A2DI: Apprentissage statistique

John Klein

Université de Lille - CRIStAL UMR CNRS 9189







- En théorie on veut minimiser *Err_{esp}*.
- En pratique on minisera Err_{train} tout en s'assurant que Err_{train} ne dévie pas de Err_{test}.
- Les solutions minimisant Err_{train} au sens de la théorie de la décision pour des fonctions de perte classiques tournent autour de solutions probabilistes reposant sur la connaissance de la distribution $p_{Y|X}$

- En théorie on veut minimiser *Err_{esp}*.
- En pratique on minisera *Err_{train}* tout en s'assurant que *Err_{train}* ne dévie pas de *Err_{test}*.
- Les solutions minimisant Err_{train} au sens de la théorie de la décision pour des fonctions de perte classiques tournent autour de solutions probabilistes reposant sur la connaissance de la distribution $p_{Y|X}$

- En théorie on veut minimiser *Err_{esp}*.
- En pratique on minisera *Err_{train}* tout en s'assurant que *Err_{train}* ne dévie pas de *Err_{test}*.
- Les solutions minimisant Err_{train} au sens de la théorie de la décision pour des fonctions de perte classiques tournent autour de solutions probabilistes reposant sur la connaissance de la distribution $p_{Y|X}$

- En théorie on veut minimiser *Erresp*.
- En pratique on minisera *Err_{train}* tout en s'assurant que *Err_{train}* ne dévie pas de *Err_{test}*.
- Les solutions minimisant Err_{train} au sens de la théorie de la décision pour des fonctions de perte classiques tournent autour de solutions probabilistes reposant sur la connaissance de la distribution $p_{Y|X}$

Pour tendre vers ces solutions optimales 1 , il faut trouver un moyen de calculer une estimation $\hat{p}_{Y|X}$ grâce à nos données \mathcal{D} . Dans ce chapitre, nous allons étudier différentes méthodes statistiques paramétriques pour atteindre ce but.

John Klein (Lille1) A2DI 2 / 37

^{1.} L'optimalité au sens de la fonction de perte choisie.

Plan du chapitre

- 1 Modèles paramétriques : généralités
- 2 Modèles paramétriques : fit fréquentiste
- 3 Modèles paramétriques : fit Bayésie
- 4 Conclusions

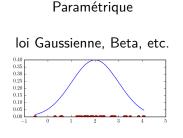
John Klein (Lille1) A2DI 3 / 37

Qu'est ce qu'un modèle paramétrique?

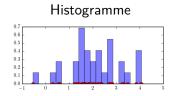
- C'est le choix une classe de distributions paramétrées pour $p_{X,Y}(x,y) = g_{\theta}(x,y)$.
- C'est aussi le choix d'un espace d'hypothèse
 H (ensemble des prédicteurs parmi lesquels on doit choisir).
- En effet, le meilleur prédicteur est étroitement liée à $p_{X,Y}$

John Klein (Lille1) A2DI 4 / 37

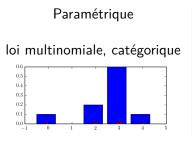
v.a. continue



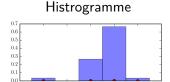
Non-Paramétrique



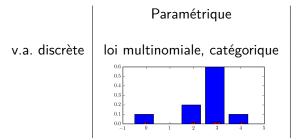
v.a. discrète



Non-Paramétrique

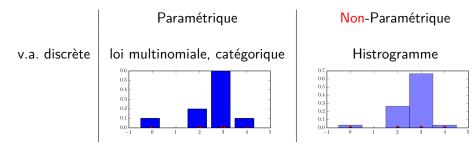


2



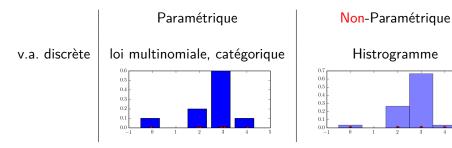
Non-Paramétrique

Est-ce vraiment différent?



Est-ce vraiment différent?

→ pas vraiment, car la distribution catégorique correspond à toutes les distributions discrètes possibles!



Est-ce vraiment différent?

- → pas vraiment, car la distribution catégorique correspond à toutes les distributions discrètes possibles!
- → Aussi possible en continu, si le modèle paramétrique est très général

Modèles paramétriques : catégories

Modèles Génératifs

On cherche $p_{X,Y}$

convergence plus rapide vers quelque chose de pertinent Modèles Discriminatifs

On cherche $p_{Y|X}$

légèremment meilleur quand n est grand

7 / 37

Plan du chapitre

- Modèles paramétriques : généralités
- 2 Modèles paramétriques : fit fréquentiste
- Modèles paramétriques : fit Bayésie
- 4 Conclusions

John Klein (Lille1) A2DI 8 / 37

•

Approche fréquentiste

Rappel : la vraie valeur de θ est fixe et inconnue.

Approche fréquentiste

Rappel : la vraie valeur de θ est fixe et inconnue.

• Je suppose que mes donneés sont i.i.d. et $(\mathbf{x}^{(i)}, y^{(i)})$ vient d'une v.a. $(\mathbf{X}^{(i)}, Y^{(i)}) \sim f_{\theta}$.

Approche fréquentiste

Rappel: la vraie valeur de θ est fixe et inconnue.

- Je suppose que mes donneés sont i.i.d. et $(\mathbf{x}^{(i)}, y^{(i)})$ vient d'une v.a. $(\mathbf{X}^{(i)}, Y^{(i)}) \sim f_{\theta}$.
- La probabilité d'observer $\mathbf{x}^{(i)}$ et $y^{(i)}$ est donc $f_{\theta}\left(\mathbf{x}^{(i)}, y^{(i)}\right)$.

Approche fréquentiste

Rappel: la vraie valeur de θ est fixe et inconnue.

- Je suppose que mes donneés sont i.i.d. et $(\mathbf{x}^{(i)}, y^{(i)})$ vient d'une v.a. $(\mathbf{X}^{(i)}, Y^{(i)}) \sim f_{\theta}$.
- La probabilité d'observer $\mathbf{x}^{(i)}$ et $y^{(i)}$ est donc $f_{\theta}\left(\mathbf{x}^{(i)}, y^{(i)}\right)$.
- ullet La probabilité d'observer ${\mathcal D}$ est donc

$$\prod_{i=1}^{n} f_{\theta} \left(\mathbf{x}^{(i)}, y^{(i)} \right) \tag{1}$$

Approche fréquentiste

Rappel: la vraie valeur de θ est fixe et inconnue.

- Je suppose que mes donneés sont i.i.d. et $(\mathbf{x}^{(i)}, y^{(i)})$ vient d'une v.a. $(\mathbf{X}^{(i)}, Y^{(i)}) \sim f_{\theta}$.
- La probabilité d'observer $\mathbf{x}^{(i)}$ et $y^{(i)}$ est donc $f_{\theta}\left(\mathbf{x}^{(i)}, y^{(i)}\right)$.
- ullet La probabilité d'observer ${\mathcal D}$ est donc

$$\prod_{i=1}^{n} f_{\boldsymbol{\theta}} \left(\mathbf{x}^{(i)}, y^{(i)} \right) \tag{1}$$

 \rightarrow C'est la fonction de vraisemblance $\mathcal{L}(\theta)$.

John Klein (Lille1) A2DI 9 / 37

• J'ai un bon modèle = J'ai un bon θ ,

John Klein (Lille1) A2DI 10 / 37

- J'ai un bon modèle = J'ai un bon θ ,
- J'ai un bon modèle = La proba d'observer \mathcal{D} sous ce modèle est grande,

John Klein (Lille1) A2DI 10 / 37

- J'ai un bon modèle = J'ai un bon θ ,
- J'ai un bon modèle = La proba d'observer ${\mathcal D}$ sous ce modèle est grande,
- Je choisis donc $\theta^* = \arg \max_{\theta \in \Theta} \mathcal{L}(\theta)$!

- J'ai un bon modèle = J'ai un bon θ ,
- J'ai un bon modèle = La proba d'observer ${\cal D}$ sous ce modèle est grande,
- Je choisis donc $\theta^* = \arg\max_{\theta \in \Theta} \mathcal{L}(\theta)$!

Le vecteur θ^* est appelée \max imum likelihood estimate, souvent noté $\hat{\theta}_{MLE}$.

John Klein (Lille1) A2DI 10 / 37

• Je choisis un modèle discriminatif Gaussien :

$$p_{Y|X=\mathbf{x}}(y) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma} e^{-\frac{\left(y - \left(\mathbf{w}^T \cdot \mathbf{x} + b\right)\right)^2}{2\sigma^2}}.$$
 (2)

Je choisis un modèle discriminatif Gaussien :

$$p_{Y|X=\mathbf{x}}(y) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma} e^{-\frac{\left(y - \left(\mathbf{w}^T \cdot \mathbf{x} + b\right)\right)^2}{2\sigma^2}}.$$
 (2)

• J'ai un $\theta =$

• Je choisis un modèle discriminatif Gaussien :

$$p_{Y|X=\mathbf{x}}(y) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma} e^{-\frac{\left(y - \left(\mathbf{w}^T \cdot \mathbf{x} + b\right)\right)^2}{2\sigma^2}}.$$
 (2)

- J'ai un $\theta =$
- J'ai donc la vraisemblance suivante :

$$\mathcal{L}(\boldsymbol{\theta}) = \prod_{i=1}^{n} \frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma} e^{-\frac{\left(y^{(i)} - \left(\mathbf{w}^{T} \cdot \mathbf{x}^{(i)} + b\right)\right)^{2}}{2\sigma^{2}}}$$
(3)

- Maximiser $\mathcal{L}(\theta) = \text{Minimiser NLL}(\theta)$.
- En choisissant une fonction de perte quadratique, montrez que la NLL s'écrit :

$$NLL(\theta) = n \log(\sigma) + \frac{n}{2\sigma^2} \frac{Err_{train}}{err_{train}} + cte$$
 (4)

• Minimiser $NLL(\theta)$ est facile car c'est une fonction convexe.

John Klein (Lille1) A2DI 13 / 37

- Minimiser $NLL(\theta)$ est facile car c'est une fonction convexe.
- $\hat{\theta}_{MLE}$ est donc l'unique minimum global de $NLL(\theta)$,

John Klein (Lille1) A2DI 13 / 37

- Minimiser $NLL(\theta)$ est facile car c'est une fonction convexe.
- $\hat{\theta}_{MLE}$ est donc l'unique minimum global de $NLL(\theta)$,
- ... ou encore l'unique point tel que $\frac{d}{d\theta} NLL(\theta) = 0$.

- Minimiser $NLL(\theta)$ est facile car c'est une fonction convexe.
- $\hat{\theta}_{MLE}$ est donc l'unique minimum global de $\mathrm{NLL}\left(\boldsymbol{\theta} \right)$,
- ... ou encore l'unique point tel que $\frac{d}{d\theta} NLL(\theta) = 0$.
- Concernant les paramètres w et b, on déjà vu en TP que

$$\begin{pmatrix} w_1 \\ \vdots \\ w_d \\ b \end{pmatrix} = \left(\mathbf{X} \mathbf{X}^T \right)^{-1} \mathbf{X} \mathbf{y} \tag{5}$$

- Minimiser $NLL(\theta)$ est facile car c'est une fonction convexe.
- $\hat{\theta}_{MLE}$ est donc l'unique minimum global de $NLL(\theta)$,
- ... ou encore l'unique point tel que $\frac{d}{d\theta} NLL(\theta) = 0$.
- Concernant les paramètres w et b, on déjà vu en TP que

$$\begin{pmatrix} w_1 \\ \vdots \\ w_d \\ b \end{pmatrix} = \left(\mathbf{X} \mathbf{X}^T \right)^{-1} \mathbf{X} \mathbf{y} \tag{5}$$

avec

$$\mathbf{X} = \left(\begin{bmatrix} \mathbf{x}^{(1)} \\ 1 \end{bmatrix} \dots \begin{bmatrix} \mathbf{x}^{(n)} \\ 1 \end{bmatrix} \right) \text{ et } \mathbf{y} = \begin{pmatrix} y^{(1)} \\ \vdots \\ y^{(n)} \end{pmatrix}$$
(6)

• Concernant le paramètre σ , montrez que son estimé MLE est l'écart type empirique :

$$\hat{\sigma}_{MLE} = \sqrt{\frac{1}{n} \sum_{i=1}^{n} (y^{(i)} - \mathbf{w}^{T}.\mathbf{x}^{(i)} - b)^{2}}.$$
 (7)

- $\hat{\sigma}_{MLE}$ ne sert à rien pour la prédiction qui est $\mathbb{E}[Y|X] = \hat{\mathbf{w}}^T.\mathbf{x}^{(i)} + \hat{b}$
- $\hat{\sigma}_{MLE}$ sert à quantifier notre confiance en la prédiction $\mathbb{E}[Y|X]$.

John Klein (Lille1) A2DI 15 / 37

Comment trouver un modèle qui colle à mes données? Approche MLE : exemple du classifieur naif bayésien

• Je choisis un modèle génératif et factorisable comme suit :

$$p_{\mathbf{X},Y}(\mathbf{x},c) = p_Y(c) p_{\mathbf{X}|Y=c}(\mathbf{x}), \qquad (8)$$

$$= p_{Y}(c) \prod_{j=1}^{d} p_{X_{j}|Y=c}(x_{j}).$$
 (9)

Je choisis un modèle génératif et factorisable comme suit :

$$p_{\mathbf{X},Y}(\mathbf{x},c) = p_Y(c) p_{\mathbf{X}|Y=c}(\mathbf{x}), \qquad (8)$$

$$= p_{Y}(c) \prod_{j=1}^{d} p_{X_{j}|Y=c}(x_{j}).$$
 (9)

 Quelle hypothèse d'indépendance est nécessaire pour écrire cette factorisation?

Je choisis un modèle génératif et factorisable comme suit :

$$p_{\mathbf{X},Y}(\mathbf{x},c) = p_Y(c) p_{\mathbf{X}|Y=c}(\mathbf{x}), \qquad (8)$$

$$= p_{Y}(c) \prod_{j=1}^{d} p_{X_{j}|Y=c}(x_{j}).$$
 (9)

- Quelle hypothèse d'indépendance est nécessaire pour écrire cette factorisation?
- $p_{X|Y=c}(x)$ est appelée class conditional density.

Je choisis un modèle génératif et factorisable comme suit :

$$p_{\mathbf{X},Y}(\mathbf{x},c) = p_Y(c) p_{\mathbf{X}|Y=c}(\mathbf{x}), \qquad (8)$$

$$= p_{Y}(c) \prod_{j=1}^{d} p_{X_{j}|Y=c}(x_{j}).$$
 (9)

- Quelle hypothèse d'indépendance est nécessaire pour écrire cette factorisation?
- $p_{X|Y=c}(x)$ est appelée class conditional density.
- Supposons que $X_j|Y \sim \mathcal{N}\left(\mu_{i,c}, \sigma_{j,c}\right)$ et $Y \sim \operatorname{Cat}\left(\pi\right)$. En notant $\ell = \sharp \mathcal{C}$, an a :

$$\theta =$$
 (10)

• Etant donné mon choix de distribution, l'équation (9) s'écrit pour couple $\left(\mathbf{x}^{(i)},c^{(i)}\right)$

$$p_{\mathbf{X},Y}\left(\mathbf{x}^{(i)},c^{(i)}\right) = \pi_{c^{(i)}} \prod_{j=1}^{d} \frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma_{j,c^{(i)}}} e^{-\frac{\left(x_{j}^{(i)}-\mu_{j,c^{(i)}}\right)^{2}}{2\sigma_{j,c^{(i)}}^{2}}}.$$
 (11)

• Etant donné mon choix de distribution, l'équation (9) s'écrit pour couple $(\mathbf{x}^{(i)}, c^{(i)})$

$$p_{\mathbf{X},Y}\left(\mathbf{x}^{(i)},c^{(i)}\right) = \pi_{c^{(i)}} \prod_{j=1}^{d} \frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma_{j,c^{(i)}}} e^{-\frac{\left(x_{j}^{(i)} - \mu_{j,c^{(i)}}\right)^{2}}{2\sigma_{j,c^{(i)}}^{2}}}.$$
 (11)

• La vraisemblance s'écrit donc :

$$\mathcal{L}(\boldsymbol{\theta}) = \prod_{i=1}^{n} \pi_{c^{(i)}} \prod_{i=1}^{d} \frac{1}{\sqrt{2\pi} \sigma_{i,c^{(i)}}} e^{-\frac{\left(x_{j}^{(i)} - \mu_{j,c^{(i)}}\right)^{2}}{2\sigma_{j,c^{(i)}}^{2}}}.$$
 (12)

John Klein (Lille1) A2DI 17 / 37

• Passons à la NLL :

$$NLL\left(\boldsymbol{\theta}\right) = \sum_{i=1}^{n} \log \pi_{c^{(i)}} + \sum_{j=1}^{d} -\log \left(\sqrt{2\pi}\sigma_{j,c^{(i)}}\right) - \frac{\left(x_{j}^{(i)} - \mu_{j,c^{(i)}}\right)^{2}}{2\sigma_{j,c^{(i)}}^{2}}.$$

John Klein (Lille1) 18 / 37^t

Passons à la NLL :

$$NLL\left(\boldsymbol{\theta}\right) = \sum_{i=1}^{n} \log \pi_{c^{(i)}} + \sum_{j=1}^{d} -\log \left(\sqrt{2\pi}\sigma_{j,c^{(i)}}\right) - \frac{\left(x_{j}^{(i)} - \mu_{j,c^{(i)}}\right)^{2}}{2\sigma_{j,c^{(i)}}^{2}}.$$

• Cette NLL est une fonction convexe de θ

John Klein (Lille1) A2DI 18 / 37

Passons à la NLL :

$$NLL\left(\boldsymbol{\theta}\right) = \sum_{i=1}^{n} \log \pi_{c^{(i)}} + \sum_{j=1}^{d} -\log \left(\sqrt{2\pi}\sigma_{j,c^{(i)}}\right) - \frac{\left(x_{j}^{(i)} - \mu_{j,c^{(i)}}\right)^{2}}{2\sigma_{j,c^{(i)}}^{2}}.$$

- Cette NLL est une fonction convexe de θ
- Intéressons nous d'abord aux π_{c_k} . On doit résoudre :

$$\frac{\partial}{\partial \pi_{c_k}} \mathrm{NLL}(\boldsymbol{\theta}) = 0,$$

Passons à la NLL :

$$NLL(\boldsymbol{\theta}) = \sum_{i=1}^{n} \log \pi_{c^{(i)}} + \sum_{j=1}^{d} -\log \left(\sqrt{2\pi}\sigma_{j,c^{(i)}}\right) - \frac{\left(x_{j}^{(i)} - \mu_{j,c^{(i)}}\right)^{2}}{2\sigma_{j,c^{(i)}}^{2}}.$$

- Cette NLL est une fonction convexe de θ
- Intéressons nous d'abord aux π_{c_k} . On doit résoudre :

$$\frac{\partial}{\partial \pi_{c_{k}}} \mathrm{NLL}(\boldsymbol{\theta}) = 0,$$

sous la contrainte $\sum_{k=1}^{\ell} \pi_{c_k} = 1$.

John Klein (Lille1) A2DI 18 / 37

Comment trouver un modèle qui colle à mes données?



Pause Optim!

- Comment minimiser une fonction objectif sous une contrainte d'égalité?
- Astuce du Lagrangien :
 - On rajoute (temporairement) un nouveau paramètre λ .

Comment trouver un modèle qui colle à mes données?



Pause Optim!

- Comment minimiser une fonction objectif sous une contrainte d'égalité?
- Astuce du Lagrangien :
 - On rajoute (temporairement) un nouveau paramètre λ .
 - On modifie la fonction objectif en y incorporant la contrainte d'égalité, par exemple :

$$J(\boldsymbol{\theta}, \boldsymbol{\lambda}) = \text{NLL}(\boldsymbol{\theta}) + \boldsymbol{\lambda} \left(1 - \sum_{k=1}^{\ell} \pi_{c_k}\right).$$

Comment trouver un modèle qui colle à mes données?



Pause Optim!

- Comment minimiser une fonction objectif sous une contrainte d'égalité?
- Astuce du Lagrangien :
 - On rajoute (temporairement) un nouveau paramètre λ .
 - On modifie la fonction objectif en y incorporant la contrainte d'égalité, par exemple :

$$J(\boldsymbol{\theta}, \boldsymbol{\lambda}) = \text{NLL}(\boldsymbol{\theta}) + \boldsymbol{\lambda} \left(1 - \sum_{k=1}^{\ell} \pi_{c_k}\right).$$

• La fonction objectif modifiée J reste convexe et on a :

$$\frac{\partial}{\partial \lambda} J(\boldsymbol{\theta}, \lambda) = 0 \quad \Leftrightarrow \quad \sum_{k=1}^{\ell} \pi_{c_k} = 1.$$

• Nous cherchons donc à présent :

$$\frac{\partial}{\partial \pi_{c_k}} J(\boldsymbol{\theta}) = 0,$$

(13)

20 / 37

• Nous cherchons donc à présent :

$$\frac{\partial}{\partial \pi_{c_k}} J(\boldsymbol{\theta}) = 0,$$

$$\Leftrightarrow \frac{\partial}{\partial \pi_{c_k}} \text{NLL}(\boldsymbol{\theta}) - \lambda = 0,$$
(13)

(14)

Nous cherchons donc à présent :

$$\frac{\partial}{\partial \pi_{c_k}} J(\boldsymbol{\theta}) = 0,$$

$$\Leftrightarrow \frac{\partial}{\partial \pi_{c_k}} \text{NLL}(\boldsymbol{\theta}) - \boldsymbol{\lambda} = 0, \tag{13}$$

$$\Leftrightarrow \frac{\partial}{\partial \pi_{c_k}} \sum_{i=1}^n \log \pi_{c^{(i)}} = \lambda, \tag{14}$$

(15)

Nous cherchons donc à présent :

$$\frac{\partial}{\partial \pi_{c_k}} J(\boldsymbol{\theta}) = 0,$$

$$\Leftrightarrow \frac{\partial}{\partial \pi_{c_k}} \text{NLL}(\boldsymbol{\theta}) - \lambda = 0,$$
(13)

$$\Rightarrow \frac{\sigma}{\partial \pi_{c_k}} \text{NLL}(\boldsymbol{\theta}) - \lambda = 0, \tag{13}$$

$$\Leftrightarrow \frac{\partial}{\partial \pi_{c_k}} \sum_{i=1}^n \log \pi_{c^{(i)}} = \lambda, \tag{14}$$

$$\Leftrightarrow n_k \times \frac{\partial}{\partial \pi_{c_k}} \log \pi_{c_k} = \lambda, \tag{15}$$

(16)

Nous cherchons donc à présent :

$$\frac{\partial}{\partial \pi_{c_k}} J(\boldsymbol{\theta}) = 0,$$

$$\Leftrightarrow \frac{\partial}{\partial \pi_{c_k}} \text{NLL}(\boldsymbol{\theta}) - \lambda = 0,$$
(13)

$$\Rightarrow \frac{\partial}{\partial \pi_{c_k}} \text{NLL}(\boldsymbol{\theta}) - \lambda = 0, \tag{13}$$

$$\Leftrightarrow \frac{\partial}{\partial \pi_{c_k}} \sum_{i=1}^n \log \pi_{c^{(i)}} = \lambda, \tag{14}$$

$$\Leftrightarrow n_k \times \frac{\partial}{\partial \pi_{c_k}} \log \pi_{c_k} = \lambda, \tag{15}$$

$$\Leftrightarrow \frac{n_k}{\pi_{C_k}} = \lambda. \tag{16}$$

• Cette relation est vraie pour tout k, d'où

$$\sum_{k=1}^{\ell} n_k = \sum_{k=1}^{\ell} \lambda \pi_{c_k}, \tag{17}$$

(18)

• Cette relation est vraie pour tout k, d'où

$$\sum_{k=1}^{\ell} n_k = \sum_{k=1}^{\ell} \lambda \pi_{c_k}, \tag{17}$$

$$\Leftrightarrow n = \lambda \sum_{k=1}^{\ell} \pi_{c_k}, \tag{18}$$

(19)

• Cette relation est vraie pour tout k, d'où

$$\sum_{k=1}^{\ell} n_k = \sum_{k=1}^{\ell} \lambda \pi_{c_k}, \tag{17}$$

$$\Leftrightarrow n = \lambda \sum_{k=1}^{\ell} \pi_{c_k}, \tag{18}$$

$$\Leftrightarrow n = \lambda. \tag{19}$$

• Cette relation est vraie pour tout k, d'où

$$\sum_{k=1}^{\ell} n_k = \sum_{k=1}^{\ell} \lambda \pi_{c_k}, \tag{17}$$

$$\Leftrightarrow n = \lambda \sum_{k=1}^{\ell} \pi_{c_k}, \tag{18}$$

$$\Leftrightarrow n = \lambda. \tag{19}$$

• Au final, il vient :

$$\hat{\pi}_{c_k,MLE} = \frac{n_k}{n}.$$
 (20)

• Passons à présent aux paramètres suivants : μ_{j,c_k}

$$\frac{\partial}{\partial \mu_{j,c_k}} \text{NLL}(\boldsymbol{\theta}) = 0, \tag{21}$$

(22)

22 / 37

• Passons à présent aux paramètres suivants : μ_{j,c_k}

$$\frac{\partial}{\partial \mu_{j,c_k}} \text{NLL}(\boldsymbol{\theta}) = 0, \qquad (21)$$

$$\Leftrightarrow \sum_{i=1}^{n} \sum_{j=1}^{d} -\frac{1}{2\sigma_{j,c^{(i)}}^{2}} \frac{\partial}{\partial \mu_{j,c_{k}}} \left(x_{j}^{(i)} - \mu_{j,c^{(i)}} \right)^{2} = 0, \qquad (22)$$

(23)

• Passons à présent aux paramètres suivants : μ_{j,c_k}

$$\frac{\partial}{\partial \mu_{j,c_k}} \text{NLL}(\boldsymbol{\theta}) = 0, \qquad (21)$$

$$\Leftrightarrow \sum_{i=1}^{n} \sum_{j=1}^{d} -\frac{1}{2\sigma_{j,c^{(i)}}^{2}} \frac{\partial}{\partial \mu_{j,c_{k}}} \left(x_{j}^{(i)} - \mu_{j,c^{(i)}} \right)^{2} = 0, \qquad (22)$$

$$\Leftrightarrow \sum_{r=1}^{n_k} \sum_{j=1}^d -\frac{1}{2\sigma_{j,c_k}^2} \frac{\partial}{\partial \mu_{j,c_k}} \left(x_j^{(r)} - \mu_{j,c_k} \right)^2 = 0, \qquad (23)$$

(24)

• Passons à présent aux paramètres suivants : μ_{j,c_k}

$$\frac{\partial}{\partial \mu_{j,c_k}} \text{NLL}(\boldsymbol{\theta}) = 0, \qquad (21)$$

$$\Leftrightarrow \sum_{i=1}^{n} \sum_{j=1}^{d} -\frac{1}{2\sigma_{j,c^{(i)}}^{2}} \frac{\partial}{\partial \mu_{j,c_{k}}} \left(x_{j}^{(i)} - \mu_{j,c^{(i)}} \right)^{2} = 0, \qquad (22)$$

$$\Leftrightarrow \sum_{r=1}^{n_k} \sum_{j=1}^d -\frac{1}{2\sigma_{j,c_k}^2} \frac{\partial}{\partial \mu_{j,c_k}} \left(x_j^{(r)} - \mu_{j,c_k} \right)^2 = 0, \tag{23}$$

$$\Leftrightarrow -\frac{1}{2\sigma_{j,c_k}^2} \sum_{r=1}^{n_k} \frac{\partial}{\partial \mu_{j,c_k}} \left(x_j^{(r)} - \mu_{j,c_k} \right)^2 = 0.$$
 (24)

• Calcul des μ_{j,c_k} (suite) :

$$\Leftrightarrow -\frac{1}{2\sigma_{j,c_k}^2} \sum_{r=1}^{n_k} 2 \times -1 \times \left(x_j^{(r)} - \mu_{j,c_k} \right) = 0, \tag{25}$$

(26)

• Calcul des μ_{j,c_k} (suite) :

$$\Leftrightarrow -\frac{1}{2\sigma_{i,c_k}^2} \sum_{r=1}^{n_k} 2 \times -1 \times \left(x_j^{(r)} - \mu_{j,c_k} \right) = 0, \tag{25}$$

$$\Leftrightarrow \sum_{r=1}^{n_k} \left(x_j^{(r)} - \mu_{j,c_k} \right) = 0, \tag{26}$$

(27)

• Calcul des μ_{j,c_k} (suite) :

$$\Leftrightarrow -\frac{1}{2\sigma_{j,c_k}^2} \sum_{r=1}^{n_k} 2 \times -1 \times \left(x_j^{(r)} - \mu_{j,c_k} \right) = 0, \tag{25}$$

$$\Leftrightarrow \sum_{r=1}^{n_k} \left(x_j^{(r)} - \mu_{j,c_k} \right) = 0, \tag{26}$$

$$\Leftrightarrow \mu_{j,c_k} = \frac{1}{n_k} \sum_{r=1}^{n_k} x_j^{(r)} \quad (27)$$

• Calcul des μ_{j,c_k} (suite) :

$$\Leftrightarrow -\frac{1}{2\sigma_{j,c_k}^2} \sum_{r=1}^{n_k} 2 \times -1 \times \left(x_j^{(r)} - \mu_{j,c_k} \right) = 0, \tag{25}$$

$$\Leftrightarrow \sum_{r=1}^{m_k} \left(x_j^{(r)} - \mu_{j,c_k} \right) = 0, \tag{26}$$

$$\Leftrightarrow \mu_{j,c_k} = \frac{1}{n_k} \sum_{r=1}^{n_k} x_j^{(r)} \quad (27)$$

En conclusion, $\hat{\mu}_{j,c_k,MLE}$ est la moyenne empirique des exemples de la classe c_k pour la dimension j.

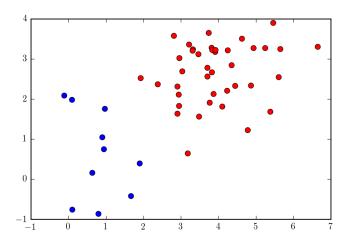
- Il ne reste plus que les paramètres suivants : σ_{j,c_k}
- On montrerait de même que $\hat{\sigma}_{j,c_k,MLE}^2$ est la variance empirique des exemples de la classe c_k pour la dimension j:

$$\hat{\sigma}_{j,c_k,MLE}^2 = \frac{1}{n_k} \sum_{r=1}^{n_k} \left(x_j^{(r)} - \hat{\mu}_{j,c_k,MLE} \right)^2$$
 (28)

→ Bon exercice à faire chez soi ..

- Le classifieur naïf bayésien est un des modèles génératifs les plus utilisés.
- Il est simple à *fitter* et présente peu de risque d'*overfitting* du fait des hypothèses simplificatrices limitant le nombre de paramètres.

• Résumé des opérations :



Plan du chapitre

- Modèles paramétriques : généralités
- 2 Modèles paramétriques : fit fréquentiste
- 3 Modèles paramétriques : fit Bayésien
- 4 Conclusions

John Klein (Lille1) A2DI 27 / 37

Comment trouver un modèle qui colle à mes données? Approche Bayésienne

•

Comment trouver un modèle qui colle à mes données? Approche Bayésienne

Rappel: le vecteur θ est aléatoire et j'ai une connaissance a priori concernant ses valeurs probables.

•

Comment trouver un modèle qui colle à mes données? Approche Bayésienne

Rappel: le vecteur θ est aléatoire et j'ai une connaissance a priori concernant ses valeurs probables.

• Concernant mes donneés, je fais les mêmes hypothèses que dans le cas fréquentiste : données i.i.d. et $(\mathbf{x}^{(i)}, y^{(i)})$ vient d'une v.a. $(\mathbf{X}^{(i)}, Y^{(i)}) \sim f_{\theta}$.

Rappel: le vecteur θ est aléatoire et j'ai une connaissance a priori concernant ses valeurs probables.

- Concernant mes données, je fais les mêmes hypothèses que dans le cas fréquentiste : données i.i.d. et $(\mathbf{x}^{(i)}, y^{(i)})$ vient d'une v.a. $(\mathbf{X}^{(i)}, Y^{(i)}) \sim f_{\theta}$.
- \rightarrow C'est encore la fonction de vraisemblance $\mathcal{L}(\theta)$ qui résume l'information venant de mes données.

Rappel: le vecteur θ est aléatoire et j'ai une connaissance a priori concernant ses valeurs probables.

- Concernant mes donneés, je fais les mêmes hypothèses que dans le cas fréquentiste : données i.i.d. et $(\mathbf{x}^{(i)}, y^{(i)})$ vient d'une v.a. $(\mathbf{X}^{(i)}, Y^{(i)}) \sim f_{\theta}$.
- \rightarrow C'est encore la fonction de vraisemblance $\mathcal{L}(\theta)$ qui résume l'information venant de mes données.
- Je dispose en plus d'un prior p_{θ} .
- Je cherche à présent la posterior sur θ :

$$p_{\theta \mid \text{donn\'ees}} = \frac{p_{\text{donn\'ees}\mid \theta} \times p_{\theta}}{p_{\text{donn\'ees}}}.$$
 (29)

Rappel : le vecteur θ est aléatoire et j'ai une connaissance a priori concernant ses valeurs probable.

• Je cherche à présent la posterior sur θ :

$$p_{\theta | \text{donn\'ees}} = \frac{p_{\text{donn\'ees}|\theta} \times p_{\theta}}{p_{\text{donn\'ees}}},$$
 (30)

(31)

Rappel: le vecteur θ est aléatoire et j'ai une connaissance a priori concernant ses valeurs probable.

• Je cherche à présent la posterior sur θ :

$$p_{\theta | \text{donn\'ees}} = \frac{p_{\text{donn\'ees}|\theta} \times p_{\theta}}{p_{\text{donn\'ees}}},$$
 (30)

$$\rho_{\theta|\mathcal{D}} = \frac{\mathcal{L}(\theta) \times p_{\theta}}{p_{\mathcal{D}}},$$
(31)

(32)

Rappel: le vecteur θ est aléatoire et j'ai une connaissance a priori concernant ses valeurs probable.

• Je cherche à présent la posterior sur θ :

$$p_{\theta | \text{donn\'ees}} = \frac{p_{\text{donn\'ees}|\theta} \times p_{\theta}}{p_{\text{donn\'ees}}},$$
 (30)

$$p_{\theta|\mathcal{D}} = \frac{\mathcal{L}(\theta) \times p_{\theta}}{p_{\mathcal{D}}}, \tag{31}$$

$$p_{\theta|\mathcal{D}} = \frac{\mathcal{L}(\theta) \times p_{\theta}}{\int \mathcal{L}(\theta) \times p_{\theta} d\theta}$$
 (32)

29 / 37

• J'ai un bon modèle = J'ai un bon θ ,

John Klein (Lille1) A2DI 30 / 37

- J'ai un bon modèle = J'ai un bon θ ,
- J'ai un bon modèle = La proba de θ ayant observé $\mathcal D$ sous ce modèle est grande,

John Klein (Lille1) A2DI 30 / 37

- J'ai un bon modèle = J'ai un bon θ ,
- J'ai un bon modèle = La proba de θ ayant observé $\mathcal D$ sous ce modèle est grande,
- Je choisis donc $\theta^* = \underset{\theta \in \Theta}{\operatorname{arg max}} p_{\theta|\mathcal{D}}!$

- J'ai un bon modèle = J'ai un bon θ ,
- J'ai un bon modèle = La proba de θ ayant observé $\mathcal D$ sous ce modèle est grande,
- Je choisis donc $\theta^* = \arg\max_{\theta \in \Theta} p_{\theta|\mathcal{D}}!$

Le vecteur θ^* est appelée maximum a posteriori estimate, souvent noté $\hat{\theta}_{MAP}$.

 Si mon seul but est de maximiser la posterior, je peux me contenter d'étudier

$$\tilde{p}_{\theta|\mathcal{D}} = \mathcal{L}\left(\boldsymbol{\theta}\right) \times p_{\theta} \quad \propto \quad p_{\theta|\mathcal{D}}$$
 (33)

John Klein (Lille1) A2DI 31 / 37

 Si mon seul but est de maximiser la posterior, je peux me contenter d'étudier

$$\tilde{p}_{\theta|\mathcal{D}} = \mathcal{L}(\theta) \times p_{\theta} \propto p_{\theta|\mathcal{D}}$$
 (33)

• $\tilde{p}_{\theta|\mathcal{D}}$ n'est pas une probabilité car elle n'est pas normalisée.

John Klein (Lille1) A2DI 31 / 37

 Si mon seul but est de maximiser la posterior, je peux me contenter d'étudier

$$\tilde{p}_{\theta|\mathcal{D}} = \mathcal{L}\left(\boldsymbol{\theta}\right) \times p_{\theta} \quad \propto \quad p_{\theta|\mathcal{D}}$$
 (33)

- $\tilde{p}_{\theta|\mathcal{D}}$ n'est pas une probabilité car elle n'est pas normalisée.
- Si j'ai besoin d'avoir de savoir à quel point je peux avoir confiance en $\hat{\theta}_{MAP}$, il faut nécessairement avoir la distribution normalisée.

• Je choisis un modèle discriminatif Gaussien :

$$p_{Y|X=\mathbf{x}}(y) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma} e^{-\frac{\left(y - \left(\mathbf{w}^T \cdot \mathbf{x} + b\right)\right)^2}{2\sigma^2}}.$$
 (34)

John Klein (Lille1) A2DI 32 / 37

• Je choisis un modèle discriminatif Gaussien :

$$p_{Y|X=\mathbf{x}}(y) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma} e^{-\frac{\left(y - \left(\mathbf{w}^T \cdot \mathbf{x} + b\right)\right)^2}{2\sigma^2}}.$$
 (34)

• J'ai (toujours) un $\boldsymbol{\theta} = [\mathbf{w} \ b \ \sigma]^T$

John Klein (Lille1) A2DI 32 / 37

• Je choisis un modèle discriminatif Gaussien :

$$p_{Y|X=\mathbf{x}}(y) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma} e^{-\frac{\left(y - \left(\mathbf{w}^T \cdot \mathbf{x} + b\right)\right)^2}{2\sigma^2}}.$$
 (34)

- J'ai (toujours) un $\boldsymbol{\theta} = [\mathbf{w} \ b \ \sigma]^T$
- J'ai la vraisemblance suivante :

$$\mathcal{L}(\boldsymbol{\theta}) = \prod_{i=1}^{n} \frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma} e^{-\frac{\left(y^{(i)} - \left(\mathbf{w}^{T} \cdot \mathbf{x}^{(i)} + b\right)\right)^{2}}{2\sigma^{2}}}$$
(35)

• Supposons à présent que j'ai un *prior* gaussien sur uniquement sur les paramètres **w** et *b*.

$$p_{\mathbf{w},b}(\mathbf{w},b) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma_0} e^{-\frac{\begin{bmatrix} \mathbf{w} & b \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} \mathbf{w} \\ b \end{bmatrix}}{2\sigma_0^2}}.$$
 (36)

• Supposons à présent que j'ai un *prior* gaussien sur uniquement sur les paramètres **w** et *b*.

$$p_{\mathbf{w},b}(\mathbf{w},b) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma_0} e^{-\frac{\begin{bmatrix} \mathbf{w} & b \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} \mathbf{w} \\ b \end{bmatrix}}{2\sigma_0^2}}.$$
 (36)

 Cela signifie qu'au départ, je considère que des valeurs proches de 0 pour w et b sont plus probables.

 Supposons à présent que j'ai un prior gaussien sur uniquement sur les paramètres w et b.

$$p_{\mathbf{w},b}(\mathbf{w},b) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma_0} e^{-\frac{\begin{bmatrix} \mathbf{w} & b \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} \mathbf{w} \\ b \end{bmatrix}}{2\sigma_0^2}}.$$
 (36)

- Cela signifie qu'au départ, je considère que des valeurs proches de 0 pour w et b sont plus probables.
- Concernant le paramètre du bruit σ , je vais me contenter du MLE.

• Supposons à présent que j'ai un *prior* gaussien sur uniquement sur les paramètres **w** et *b*.

$$p_{\mathbf{w},b}(\mathbf{w},b) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma_0} e^{-\frac{\begin{bmatrix} \mathbf{w} & b \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} \mathbf{w} \\ b \end{bmatrix}}{2\sigma_0^2}}.$$
 (36)

- Cela signifie qu'au départ, je considère que des valeurs proches de 0 pour w et b sont plus probables.
- Concernant le paramètre du bruit σ , je vais me contenter du MLE.
- On a donc la *posterior* non normalisée suivante :

$$\tilde{p}_{\theta|\mathcal{D}}(\mathbf{w}, b, \sigma) = \prod_{i=1}^{n} \frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma} e^{-\frac{\left(y^{(i)} - \left(\mathbf{w}^{T} \cdot \mathbf{x}^{(i)} + b\right)\right)^{2}}{2\sigma^{2}}} \times \frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma_{0}} e^{-\frac{\left[\mathbf{w} \quad b\right] \cdot \begin{bmatrix} \mathbf{w} \\ b \end{bmatrix}}{2\sigma_{0}^{2}}}$$

• Si on utilise l'opération permettant de passer à la NLL, on obtient la fonction objectif *J* suivante :

$$J(\mathbf{w}, b, \sigma) = \text{NLL}(\mathbf{w}, b, \sigma) - \log\left(\sqrt{2\pi}\sigma_0\right) - \frac{\begin{bmatrix} \mathbf{w} & b \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} \mathbf{w} \\ b \end{bmatrix}}{2\sigma_0^2}.$$
 (38)

John Klein (Lille1) A2DI 34 / 37

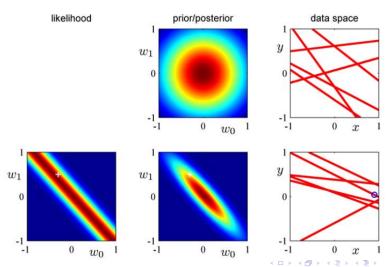
 Si on utilise l'opération permettant de passer à la NLL, on obtient la fonction objectif J suivante :

$$J(\mathbf{w}, b, \sigma) = \text{NLL}(\mathbf{w}, b, \sigma) - \log\left(\sqrt{2\pi}\sigma_0\right) - \frac{\begin{bmatrix} \mathbf{w} & b \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} \mathbf{w} \\ b \end{bmatrix}}{2\sigma_0^2}.$$
 (38)

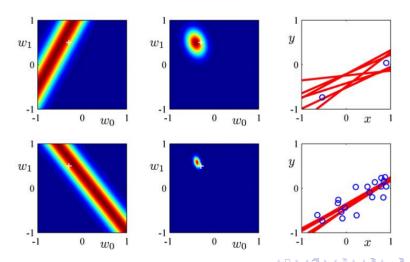
- Le terme $\log\left(\sqrt{2\pi}\sigma_0\right)$ est constant par rapport aux paramètres recherchés. Il peut donc être éliminé de la fonction J.
- Le terme $\frac{\begin{bmatrix} \mathbf{w} & b \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} \mathbf{w} \\ b \end{bmatrix}}{2\sigma_0^2}$ s'appelle terme de régularisation. Il limite les degrés de liberté du modèle. Il permet de lutter contre l'overfitting.

John Klein (Lille1) A2DI 34 / 37

Comment trouver un modèle qui colle à mes données? Approche MAP : exemple de régression linéaire le retour.. Illustration de l'influence du *prior*



Comment trouver un modèle qui colle à mes données? Approche MAP : exemple de régression linéaire le retour.. Illustration de l'influence du *prior*



Messages importants du chapitre :

- En se dotant d'un modèle paramétrique, on parvient à estimer $p_{X,Y|\theta}$ à partir des données.
- Cette distribution est utilisée dans les classifieurs/régresseurs optimaux au sens des pertes classiques.
- Le *prior* est dominé par la *likelihood* quand *n* croît.

John Klein (Lille1) A2DI 37 / 37