectue à partir d'un modèle, l'algorithme ajuste ce modèle au jeu d'entraînement

#### Etapes :

- Rassembler des données dans un jeu d'entraînement
- Alimenter l'algorithme d'apprentissage avec ce jeu
- Puis
  - Si l'apprentissage s'effectue à partir d'un modèle, l'algorithme ajuste ce modèle au jeu d'entraînement
  - Si l'apprentissage s'effectue à partir d'observations, il mémorise les exemples et utilise une mesure de similarité pour généraliser à de nouvelles observations

- Etapes :
  - Rassembler des données dans un jeu d'entraînement
  - Alimenter l'algorithme d'apprentissage avec ce jeu
  - Puis
    - Si l'apprentissage s'effectue à partir d'un modèle, l'algorithme ajuste ce modèle au jeu d'entraînement
    - Si l'apprentissage s'effectue à partir d'observations, il mémorise les exemples et utilise une mesure de similarité pour généraliser à de nouvelles observations
- Pas de bons résultats
  - si jeu d'entraînement trop petit

- Etapes :
  - Rassembler des données dans un jeu d'entraînement
  - Alimenter l'algorithme d'apprentissage avec ce jeu
  - Puis
    - Si l'apprentissage s'effectue à partir d'un modèle, l'algorithme ajuste ce modèle au jeu d'entraînement
    - Si l'apprentissage s'effectue à partir d'observations, il mémorise les exemples et utilise une mesure de similarité pour généraliser à de nouvelles observations
- Pas de bons résultats
  - si jeu d'entraînement trop petit
  - si données
    - non-représentatives
    - entâchées de bruit
    - polluées par des variables non appropriées

- Etapes :
  - Rassembler des données dans un jeu d'entraînement
  - Alimenter l'algorithme d'apprentissage avec ce jeu
  - Puis
    - Si l'apprentissage s'effectue à partir d'un modèle, l'algorithme ajuste ce modèle au jeu d'entraînement
    - Si l'apprentissage s'effectue à partir d'observations, il mémorise les exemples et utilise une mesure de similarité pour généraliser à de nouvelles observations
- Pas de bons résultats
  - si jeu d'entraînement trop petit
  - si données
    - non-représentatives
    - entâchées de bruit
    - polluées par des variables non appropriées
  - si modèle trop simple (sous-ajustement) ou trop complexe (surajustement)

- Etapes :
  - Rassembler des données dans un jeu d'entraînement
  - Alimenter l'algorithme d'apprentissage avec ce jeu
  - Puis
    - Si l'apprentissage s'effectue à partir d'un modèle, l'algorithme ajuste ce modèle au jeu d'entraînement
    - Si l'apprentissage s'effectue à partir d'observations, il mémorise les exemples et utilise une mesure de similarité pour généraliser à de nouvelles observations
- Pas de bons résultats
  - si jeu d'entraînement trop petit
  - si données
    - non-représentatives
    - entâchées de bruit
    - polluées par des variables non appropriées
  - si modèle trop simple (sous-ajustement) ou trop complexe (surajustement)
- ⇒ Après entrainement, validation + réglages éventuels

59/81

### Plan

- Intelligence artificielle
  - Machine learning
  - Deep learning
- Machine learning
  - Introduction
  - Types de systèmes
  - Difficultés
  - Test et validation
- Critères pour évaluer la performance

#### Test et validation

 partage des données en 2 ensembles : jeu d'entraînement et jeu de test : en général 80% des données pour l'entraînement et 20% pour les tests

#### Test et validation

- partage des données en 2 ensembles : jeu d'entraînement et jeu de test : en général 80% des données pour l'entraînement et 20% pour les tests
- erreur de généralisation : taux d'erreur sur le jeu de test
  - si erreur d'apprentissage faible mais erreur de généralisation élevée ⇒ modèle surajuste les données d'entraînement

#### Test et validation

- partage des données en 2 ensembles : jeu d'entraînement et jeu de test : en général 80% des données pour l'entraînement et 20% pour les tests
- erreur de généralisation : taux d'erreur sur le jeu de test
  - si erreur d'apprentissage faible mais erreur de généralisation élevée ⇒ modèle surajuste les données d'entraînement
- comment choisir entre plusieurs modèles ou comment choisir les valeurs des hyperparamètres?

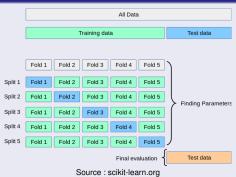
#### Test et validation

- partage des données en 2 ensembles : jeu d'entraînement et jeu de test : en général 80% des données pour l'entraînement et 20% pour les tests
- erreur de généralisation : taux d'erreur sur le jeu de test
  - si erreur d'apprentissage faible mais erreur de généralisation élevée ⇒ modèle surajuste les données d'entraînement
- comment choisir entre plusieurs modèles ou comment choisir les valeurs des hyperparamètres?
- jeu de validation
  - entraînement de plusieurs modèles avec différents hyperparamètres sur le jeu d'entraînement
  - sélection du modèle et des hyperparamètres donnant les meilleurs résultats sur le jeu de validation
  - test final unique sur le jeu de test pour estimer l'erreur de généralisation

S. Bricq (UB) Machine Learning 09/2022 61/81

#### Test et validation

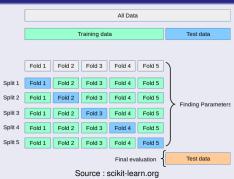
#### Validation croisée



- jeu d'entraînement partagé en sous-ens complémentaires
- chaque modèle est
  - évalué sur une combinaison différente des ces sous-ens
  - puis validé sur les sous-ens restants

#### Test et validation

#### Validation croisée



- après sélection du type de modèle et des hyperparamètres, le modèle final utilisant ces hyperparamètres est entraîné sur le jeu d'entraînement complet
- erreur de généralisation mesurée sur le jeu de test

S. Bricq (UB) Machine Learning 09/2022

62/81

## Travailler avec des données réelles

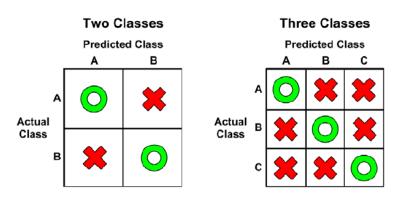
- préférable de s'entraîner sur des données du monde réel
- jeux de données librement accessibles (open datasets)
  - https://www.kaggle.com/:plateforme de compétition
  - https://www.openml.org
  - http://archive.ics.uci.edu/ml/:entrepôt de Machine Learning de l'Université d'Irvine en Californie

S. Bricq (UB) Machine Learning 09/2022 63/81

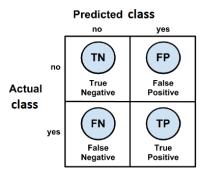
#### Plan

- Intelligence artificielle
  - Machine learning
  - Deep learning
- Machine learning
  - Introduction
  - Types de systèmes
  - Difficultés
  - Test et validation
- Critères pour évaluer la performance

## Matrice de confusion



## Matrice de confusion : cas $2 \times 2$



- vrais positifs (TP) : bien classés comme la classe d'intérêt
- vrais négatifs (TN): bien classés comme n'étant pas la classe d'intérêt
- faux positifs (FP) : mal classés comme la classe d'intérêt
- faux négatifs (FN) : mal classés comme n'étant pas la classe d'intérêt

# Métriques de classification

Accuracy (success rate)

$$accuracy = \frac{TP + TN}{TP + TN + FP + FN}$$

• taux d'erreur (error rate)

error rate = 
$$\frac{FP + FN}{TP + TN + FP + FN} = 1 - accuracy$$

## Accuracy

# Reality What has been a second as the secon

Imbalanced dataset

#### Prediction



# Sensibilité et spécificité

 Sensibilité (sensitivity ou true positive rate) : mesure la proportion de cas positifs correctement classés

$$\text{sensitivity} = \frac{\text{TP}}{\text{TP} + \text{FN}}$$

# Sensibilité et spécificité

 Sensibilité (sensitivity ou true positive rate) : mesure la proportion de cas positifs correctement classés

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

 spécificité(specificity ou false positive rate) : mesure la proportion de cas négatifs correctement classés

$$\text{specificity} = \frac{\text{TN}}{\text{TN} + \text{FP}}$$

## Precision et recall

 Précision ou valeur positive prédictive (precision, positive predictive value): proportion de cas positifs qui sont réellement positifs

$$precision = \frac{TP}{TP + FP}$$

## Precision et recall

 Précision ou valeur positive prédictive (precision, positive predictive value): proportion de cas positifs qui sont réellement positifs

$$precision = \frac{TP}{TP + FP}$$

Rappel (recall)

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

09/2022

70/81

#### F-Mesure

• F1-score : moyenne harmonique de la précision et du rappel

$$\text{F-mesure} = \frac{2 \times \text{precision} \times \text{recall}}{\text{recall} + \text{precision}} = \frac{2 \times \text{TP}}{2 \times \text{TP} + \text{FP} + \text{FN}}$$

## Exemple

Test clinique : frottis de dépistage du cancer du col de l'utérus

	Cancer	Pas de cancer	Total
Frottis +	190	210	400
Frottis -	10	3590	3600
Total	200	3800	4000

Calculer rappel, spécificité et précision.

09/2022

72/81

## Exemple

Test clinique : frottis de dépistage du cancer du col de l'utérus

	Cancer	Pas de cancer	Total
Frottis +	190	210	400
Frottis -	10	3590	3600
Total	200	3800	4000

Calculer rappel, spécificité et précision.

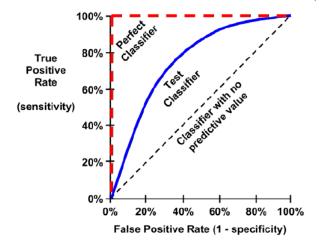
Interpréter les résultats obtenus : ce test est-il un bon outil de dépistage ? un bon outil diagnostique ?

09/2022

72/81

## Visualisation de la performance : courbe ROC

- courbe ROC (receiver operating charactetistic curve)
  - pour visualiser l'efficacité des modèles de machine learning
  - décrit la l'évolution de la sensibilité en fonction de 1- spécificité



#### Courbe ROC

#### Construction

- on prend pour seuil les valeurs successives de la fonction de décision sur notre jeu de données
- à chaque valeur de seuil, une observation que l'on prédisait précédemment négative change d'étiquette
  - si cette observation est effectivement positive, la sensibilité augmente de  $1/n_p$  (où  $n_p$  est le nb d'exemples positifs)
  - sinon c'est le taux de faux positifs qui augmente de 1/nn (nn nb d'exemples négatifs)
- ⇒ courbe en escalier

#### Courbe ROC

- Construction
  - on prend pour seuil les valeurs successives de la fonction de décision sur notre jeu de données
  - à chaque valeur de seuil, une observation que l'on prédisait précédemment négative change d'étiquette
    - si cette observation est effectivement positive, la sensibilité augmente de  $1/n_{\rm p}$  (où  $n_{\rm p}$  est le nb d'exemples positifs)
    - sinon c'est le taux de faux positifs qui augmente de  $1/n_n$  ( $n_n$  nb d'exemples négatifs)
  - ⇒ courbe en escalier
- AUC (Area Under the Roc) : aire sous la courbe
  - plus la valeur est proche de 1, meilleur est le classifieur

# Segmentation d'images

- Attribution d'une classe à chaque pixel
- Comment évaluer les performances?

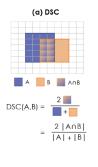
# Segmentation d'images

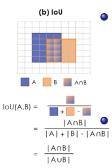
- Attribution d'une classe à chaque pixel
- Comment évaluer les performances?
  - Recouvrement (overlap) entre la prédiction et la vérité terrain
  - Qualité de la frontière

# Segmentation d'images

- Attribution d'une classe à chaque pixel
- Comment évaluer les performances?
  - Recouvrement (overlap) entre la prédiction et la vérité terrain
  - Qualité de la frontière
- On peut considérer la labelisation de chaque pixel de l'image comme un pb de classification
  - possibilité d'utiliser les métriques de classification
  - !! Déséquilibre!

## Overlap





- Dice Similarity Coefficient (DSC)
- Intersection over Union (IoU) (ou Index Jaccard)

$$DSC = \frac{2|A \cap B|}{|A| + |B|}$$
 or  $DSC = \frac{2TP}{2TP + FP + FN}$ 

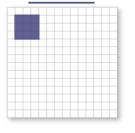
$$IoU = \frac{|A \cap B|}{|A \cup B|}$$
 or  $IoU = \frac{TP}{TP + FP + FN}$ 

Relation entre les 2 métriques

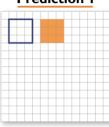
Source: Reinke et al, 2021

## Overlap: exemple

#### Reference



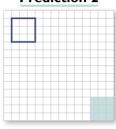
#### Prediction I



<<

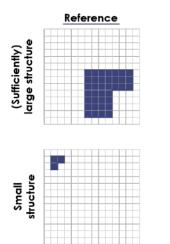
Source: Reinke et al, 2021

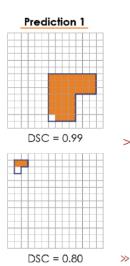
#### **Prediction 2**

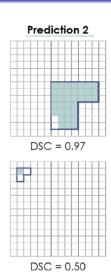


S. Bricq (UB)

## Overlap: exemple



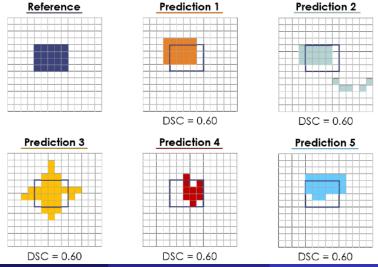




Source: Reinke et al, 2021

## Overlap: exemple

• Problème : ne prend pas en compte la forme



S. Bricq (UB)

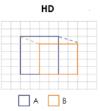
## Qualité de la frontière

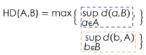
Distance de Hausdorff

$$d_H(X,Y) = \max \left\{ \sup_{x \in X} \inf_{y \in Y} d(x,y), \sup_{y \in Y} \inf_{x \in X} (d(x,y)) \right\}$$

 Average symmetric surface distance (ASSD): moins sensible aux outliers que HD

$$ASSD = \frac{\sum_{x \in X} d(x, Y) + \sum_{y \in Y} d(y, X)}{|X| + |Y|}$$





$$d(x,Y) = \inf_{y \in Y} d(x,y)$$

Source: Reinke et al, 2021

# Mesures pour la régression

- mesures de performance typiques pour les problèmes de régression
  - RMSE (Root Mean Square Error)

RMSE(X, h) = 
$$\sqrt{\frac{1}{m} \sum_{i=1}^{m} (h(x^{(i)}) - y^{(i)})^2}$$

MAE (Mean Absolute Error)

$$MAE(X, h) = \frac{1}{m} \sum_{i=1}^{m} |h(x^{(i)}) - y^{(i)}|$$