Éléments de théorie de l'apprentissage

S. Herbin

stephane.herbin@onera.fr

Cours précédents

- Principes généraux d'apprentissage : données apprentissage/validation/test, optimisation, évaluation.
- Plusieurs algorithmes de *classification supervisée* : plus proche voisin, classifieur Bayésien, arbres de décision.

Objectifs de ce cours

- Pourquoi ça marche : justifications théoriques, comment ça s'exprime.
- Domaine : « Statistical Machine Learning » ou « Computational Learning Theory »

Eléments de théorie de l'apprentissage statistique

Généralisation

Biais et variance

Régularisation

Validation croisée

Minimisation du risque empirique

PAC learning

Caractériser les familles de prédicteurs

Domaine d'utilisation

Et le deep learning ?

Généralisation

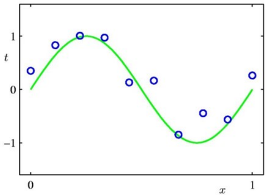
Régression

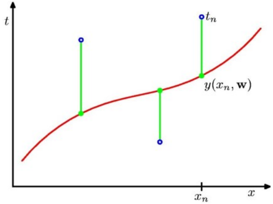
- La courbe verte est la véritable fonction $f(x)$ à estimer – mais inconnue.
- Les données $D_n = \{(x_i, y_i)\}_{i=1}^{n}$ sont considérées comme échantillonnées en x et bruitées en y par ϵ :

$$y = f(x) + \epsilon$$

- On cherche un prédicteur $f(x; \mathbf{w})$ paramétré par $\mathbf{w}$ qui minimise l'erreur de régression :

$$E_{\mathrm{RMS}} = \sqrt{\frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n}(y_i - f(x_i; \mathbf{w}))^2}$$





Modèle linéaire généralisé

- On va recherche le prédicteur comme combinaison linéaire de fonctions de base $\phi_k(x)$:

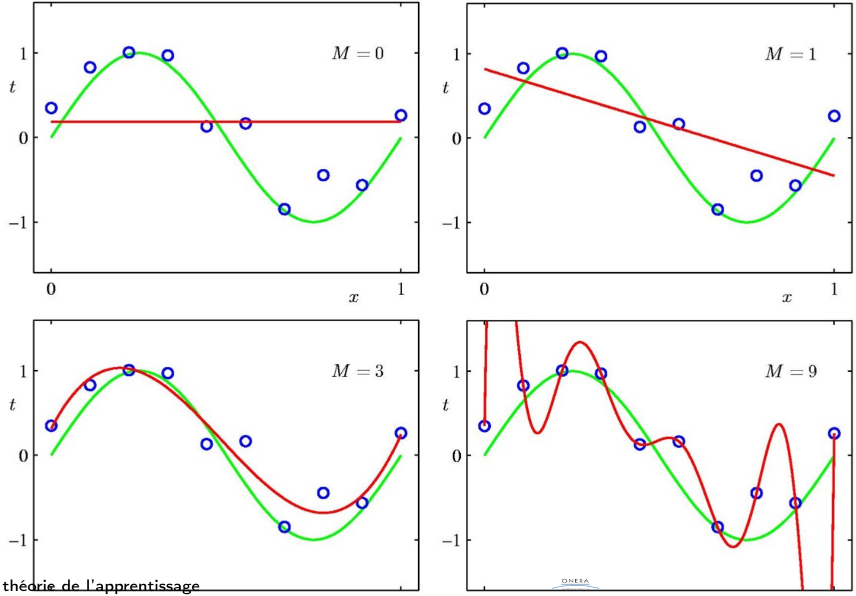
$$\begin{aligned} f(x; \mathbf{w}) &= w_0.\phi_0(x) + w_1.\phi_1(x) + \cdots + w_M.\phi_M(x) \\ &= \mathbf{w}^t.\phi(x) \end{aligned}$$

  où $\mathbf{w} = [w_0, w_1, \ldots w_M]^t$ et $\phi(x) = [\phi_0(x), \phi_1(x), \ldots \phi_M(x)]^t$.
- Si les fonctions de base sont $\phi_k(x) = x^k$, les prédicteurs sont à chercher dans la famille des polynômes de degré M.
- La minimisation de E_{RMS} donne la solution aux moindres carrés :

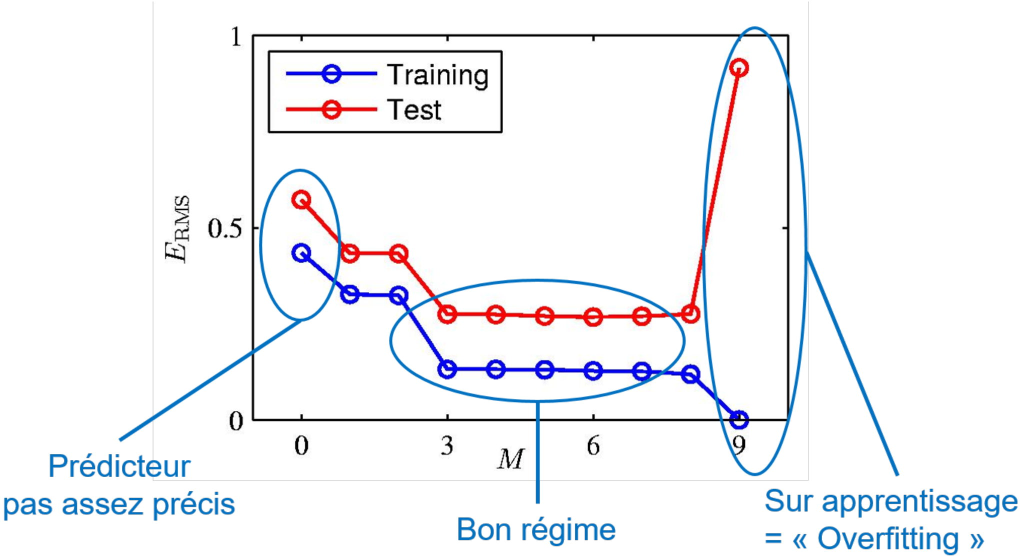
$$\mathbf{w}_{\mathrm{RMS}} = (\mathbf{\Phi}^t\mathbf{\Phi})^{-1}\mathbf{\Phi}^t\mathbf{y}$$

  où $\mathbf{\Phi}$ est la matrice de taille $n \times M + 1$ définie par $\Phi_{i,k} = \phi_k(x_i)$ et $\mathbf{y} = [y_1, y_2 \ldots y_n]^t$.

Comportement des prédicteurs



Evaluation des prédicteurs



Généralisation

Train & Test

- L'**erreur de généralisation** est l'erreur commise sur les données nouvelles (« non vues »).
- Elle est en général estimée par les données de **test**.
- Les données d'**apprentissage** sont utilisées comme moyen de modélisation dans le critère à optimiser.

Deux situations à contrôler (ou éviter)

- **Simplisme** : modélisation trop grossière pour rendre compte de la variété des données
  Erreurs d'apprentissage et de test importantes
- **Sur-apprentissage (« Overfitting »)** : modèle trop complexe se spécialisant sur les données d'apprentissage
  Écart important entre erreur d'apprentissage et erreur de test

Biais et variance

Biais et variance

Exemple de la régression : $y = f(\mathbf{x}) + \epsilon$
Il y a deux sources d'aléatoire :

- Le bruit : ϵ (un même $\mathbf{x}$ peut produire différents y)
- L'échantillonnage des données d'apprentissage : D_n

On définit pour un prédicteur appris $\hat{f}_{D_n}(\mathbf{x})$:

Erreur écart quadratique moyen entre prédiction et valeur idéale

Biais erreur de la prédiction moyenne par rapport à la valeur idéale

Variance écart quadratique moyen entre prédiction et prédiction moyenne

Biais et variance

Compromis biais variance

L'erreur pour un $\mathbf{x}$ donné peut se décomposer en :

$$\begin{aligned}\mathrm{Err}^2 &= E_{D_n}[(y - \hat{f}_{D_n}(\mathbf{x}))^2] \\ &= \underbrace{\epsilon^2}_{\text{bruit}^2} + \underbrace{(E_{D_n}[\hat{f}_{D_n}(\mathbf{x})] - y)^2}_{\text{biais}^2} + \underbrace{E_{D_n}[(E_{D_n}[\hat{f}_{D_n}(\mathbf{x})] - \hat{f}_{D_n}(\mathbf{x}))^2]}_{\text{variance}}\end{aligned}$$

L'origine de l'erreur de généralisation est double, mais les deux termes sont difficiles à contrôler individuellement.

Rem : pour la classification, une telle décomposition est plus difficile à obtenir, mais les comportements sont comparables.

Biais et variance

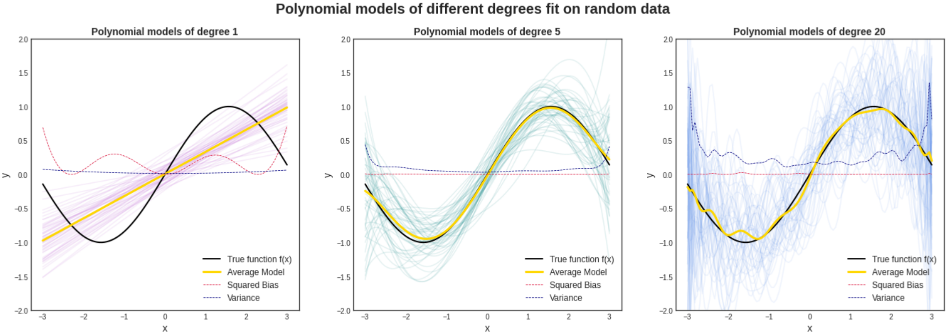
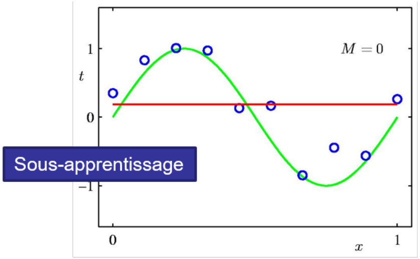


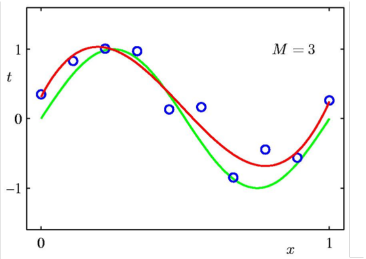
Figure 1 – Simulation d'une régression pour 50 échantillons et polynomes de degrés 1,5,20.

- Degré 1 : variance faible, mais biais important
- Degré 5 : variance et biais faibles
- Degré 20 : variance importante et biais très faible

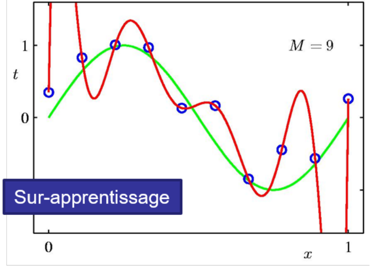
Régularisation

Retour sur sur-apprentissage





	$M = 0$	$M = 1$	$M = 3$	$M = 9$
$w_0^\star$	0.19	0.82	0.31	0.35
$w_1^\star$		-1.27	7.99	232.37
$w_2^\star$			-25.43	-5321.83
$w_3^\star$			17.37	48568.31
$w_4^\star$				-231639.30
$w_5^\star$				640042.26
$w_6^\star$				-1061800.52
$w_7^\star$				1042400.18
$w_8^\star$				-557682.99
$w_9^\star$				125201.43



Coefficients des polynômes

Très grandes valeurs!

Moindres carrés régularisés (« Ridge regression »)

- Nouveau critère : ajout d'un terme de régularisation ($\lambda \geq 0$).

$$L_n = \underbrace{\sum_{i=1}^{n} (y_i - f(x_i; \mathbf{w}))^2}_{\text{attache aux données}} + \underbrace{\lambda \cdot \|\mathbf{w}\|^2}_{\text{régularisation}}$$

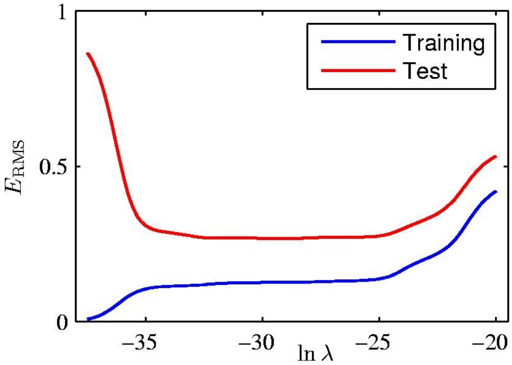
- La valeur $\mathbf{w}_\lambda$ qui minimise ce critère est :

$$\mathbf{w}_\lambda = \left(\mathbf{\Phi}^t \mathbf{\Phi} + \lambda \mathbf{I} \right)^{-1} \mathbf{\Phi}^t \mathbf{y}$$

- Augmenter λ pénalise les grandes valeurs de $\mathbf{w}_\lambda$.

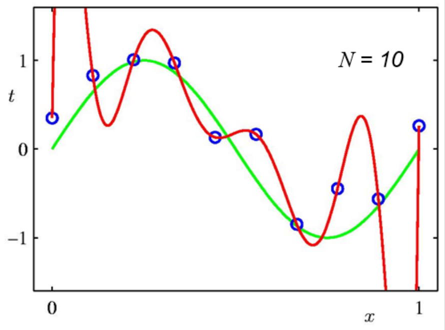
Impact de la régularisation

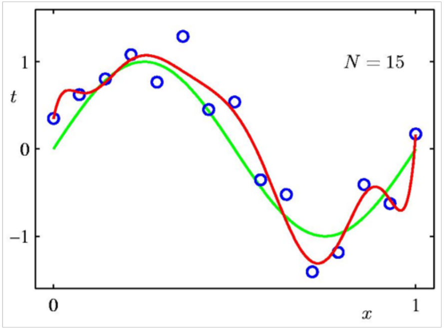
$$E_{\mathrm{RMS}} = \sqrt{\frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n}(y_i - f(x_i;\mathbf{w}))^2}$$

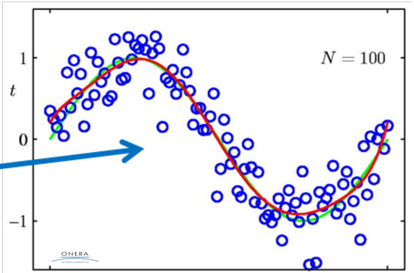


- $\lambda \approx$ terme de complexité (complexité $\downarrow$ quand $\lambda \uparrow$)

Influence de la quantité de données







C'est aussi un moyen de contrôler la régression

Trois grandeurs à ne pas confondre

- Risque empirique ou métrique :

$$L_n(f) = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^{n} (y_i - f(x_i; \mathbf{w}))^2$$

- Erreur de généralisation ou erreur théorique :

$$L(f) = E_{X,Y}[(Y - f(X; \mathbf{w}))^2]$$

- Critère d'optimisation (« loss ») :

$$L_n(f; \lambda) = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^{n} (y_i - f(x_i; \mathbf{w}))^2 + \lambda \cdot \|\mathbf{w}\|^2$$

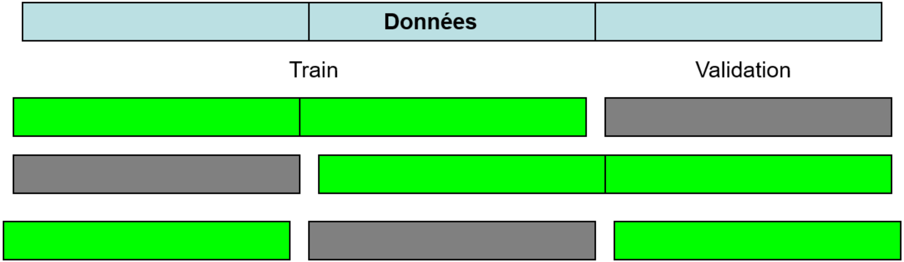
Validation croisée

Validation croisée : un outil pratique

- Permet d'estimer l'erreur de généralisation à partir des données d'apprentissage (« astuce »)
- Principe :
  1. Division des données en k sous ensembles (« fold »)
  2. Choix d'une partie comme ensemble de validation (= ensemble de test fictif), les autres comme train
  3. Apprentissage sur l'ensemble train
  4. Estimation des erreurs sur validation
  5. On fait tourner l'ensemble de validation sur chacun des fold
- L'erreur de généralisation estimée est la moyenne des erreurs sur chaque ensemble de validation

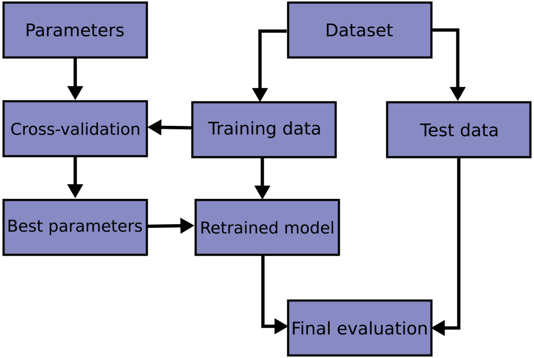
Principe de la Validation Croisée

« k-fold »



« Leave-one-out »

Utilisation de la VC



Utilisation principale : réglage des **hyper-paramètres** :

- ex : Nombre de voisins d'un k-NN, Complexité d'un prédicteur (degré du polynôme), Profondeur des arbres, Contrainte de régularisation, etc.
- Stratégie d'optimisation : « grid search » + dichotomie.

Minimisation du risque empirique

Rappels

f une fonction de prédiction $\mathcal{X} \rightarrow \mathcal{Y}$: y=f(x)
Un ensemble de données $D_n = \{(x_i, y_i)\}_{1 \leq i \leq n}$ issues d'une distribution P

Plusieurs fonctions d'erreur

- Coût : $l(y, y') \in [0, +\infty[$, par exemple $l_{01}(y, y') = \mathbb{1}_{\{y \neq y'\}}$
- Risque vrai ou réel (théorique) :

$$L(f) = E[l(f(X), Y)] = \int l(f(x), y) dP(x, y)$$

- Risque empirique (calculable) :

$$L_n(f) = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^{n} l(f(X_i), Y_i)$$

Minimisation du risque empirique (MRE)

Principe

- On se donne une famille de prédicteurs $\mathcal{F}$ (on parle parfois d'hypothèses)
- Algorithme = Trouver dans cette famille celui qui minimise le risque empirique :

$$\hat{f}_n = \arg\min_{f \in \mathcal{F}} \frac{1}{n} \sum_{i=1}^{n} l(f(X_i), Y_i)$$

Erreur de généralisation

- Le risque de ce prédicteur est potentiellement supérieur au risque réel (erreur de Bayes)

$$L(\hat{f}_n) \gg L^*$$

où $L^* = \inf_f L$ est le risque réel (idéal)

Structure des erreurs

Autre décomposition biais/variance

$$L(\hat{f}_n) - L^* = \underbrace{L(\hat{f}_n) - L(f^*)}_{\text{estimation, stochastique}} + \underbrace{L(f^*) - L^*}_{\text{approximation, déterministe}}$$

où $f^* = \arg\min_{f \in \mathcal{F}} L(f)$ est le meilleur prédicteur possible de la famille $\mathcal{F}$.
Deux sources d'erreur :

- Le nombre limité de données
- La famille des prédicteurs (arbres, réseaux de neurones...)
- L'erreur d'approximation est liée à la modélisation du problème
- L'erreur d'estimation est liée à l'apprentissage : c'est elle que l'on peut essayer de contrôler.

Que veut-dire apprendre ?

Questions

1. Comment garantir que mon algorithme d'apprentissage se comporte bien : $L(\hat{f}_n) \xrightarrow[n\to\infty]{} L(f^*)$?
2. Combien de données pour garantir une erreur de généralisation minimale ?
3. Comment contrôler ou caractériser l'espace des fonctions de prédiction $\mathcal{F}$?

PAC learning

Comment qualifier un algorithme d'apprentissage ?

Un premier cas simplifié

- Classification binaire : $\mathcal{Y} = \{0, 1\}$
- $|\mathcal{F}|$ fini
- $\mathcal{F}$ contient un prédicteur parfait $(L(f^*) = 0)$: on parle de problème « réalisable »

Quelques conséquences

- Pour tout échantillon D_n : $L_n(f^*) = 0$ et $L_n(\hat{f}_n) = 0$ car $l(y, y') \geq 0$
- Mais en général $L(\hat{f}_n) > 0$ (erreur de généralisation)

Objectif

- Majorer la probabilité de faire des erreurs d'au plus ϵ : $P[L(\hat{f}_n) > \epsilon]$ par une fonction de ϵ et n.

Démonstration

On va prouver que

$$P[L(\hat{f}_n) > \epsilon] \leq |\mathcal{F}|e^{-n\epsilon}$$

Étapes

1. On s'intéresse aux ensembles de données D_n *trompeurs*, c-à-d qui estiment un prédicteur $\hat{f}_n$ tel que $L(\hat{f}_n) > \epsilon$ (erreur réelle) mais avec $L_n(\hat{f}_n) = 0$ (pas d'erreur empirique)
2. Ces ensembles sont les seules sources d'erreur !
3. On va repérer ces ensembles à partir des prédicteurs erronés (ceux pour lesquels $L(f) > \epsilon$)
4. Puis on va calculer pour chaque prédicteur erroné la probabilité de tomber sur un ensemble trompeur

Détails I

1. On veut majorer la probabilité qu'un ensemble de données soit source d'erreur : $P\{D_n \,:\, L(\hat{f}_n) > \epsilon\}$
2. On repère les prédicteurs erronés : $\mathcal{F}_\epsilon = \{f \,:\, L(f) > \epsilon\}$
3. Les données source d'erreur sont trompeuses :

$$\{D_n : L(\hat{f}_n) > \epsilon\} \subset \bigcup_{f \in \mathcal{F}_\epsilon} \{D_n : L_n(f) = 0\}$$

4. On passe aux probabilités et on applique l'inégalité de Boole (« Union Bound ») :

$$P[L(\hat{f}_n) > \epsilon] \leq P[\bigvee_{f \in \mathcal{F}_\epsilon} \{L_n(f) = 0\}] \leq \sum_{f \in \mathcal{F}_\epsilon} P[L_n(f) = 0]$$

Détails II

5. On calcule la probabilité d'être erroné pour un ensemble $D_n = \{(x_i, y_i)\}_{1 \leq i \leq n}$:

$$\begin{aligned} P[L_n(f) = 0] &= P[\forall i \, f(x_i) = f^*(x_i)] \\ &= \prod_{1 \leq i \leq n} P[f(x) = f^*(x)] \\ &\leq \prod_{1 \leq i \leq n} (1 - \epsilon) = (1 - \epsilon)^n \leq e^{-n\epsilon} \end{aligned}$$

   car $f \in \mathcal{F}_\epsilon$

6. Et finalement

$$\begin{aligned} P[L(\hat{f}_n) > \epsilon] &\leq \sum_{f \in \mathcal{F}_\epsilon} e^{-n\epsilon} \\ &\leq |\mathcal{F}_\epsilon| e^{-n\epsilon} \leq |\mathcal{F}| e^{-n\epsilon} \end{aligned}$$

PAC learning

Interprétation de $P[L(\hat{f}_n) > \epsilon] \leq |\mathcal{F}|e^{-n\epsilon}$

- Cette inégalité est valable pour l'utilisation de l'algorithme MRE et pour toute famille finie de prédicteurs $\mathcal{F}$ qui contient un prédicteur sans erreur ($L(f^*) = 0$).
- Elle indique que l'on peut obtenir un prédicteur par MRE avec une probabilité d'erreur bornée.
- On peut reformuler le résultat : Si $n \geq \frac{\log(|\mathcal{F}|/\delta)}{\epsilon} = m(\epsilon, \delta)$ alors on aura un risque réel inférieur à ϵ avec une probabilité $1 - \delta$.
- La valeur de $m(\epsilon, \delta)$ ne dépend pas de P (la distribution de données) !

« Probably Approximately Correct learnable »

Définition

Une famille de prédicteurs $\mathcal{F}$ est PAC apprenable s'il existe une fonction $m :]0,1[^2 \rightarrow \mathbb{N}$ et un algorithme d'apprentissage tels que : pour tout $\epsilon > 0$ et $\delta > 0$, en appliquant l'algorithme d'apprentissage sur un échantillon de taille $m(\epsilon, \delta)$, on obtienne un prédicteur de risque inférieur à ϵ avec une probabilité de $1 - \delta$.

$$n \geq m(\epsilon, \delta) \Rightarrow P[L(\hat{f}_n) \leq \epsilon] \geq 1 - \delta$$

Relâcher la contrainte de réalisabilité

- Il est difficile de garantir : $\min_{f \in \mathcal{F}} L(f) = 0$ et donc de garantir une borne absolue sur le risque
- Lorsque $\min_{f \in \mathcal{F}} L(f) > 0$, on cherche plutôt à borner l'erreur d'estimation du risque réel : $L(\hat{f}_n) - L(f^*)$
- Cela conduit à une version dérivée de la notion de « PAC apprenable » dite « agnostique » = on ne sait pas si le prédicteur idéal est dans $\mathcal{F}$.
- On peut montrer, avec probabilité $1 - \delta$:

$$L(\hat{f}_n) - L(f^*) \leq \sqrt{\frac{2\log(2|\mathcal{F}|/\delta)}{n}}$$

- Ce qui donne comme indicateur de complexité PAC :

$$m_{\text{agnostique}}(\epsilon, \delta) = \frac{2\log(2|\mathcal{F}|/\delta)}{\epsilon^2}$$

Eléments de démonstration

Inégalité de Hoeffding

- Si $Z_1, Z_2 \ldots Z_n$ sont des variables i.i.d. à valeur dans $[0,1]$.
- Alors pour tout $\epsilon > 0$:

$$P\left[\left|\frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n} Z_i - E(Z_1)\right| > \epsilon\right] \leq 2\exp(-2n\epsilon^2)$$

Convergence uniforme

- On s'intéresse au comportement de tous les prédicteurs et on utilise l'inégalité :

$$L(\hat{f}_n) - L(f^*) \leq 2 \sup_{f \in \mathcal{F}} |L(f) - L_n(f)|$$

PAC learning

Des résultats généraux

- Permet de garantir que l'apprentissage MRE fonctionne pour des familles finies de prédicteurs
- Donne des bornes sur le nombre de données utiles (indépendamment de la distribution sous-jacente !)

Mais des limitations

- Ne donne de résultats que pour les familles finies de prédicteurs
- Ne dit rien sur la nature des prédicteurs
- Ne dit rien sur l'erreur d'approximation $L(f^*) - L^*$
- Calculer le MRE peut être complexe si $|\mathcal{F}|$ est grand
- Les bornes sont grossières (ne dépendent ni des données, ni de la nature des prédicteurs)

Caractériser les familles de prédicteurs

Des résultats plus fins ?

Que faire lorsque $|\mathcal{F}| = \infty$?

- Beaucoup de familles de prédicteurs sont dans ce cas (arbres, réseaux de neurones, bayésien naïf, ...)
- Ils ont une expressivité variable et contrôlable (profondeur des arbres, couches des RN)
- Peut-on produire des résultats comparables au cas fini ?

Comment particulariser le « PAC learning » ?

- Les résultats précédents ne dépendent pas de la nature de $\mathcal{F}$
- Comparer différentes familles de prédicteurs ?

➪ Théorie de Vapnik Chervonenkis [Vapnik, 2013]

Complexité des familles de prédicteurs

Intuitions

- Expressivité = Capacité à discriminer un grand *nombre* de données.
- Famille de prédicteurs décrites par un nombre fini de paramètres : complexité = # paramètres ?. . .pas tout à fait.

Un problème combinatoire

- Idée = on compte le nombre maximal de prédicteurs capables de discriminer un jeu de données quelconque de taille m.
- On regarde la forme de la fonction de croissance :

$$G_{\mathcal{F}}(n) = \max_{x_1, x_2, \ldots, x_n \in \mathcal{X}} |\{(f(x_1), f(x_2), \ldots f(x_n)) : f \in \mathcal{F}\}|$$

- On a nécessairement : $G_{\mathcal{F}}(n) \leq 2^n$

Fonction de croissance

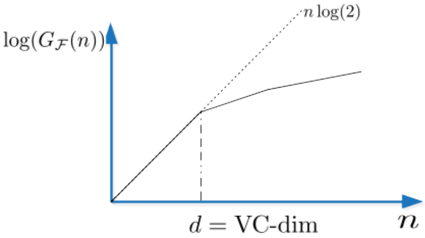


Figure 2 – Allure de la fonction de croissance.

Allure

- La fonction croit comme 2^n jusqu'à d puis moins vite (Figure 2)
- La valeur d est la dimension de Vapnik-Chervonenkis
- ! ! ! Elle peut être infinie ! = famille de prédicteurs très complexe ➪ sur-apprentissage (en fait, aucune garantie d'apprentissage)

Dimension de Vapnik-Chervonenkis

Définition

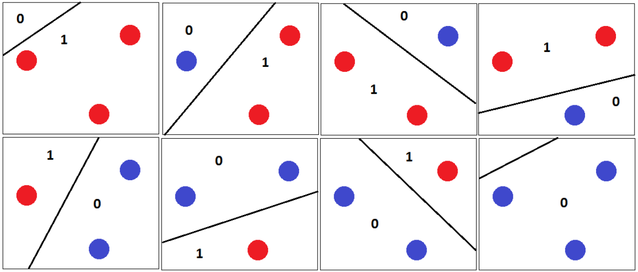
- Plus grande taille n de données $X_n = (x_1, x_2, \ldots, x_n)$ étiquetée de manière quelconque qui puisse être discriminée par un élément de $\mathcal{F}$
- On dit que $\mathcal{F}$ pulvérise X_n
- Conséquence : il suffit de trouver une configuration de n points pulvérisée pour avoir VC-dim$(\mathcal{F}) \geq n$

Propriétés

- Lien avec fonction de croissance : VC-dim$(\mathcal{F}) = \max_n\{n : G_{\mathcal{F}}(n) = 2^n\}$
- Lemme de Sauer : si VC-dim$(\mathcal{F}) = d < \infty$ alors $G_{\mathcal{F}}(n) \leq \sum_{i=0}^{d} \binom{n}{i}$.
En particulier, si $n > d + 1$, $G_{\mathcal{F}}(n) \leq (e.n/d)^d$ (croissance polynomiale < exponentielle)

Un exemple 2D : hyperplans dans $\mathbb{R}^2$

Trois points



Quatre points

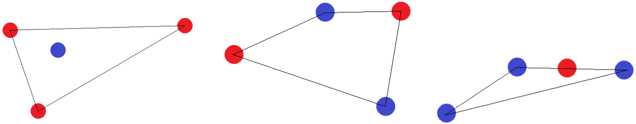
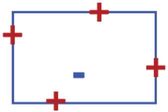


Figure 3 – Pulvérisation par hyperplan.

Un exemple 2D : rectangles dans $\mathbb{R}^2$

(a)



(b)

Figure 4 – Pulvérisation par fonction rectangle.

Pas moyen de séparer l'étiquetage (b) avec des rectangles :
➪ VC-dim(« Rectangles ») $= 4$

Un autre exemple 1D : fonction caractéristique sinusoïdale

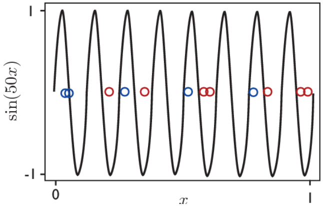


Figure 5 – Pulvérisation par fonction sinusoïdale.

- $f(x) = \text{signe}(\sin(\omega x))$ où $\omega \in [0, 2\pi)$.
- On peut trouver un ω qui sépare un ensemble de points de taille n quelconque
  - $x_j = 2\pi 10^{-j}$
  - $w = \frac{1}{2}\left(1 + \sum_{i=1}^{n} \frac{1-y_i}{2} 10^i\right)$

➪ VC-dim(« Sinusoides ») $= \infty$

Complexité et erreur d'estimation

On peut montrer, si VC-dim$(\mathcal{F}) = d$, avec probabilité $1 - \delta$:

$$L(\hat{f}_n) \leq \inf_{f \in \mathcal{F}} L(f) + \sqrt{\frac{2d(1 + \log(n/d))}{n}} + \sqrt{\frac{\log(1/\delta)}{2n}}$$

Interprétation

- Si la famille de prédicteurs est de dimension VC fini, alors elle est PAC apprenable
- On peut borner l'erreur sur le risque par un $O\left(\sqrt{\frac{\log(n/d)}{n/d}}\right)$
- On peut aussi montrer que si la dimension VC de $\mathcal{F}$ est infinie, elle n'est pas PAC apprenable.

Ce *théorème fondamental de l'apprentissage statistique* implique qu'il y a **équivalence entre PAC apprenable et avoir une dimension VC finie** pour une famille de prédicteurs.

Exemples de dimensions VC

- Hyperplans dans $\mathbb{R}^d$: $d+1$
- Rectangles alignés sur les axes dans $\mathbb{R}^2$: 4
- Rectangles quelconques dans $\mathbb{R}^2$: 7
- Triangles dans $\mathbb{R}^2$: 7
- Polygones convexes dans $\mathbb{R}^2$: ∞
- Réseaux de neurones avec RELU (W paramètres et L couches)[Bartlett et al., 2019] : $\geq c \cdot WL \log(W/L)$ et $\leq C \cdot WL \log W$

D'autres inégalités I

Fonction de croissance

- On peut également montrer, avec probabilité $1-\delta$, $\forall f \in \mathcal{F}$:

$$L(f) \leq L_n(f) + \sqrt{\frac{2G_{\mathcal{F}}(n)}{n}} + \sqrt{\frac{\log(1/\delta)}{2n}}$$

- ou de manière plus générale

$$P\left[|L(f) - L_n(f)| > \epsilon\right] \leq 4 \cdot G_{\mathcal{F}}(2n) \exp\left(-n\epsilon^2/8\right)$$

- La difficulté est d'estimer la fonction de croissance (la dimension VC est une simplification)

D'autres inégalités II

Complexité de Rademacher

- Définition : espérance de la « pire mauvaise classification »

$$R_n(\mathcal{F}, D_n) = E_\sigma \left[\sup_{f \in \mathcal{F}} \frac{1}{n} \sum_{i=1}^{n} \sigma_i h(x_i) \right] \text{ et } \bar{R}_n(\mathcal{F}) = E_P[R_n(\mathcal{F}, D_n)]$$

  où σ_i est une variable aléatoire uniforme i.i.d. sur $\{-1, 1\}$

- C'est une quantité qui dépend de la distribution
  ➪ bornes plus fines

D'autres inégalités III

Complexité de Rademacher

- Lien avec fonction de croissance

$$\bar{R}_n(\mathcal{F}) \leq \sqrt{\frac{2\log(G_{\mathcal{F}}(n))}{n}}$$

- Lien avec erreur d'estimation

$$L(f) \leq L_n(f) + \bar{R}_n(\mathcal{F}) + \sqrt{\frac{\log(1/\delta)}{2n}}$$

Les deux combinés redonnent la borne utilisant la VC-dimension.

MRE : bornes sur le nombre de données

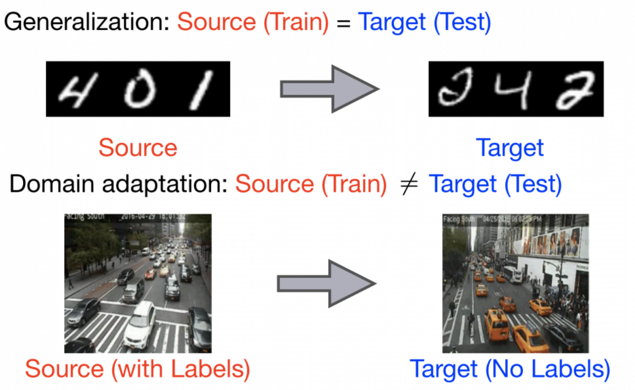
Hypothèses

- $\mathcal{F}$ est fini ou sa dimension VC-dim$(\mathcal{F}) = d$ est finie.
- Fonction de coût $0-1$ $(l(y,y') = \mathbb{1}_{\{y \neq y'\}})$.
- Inégalité à probabilité $1-\delta$.

$\lvert\mathcal{F}\rvert$	Réalisable $(\inf_{f\in\mathcal{F}} = 0)$ $P[L(\hat{f}_n) \leq \epsilon]$	Agnostique $(\inf_{f\in\mathcal{F}} > 0)$ $P[\lvert L(\hat{f}_n) - \inf_{f\in\mathcal{F}}\rvert \leq \epsilon]$
$< \infty$	$n \geq \dfrac{\log(\lvert\mathcal{F}\rvert/\delta)}{\epsilon}$	$n \geq \dfrac{2\log(2\lvert\mathcal{F}\rvert/\delta)}{\epsilon^2}$
$= \infty$	$n = O\left(\dfrac{d\log(1/\epsilon) + \log(1/\delta)}{\epsilon}\right)$	$n = O\left(\dfrac{d + \log(1/\delta)}{\epsilon^2}\right)$

Domaine d'utilisation

Domaine d'utilisation et apprentissage I



- En pratique, la distribution des données d'apprentissage (« source domain ») n'est souvent pas identique à celles qui seront traitées en conditions réelles (« target domain »).

Domaine d'utilisation et apprentissage II

- Rupture de l'hypothèse que le passé (apprentissage) = futur (inférence).
- C'est une autre source d'erreur que la généralisation.

Domaine d'utilisation et apprentissage III

Ce phénomène conduit à d'autres types de problèmes :

- décalage de domaine (« shift »)
- généralisation de domaine
- adaptation/transfert de domaine
- dérive de domaine (« drift »)
- ...

Théorie de l'apprentissage limitée en résultats : dépendance au contexte d'utilisation et à la nature des données difficile à formaliser.

Et le deep learning ?

Erreur d'optimisation

- Dans la théorie PAC, on suppose que l'on peut minimiser le risque empirique.
- Mais : l'optimisation peut aussi générer des erreurs.
  Une autre décomposition de l'erreur de généralisation

$$L(\hat{f}_n) - L(f^*) = \underbrace{L(\hat{f}_n) - L_n(\hat{f}_n)}_{\text{estimation, stochastique}} + \underbrace{L_n(\hat{f}_n) - L_n(f^*)}_{\text{optimisation, stochastique}} + \underbrace{L_n(f^*) - L(f^*)}_{\text{estimation, stochastique}}$$

  où f^* est le prédicteur optimal du risque L et $\hat{f}_n$ est le prédicteur appris à partir du jeu de données de taille n et issu d'une optimisation (gradient stochastique).
- Il faut encore rajouter l'erreur d'approximation (famille de prédicteurs).

Régularisation implicite du SGD

- Régularisation = une manière de limiter les espaces de prédicteurs. (prochain cours)
- La descente de gradient permet d'introduire une forme de régularisation. [Neyshabur et al., 2014, Dauber et al., 2020, Soudry et al., 2018]

La « double descente »

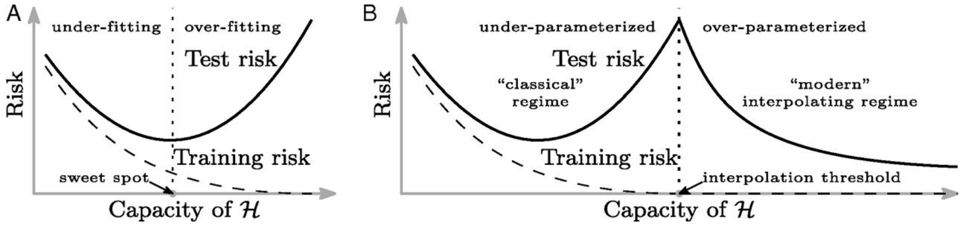


Figure 6 – Ecart apprentissage/test pour différentes complexités de prédicteurs.

- Les réseaux sur-paramétrés ont (parfois) des erreurs de généralisation plus faible : phénomène contre-intuitif.

[Belkin et al., 2019, Dar et al., 2021, Nakkiran et al., 2019]

Il y a encore bien d'autres questions...

- Autres algorithmes que MRE : arbres, ensembles, SVM, RN ?
- Comment introduire l'optimisation ($\arg\min$) dans les bornes
- Bornes inférieures (conditions nécessaires)
- Bornes dépendant des algorithmes, des distributions
- Contrôler la variance des écarts plutôt que $\sup$
- Utiliser les bornes en pratique pour contrôler les algorithmes
- Quel algorithme/stratégie utiliser avec des familles de dimension VC infinies ?
- Les algorithmes itératifs/séquentiels (renforcement, bandit...) : quelles garanties de convergence ?
- Pourquoi (et comment) les réseaux profonds qui contiennent plus de paramètres que de données généralisent-ils ?
- Pourquoi existe-t-il des exemples adversariaux ? Comment les contrer ?
- ...

Minimisation du risque empirique : Résumé

Résultats

+ Bornes théoriques
+ Justification de la faisabilité de l'apprentissage
+ Bornes indépendantes des distributions
- Résultats en probabilité $(1 - \delta)$
- Il y a d'autres algorithmes que MRE
- Pas applicable au « Deep Learning »

Utilisations

+ Garantie
- Bornes trop lâches ou trop générales (convergence uniforme)
- Complexités difficiles à calculer (VC ou Rademacher)

Références I

Bach, F. (2021).
Learning theory from first principles.

Bartlett, P. L., Harvey, N., Liaw, C., and Mehrabian, A. (2019).
Nearly-tight vc-dimension and pseudodimension bounds for piecewise linear neural networks.
Journal of Machine Learning Research, 20(63) :1–17.

Belkin, M., Hsu, D., Ma, S., and Mandal, S. (2019).
Reconciling modern machine-learning practice and the classical bias–variance trade-off.
Proceedings of the National Academy of Sciences, 116(32) :15849–15854.
Publisher : National Academy of Sciences Section : Physical Sciences.

Dar, Y., Muthukumar, V., and Baraniuk, R. G. (2021).
A Farewell to the Bias-Variance Tradeoff ? An Overview of the Theory of Overparameterized Machine Learning.
arXiv :2109.02355 [cs, stat].
arXiv : 2109.02355.

Dauber, A., Feder, M., Koren, T., and Livni, R. (2020).
Can implicit bias explain generalization ? stochastic convex optimization as a case study.
Advances in Neural Information Processing Systems, 33 :7743–7753.

Devroye, L., Györfi, L., and Lugosi, G. (2013).
A probabilistic theory of pattern recognition, volume 31.
Springer Science & Business Media.

Mohri, M., Rostamizadeh, A., and Talwalkar, A. (2018).
Foundations of machine learning.
MIT press.

Références II

Nakkiran, P., Kaplun, G., Bansal, Y., Yang, T., Barak, B., and Sutskever, I. (2019).
Deep Double Descent : Where Bigger Models and More Data Hurt.
arXiv :1912.02292 [cs, stat].
arXiv : 1912.02292.

Neyshabur, B., Tomioka, R., and Srebro, N. (2014).
In search of the real inductive bias : On the role of implicit regularization in deep learning.
arXiv preprint arXiv :1412.6614.

Shalev-Shwartz, S. and Ben-David, S. (2014).
Understanding machine learning : From theory to algorithms.
Cambridge university press.

Soudry, D., Hoffer, E., Nacson, M. S., Gunasekar, S., and Srebro, N. (2018).
The Implicit Bias of Gradient Descent on Separable Data.
Journal of Machine Learning Research, 19(70) :1–57.

Vapnik, V. (2013).
The nature of statistical learning theory.
Springer science & business media.