A2DI: Théorie de la décision

John Klein

Lille1 Université - CRIStAL UMR CNRS 9189

Où en est-on dans notre problème d'apprentissage supervisé ?

- En théorie on veut minimiser Err_{gen}.
- En pratique on minisera Err_{train} tout en s'assurant que Err_{train} ne dévie pas de Err_{esp}.

Le calcul de ces 2 erreurs dépend de la perte L. Dans ce chapitre, nous allons étudier l'influence de L en détail.

Plan du chapitre

Comment prendre de bonnes décisions ?

- Imaginons un problème d'apprentissage supervisé où une valeur y est associée à un exemple $\mathbf{x}$.
- Supposons que notre problème consiste à choisir une action $a \in \mathcal{A}$ quand nous observons $\mathbf{x}$.
- Enfin, nous avons connaissance d'une fonction de perte $L : \mathbb{Y} \times \mathcal{A} \to \mathbb{R}$.

Exemple

Problème de régression avec $\mathcal{A} = \mathbb{Y}$ et $L(y, a) = (y - a)^2$.
Ce formalisme généralise donc celui vu au chapitre précédent où on ne s'intéressait qu'à une forme de perte particulière : l'erreur espérée.

Comment prendre de bonnes décisions ? minimiser la perte attendue.

- Le démarche optimale consiste à sélectionner la fonction prédictrice f^* qui en moyenne causera le moins de perte :

$$f^*(\mathbf{x}) = \arg\min_{a \in \mathcal{A}} \mathbb{E}[L]. \tag{1}$$

- ... où est $\mathbf{x}$ dans cette expression ?
- dans la distribution sous laquelle le calcul d'espérance est fait :
  - En statistiques Bayésiennes, cette distribution est $p_{Y|\mathbf{X}=\mathbf{x}}$.
  - En statistiques fréquentistes, cette distribution est $p_{\mathbf{X},Y}$.
    ... mais $\mathbf{X}$ est intégré du coup !
    En fait, il faudrait écrire pour la version fréquentiste :

$$f^* = \arg\min_{f \in \mathcal{F}} \mathbb{E}_{\mathbf{X},Y}[L], \tag{2}$$

où $\mathcal{F}$ est un espace de fonctions.

Comment prendre de bonnes décisions ? minimiser la perte attendue.

- Le démarche optimale consiste à sélectionner la fonction prédictrice f^* qui en moyenne causera le moins de perte :

$$f^*(\mathbf{x}) = \arg\min_{a \in \mathcal{A}} \mathbb{E}[L]. \quad (1)$$

- ... où est $\mathbf{x}$ dans cette expression ?
- dans la distribution sous laquelle le calcul d'espérance est fait :
  - En statistiques Bayésiennes, cette distribution est $p_{Y|\mathbf{X}=\mathbf{x}}$.
  - En statistiques fréquentistes, cette distribution est $p_{\mathbf{X},Y}$.

    ... mais $\mathbf{X}$ est intégré du coup !

    En fait, il faudrait écrire pour la version fréquentiste :

$$f^* = \arg\min_{f \in \mathcal{F}} \mathbb{E}_{\mathbf{X},Y}[L], \quad (2)$$

    où $\mathcal{F}$ est un espace de fonctions.

Comment prendre de bonnes décisions ? minimiser la perte attendue.

- Le démarche optimale consiste à sélectionner la fonction prédictrice f^* qui en moyenne causera le moins de perte :

$$f^*(\mathbf{x}) = \arg\min_{a \in \mathcal{A}} \mathbb{E}[L]. \quad (1)$$

- ... où est $\mathbf{x}$ dans cette expression ?
- dans la distribution sous laquelle le calcul d'espérance est fait :
  - En statistiques Bayésiennes, cette distribution est $p_{Y|\mathbf{X}=\mathbf{x}}$.
  - En statistiques fréquentistes, cette distribution est $p_{\mathbf{X},Y}$.

  ... mais $\mathbf{X}$ est intégré du coup !
  En fait, il faudrait écrire pour la version fréquentiste :

$$f^* = \arg\min_{f \in \mathcal{F}} \mathbb{E}_{\mathbf{X},Y}[L], \quad (2)$$

  où $\mathcal{F}$ est un espace de fonctions.

Comment prendre de bonnes décisions ? minimiser la perte attendue.

- Le démarche optimale consiste à sélectionner la fonction prédictrice f^* qui en moyenne causera le moins de perte :

$$f^*(\mathbf{x}) = \arg\min_{a \in \mathcal{A}} \mathbb{E}[L]. \quad (1)$$

- ... où est $\mathbf{x}$ dans cette expression ?
- dans la distribution sous laquelle le calcul d'espérance est fait :
  - En statistiques Bayésiennes, cette distribution est $p_{Y|\mathbf{X}=\mathbf{x}}$.
  - En statistiques fréquentistes, cette distribution est $p_{\mathbf{X},Y}$.
    ... mais $\mathbf{X}$ est intégré du coup !
    En fait, il faudrait écrire pour la version fréquentiste :

$$f^* = \arg\min_{f \in \mathcal{F}} \mathbb{E}_{\mathbf{X},Y}[L], \quad (2)$$

où $\mathcal{F}$ est un espace de fonctions.

Comment prendre de bonnes décisions ? minimiser la perte attendue.

- Le démarche optimale consiste à sélectionner la fonction prédictrice f^* qui en moyenne causera le moins de perte :

$$f^*(\mathbf{x}) = \arg\min_{a \in \mathcal{A}} \mathbb{E}[L]. \quad (1)$$

- ... où est $\mathbf{x}$ dans cette expression ?
- dans la distribution sous laquelle le calcul d'espérance est fait :
  - En statistiques Bayésiennes, cette distribution est $p_{Y|\mathbf{X}=\mathbf{x}}$.
  - En statistiques fréquentistes, cette distribution est $p_{\mathbf{X},Y}$.
    ... mais $\mathbf{X}$ est intégré du coup !
    En fait, il faudrait écrire pour la version fréquentiste :

$$f^* = \arg\min_{f \in \mathcal{F}} \mathbb{E}_{\mathbf{X},Y}[L], \quad (2)$$

où $\mathcal{F}$ est un espace de fonctions.

Comment prendre de bonnes décisions ? minimiser la perte attendue.

- Dans cette section du chapitre, on se concentre sur la solution bayésienne.
- Ce cadre de travail se nomme théorie Bayésienne de la décision.
- La perte $\mathbb{E}_{y|\mathbf{x}}[L]$ est appelée perte attendue a posteriori.
- On note souvent :

$$\rho(a|\mathbf{x}) = \mathbb{E}_{Y|\mathbf{X}=\mathbf{x}}[L(y,a)] = \int_{\mathbb{Y}} L(y,a)\, p_{Y|\mathbf{X}=\mathbf{x}}(y)\, dy. \qquad (3)$$

Théorie Bayésienne de la décision

avec la **0-1 loss** pour un problème de classification ($\mathbb{Y} = \mathcal{A} = \mathcal{C}$).

$$L : \mathcal{C} \times \mathbb{X} \rightarrow \{0;1\}, \tag{4}$$

$$(c_i, \hat{c}(\mathbf{x_i})) \rightarrow \begin{cases} 0 & \text{si } c_i = \hat{c}(\mathbf{x_i}) \\ 1 & \text{sinon} \end{cases}. \tag{5}$$

La perte attendue a posteriori s'écrit :

$$\rho(a|\mathbf{x}) = \sum_{c \in \mathcal{C}} (1 - \mathbb{I}_c(a)) \, p_{Y|\mathbf{X}=\mathbf{x}}(c), \tag{6}$$

$$= 1 - p_{Y|\mathbf{X}=\mathbf{x}}(a). \tag{7}$$

La fonction prédictrice qui minimise ρ est donc :

$$f^*(\mathbf{x}) = \arg\max_{a \in \mathcal{C}} p_{Y|\mathbf{X}=\mathbf{x}}(a). \tag{8}$$

Théorie Bayésienne de la décision

avec une perte à option de rejet pour un problème de classification $(\mathbb{Y} = \mathcal{A} = \mathcal{C})$:

- Dans certains domaines, laisser le système prendre une décision risquée n'est pas acceptable.
- On ajoute une nouvelle classe fictive c_r appelée classe de rejet.
- La perte correspondante s'exprime alors comme suit :

$$L : \mathcal{C} \times \mathbb{X} \rightarrow \{0;1\}, \tag{9}$$

$$(c_i, \hat{c}(\mathbf{x_i})) \rightarrow \begin{cases} 0 & \text{si } c_i = \hat{c}(\mathbf{x_i}) \\ \lambda_r & \text{si } c_r = \hat{c}(\mathbf{x_i}) \\ \lambda & \text{sinon} \end{cases}, \tag{10}$$

avec $0 < \lambda_r < \lambda$.

Théorie Bayésienne de la décision

avec une perte à option de rejet pour un problème de classification ($\mathbb{Y} = \mathcal{A} = \mathcal{C}$) :

Pour une classifcation binaire, on peut résumer les pertes comme suit :

	$\hat{c}(\mathbf{x}) = a = c_0$	$\hat{c}(\mathbf{x}) = a = c_1$	$\hat{c}(\mathbf{x}) = a = c_r$
$y = c_0$	0	λ	λ_r
$y = c_1$	λ	0	λ_r

La perte attendue a posteriori s'écrit :

$$\rho(a|\mathbf{x}) = \Bigg\{ \tag{11}$$

Théorie Bayésienne de la décision

avec une perte à option de rejet pour un problème de classification $(\mathbb{Y} = \mathcal{A} = \mathcal{C})$:

Quant à la fonction prédictrice qui minimise ρ, on a :

$$f^* (\mathbf{x}) = \tag{12}$$

Théorie Bayésienne de la décision

avec une perte asymétrique pour un problème de classification binaire $(\mathbb{Y} = \mathcal{A} = \mathcal{C})$:

	$\hat{c}(\mathbf{x}) = a = c_0$	$\hat{c}(\mathbf{x}) = a = c_1$
$y = c_0$	0	λ_{FP}
$y = c_1$	λ_{FN}	0

La perte attendue a posteriori s'écrit :

$$\rho(a|\mathbf{x}) = \left\{ \right. \tag{13}$$

Théorie Bayésienne de la décision avec une perte asymétrique pour un problème de classification binaire ($\mathbb{Y} = \mathcal{A} = \mathcal{C}$) : Exercice

Si on a $\frac{\lambda_{FP}}{\lambda_{FP}} = \alpha > 1$, c'est à dire qu'un faux positif coûte α plus cher qu'un faux négatif, à partir de quel seuil τ de probabilité a posteriori vais je choisir la classe c_1 ?

Théorie Bayésienne de la décision

avec une perte asymétrique pour un problème de classification binaire $(\mathbb{Y} = \mathcal{A} = \mathcal{C})$: Matrice de confusion.

- Ayant déterminé τ, on peut utiliser notre règle de décision $\hat{c}$ sur un ensemble de test $\mathcal{D}_{\text{test}}$.
- La taille de cet ensemble est notée $\sharp\mathcal{D}_{\text{test}} = n_{\text{test}}$.
- On peut alors détailler les probabilités de se tromper ou non d'une manière plus fine que l'erreur de généralisation :

Action : Choix de la classe	$y = c_0$	$y = c_1$
$\hat{c}(\mathbf{x}) = c_0$	$\sum_{i=1}^{n_{\text{test}}} \mathbb{I}_{c_0}(c_i)\,\mathbb{I}_{c_0}(\hat{c}(\mathbf{x}_i))$	$\sum_{i=1}^{n_{\text{test}}} \mathbb{I}_{c_1}(c_i)\,\mathbb{I}_{c_0}(\hat{c}(\mathbf{x}_i))$
$\hat{c}(\mathbf{x}) = c_1$	$\sum_{i=1}^{n_{\text{test}}} \mathbb{I}_{c_0}(c_i)\,\mathbb{I}_{c_1}(\hat{c}(\mathbf{x}_i))$	$\sum_{i=1}^{n_{\text{test}}} \mathbb{I}_{c_1}(c_i)\,\mathbb{I}_{c_1}(\hat{c}(\mathbf{x}_i))$

- On peut calculer une telle matrice pour du multi-classe.

Théorie Bayésienne de la décision

avec une perte asymétrique pour un problème de classification binaire $(\mathbb{Y} = \mathcal{A} = \mathcal{C})$: Matrice de confusion.

- En normalisant cette matrice par colonne par colonne, on obtient une estimation empirique de $p(\hat{c}|c)$.
- Avant normalisation :

Action : Choix de la classe	$y = c_0$	$y = c_1$
$\hat{c}(\mathbf{x}) = c_0$	$\sum_{i=1}^{n_{\text{test}}} \mathbb{I}_{c_0}(c_i)\,\mathbb{I}_{c_0}(\hat{c}(\mathbf{x}_i))$	$\sum_{i=1}^{n_{\text{test}}} \mathbb{I}_{c_1}(c_i)\,\mathbb{I}_{c_0}(\hat{c}(\mathbf{x}_i))$
$\hat{c}(\mathbf{x}) = c_1$	$\sum_{i=1}^{n_{\text{test}}} \mathbb{I}_{c_0}(c_i)\,\mathbb{I}_{c_1}(\hat{c}(\mathbf{x}_i))$	$\sum_{i=1}^{n_{\text{test}}} \mathbb{I}_{c_1}(c_i)\,\mathbb{I}_{c_1}(\hat{c}(\mathbf{x}_i))$
Somme	$n_0 = \sum_{i=1}^{n_{\text{test}}} \mathbb{I}_{c_0}(c_i)$	$n_1 = \sum_{i=1}^{n_{\text{test}}} \mathbb{I}_{c_1}(c_i)$

Théorie Bayésienne de la décision

avec une perte asymétrique pour un problème de classification binaire $(\mathbb{Y} = \mathcal{A} = \mathcal{C})$: Matrice de confusion.

- En normalisant cette matrice par colonne par colonne, on obtient une estimation empirique de $p(\hat{c}|c)$.
- Après normalisation :

Action : Choix de la classe	$y = c_0$	$y = c_1$
$\hat{c}(\mathbf{x}) = c_0$	$\frac{1}{n_0}\sum_{i=1}^{n_{\text{test}}} \mathbb{I}_{c_0}(c_i)\,\mathbb{I}_{c_0}(\hat{c}(\mathbf{x}_i))$	$\frac{1}{n_1}\sum_{i=1}^{n_{\text{test}}} \mathbb{I}_{c_1}(c_i)\,\mathbb{I}_{c_0}(\hat{c}(\mathbf{x}_i))$
$\hat{c}(\mathbf{x}) = c_1$	$\frac{1}{n_0}\sum_{i=1}^{n_{\text{test}}} \mathbb{I}_{c_0}(c_i)\,\mathbb{I}_{c_1}(\hat{c}(\mathbf{x}_i))$	$\frac{1}{n_1}\sum_{i=1}^{n_{\text{test}}} \mathbb{I}_{c_1}(c_i)\,\mathbb{I}_{c_1}(\hat{c}(\mathbf{x}_i))$

Théorie Bayésienne de la décision

avec une perte asymétrique pour un problème de classification binaire $(\mathbb{Y} = \mathcal{A} = \mathcal{C})$: Matrice de confusion.

- En normalisant cette matrice par colonne par colonne, on obtient une estimation empirique de $p(\hat{c}|c)$.
- Après normalisation :

Action : Choix de la classe	$y = c_0$	$y = c_1$
$\hat{c}(\mathbf{x}) = c_0$	$\hat{p}(\hat{c} = c_0 \vert c = c_0)$	$\hat{p}(\hat{c} = c_0 \vert c = c_1)$
$\hat{c}(\mathbf{x}) = c_1$	$\hat{p}(\hat{c} = c_1 \vert c = c_0)$	$\hat{p}(\hat{c} = c_1 \vert c = c_1)$

Théorie Bayésienne de la décision

avec une perte asymétrique pour un problème de classification binaire ($\mathbb{Y} = \mathcal{A} = \mathcal{C}$) : Matrice de confusion.

- Quand la matrice est normalisée, chaque entrée a un nom spécifique

	$\hat{c}(\mathbf{x}) = a = c_0$	$\hat{c}(\mathbf{x}) = a = c_1$
$y = c_0$	taux de vrais négatifs spécificité	taux de faux négatifs taux de cibles manquées erreur de type II
$y = c_1$	taux de faux positifs erreur de type I	taux de vrais positifs rappel sensibilité

Théorie Bayésienne de la décision

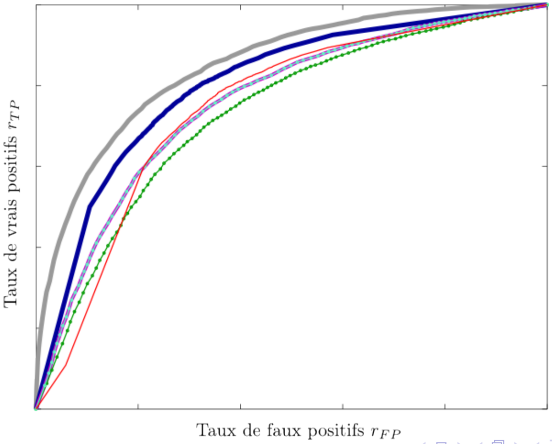
avec une perte asymétrique pour un problème de classification binaire ($\mathbb{Y} = \mathcal{A} = \mathcal{C}$) : courbe ROC.

- Choisir un seuil τ fixe permet de calculer tous ces critères d'évaluation d'un classifieur binaire, mais pour comparer 2 classifieurs ne faudrait-il pas le faire pour tout τ ?
- La courbe ROC se propose d'atteindre cet objectif en calculant les deux types d'erreur pour différentes valeurs de τ.

Théorie Bayésienne de la décision

avec une perte à asymétrique pour un problème de classification binaire ($\mathbb{Y} = \mathcal{A} = \mathcal{C}$) : courbe ROC.

- Chaque paire (r_{FP}, r_{FN}) obtenue pour une valeur de τ forme un point de la courbe.



Théorie Bayésienne de la décision

avec une perte asymétrique pour un problème de classification binaire ($\mathbb{Y} = \mathcal{A} = \mathcal{C}$) : autres critères.

- On préfère parfois la courbe rappel/précision à la courbe ROC.
- La précision est la proportion de vrais positifs parmi ceux détectés comme tel :

$$\hat{p}\left(c = c_1 | \hat{c} = c_1\right) = \frac{\sum_{i=1}^{n_{\text{test}}} \mathbb{I}_{c_1}\left(c_i\right) \mathbb{I}_{c_1}\left(\hat{c}\left(\mathbf{x}_i\right)\right)}{\sum_{i=1}^{n_{\text{test}}} \mathbb{I}_{c_1}\left(\hat{c}\left(\mathbf{x}_i\right)\right)} \quad (14)$$

- Pour essayer de combiner précision et rappel en une seule valeur, on peut utilise le F-score :

$$\text{F-score} = \frac{2 \times \text{précision} \times \text{rappel}}{\text{précision} + \text{rappel}} \quad (15)$$

Théorie Bayésienne de la décision

avec la **quadratic loss** pour un problème de régression ($\mathbb{Y} = \mathcal{A} = \mathbb{R}$).

$$\begin{aligned} L : \mathbb{R} \times \mathbb{X} &\rightarrow \mathbb{R}, & (16) \\ \left(y_i, \hat{y}\left(\mathbf{x_i}\right)\right) &\rightarrow \left(y_i - \hat{y}\left(\mathbf{x_i}\right)\right)^2. & (17) \end{aligned}$$

La perte attendue a posteriori s'écrit :

$$\rho\left(a|\mathbf{x}\right) = \int_{\mathbb{R}} \left(y_i - a\right)^2 p_{Y|\mathbf{X}=\mathbf{x}}\left(y\right) dy. \quad (18)$$

La fonction prédictrice qui minimise ρ est alors :

$$f^*\left(\mathbf{x}\right) = \mathbb{E}\left[Y|\mathbf{X} = \mathbf{x}\right]. \quad (19)$$

Théorie Bayésienne de la décision

Pour preuve, résolvons :

$$\frac{d\rho}{da}(a|\mathbf{x}) = 0, \tag{20}$$

Théorie Bayésienne de la décision

avec la **absolute loss** pour un problème de régression ($\mathbb{Y} = \mathcal{A} = \mathbb{R}$).

$$\begin{aligned} L : \mathbb{R} \times \mathbb{X} &\rightarrow \mathbb{R}, && (21) \\ \left(y_i, \hat{y}\left(\mathbf{x_i}\right)\right) &\rightarrow \left|y_i - \hat{y}\left(\mathbf{x_i}\right)\right|. && (22) \end{aligned}$$

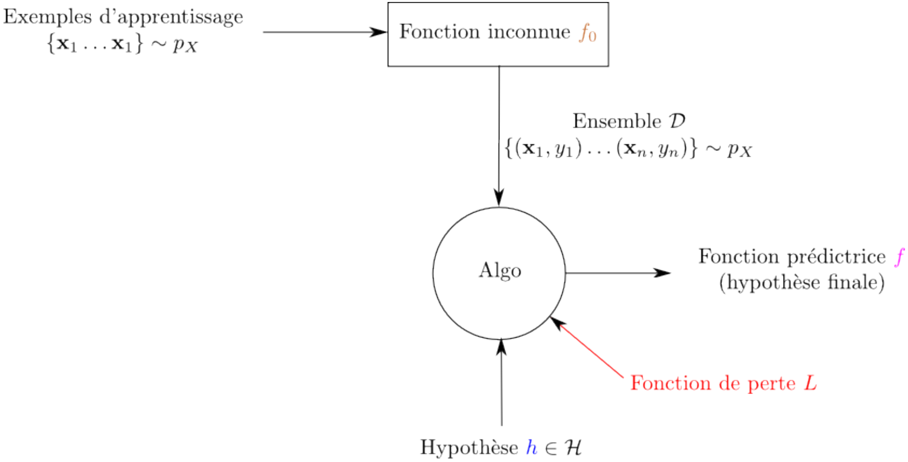
La perte attendue a posteriori s'écrit :

$$\rho\left(a|\mathbf{x}\right) = \int_{\mathbb{R}} \left|y_i - a\right| p_{Y|\mathbf{X}=\mathbf{x}}\left(y\right) dy. \quad (23)$$

La fonction prédictrice qui minimise ρ est alors la médiane de la distribution conditionnelle $p_{Y|\mathbf{X}=\mathbf{x}}\left(y\right)$.

Théorie Bayésienne de la décision

La fonction de perte influe directement sur la solution retenue.



Plan du chapitre

Théorie fréquentiste la décision

$\boxed{\text{Rappel}}$: On a vu plus tôt dans ce chapitre que Bayésiens et fréquentistes ont 2 visions différentes de la perte attendue :

- Pour les Bayésiens, on cherche la fonction f^* qui à chaque exemple observé $\mathbf{x}$ associe une action a telle que :

$$\begin{aligned} f^*(\mathbf{x}) &= \arg\min_{a \in \mathcal{A}} \rho(a|\mathbf{x}), &(24)\\ &= \arg\min_{a \in \mathcal{A}} \mathbb{E}_{Y|\mathbf{X}=\mathbf{x}}[L(y,a)]. &(25)\end{aligned}$$

- Pour les fréquentistes, on cherche directement la fonction f^* telle que

$$f^* = \arg\min_{f \in \mathcal{F}} \mathbb{E}_{\mathbf{X},Y}[L]. \quad (26)$$

Théorie fréquentiste la décision : Généralités sur l'estimation

Pause Stat !

- Les fréquentistes d'intéressent à l'estimation d'un vecteur $\boldsymbol{\theta}_0$ vivant dans un espace Θ.

Théorie fréquentiste la décision : Généralités sur l'estimation

Pause Stat !

- Les fréquentistes d'intéressent à l'estimation d'un vecteur $\boldsymbol{\theta}_0$ vivant dans un espace Θ.
- Selon la philosophie fréquentiste, il existe une unique vraie valeur $\boldsymbol{\theta}_0$ de $\boldsymbol{\theta}$ et ce n'est pas une v.a. mais une constante.

Théorie fréquentiste la décision : Généralités sur l'estimation

Pause Stat !

- Les fréquentistes d'intéressent à l'estimation d'un vecteur $\boldsymbol{\theta}_0$ vivant dans un espace Θ.
- Selon la philosophie fréquentiste, il existe une unique vraie valeur $\boldsymbol{\theta}_0$ de $\boldsymbol{\theta}$ et ce n'est pas une v.a. mais une constante.
- Le seul aléa est alors dans les données $\mathcal{D}$.

Théorie fréquentiste la décision : Généralités sur l'estimation

Pause Stat !

- Les fréquentistes d'intéressent à l'estimation d'un vecteur $\boldsymbol{\theta}_0$ vivant dans un espace Θ.
- Selon la philosophie fréquentiste, il existe une unique vraie valeur $\boldsymbol{\theta}_0$ de $\boldsymbol{\theta}$ et ce n'est pas une v.a. mais une constante.
- Le seul aléa est alors dans les données $\mathcal{D}$.

Exemple

Ex : On mesure 100 fois la masse d'un objet lundi, cela donne $\mathcal{D}_1$. On recommence mardi cela donne $\mathcal{D}_2 \neq \mathcal{D}_1$, il y a donc bien un aléa mais la masse est la même.

Théorie fréquentiste la décision : Généralités sur l'estimation

Pause Stat !

- La forme générale du problème d'estimation de $\boldsymbol{\theta}_0$ s'exprime alors comme suit

$$\hat{\boldsymbol{\theta}}^* = \underset{\hat{\boldsymbol{\theta}} \in \mathcal{F}}{\arg\min} \mathbb{E}_{\mathcal{D}|\boldsymbol{\theta}_0} \left[L\left(\boldsymbol{\theta}_0, \hat{\boldsymbol{\theta}} \right) \right], \tag{27}$$

où $\hat{\boldsymbol{\theta}}\left(\mathcal{D}\right)$ est un estimateur (une fonction estimant $\boldsymbol{\theta}_0$).

Théorie fréquentiste la décision : Généralités sur l'estimation

Pause Stat !

- La forme générale du problème d'estimation de θ_0 s'exprime alors comme suit

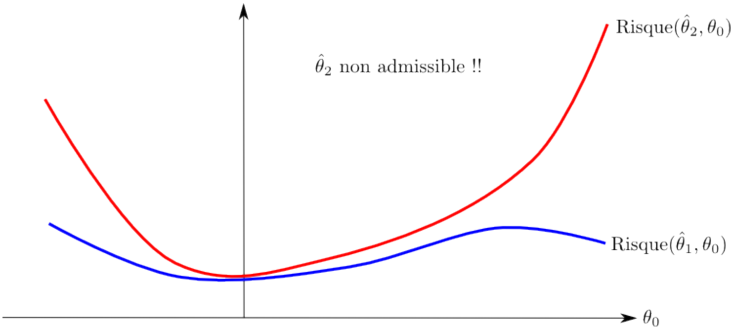
$$\hat{\theta}^* = \arg\min_{\hat{\theta} \in \mathcal{F}} \mathbb{E}_{\mathcal{D}|\theta_0} \left[L\left(\theta_0, \hat{\theta} \right) \right], \tag{27}$$

où $\hat{\theta}(\mathcal{D})$ est un estimateur (une fonction estimant θ_0).

- La quantité $\mathbb{E}_{\mathcal{D}|\theta_0} \left[L\left(\theta_0, \hat{\theta} \right) \right]$ est appelée risque.

Théorie fréquentiste la décision : Généralités sur l'estimation

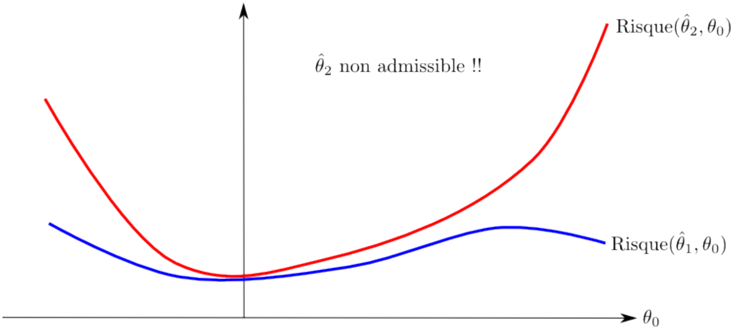
- $\rightarrow$ Gros problème : $\boldsymbol{\theta}_0$ est inconnu et le risque n'est pas calculable !
- .. mais on peut quand même savoir qu'un estimateur $\hat{\boldsymbol{\theta}}_1$ est meilleur qu'un $\hat{\boldsymbol{\theta}}_2$ si son risque est toujours plus faible (pour toute valeur de $\boldsymbol{\theta}_0$).



Théorie fréquentiste la décision : Généralités sur l'estimation

Définition

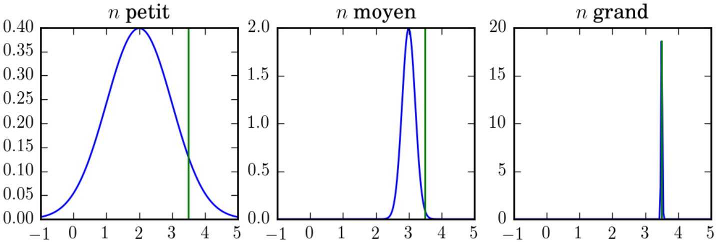
Un estimateur $\hat{\boldsymbol{\theta}}$ de $\boldsymbol{\theta}_0$ est admissible, si $\exists \mathbf{a}$ tel qu'il n'existe aucun autre estimateur ayant un risque plus faible en $\boldsymbol{\theta}_0 = \mathbf{a}$.



Théorie fréquentiste la décision : Généralités sur l'estimation

Définition

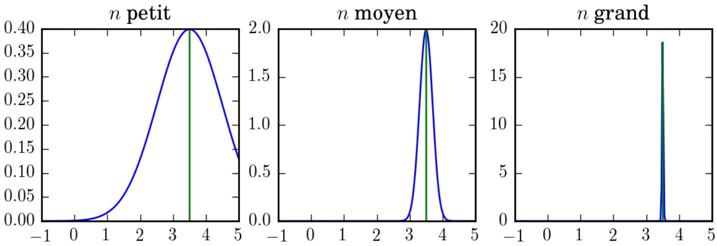
Un estimateur $\hat{\boldsymbol{\theta}}$ de $\boldsymbol{\theta}_0$ est consistant, si $\lim_{\sharp\mathcal{D}\to\infty} \mathbb{P}\left(\left|\hat{\boldsymbol{\theta}}\left(\mathcal{D}\right) - \boldsymbol{\theta}_0\right| > \epsilon\right) = 0.$



Théorie fréquentiste la décision : Généralités sur l'estimation

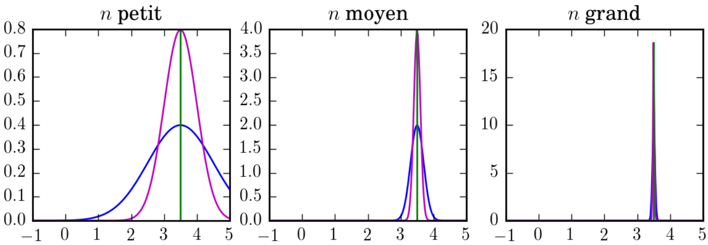
Définition

Un estimateur $\hat{\boldsymbol{\theta}}$ de $\boldsymbol{\theta}_0$ est non biaisé, si $\mathbb{E}_{\mathcal{D}|\boldsymbol{\theta}_0}\left[\hat{\boldsymbol{\theta}}\right] = \boldsymbol{\theta}_0$.



Théorie fréquentiste la décision : Généralités sur l'estimation

Un autre moyen de comparer la qualité d'un estimateur est la variance



Théorie fréquentiste la décision : Généralités sur l'estimation

Un autre moyen de comparer la qualité d'un estimateur est la variance.
On a le résultat suivant :

Inégalité de Cramer-Rao

Soit un estimateur non biaisé $\hat{\boldsymbol{\theta}}$ de $\boldsymbol{\theta}_0$, si la distribution $p_{X|\boldsymbol{\theta}_0}$ est lisse, alors

$$\mathrm{var}\left[\hat{\boldsymbol{\theta}}\right] \geq \frac{1}{n\,I\left(\boldsymbol{\theta}_0\right)}. \tag{28}$$

$I\left(\boldsymbol{\theta}_0\right)$ est l'information de Fisher :

$$\begin{aligned} I\left(\boldsymbol{\theta}_0\right) &= \mathbb{E}\left[-\frac{d^2}{d\theta^2}\log p_{\mathcal{D}|\theta=\boldsymbol{\theta}_0}\right], && (29)\\ &= \mathbb{E}\left[\frac{d^2}{d\theta^2}\mathrm{NLL}\left(\theta=\boldsymbol{\theta}_0\right)\right]. && (30)\end{aligned}$$

Théorie fréquentiste la décision pour le cas supervisé

- $\rightarrow$ Gros problème : $\boldsymbol{\theta}_0$ est inconnu et le risque n'est pas calculable !

Théorie fréquentiste la décision pour le cas supervisé

- $\rightarrow$ Gros problème : $\boldsymbol{\theta}_0$ est inconnu et le risque n'est pas calculable !
- .. sauf dans le cas particulier où $\boldsymbol{\theta}$ est observable comme dans un problème supervisé !

$$\boldsymbol{\theta} \text{ devient } y$$

$$\mathcal{D} \text{ devient } \mathbf{x}$$

Théorie fréquentiste la décision pour le cas supervisé

- $\rightarrow$ Gros problème : θ_0 est inconnu et le risque n'est pas calculable !
- Retournons donc à notre problème d'apprentissage supervisé :

Théorie fréquentiste la décision pour le cas supervisé

- $\rightarrow$ Gros problème : $\boldsymbol{\theta}_0$ est inconnu et le risque n'est pas calculable !
- Retournons donc à notre problème d'apprentissage supervisé :
  - $\mathbf{x}$ est un exemple dont la valeur (ou classe) est y.

Théorie fréquentiste la décision pour le cas supervisé

- $\rightarrow$ Gros problème : $\boldsymbol{\theta}_0$ est inconnu et le risque n'est pas calculable !
- Retournons donc à notre problème d'apprentissage supervisé :
  - $\mathbf{x}$ est un exemple dont la valeur (ou classe) est y.
  - y est bien une v.a. (même à $\mathbf{x}$ fixé, il peut y avoir un aléa dans l'étiquetage).

Théorie fréquentiste la décision pour le cas supervisé

- $\rightarrow$ Gros problème : $\boldsymbol{\theta}_0$ est inconnu et le risque n'est pas calculable !
- Retournons donc à notre problème d'apprentissage supervisé :
  - $\mathbf{x}$ est un exemple dont la valeur (ou classe) est y.
  - y est bien une v.a. (même à $\mathbf{x}$ fixé, il peut y avoir un aléa dans l'étiquetage).
  - Nous cherchons une fonction f^* associe à chaque $\mathbf{x}$ individuellement un y de la meilleure manière possible.

Théorie fréquentiste la décision pour le cas supervisé

- $\rightarrow$ Gros problème : $\boldsymbol{\theta}_0$ est inconnu et le risque n'est pas calculable !
- Retournons donc à notre problème d'apprentissage supervisé :
  - $\mathbf{x}$ est un exemple dont la valeur (ou classe) est y.
  - y est bien une v.a. (même à $\mathbf{x}$ fixé, il peut y avoir un aléa dans l'étiquetage).
  - Nous cherchons une fonction f^* associe à chaque $\mathbf{x}$ individuellement un y de la meilleure manière possible.
  - Nous ne sommes pas intéressé par une fonction fonction f^* qui prendrait tout un dataset $\mathcal{D}$ en entrée car ce n'est pas l'usage souhaité.

Théorie fréquentiste la décision pour le cas supervisé

- $\rightarrow$ Gros problème : $\boldsymbol{\theta}_0$ est inconnu et le risque n'est pas calculable !
- Retournons donc à notre problème d'apprentissage supervisé :
  - $\mathbf{x}$ est un exemple dont la valeur (ou classe) est y.
  - y est bien une v.a. (même à $\mathbf{x}$ fixé, il peut y avoir un aléa dans l'étiquetage).
  - Nous cherchons une fonction f^* associe à chaque $\mathbf{x}$ individuellement un y de la meilleure manière possible.
  - Nous ne sommes pas intéressé par une fonction fonction f^* qui prendrait tout un dataset $\mathcal{D}$ en entrée car ce n'est pas l'usage souhaité.
  - Le risque s'écrit alors

$$\mathbb{E}_{\mathbf{x}|Y}\left[L\left(y, f\left(\mathbf{x}\right)\right)\right] = \int_{\mathbb{X}} L\left(y, f\left(\mathbf{x}\right)\right) p_{\mathbf{x}|Y}\left(\mathbf{x}\right) d\mathbf{x}. \qquad (31)$$

  - Comme y varie, on doit passer au risque intégré est

$$\begin{aligned}\mathbb{E}_{\mathbf{x},Y}\left[L\left(y, f\left(\mathbf{x}\right)\right)\right] &= \int_{\mathbb{Y}} \int_{\mathbb{X}} L\left(y, f\left(\mathbf{x}\right)\right) p_{\mathbf{x}|Y}\left(\mathbf{x}\right) d\mathbf{x}\, p_Y\left(y\right) dy, \\ &= Err_{esp}\end{aligned}$$

Théorie fréquentiste la décision pour le cas supervisé

- Mais au fond, c'est quoi la différence avec l'approche Bayésienne ?

$$\mathbb{E}_{\mathbf{X},Y}\left[L\left(y,f\left(\mathbf{x}\right)\right)\right] = \int_{\mathbb{X}}\int_{\mathbb{Y}} L\left(y,f\left(\mathbf{x}\right)\right) p_{\mathbf{X},Y}\left(\mathbf{x},y\right) d\mathbf{x}dy, \quad (32)$$

$$= \int_{\mathbb{X}}\int_{\mathbb{Y}} L\left(y,f\left(\mathbf{x}\right)\right) p_{Y|\mathbf{X}}\left(y\right) p_{\mathbf{X}}\left(\mathbf{x}\right) d\mathbf{x}dy, \quad (33)$$

$$= \int_{\mathbb{X}} \rho\left(f\left(\mathbf{x}\right)|\mathbf{x}\right) p_{\mathbf{X}}\left(\mathbf{x}\right) d\mathbf{x}. \quad (34)$$

Théorie fréquentiste la décision pour le cas supervisé

- Mais au fond, c'est quoi la différence avec l'approche Bayésienne ?

$$\mathbb{E}_{\mathbf{X},Y}\left[L\left(y,f\left(\mathbf{x}\right)\right)\right] = \int_{\mathbb{X}}\int_{\mathbb{Y}} L\left(y,f\left(\mathbf{x}\right)\right) p_{\mathbf{X},Y}\left(\mathbf{x},y\right) d\mathbf{x}dy, \quad (32)$$

$$= \int_{\mathbb{X}}\int_{\mathbb{Y}} L\left(y,f\left(\mathbf{x}\right)\right) p_{Y|\mathbf{X}}\left(y\right) p_{\mathbf{X}}\left(\mathbf{x}\right) d\mathbf{x}dy, \quad (33)$$

$$= \int_{\mathbb{X}} \rho\left(f\left(\mathbf{x}\right)|\mathbf{x}\right) p_{\mathbf{X}}\left(\mathbf{x}\right) d\mathbf{x}. \quad (34)$$

2 worlds collide !

Théorie fréquentiste la décision pour le cas supervisé

- Minimiser la perte attendue au sens bayésien et fréquentiste est équivalent dans notre cas !
- Cela reste valable pour tout risque intégré du type :

$$\int \mathrm{Risque}\left(\boldsymbol{\theta}_0, \hat{\boldsymbol{\theta}}\right) p\left(\boldsymbol{\theta}_0\right) d\boldsymbol{\theta}_0. \tag{35}$$

$\boxed{\text{Messages importants du chapitre}}$:

- Les pertes classiques mènent à des classifieurs/régresseurs optimaux mais qui nécessitent de connaître $p_{Y|\mathbf{X}}$.
- Les pertes peuvent être *customisées* selon le contexte applicatifs.
- Elles influent directement sur la solution retenue.
- Les approches Bayésiennes et fréquentistes sont équivalentes dans le contexte supervisé.

Notion de bruit : $B = Y - f_0(\mathbf{X})$. Si le bruit en centré alors

$$\begin{aligned} \mathbb{E}[B|X = \mathbf{x}_i] &= 0, \\ \Leftrightarrow \mathbb{E}[Y|X = \mathbf{x}_i] &= f_0(\mathbf{x}_i). \end{aligned} \tag{36}$$