Hiver 2019

Méthodes d'apprentissage

IFT603

Formulation probabiliste

Par
Pierre-Marc Jodoin
et
Hugo Larochelle

1

Variable aléatoire

- 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

2

Variable aléatoire

- Soient X et Y des variables aléatoires discrètes
 - ightharpoonup X peut prendre comme valeurs x_1, \dots, x_M
 - \triangleright Y peut prendre comme valeurs y_1, \dots, y_M
- La **probabilité jointe** qu'on observe $X = x_i$ et $Y = y_j$ est notée

$$P(X = x_i, Y = y_i)$$

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

• Note:

$$P(X = x_i, Y = y_i) = P(Y = y_i, X = x_i)$$

Probabilité marginale

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

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

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

4

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

$$P(X = x_i \mid Y = y_i)$$

Se lit : la probabilité que $X=x_j$ étant donné que $Y=y_l$

5

Probabilité conditionnelle

Exemple, élections américaines 2016

 $P(Voter\ r\'epublicain) = 46.1\%$

VS

 $\begin{cases} P(Voter\ r\'epublicain | Zone\ urbaine) = 35\% \\ P(Voter\ r\'epublicain | Zone\ rurale) = 62\% \\ P(Voter\ r\'epublicain | Banlieu) = 50\% \end{cases}$

Produit des probabilités

x_i et y_j ont disparu, seulement pour simplifier la notation

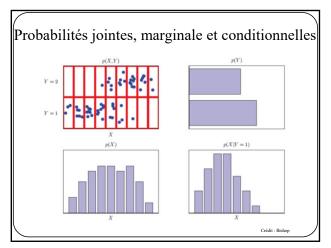
Une probabilité jointe peut toujours être décomposée par le produit d'une probabilité conditionnelle et marginale

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

En mots:

la probabilité d'observer $X=x_i$ ET $Y=y_j$, c'est la probabilité d'observer $Y=y_i$ multipliée par la probabilité d'observer $X=x_i$ étant donné que $Y=y_i$

7



8

Bayes

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

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

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

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

Indépendance

Deux variables aléatoires X et Y sont indépendantes si

- P(X,Y) = P(X)P(Y) ou
- $> P(X \mid Y) = P(X)$
- $> P(Y \mid X) = P(Y)$

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

10

Variable aléatoire continue

Soit X une variable aléatoire continue

- $\,\,igstar\,\, X\,$ 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

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

11

Variables aléatoires continues

Soit X une variable aléatoire continue

> la fonction de densité doit satisfaire

$$p(x) \ge 0$$

$$\int_{0}^{\infty} p(x)dx = 1$$

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



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 $(-\infty, z)$

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

13

Variables aléatoires continues

Soient X et Y deux variables aléatoires continues

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

$$p(x \in [a,b], y \in [c,d]) = \int_a^b \int_c^d p(x,y) dx dy$$

14

Variables aléatoires continues

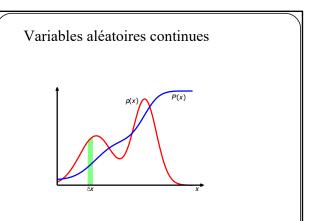
Soient X et Y deux variables aléatoires continues

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

$$p(x) = \int p(x, y) dy$$

> La function de densité conditionnelle s'obtient comme auparavant

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



16

Expérance mathématique

L'espérance d'une $\underline{\text{variable } X}$ est la moyenne qu'on obtient si on répète un grand nombre de fois une expérience

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

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

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

17

Expérance mathématique

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

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

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

$$var[f] = E[(f(x) - E[f(x)])^2]$$

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

19

Propriétés de l'espérance et de la variance

Transformation linéaire de l'espérance

$$\begin{split} \mathbf{E}[ax+by] &= \sum_{\mathbf{x}} \sum_{\mathbf{y}} (ax+by) p(\mathbf{x},\mathbf{y}) & \text{a,b sont r\'eels} \\ &= a\mathbf{E}[\mathbf{x}] + b\mathbf{E}[\mathbf{y}] & \text{Si x, y ind\'ependants} \end{split}$$

Transformation linéaire de la variance

$$\operatorname{var}[ax + by] = a^2 \operatorname{var}[x] + b^2 \operatorname{var}[y]$$
 Six, y indépendant

20

Espérance et variance conditionnelles

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

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

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

Covariance

La covariance entre 2 variables aléatoires X et Y

$$cov[x, y] = E_{xy}[(x - E_x[x])(y - E_y[y])]$$

= $E_{xy}[xy] - E_x[x]E_y[y]$

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

22

Variables aléatoires multidimensionnels

Une variable aléatoire peut être un vecteur

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

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

Et la covariance de deux vecteurs est

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

23

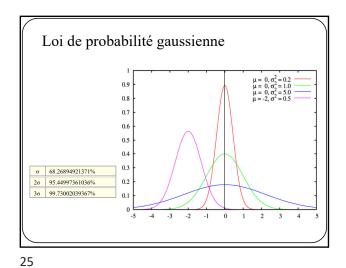
Loi de probabilité gaussienne

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

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

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

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



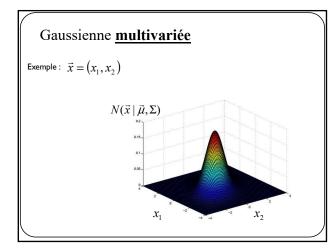
Gaussienne multivariée

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

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

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

26



Gaussienne multivariée

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

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

28

Gaussienne multivariée

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

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

$$\Sigma = \begin{pmatrix} 2 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \qquad \begin{array}{|c|c|} \hline & & \\ & \\ & & \\ & & \\ & & \\ & & \\ & & \\ & & \\ & & \\ & & \\ & & \\ & & \\ &$$

29

Gaussienne multivariée

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

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

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

Gaussienne multivariée

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 y une variable gaussienne de moyenne μ_2 et variance σ_2^2
 - > alors ax + by 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)

31

Régression:

Maximum de vraisemblance vs Maximum a posteriori

32

32

Introduction au tableau

Maximum de vraisemblance vs Maximum a posteriori

Régression 1D Retournons à notre exemple de régression

➤ Données

✓ entrée : scalaire *x* ✓ cible : scalaire *t*

 \succ Ensemble d'entraı̂nement D contient:

$$\checkmark X = (x_1, \dots, x_N)^T$$

$$\checkmark T = (t_1, \dots, t_N)^T$$

 \triangleright Objectif:

✓ Faire une prédiction \hat{t} pour chaque nouvelle entrée \hat{x}

34

Régression polynomiale

➤ On va supposer que nos données suivent une **forme polynomiale**

$$y_{W}(x) = w_0 + w_1 x + w_2 x^2 + \dots + w_M x^M$$

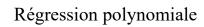
= $\sum_{i=0}^{M} w_i x^i$

 $\triangleright y_{\vec{w}}(x)$ est notre **modèle**

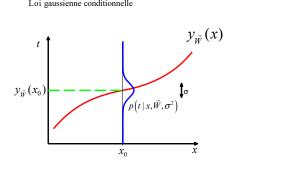
✓ Représente nos hypothèses sur le problème à résoudre ✓ Un modèle a toujours des paramètres qu'on doit trouver (ici \vec{W})

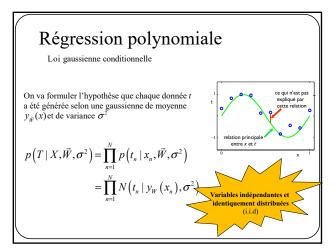
35

35



Loi gaussienne conditionnelle





37

Régression polynomiale

Maximum de vraisemblance (cf. notes au tableau)

Cherche les meilleurs paramètres \vec{W} en maximisant la vraisemblance

Connue

W =
$$\arg \max_{W} p(T \mid X, \overline{W}, \sigma^{2})$$

= $\arg \max_{W} \prod_{n=1}^{N} N(t_{n} \mid x_{n}, \overline{W}, \sigma^{2})$

=> Données gaussienns et (i,i.d)

= $\arg \max_{W} \ln \left[\prod_{n=1}^{N} N(t_{n} \mid y_{W}(x_{n}), \sigma^{2}) \right]$

= $\arg \max_{W} \sum_{n=1}^{N} \ln N(t_{n} \mid y_{W}(x_{n}), \sigma^{2})$

38

Régression polynomiale

Maximum de vraisemblance (cf. notes au tableau)

Cherche les meilleurs paramètres W en maximisant la vraisemblance

$$W = \arg \max_{W} \sum_{n=1}^{N} \ln N(t_{n} \mid y_{W}(x_{n}), \sigma^{2})$$

$$= \arg \max_{W} \sum_{n=1}^{N} \ln \left[\frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma}} e^{-\frac{(t_{n} - y_{W}(x_{n}))^{2}}{2\sigma^{2}}} \right]$$

$$= \arg \max_{W} \sum_{n=1}^{N} -\frac{(t_{n} - y_{W}(x_{n}))^{2}}{2} + \ln \left[\frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma}} e^{-\frac{(t_{n} - y_{W}(x_{n}))^{2}}{2\sigma^{2}}} + \ln \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma}} \right]$$

$$= \arg \min_{W} \frac{1}{2} \sum_{n=1}^{N} (t_{n} - y_{W}(x_{n}))^{2}$$

Régression polynomiale

Maximum de vraisemblance

Cherche les meilleurs paramètres W en maximisant la vraisemblance

$$W = \arg\min_{W} \frac{1}{2} \sum_{n=1}^{N} (t_n - y_W(x_n))^2$$

40

Régression polynomiale

Maximum a posteriori (MAP) (cf. notes au tableau)

Cherche les meilleurs paramètres W en maximisant la probabilité a posteriori



41

Régression polynomiale

Maximum *a posteriori* (MAP) (cf. notes au tableau)

Cherche les meilleurs paramètres W en maximisant la probabilité a posteriori

$$W = \arg\max_{W} \prod_{n=1}^{N} N(t_n \mid y_W(x_n), \sigma^2) p(W)$$

Si on présuppose que les paramètres W suivent une distribution gaussienne centrée à zéro avec une matrice de variance Σ

$$W = \arg \max_{W} \prod_{n=1}^{N} N(t_n \mid y_W(x_n), \sigma^2) N(W \mid 0, \Sigma)$$

$$W = \arg \max_{W} \ln \left[\prod_{n=1}^{N} N(t_n \mid y_W(x_n), \sigma^2) N(W \mid 0, \Sigma) \right]$$

Régression polynomiale

Maximum *a posteriori* (MAP) (cf. notes au tableau)

Cherche les meilleurs paramètres W en maximisant la probabilité a posteriori

$$\begin{split} W &= \arg\max_{W} \ln \left[\prod_{n=1}^{N} N(t_n \mid y_W(x_n), \sigma^2) N(W \mid 0, \Sigma) \right] \\ &= \arg\max_{W} \sum_{n=1}^{N} \ln \left[N(t_n \mid y_W(x_n), \sigma^2) N(W \mid 0, \Sigma) \right] \\ &= \arg\max_{W} \sum_{n=1}^{N} \ln \left[\frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma}} e^{-\frac{(t_n - y_W(x_n))^2}{2\sigma^2}} \right] + \ln \left[\frac{1}{(2\pi)^{1/M} |\Sigma|} e^{-\frac{W^T \Sigma^{-1} W}{2}} \right] \\ &= \arg\max_{W} \sum_{n=1}^{N} -\frac{(t_n - y_W(x_n))^2}{2\sigma^2} - \frac{W^T \Sigma^{-1} W}{2} + \ln \left[\frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma}} \right] + \ln \left[\frac{1}{(2\pi)^{1/M} |\Sigma|} \right] \end{split}$$

43

Régression polynomiale

Maximum a posteriori (MAP) (cf. notes au tableau)

Cherche les meilleurs paramètres W en maximisant la probabilité a posteriori

$$W = \arg\max_{W} \sum_{n=1}^{N} -\frac{(t_{n} - y_{W}(x_{n}))^{2}}{2\sigma^{2}} - \frac{W^{\mathsf{T}} \Sigma^{-1} W}{2} + \ln\left[\frac{1}{2\pi}\right] + \ln\left[\frac{1}{2\pi}\right]$$

De plus, comme on ne connaît généralement pas $\Sigma,$ on suppose qu'elle est isotropique

$$\Sigma = \begin{pmatrix} \alpha^2 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & \alpha^2 & & \vdots \\ \vdots & & \ddots & \\ 0 & 0 & \dots & \alpha^2 \end{pmatrix} = \alpha^2 I$$

44

Régression polynomiale

Maximum a posteriori (MAP) (cf. notes au tableau)

Cherche les meilleurs paramètres W en maximisant la probabilité a posteriori

$$\begin{split} W &= \arg\max_{W} \sum_{n=1}^{N} - \frac{(t_{n} - y_{W}(x_{n}))^{2}}{2\sigma^{2}} - \frac{W^{\mathsf{T}}\Sigma^{-1}W}{2} \\ &= \arg\max_{W} \sum_{n=1}^{N} - \frac{(t_{n} - y_{W}(x_{n}))^{2}}{2\sigma^{2}} - \frac{W^{\mathsf{T}}W}{2\alpha^{2}} \\ &= \arg\min_{W} \sum_{n=1}^{N} \frac{(t_{n} - y_{W}(x_{n}))^{2}}{2} + \lambda \frac{W^{\mathsf{T}}W}{2} \end{split} \qquad \text{où } \lambda = \frac{\sigma^{2}}{\alpha^{2}} \end{split}$$

Régression polynomiale

Maximum a posteriori (MAP)

Cherche les meilleurs paramètres W en maximisant la probabilité a posteriori

$$W = \arg\min_{W} \sum_{n=1}^{N} \frac{(t_{n} - y_{W}(x_{n}))^{2}}{2} + \lambda \frac{W^{T}W}{2}$$

NOTE

NOTE

Voir sklearn pour une implémentation simple scikit-learn.org/stable/modules/generated/sklearn.linear model.Ridge.htm

46

Théorie de l'information

47

47

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

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

'a' 'b' 'c' 'd' 0.4 0.05 0.2 0.3

49

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



50

Théorie de l'information

Codage de Huffman :

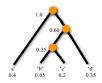
- > façon optimale d'encoder des symboles indépendants de façon binaire
- $\,\blacktriangleright\,\,\,$ plus un symbole est «fréquent» (probable), plus son code sera court



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

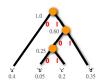


52

Théorie de l'information

Codage de Huffman :

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



| Symbole | Code | Prob |
|---------|------|------|
| 'a' | 0 | 40% |
| 'Ь' | 100 | 5% |
| ,c, | 101 | 20% |
| 'd' | - 11 | 35% |

53

Entropie

| Symbole | Code | Prob |
|---------|------|------|
| 'a' | 0 | 40% |
| 'b' | 100 | 5% |
| ,c, | 101 | 20% |
| 'd' | - 11 | 35% |

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

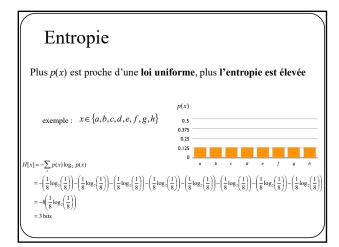
la taille moyenne du code d'un symbole est $0.4 \times 1 + 0.05 \times 3 + 0.2 \times 3 + 0.35 \times 2 =$ **1.85 (bits)**

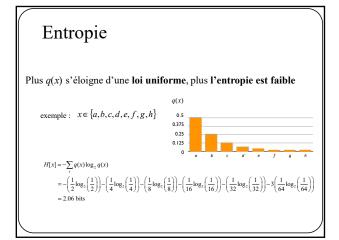
• Entropie :

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

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

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 :

$$KL(p(x) || q(x)) = -\sum_{x} p(x) \log_{2} q(x) - \left(-\sum_{x} p(x) \log_{2} p(x)\right)$$
$$= \sum_{x} p(x) \log_{2} \frac{p(x)}{q(x)}$$

ightharpoonup correspond au <u>nombre de bits additionnels</u> par rapport à ce qui serait optimal

58

Entropie jointe

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

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

On peut généraliser l'entropie à plusieurs variables

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

59

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

| _ | 1 |
|---|----|
| n | -1 |