$\begin{array}{c} {\rm M\acute{e}thodes\ d'apprentissage} \\ {\rm IFT}603\text{--}712 \end{array}$

Formulation probabiliste

Par
Pierre-Marc Jodoin
et
Hugo Larochelle

Illustration au tableau des probabilités marginales, jointes et conditionnelles

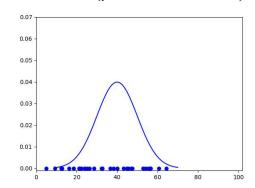
- La théorie des probabilités est l'outil idéal pour formaliser nos **hypothèses et incertitudes** par rapport à nos données
- On va traiter nos données comme des variables aléatoires
 - ➤ la valeur d'une variable aléatoire est incertaine (avant de l'observer)
 - ➤ la loi de probabilité de la variable aléatoire caractérise notre incertitude par rapport à sa valeur

Variable aléatoire

$$x \sim P(X)$$

Exemple, résultats à un examen (groupe 1)

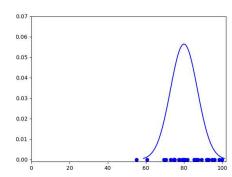
$$x \sim N(\mu = 40, \sigma = 10)$$



$$x \sim P(X)$$

Exemple, résultats à un examen (groupe 2)

$$x \sim N(\mu = 80, \sigma = 7)$$



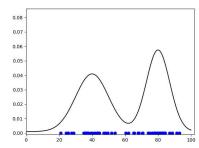
5

Variable aléatoire

$$x \sim P(X)$$

Exemple, résultats à un examen (toute la classe)

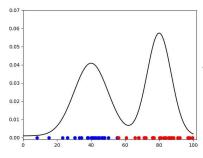
$$x \sim \frac{1}{2}N(\mu = 40, \sigma = 10) + \frac{1}{2}N(\mu = 80, \sigma = 7)$$



$$x \sim P(X)$$

Exemple, résultats à un examen (toute la classe)

$$x \sim \frac{1}{2}N(\mu = 40, \sigma = 10) + \frac{1}{2}N(\mu = 80, \sigma = 7)$$





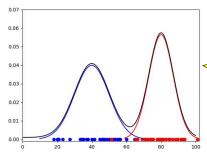
,

Variable aléatoire

$$x \sim P(X)$$

Exemple, résultats à un examen (toute la classe)

$$x \sim \frac{1}{2}N(\mu = 40, \sigma = 10) + \frac{1}{2}N(\mu = 80, \sigma = 7)$$

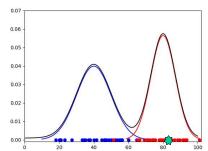




$$x \sim P(X)$$

Exemple, résultats à un examen (toute la classe)

$$x \sim \frac{1}{2}N(\mu = 40, \sigma = 10) + \frac{1}{2}N(\mu = 80, \sigma = 7)$$



Très confiant que le nouvel étudiant ayant eu la note de 82% () est issu du groupe 2

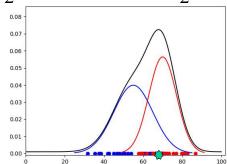
9

Variable aléatoire

$$x \sim P(X)$$

Exemple, résultats à un examen (toute la classe)

$$x \sim \frac{1}{2}N(\mu = 50, \sigma = 10) + \frac{1}{2}N(\mu = 70, \sigma = 6)$$



Incertain que le nouvel étudiant ayant eu la note de 67% (est issu du groupe 2

- Soient X et T des variables aléatoires discrètes
 - \triangleright X peut prendre comme valeurs x_1, \dots, x_M
 - ightharpoonup T peut prendre comme valeurs t_1, \dots, t_M
- La **probabilité jointe** qu'on observe $X = x_i$ et $T = t_j$ est notée

$$P(X = x_i, T = t_i)$$

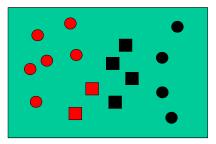
et se lit comme la « probabilité d'observer à <u>la fois</u> x_i <u>et</u> t_j .

• Note:

$$P(X = x_i, T = t_i) = P(T = t_i, X = x_i)$$

Probabilité jointe

Exemple X: forme, Y: couleur



$$P(X = carr\acute{e}) = 6/16$$

$$P(Y = rouge) = 8/16$$

$$P(X = carr\acute{e}, Y = rouge) = 2/16$$

Probabilité marginale

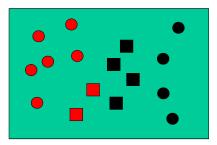
Une **probabilité marginale** est lorsqu'on ne s'intéresse pas à toutes les variables aléatoires qu'on a défini

Exemple : la probabilité marginale d'observer $X = x_i$

$$P(X = x_i) = \sum_{j=1}^{N} P(X = x_i, T = t_j)$$

Probabilité jointe

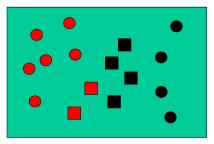
Exemple X: forme, Y: couleur



$$P(X = carr\acute{e}) = \sum_{coleur} P(X = carr\acute{e}, Y = couleur)$$

Probabilité jointe

Exemple X: forme, Y: couleur



$$P(X = carr\acute{e}) = P(X = carr\acute{e}, Y = rouge) + P(X = carr\acute{e}, Y = noir)$$

$$= \frac{2}{16} + \frac{4}{16}$$

$$= \frac{6}{16}$$

Probabilité conditionnelle

Une **probabilité conditionnelle** est lorsqu'on s'intéresse la valeur d'une variable aléatoire «étant donnée» une valeur assignée à d'autres variables

$$P(X = x_i \mid T = t_j)$$

Se lit : la probabilité que $X = x_j$ étant donné que $T = t_i$

Probabilité conditionnelle

Exemple, élections américaines 2016

$$P(Voter\ r\acute{e}publicain) = 46.1\%$$

VS

 $P(Voter\ r\'epublicain\ |\ Zone\ urbaine) = 35\%$ $P(Voter\ r\'epublicain\ |\ Zone\ rurale) = 62\%$ $P(Voter\ r\'epublicain\ |\ Banlieu) = 50\%$

https://www.npr.org/2016/11/14/501737150/rural-voters-played-a-big-part-in-helping-trump-defeat-clinton

Produit des probabilités

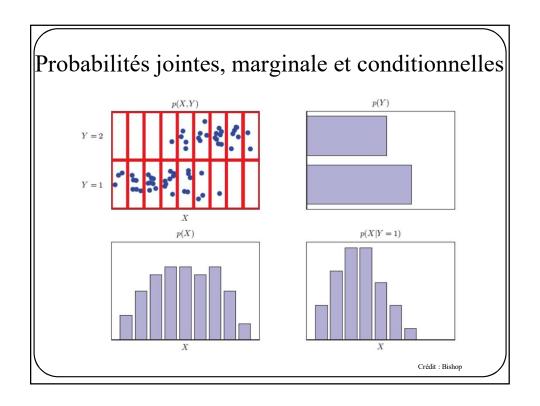
 x_i et t_j ont disparu, seulement pour simplifier la notation

Une probabilité jointe peut toujours être décomposée par le produit d'une probabilité conditionnelle et marginale

$$P(X,T) = P(X \mid T)P(T)$$

En mots:

la probabilité d'observer $X = x_i$ ET $T = t_j$, c'est la probabilité d'observer $T = t_i$ multipliée par la probabilité d'observer $X = x_i$ étant donné que $T = xt_i$



Bayes

La règle de Bayes permet d'inverser l'ordre de la conditionnelle

$$P(T \mid X) = \frac{P(X \mid T)P(T)}{P(X)}$$

p(T) est appelée loi de probabilité <u>a priori</u> (prior)

p(T|X) est appelée loi de probabilité <u>a posteriori</u> (posterior)

Indépendance

Deux variables aléatoires X et T sont indépendantes si

$$P(X,T) = P(X)P(T)$$
 ou
 $P(X \mid T) = P(X)$ ou
 $P(T \mid X) = P(T)$

Observer la valeur d'une variable ne nous apprend rien sur la valeur de l'autre

Variable aléatoire continue

Soit X une variable aléatoire continue

- $\succ X$ peut prendre un nombre infini de valeurs possibles (e.g. \mathbb{R})
- $\succ X$ est associée à une fonction de densité de probabilité p(x)

la probabilité que X appartienne à un intervalle (a,b) est

$$p(x \in (a,b)) = \int_a^b p(x)dx$$

Variables aléatoires continues

Soit X une variable aléatoire continue

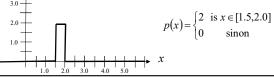
> la fonction de densité doit satisfaire

$$p(x) \ge 0$$

$$\int_{-\infty}^{\infty} p(x) dx = 1$$

à noter que, contrairement aux probabilités d'une variable discrète, la fonction de densité peut être > 1.

Exemple



Variables aléatoires continues

Soit X une variable aléatoire continue

la fonction de répartition P(z) (cumulative distribution function) donne la probabilité que X appartienne à l'intervalle $(-\infty,z)$

$$P(x=z) = \int_{-\infty}^{z} p(x)dx$$

Variables aléatoires continues

Soient X et T deux variables aléatoires continues

 \triangleright elles sont associées à une fonction de densité jointe p(x,t) telle que :

$$p(x \in [a,b], t \in [c,d]) = \int_{a}^{b} \int_{c}^{d} p(x,t) dx dt$$

Variables aléatoires continues

Soient X et T deux variables aléatoires continues

➤ La function de densité marginale s'obtient en intégrant l'autre variable

$$p(x) = \int p(x,t)dt$$

> La function de densité conditionnelle s'obtient comme auparavant

$$p(t \mid x) = \frac{p(x,t)}{p(x)}$$

Expérance mathématique

L'espérance d'une <u>variable X</u> est la moyenne qu'on obtient si on répète un grand nombre de fois une expérience

$$E[X] = \sum_{x} xp(x) \qquad \text{(cas discret)}$$

$$E[X] = \int xp(x)dx \quad \text{(cas continu)}$$

Expérance mathématique

L'espérance d'une <u>fonction f(x)</u> est la moyenne qu'on obtient si on génère un grand nombre de valeurs pour cette fonction

$$E[f] = \sum_{x} f(x)p(x) \quad \text{(cas discret)}$$

$$E[f] = \int f(x)p(x)dx \quad (cas continu)$$

Variance

• La variance d'une variable X est

$$\operatorname{var}[X] = \operatorname{E}[(X - \operatorname{E}[X])^2]$$

• La variance d'une fonction f (x) est

$$\operatorname{var}[f] = \operatorname{E}[(f(x) - \operatorname{E}[f(x)])^{2}]$$

La variance mesure à quel point les valeurs varient autour de l'espérance

Propriétés de l'espérance et de la variance

Transformation linéaire de l'espérance

$$E_{xy}[ax+by] = \sum_{x} \sum_{y} (ax+by)p(x,y)$$
 a,b sont réels
$$= aE[x] + bE[y]$$
 Si x, y indépendants

Transformation linéaire de la variance

$$var[ax + by] = a^2 var[x] + b^2 var[y]$$
 Si x, y indépendants

Espérance et variance conditionnelles

L'espérance et la variance se généralisent au cas conditionnel :

$$E[x | y] = \sum_{x} xp(x | y)$$
$$E[f(x) | y] = \sum_{x} f(x)p(x | y)$$

$$\operatorname{var}[x \mid y] = \operatorname{E}\left[\left(x - \operatorname{E}[x \mid y]\right)^{2}\right]$$
$$\operatorname{var}[f(x) \mid y] = \operatorname{E}\left[\left(f(x) - \operatorname{E}[f(x) \mid y]\right)^{2}\right]$$

Covariance

La covariance entre 2 variables aléatoires X et Y

$$\operatorname{cov}[x, y] = \operatorname{E}_{xy} \left[(x - \operatorname{E}_{x}[x])(y - \operatorname{E}_{y}[y]) \right]$$
$$= \operatorname{E}_{xy}[xy] - \operatorname{E}_{x}[x]\operatorname{E}_{y}[y]$$

mesure à quel point on peut prédire X à partir de Y (linéairement), et vice-versa si X etY sont indépendantes, alors la covariance est 0

Variables aléatoires multidimensionnels

Une variable aléatoire peut être un vecteur

L'espérance d'un vecteur est le vecteur des espérances

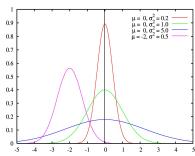
$$E[\vec{x}] = (E[x_1], \dots, E[x_D])^T$$

Et la covariance de deux vecteurs est

$$\operatorname{cov}[\vec{x}, \vec{y}] = \operatorname{E}_{\vec{x}\vec{y}}[\vec{x}\vec{y}^{\mathrm{T}}] - \operatorname{E}_{\vec{x}}[\vec{x}]\operatorname{E}_{\vec{y}}[\vec{y}]$$

Loi de probabilité gaussienne

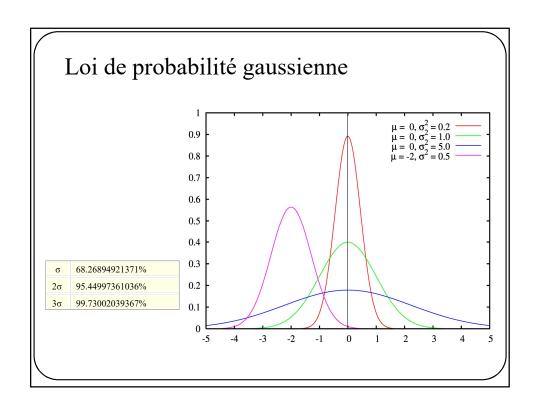
$$N(x \mid \mu, \sigma) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma} e^{-\frac{(x-\mu)^2}{2\sigma^2}} \int_{0.5}^{0.8} e$$



Moyenne: $E[x] = \int_{0}^{\infty} N(x; \mu, \sigma) x dx = \mu$

Variance: $\operatorname{var}[x] = \int_{-\infty}^{\infty} N(x; \mu, \sigma)(x - \mu)^2 dx = \sigma^2$

Écart type : $\sqrt{\operatorname{var}[x]} = \sigma$



Gaussienne multivariée

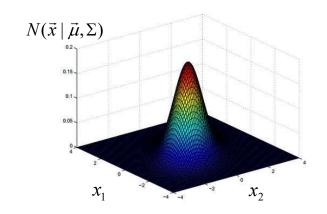
$$N(\vec{x} \mid \vec{\mu}, \Sigma) = \frac{1}{(2\pi)^{D/2} |\Sigma|^{1/2}} \exp\left\{-\frac{1}{2} (\vec{x} - \vec{\mu})^{\mathrm{T}} \Sigma^{-1} (\vec{x} - \vec{\mu})\right\}$$

Moyenne: $E[\vec{x}] = \vec{\mu}$

Variance : $\operatorname{cov}[\vec{x}] = \Sigma$

Gaussienne <u>multivariée</u>

Exemple: $\vec{x} = (x_1, x_2)$



Gaussienne <u>multivariée</u>

Exemple: $\vec{x} = (x_1, x_2)$

Courbes de niveaux de $N(\vec{x} \mid \vec{\mu}, \Sigma)$

$$\Sigma = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \qquad \begin{array}{|c|c|} \hline & & \\ & & \\ \hline & & \\ & &$$

Gaussienne <u>multivariée</u>

Exemple:
$$\vec{x} = (x_1, x_2)$$

Courbes de niveaux de $N(\vec{x} \mid \vec{\mu}, \Sigma)$

$$\Sigma = \begin{pmatrix} 2 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \qquad x_2$$

Gaussienne <u>multivariée</u>

Exemple:
$$\vec{x} = (x_1, x_2)$$

Courbes de niveaux de $N(\vec{x} \mid \vec{\mu}, \Sigma)$

$$\Sigma = \begin{pmatrix} 1.5 & 0.5 \\ 0.5 & 1.5 \end{pmatrix} \qquad \qquad \qquad X_2$$

Gaussienne <u>multivariée</u>

Une **combinaison linéaire** de variables aléatoires gaussiennes est également gaussienne

- Exemple
 - \triangleright soit x une variable gaussienne de moyenne μ_1 et variance σ_1^2
 - \triangleright soit *t* une variable gaussienne de moyenne μ_2 et variance σ_2^2
 - ➤ alors ax + bt suit une loi gaussienne de moyenne $a\mu_1 + b\mu_2$ et variance $a^2\sigma_1^2 + b^2\sigma_2^2$ (x et y sont indépendantes)

Introduction au tableau

Maximum de vraisemblance vs Maximum a posteriori

58

Théorie de l'information

• Les probabilités sont également utiles pour **quantifier l'information** présente dans des données

exemple : quel est le nombre minimum de bits nécessaire pour encoder un message ?

• Cette question est intimement liée à la probabilité d'observer ce message

plus le message est «surprenant» (improbable), plus on aura besoin de bits

Codage de Huffman :

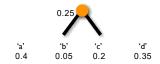
- > façon optimale d'encoder des symboles indépendants de façon binaire
- > plus un symbole est «fréquent» (probable), plus son code sera court

'a' 'b' 'c' 'd' 0.4 0.05 0.2 0.35

Théorie de l'information

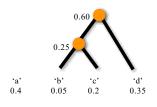
Codage de Huffman:

- > façon optimale d'encoder des symboles indépendants de façon binaire
- > plus un symbole est «fréquent» (probable), plus son code sera court



Codage de Huffman :

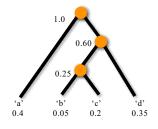
- > façon optimale d'encoder des symboles indépendants de façon binaire
- > plus un symbole est «fréquent» (probable), plus son code sera court



Théorie de l'information

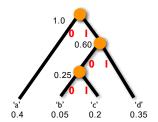
Codage de Huffman:

- > façon optimale d'encoder des symboles indépendants de façon binaire
- > plus un symbole est «fréquent» (probable), plus son code sera court



Codage de Huffman:

- > façon optimale d'encoder des symboles indépendants de façon binaire
- > plus un symbole est «fréquent» (probable), plus son code sera court



Symbole	Code	Prob
ʻa'	0	40%
'b'	100	5%
ʻc'	101	20%
ʻd'	- 11	35%

Entropie

Symbole	Code	Prob
ʻa'	0	40%
ʻb'	100	5%
ʻc'	101	20%
'd'	П	35%

• Soit p(x) la probabilité d'observer le symbole x

la taille moyenne du code d'un symbole est

$$0.4 \times 1 + 0.05 \times 3 + 0.2 \times 3 + 0.35 \times 2 = 1.85$$
 (bits)

• Entropie :

$$H[x] = -\sum_{x} p(x) \log_2 p(x) \approx 1.739 \text{ (bits)}$$

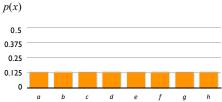
Claude Shannon a démontré qu'il est impossible de compresser l'information dans un plus petit code moyen sans perte d'information

 $-\log_2 p(x)$ est l'information contenue par x

Entropie

Plus p(x) est proche d'une loi uniforme, plus l'entropie est élevée

exemple:
$$x \in \{a, b, c, d, e, f, g, h\}$$



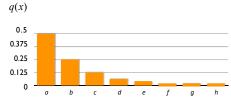
$$H[x] = -\sum_{x} p(x) \log_{2} p(x)$$

$$= -\left(\frac{1}{8} \log_{2}\left(\frac{1}{8}\right)\right) - \left(\frac{1}{8} \log_{2}\left(\frac{1}{8}\right$$

Entropie

Plus q(x) est proche d'une loi uniforme, plus l'entropie est élevée

exemple: $x \in \{a,b,c,d,e,f,g,h\}$



$$\begin{split} H[x] &= -\sum_{x} q(x) \log_2 q(x) \\ &= -\left(\frac{1}{2} \log_2 \left(\frac{1}{2}\right)\right) - \left(\frac{1}{4} \log_2 \left(\frac{1}{4}\right)\right) - \left(\frac{1}{8} \log_2 \left(\frac{1}{8}\right)\right) - \left(\frac{1}{16} \log_2 \left(\frac{1}{16}\right)\right) - \left(\frac{1}{32} \log_2 \left(\frac{1}{32}\right)\right) - 3\left(\frac{1}{64} \log_2 \left(\frac{1}{64}\right)\right) \\ &= 2.06 \text{ bits} \end{split}$$

Entropie

L'entropie se généralise aux variables continues

$$H[x] = -\int_{-\infty}^{\infty} p(x) \log_2 p(x) dx$$

Entropie relative et divergence de Kullback-Leibler

- Si on ne connaît pas p(x), on va vouloir l'estimer
- Si q(x) est notre estimation, on définit la **divergence de Kullback-Leibler** (K-L) comme suit :

$$KL(p(x) || q(x)) = -\sum_{x} p(x) \log_2 q(x) - \left(-\sum_{x} p(x) \log_2 p(x)\right)$$
$$= \sum_{x} p(x) \log_2 \frac{p(x)}{q(x)}$$

> correspond au nombre de bits additionnels par rapport à ce qui serait optimal

Entropie jointe

L'entropie est une fonction d'une loi de probabilité

- > elle reflète l'incertitude représentée par la loi
- \Rightarrow si p(x) = 1 pour une seule valeur de x, l'entropie est 0

On peut généraliser l'entropie à plusieurs variables

$$H[x, y] = -\sum_{x} \sum_{y} p(x, y) \log_2 p(x, y)$$

Entropie conditionnelle

L'entropie conditionnelle quantifie **l'information additionnelle** qu'apporte une **nouvelle observation** y

$$H[x | y] = -\sum_{x} \sum_{y} p(x, y) \log_2 p(x | y)$$

On peut démontrer que

$$H[x,y] = H[y \mid x] + H[x]$$

Information mutuelle

• Mesure à quel point deux variables sont indépendantes

$$I(x,y) = KL(p(x,y) || p(x)p(y))$$
$$= \sum_{x,y} p(x,y) \log_2 \frac{p(x,y)}{p(x)p(y)}$$

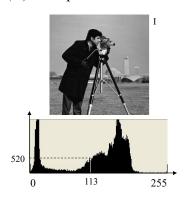
> On appelle cette mesure l'information mutuelle

Autre exemple concret de l'utilité des probabilités

Comprendre la théorie des probabilité à l'aide d'images

Un **histogramme** représente le nombre de pixels appartenant à chaque niveau de gris (ou couleur) pouvant être représenté dans l'image.

H(c) = Nb pixels d'intensité "c"



74

Quelques définitions

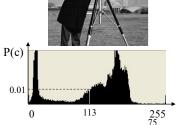
Parfois l'histogramme est normalisé par le nombre de pixels dans l'image:

$$H'(c) = P(c) = \frac{\text{Nb pixels d'intensit\'e c}}{\text{Nb total de pixels dans l'image}}$$

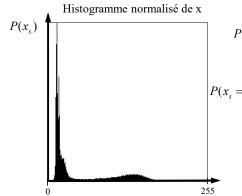
Ainsi défini, P(c) donne une idée de la probabilité d'occurrence d'un pixel de niveau de gris "c".

$$\sum_{c=0}^{255} P(c) = 1$$

Si je tire un pixel au hasard dans l'image, j'ai 1% de chance qu'il soit d'intensité 113.







 $P(x_s)$ Distribution des niveaux de gris dans l'image x.

 $P(x_s = a)$ Peut se lire : probabilité d'observer un pixel de niveau de gris « a » dans l'image y.

exemple: si $P(x_s = 15) = 0.09$ alors

si je tire au hasard un pixel dans l'image x, j'aurai 9 pourcents de chance qu'il soit d'intensité 15

Quelques définitions

 $P(x_s = a)$ probabilité d'observer un pixel de niveau de gris <u>a</u> dans l'image x.

 $P(x_s = a, mer)$ est une **probabilité jointe** qui se lit : la probabilité d'observer un pixel de niveau de gris <u>a</u> dans l'image x <u>ET</u> faisant partie de la classe mer.

P(mer) Probabilité **a priori** d'observer un pixel appartenant à la classe mer.

$$P(x_s = a, mer) = P(mer)P(x_s = a \mid mer)$$

 $P(x_s = a \mid mer)$ est une **probabilité conditionnelle** qui se lit : la probabilité d'observer un pixel de niveau de gris <u>a</u> dans l'image x <u>ÉTANT DONNÉ</u> qu'il appartienne à la classe mer.

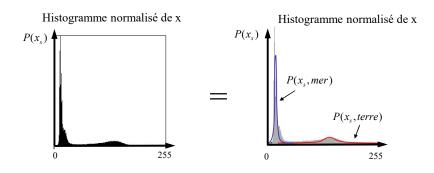
$$P(x_s, y_s) = P(y_s) \times P(x_s \mid y_s)$$
terme de vraisemblance (likelihood en anglais)

Probabilité jointe

 $y_s \in \{mer, terre\}$

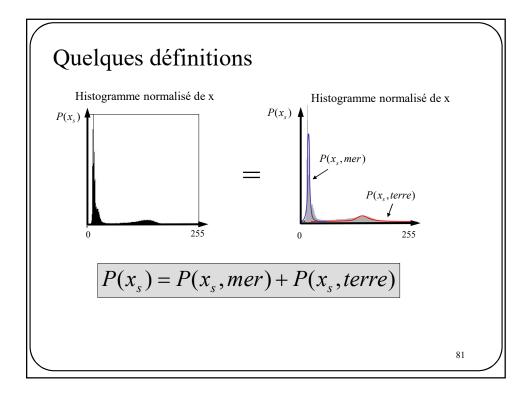
79

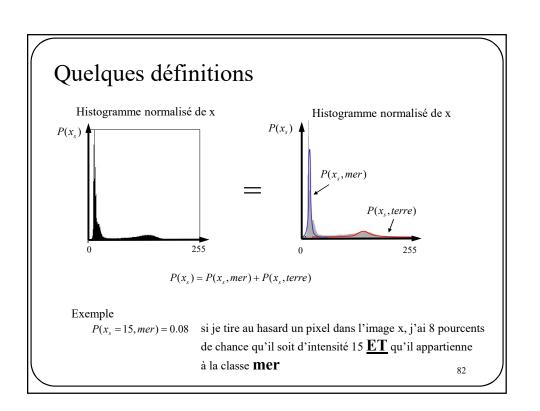
Quelques définitions

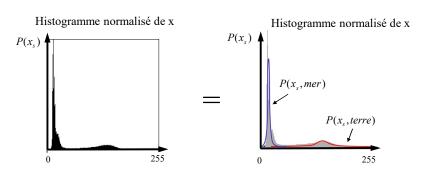


 $P(x_s, terre)$ Distribution des niveaux de gris des pixels « terre »

 $P(x_s, mer)$ Distribution des niveaux de gris des pixels « mer »





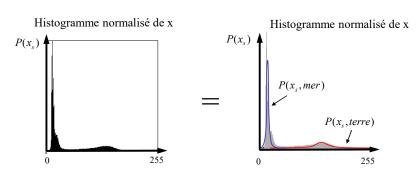


 $P(x_s) = P(x_s, mer) + P(x_s, terre)$

Exemple

 $P(x_s = 15, terre) = 0.01$ si je tire au hasard un pixel dans l'image x, j'ai 1 pourcent de chance qu'il soit d'intensité 15 **ET** qu'il appartienne à la classe **terre**

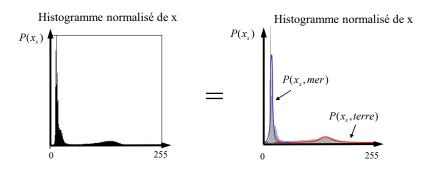
Quelques définitions



$$P(x_s) = P(x_s, mer) + P(x_s, terre)$$

Exemple
$$P(x_s = 15) = P(x_s = 15, mer) + P(x_s = 15, terre)$$

 $0.09 = 0.08 + 0.01$



$$P(x_s) = P(x_s, mer) + P(x_s, terre)$$

Exemple
$$P(x_s = 15) = P(x_s = 15, mer) + P(x_s = 15, terre)$$

 $0.09 = 0.08 + 0.01$

8.

Quelques définitions

Ceci est un exemple de marginalisation de la variable y

$$P(x_s = 15) = P(x_s = 15, mer) + P(x_s = 15, terre)$$

0.09 = 0.08 + 0.01

$$P(x_s) = \sum_{y_s} P(x_s, y_s)$$

Ceci est un exemple de marginalisation de la variable x

$$P(y_s = mer) = \sum_{x_s} P(x_s, y_s = mer)$$
$$= 0.4$$

87

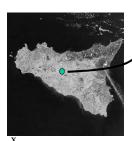
Bayes



Lorqu'on segmente une image, on cherche à déterminer pour chaque pixel, quelle classe est la plus probable. En d'autres mots, trouver l'étiquette de classe qui maximise

$$P(y_s \mid x_s)$$

Étant donné X_s on veut savoir quelle classe est la plus probable



$$P(y_s = terre \mid x_s)$$
 ou $P(y_s = mer \mid x_s)$?

