Hiver 2019

$\begin{array}{c} \text{M\'ethodes d'apprentissage} \\ IFT603 \end{array}$

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

Variable aléatoire

- Soient X et Y des variables aléatoires discrètes
 - \triangleright 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:

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

3

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 $X = x_i$

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

Δ

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

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

Se lit : la probabilité que $X = x_i$ étant donné que $Y = y_i$

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

_

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 y_j ont disparu, seulement pour simplifier la notation

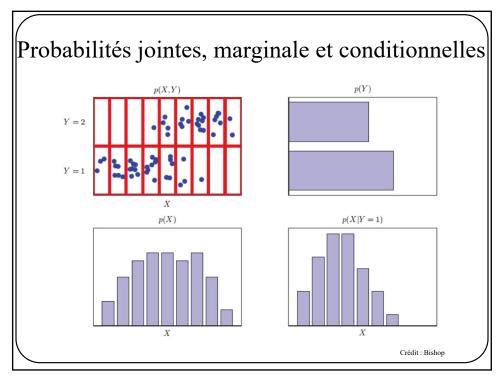
Une probabilité jointe peut toujours être décomposée par le produit d'une probabilité conditionnelle et marginale

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

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



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)

9

Indépendance

Deux variables aléatoires X et Y sont indépendantes si

$$> P(X,Y) = P(X)P(Y)$$
 ou

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

$$P(Y | X) = P(Y)$$

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

- ightharpoonup X peut prendre un nombre infini de valeurs possibles (e.g. $\mathbb R$)
- $\triangleright X$ 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

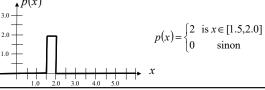
> la fonction de densité doit satisfaire

$$p(x) \ge 0$$

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

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

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 :

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

Variables aléatoires continues

Soient X et Y deux variables aléatoires continues

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

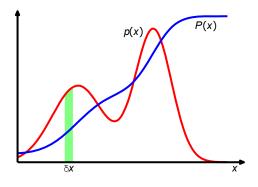
$$p(x) = \int p(x, y) dy$$

> La function de densité conditionnelle s'obtient comme auparavant

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

15

Variables aléatoires continues



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

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

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

17

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

19

Propriétés de l'espérance et de la variance

Transformation linéaire de l'espérance

$$E[ax + by] = \sum_{x} \sum_{y} (ax + by) p(x, y)$$
 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 généralise au cas conditionnel :

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

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

21

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 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

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

Et la covariance de deux vecteurs est

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

23

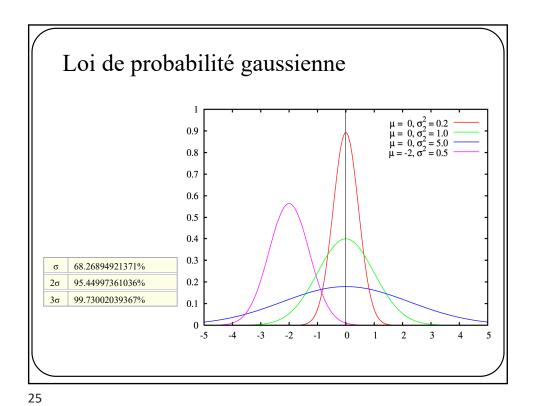
Loi de probabilité gaussienne

 $N(x \mid \mu, \sigma) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma}} e^{-\frac{(x-\mu)^2}{2\sigma^2}} \left(\begin{array}{c} 0.8 \\ 0.7 \\ 0.6 \\ 0.5 \\ 0.4 \\ 0.3 \\ 0.2 \\ 0.1 \end{array} \right)$

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

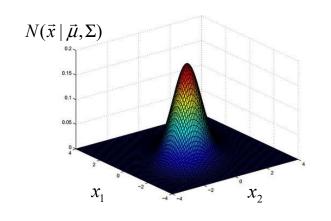
$$N(\vec{x} \mid \vec{\mu}, \Sigma) = \frac{1}{(2\pi)^{D/2} |\Sigma|^{1/2}} \exp\left\{-\frac{1}{2} (\vec{x} - \vec{\mu})^{\mathrm{T}} \Sigma^{-1} (\vec{x} - \vec{\mu})\right\}$$

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

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

Gaussienne multivariée

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



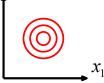
27

Gaussienne <u>multivariée</u>

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

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

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



Gaussienne <u>multivariée</u>

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

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

29

Gaussienne multivariée

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

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

$$\Sigma = \begin{pmatrix} 1.5 & 0.5 \\ 0.5 & 1.5 \end{pmatrix} \qquad \begin{bmatrix} x_2 \\ x_1 \end{bmatrix}$$

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
 - > 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

Introduction au tableau

Maximum de vraisemblance Maximum a posteriori

33

Régression 1D

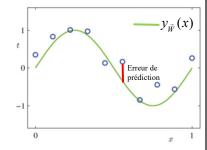
Retournons à notre exemple de régression

- > Données
 - ✓ entrée : scalaire *x*
 - ✓ cible : scalaire t
- **Ensemble d'entraînement** *D* contient:

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

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

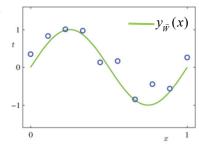




- ➤ Objectif:
 - \checkmark Faire une prédiction \hat{t} pour chaque nouvelle entrée \hat{x}

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

$$y_{\bar{w}}(x) = w_0 + w_1 x + w_2 x^2 + \dots + w_M x^M$$
$$= \sum_{i=0}^{M} w_i x^i$$



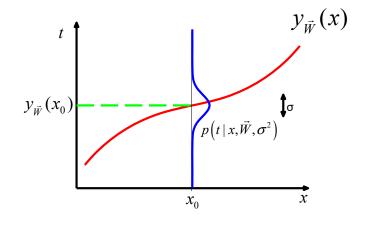
- $> y_{\vec{w}}(x)$ est notre **modèle**
 - ✓ Représente nos hypothèses sur le problème à résoudre
 - ✓ Un modèle a toujours des paramètres qu'on doit trouver (ici \vec{W})

35

35

Régression polynomiale

Loi gaussienne conditionnelle

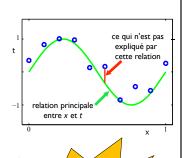


Loi gaussienne conditionnelle

On va formuler l'hypothèse que chaque donnée t a été générée selon une gaussienne de moyenne $y_{\bar{w}}(x)$ et de variance σ^2

$$p(T \mid X, \vec{W}, \sigma^2) = \prod_{n=1}^{N} p(t_n \mid x_n, \vec{W}, \sigma^2)$$

$$= \prod_{n=1}^{N} N(t_n \mid y_W(x_n), \sigma^2)$$
Variables indépendantes et identiquement distribuées (i.i.d)



37

Régression polynomiale

Maximum de vraisemblance (cf. notes au tableau)

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

Connue

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

= $\arg \max_{W} \prod_{n=1}^{N} N(t_{n} | x_{n}, \vec{W}, \sigma^{2})$ => Données gaussienns et (i,i.d)

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

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

Maximum de vraisemblance (cf. notes au tableau)

Cherche les meilleurs paramètres W en maximisant la vraisemblance

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

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

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

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

39

Régression polynomiale

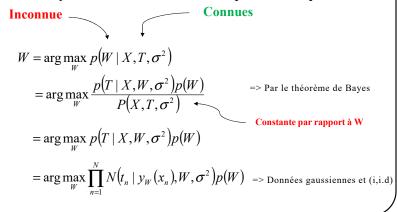
Maximum de vraisemblance

Cherche les meilleurs paramètres W en maximisant la vraisemblance

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

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

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

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

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

Cherche les meilleurs paramètres W en maximisant la probabilité a posteriori

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

$$= \arg \max_{W} \sum_{n=1}^{N} \ln \left[N(t_{n} \mid y_{W}(x_{n}), \sigma^{2}) N(W \mid 0, \Sigma) \right]$$

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

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

43

Régression polynomiale

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

Cherche les meilleurs paramètres W en maximisant la probabilité a posteriori

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

Constante par rapport à W

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

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

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

Cherche les meilleurs paramètres W en maximisant la probabilité a posteriori

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

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

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

45

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

Formule également connue sous le nom de régression de *Ridge* »

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

4

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

48

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

49

Théorie de l'information

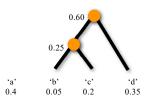
Codage de Huffman:

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

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

Codage de Huffman:

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

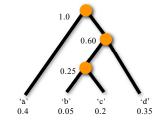


51

Théorie de l'information

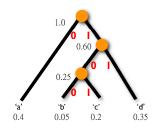
Codage de Huffman :

- > 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
'a'	0	40%
ʻb'	100	5%
ʻc'	101	20%
'ď'	П	35%

53

Entropie

		`
Symbole	Code	Prob
ʻa'	0	40%
'b'	100	5%
ʻc'	101	20%
'd'	Ш	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 :

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

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: $x \in \{a, b, c, d, e, f, g, h\}$ 0.5 0.375 0.125 0.125 $0 = -\left(\frac{1}{8}\log_2\left(\frac{1}{8}\right)\right) - \left(\frac{1}{8}\log_2\left(\frac{1}{8}\right)\right) - \left(\frac{1}{8}$

55

Entropie

Plus q(x) s'éloigne d'une loi uniforme, plus l'entropie est faible

exemple: $x \in \{a, b, c, d, e, f, g, h\}$ 0.5
0.375
0.125

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

Entropie

L'entropie se généralise aux variables continues

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

57

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
- 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