

Apprentissage Automatique

SVM + régression

Stéphane Herbin

`stephane.herbin@onera.fr`

Aujourd'hui

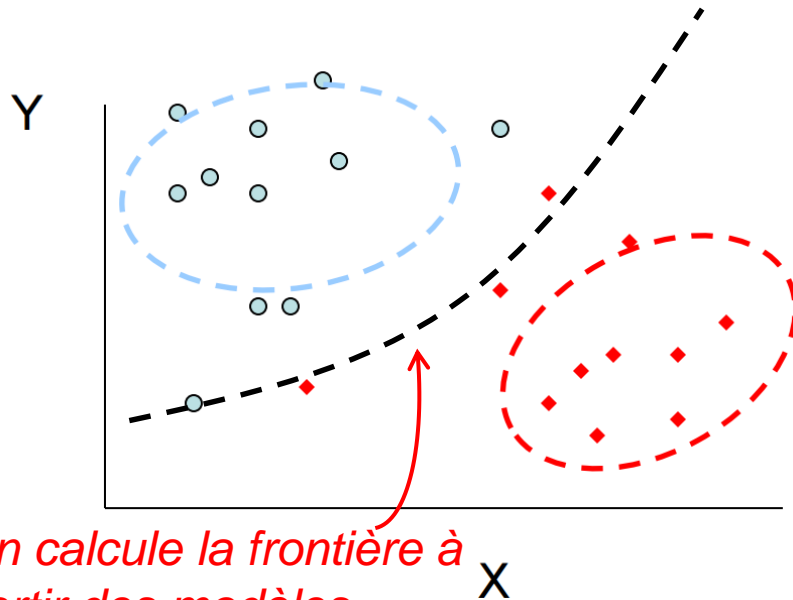
- Approfondissement:
 - Un algorithme efficace: Support Vector Machines (SVM)
 - Multiclasse
 - Régression
- TD:
 - SVM: étude de l'influence des paramètres
 - Validation croisée (reprise!)

« Support Vector Machines »

Deux types d'approches: génératives vs. discriminatives

Objectif = modéliser les
distributions de données
puis les exploiter

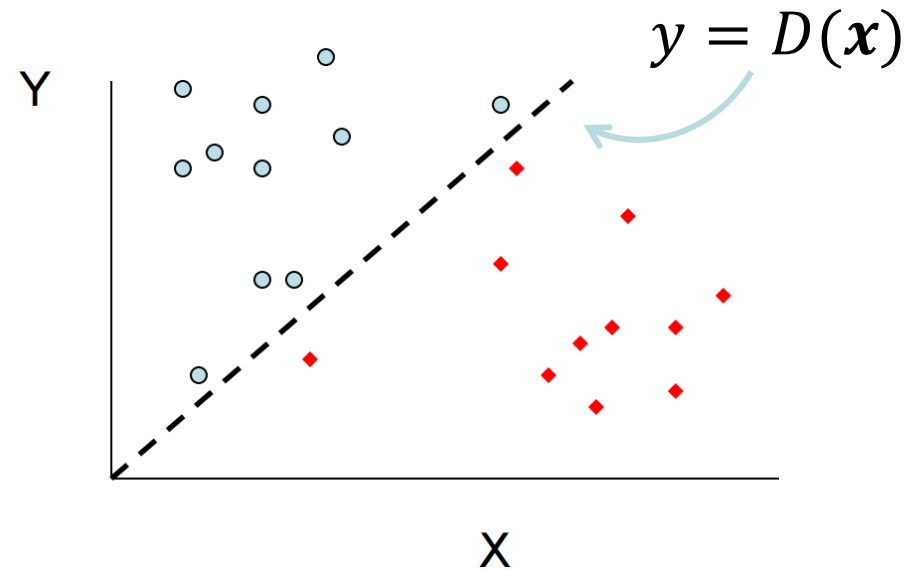
Generative model



Le premier cours

On estime directement

Discriminative model



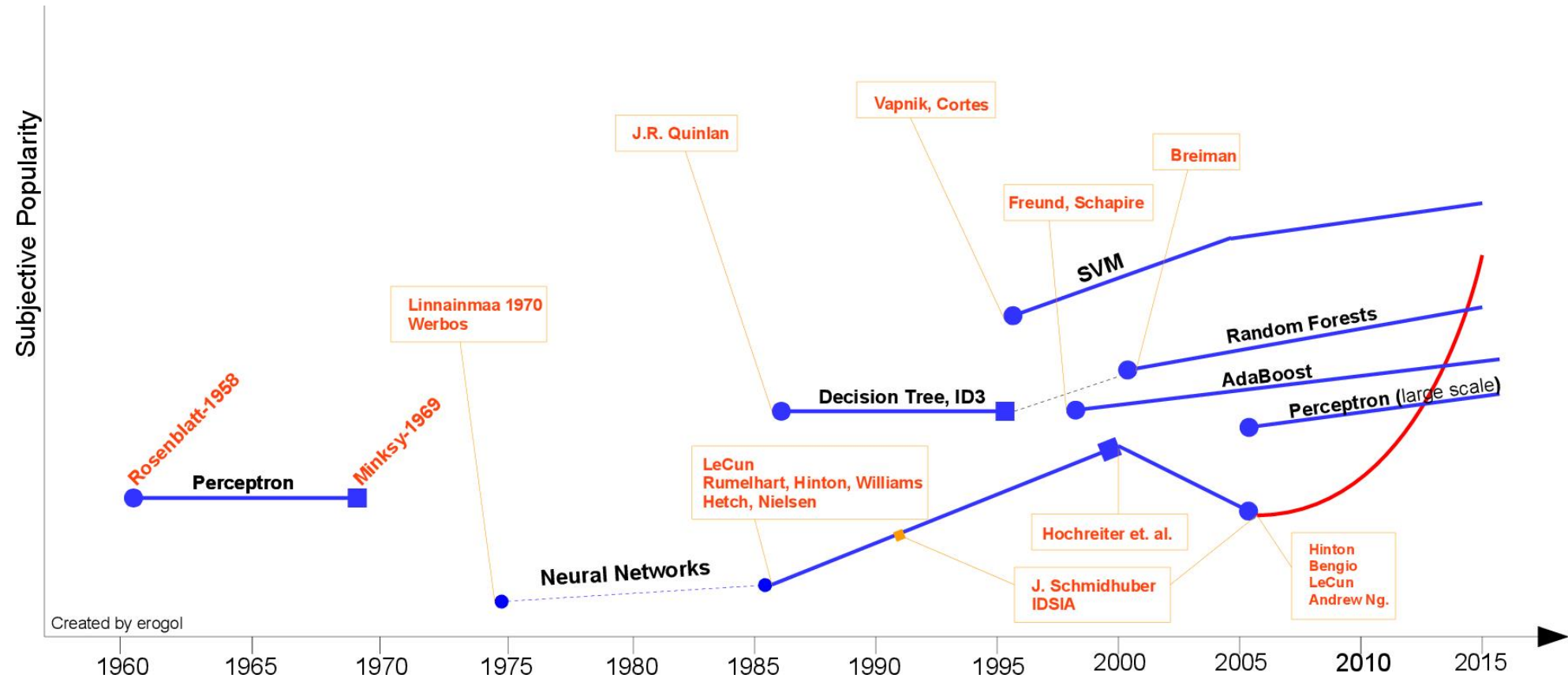
Objectif = construire les
meilleures frontières

Aujourd'hui

Support Vector Machines

- Historique
- Principe: maximiser la marge de séparation d'un hyperplan
- Le cas séparable
- Le cas non séparable: les fonctions de perte (« hinge loss »)
- L'extension au cas non linéaire: les noyaux
- Parcimonie
- Les paramètres de contrôle

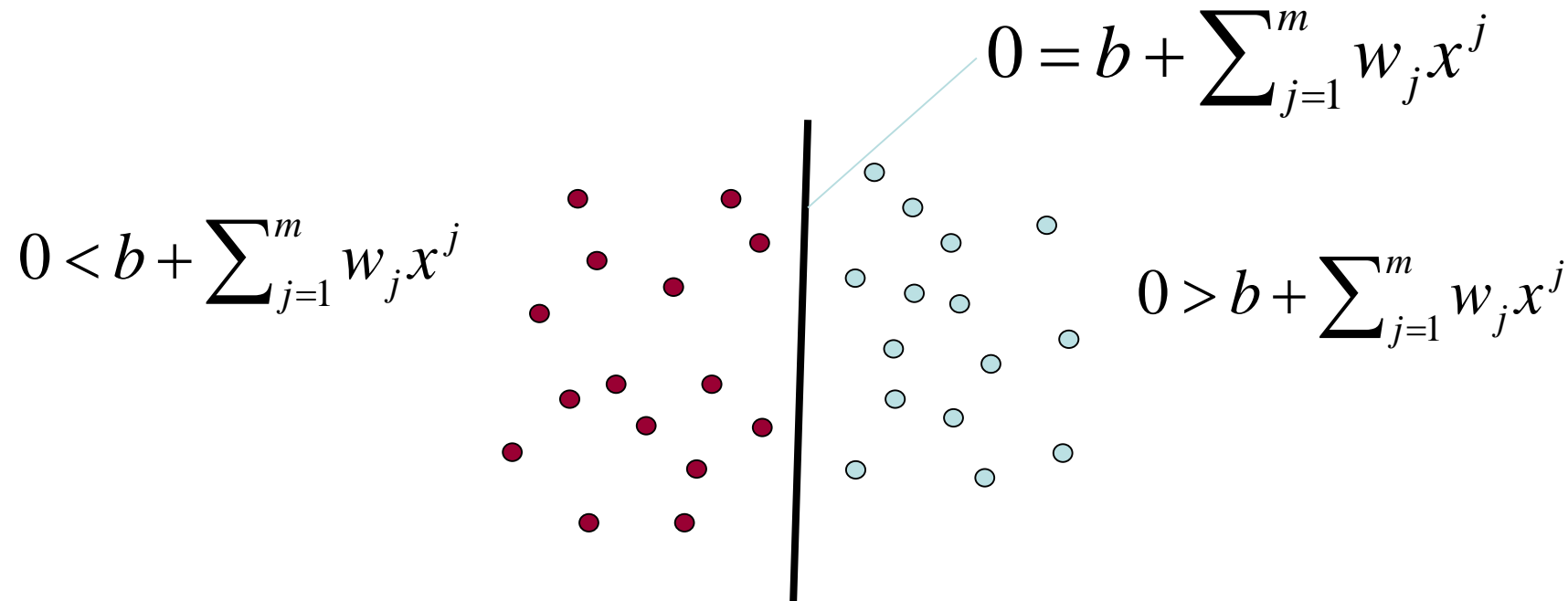
Historique du Machine Learning



Modèles linéaires de décision

Hypothèse = les données sont linéairement séparables.

- En 2D, par une droite
- En ND, par un hyperplan.



Classifieur linéaire

- Equation de l'hyperplan séparateur

$$b + \mathbf{w} \cdot \mathbf{x} = 0$$

- Expression du classifieur linéaire (pour y_i valant -1 et 1)

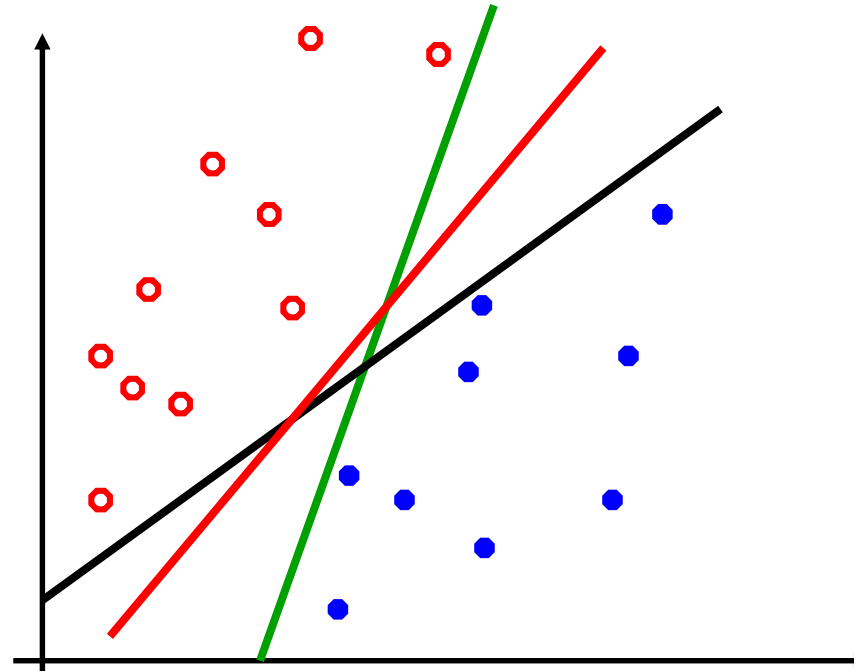
$$F(\mathbf{x}; \mathbf{w}) = \text{sign}(b + \mathbf{w} \cdot \mathbf{x})$$

- Erreur

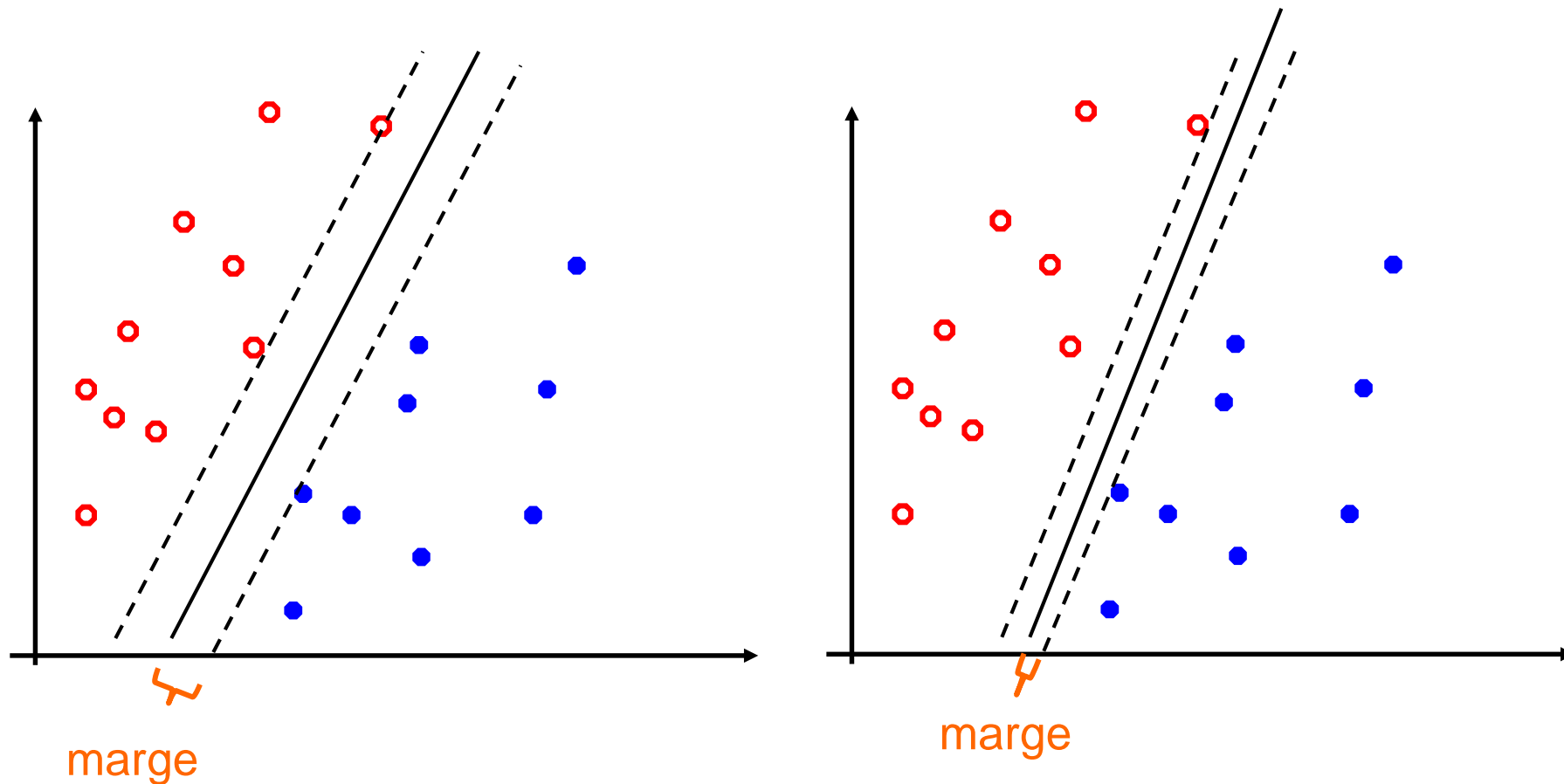
$$\mathcal{E}_{test}(\mathbf{w}, \mathcal{D}) = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \{y_i \cdot \text{sign}(b + \mathbf{w} \cdot \mathbf{x}_i) < 0\}$$

- Calculée sur la base $\mathcal{D} = \{(\mathbf{x}_i, y_i)\}_{i=1}^N$

Quel hyperplan choisir?



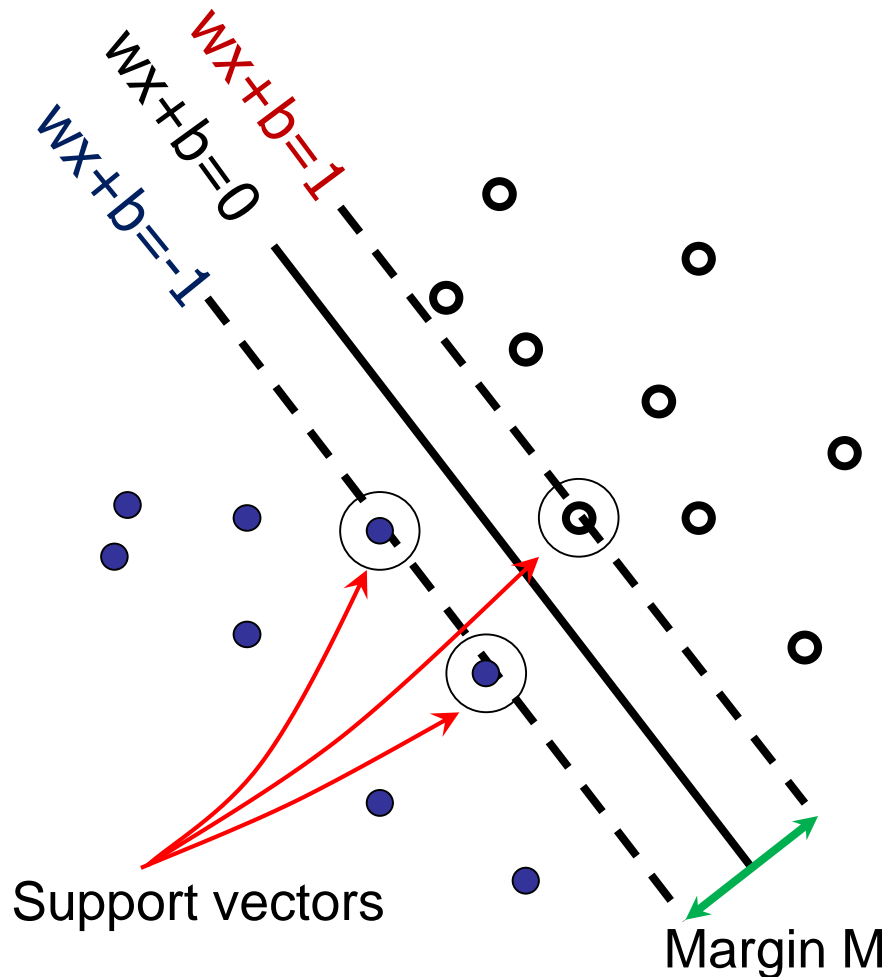
Classifieur « Large margin »



Choisir l'hyperplan qui maximise la distance aux points les plus proches

Support Vector Machines

- On cherche l'hyperplan qui maximise la marge.



$$\mathbf{x}_i \text{ positif } (y_i = 1): \quad \mathbf{x}_i \cdot \mathbf{w} + b \geq 1$$

$$\mathbf{x}_i \text{ négatif } (y_i = -1): \quad \mathbf{x}_i \cdot \mathbf{w} + b \leq -1$$

Pour les vecteurs de support, $\mathbf{x}_i \cdot \mathbf{w} + b = \pm 1$

Distance entre point et hyperplan: $\frac{|\mathbf{x}_i \cdot \mathbf{w} + b|}{\|\mathbf{w}\|}$

Pour les « support vectors »:

$$\frac{\mathbf{w}^T \mathbf{x} + b}{\|\mathbf{w}\|} = \frac{\pm 1}{\|\mathbf{w}\|} \quad M = \left| \frac{1}{\|\mathbf{w}\|} - \frac{-1}{\|\mathbf{w}\|} \right| = \frac{2}{\|\mathbf{w}\|}$$

Principe du SVM (Large Margin)

- Maximiser la marge = distance des vecteurs à l'hyperplan séparateur des vecteurs de supports

$$\max \frac{1}{\|\mathbf{w}\|^2}$$

- Sous contraintes

$$y_i(\mathbf{w} \cdot \mathbf{x}_i + b) \geq \boxed{1} \quad \forall i$$

- Les vecteurs de support vérifiant:

$$y_i(\mathbf{w} \cdot \mathbf{x}_i + b) = \boxed{1}$$

Le 1 est conventionnel.
N'importe quelle
constante >0 est valable.

Formulation du SVM

$$\min_{w,b} \|w\|^2$$

Tel que:

$$y_i (w \cdot x_i + b) \geq 1 \quad \forall i$$

Si les données sont séparables

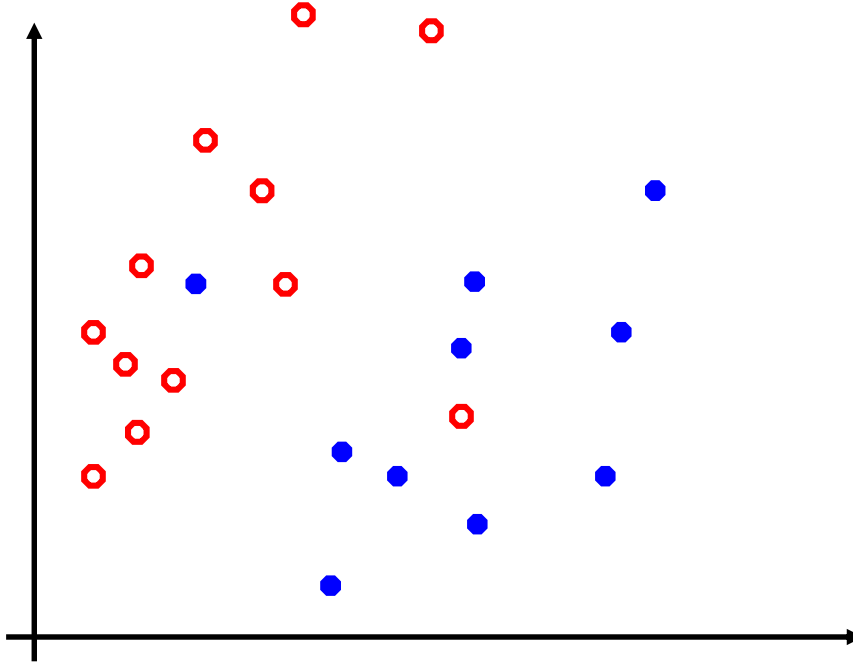
Problème d'optimisation quadratique

Avec contraintes linéaires

Problème d'optimisation quadratique classique

Mais avec beaucoup de contraintes! (autant que d'exemples d'apprentissage)

Classification « Soft Margin »



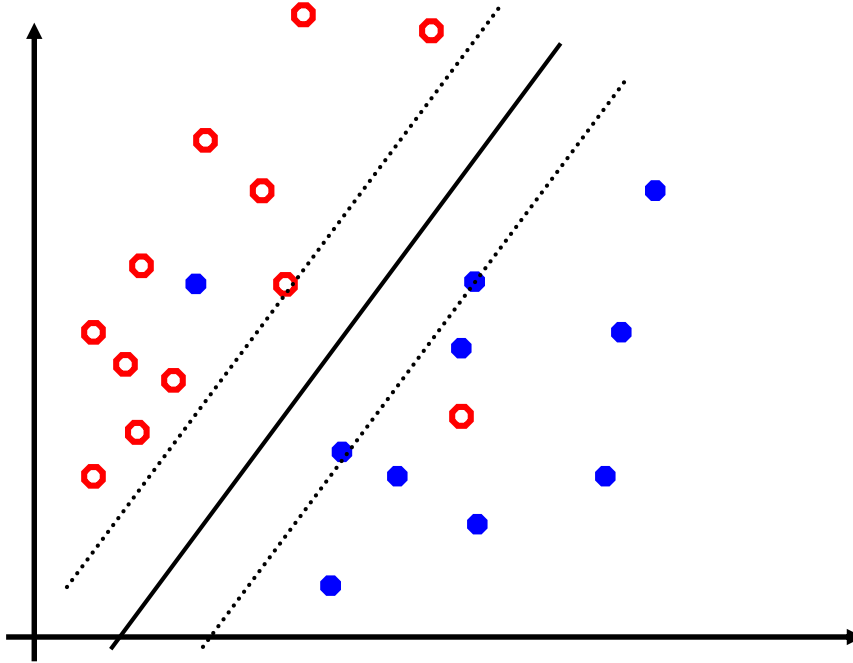
$$\min_{w,b} \|w\|^2$$

Tel que:

$$y_i (w \cdot x_i + b) \geq 1 \quad \forall i$$

Comment traiter le cas non linéairement séparable?

Classification « Soft Margin »



$$\min_{w,b} \|w\|^2$$

Tel que:

$$y_i(w \cdot x_i + b) \geq 1 \quad \forall i$$

On aimerait obtenir une séparation robuste à quelques données non séparées

Idée: « Slack variables »

$$\min_{w,b} \|w\|^2$$

tq:

$$y_i(w \cdot x_i + b) \geq 1 \quad \forall i$$



$$\min_{w,b} \|w\|^2 + C \sum_i \xi_i$$

tq:

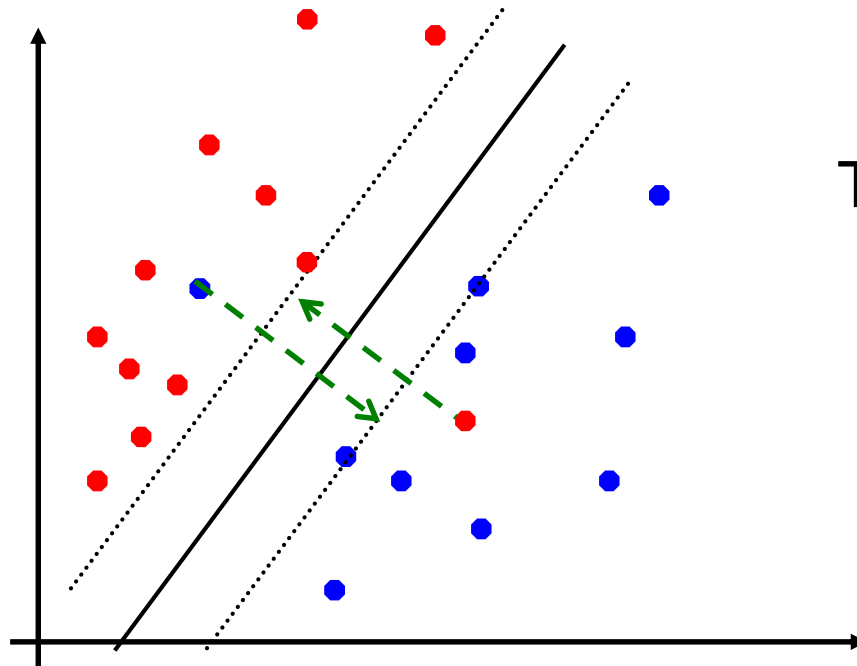
$$y_i(w \cdot x_i + b) \geq 1 - \xi_i \quad \forall i$$

$$\xi_i \geq 0$$

Permet de relacher la contrainte de séparabilité pour chaque exemple.

slack variables
(une par exemple)

« Slack variables »



$$\min_{w,b} \|w\|^2 + C \sum_i \xi_i$$

Tel que:

$$y_i (w \cdot x_i + b) + \xi_i \geq 1 \quad \forall i$$

$$\xi_i \geq 0$$

Relâchement de la contrainte

Utilisation des « Slack variables »

marge

Compromis entre marge et pénalisation de la contrainte

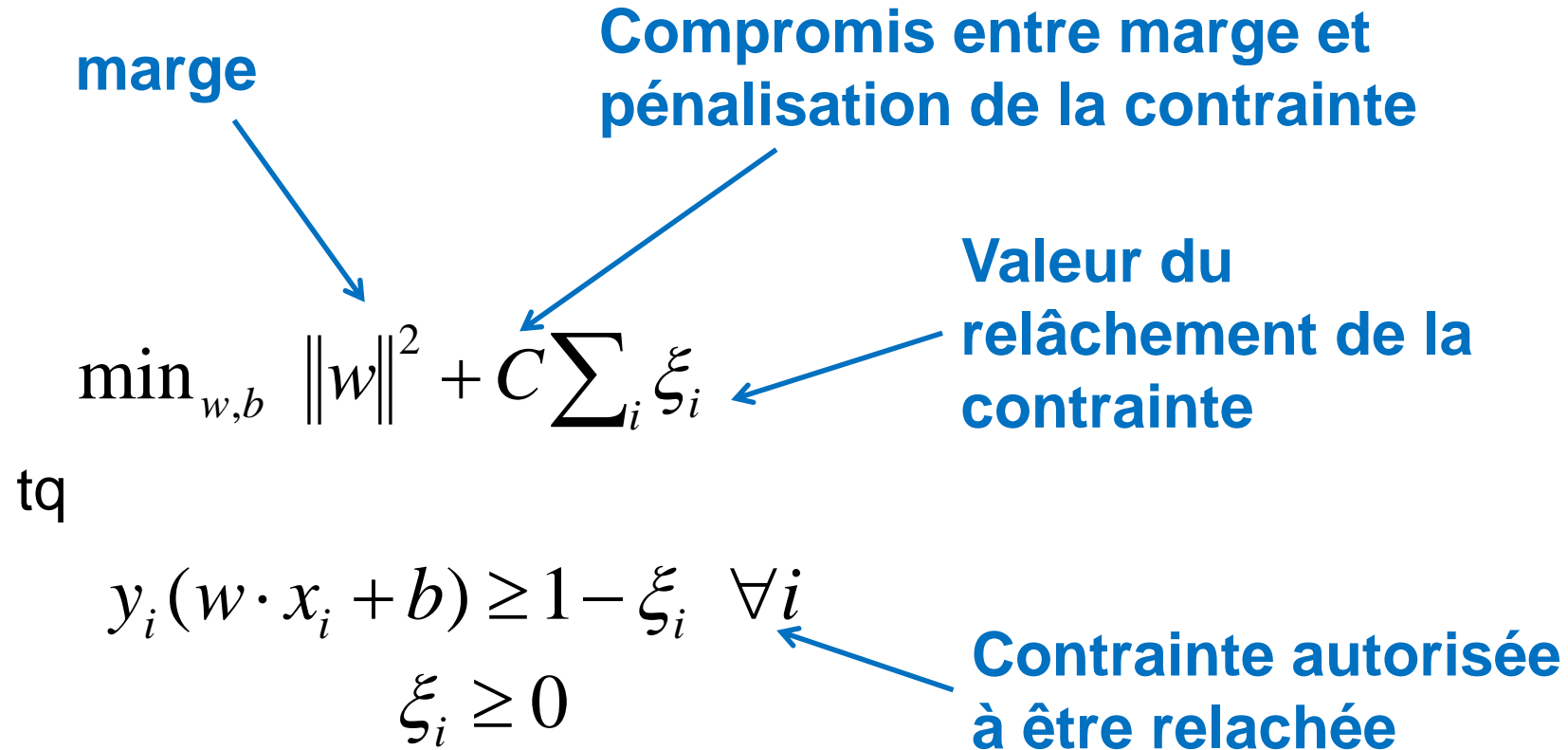
Valeur du relâchement de la contrainte

$$\min_{w,b} \|w\|^2 + C \sum_i \xi_i$$

tq

$$y_i (w \cdot x_i + b) \geq 1 - \xi_i \quad \forall i$$
$$\xi_i \geq 0$$

Contrainte autorisée à être relâchée



Soft margin SVM

$$\min_{w,b} \|w\|^2 + C \sum_i \xi_i$$

Tel que

$$y_i (w \cdot x_i + b) \geq 1 - \xi_i \quad \forall i$$
$$\xi_i \geq 0$$

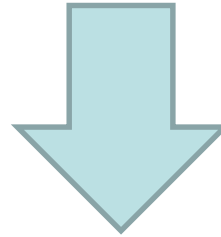
On garde un problème quadratique!

Mais avec un très grand nombre de variables+contraintes

Autre formulation

tq:

$$\min_{w,b} \|w\|^2 + C \sum_i \xi_i$$
$$y_i(w \cdot x_i + b) \geq 1 - \xi_i \quad \forall i$$
$$\xi_i \geq 0$$
$$\xi_i = \max(0, 1 - y_i(w \cdot x_i + b))$$



$$\min_{w,b} \|w\|^2 + C \sum_i \max(0, 1 - y_i(w \cdot x_i + b))$$

Problème d'optimisation non contraint

→ Autres méthodes d'optimisation (descente de gradient)

Interprétation du « Soft Margin SVM »

$$\min_{w,b} \|w\|^2 + C \sum_i \max(0, 1 - y_i (w \cdot x_i + b))$$

On retrouve la formulation:

$$\text{Loss}(\mathbf{w}, \mathcal{D}) = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N l(F(\mathbf{x}_i, \mathbf{w}), y_i) + r(\mathbf{w})$$

Avec

$$r(\mathbf{w}) = \frac{1}{C} \|\mathbf{w}\|^2$$

$$l(F(\mathbf{x}_i, \mathbf{w}), y_i) = \max(0, 1 - y_i (\mathbf{w} \cdot \mathbf{x}_i + b))$$

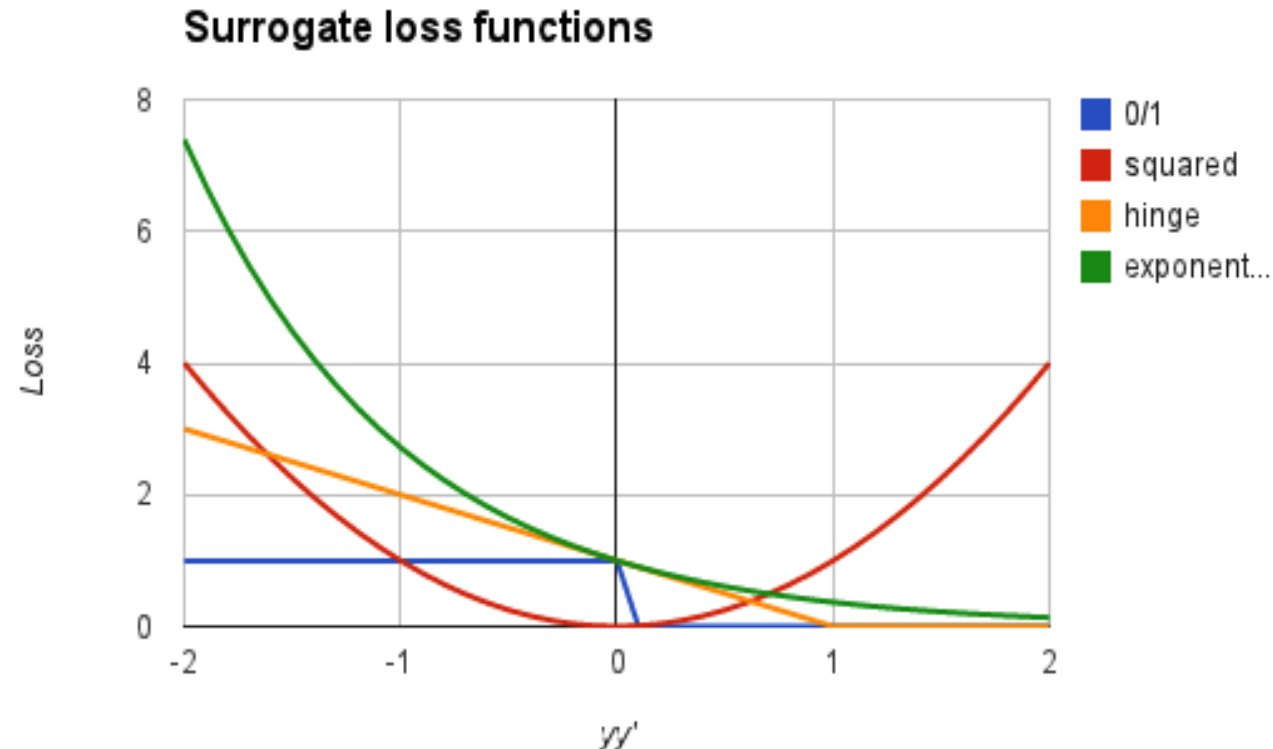
**Le SVM est un cas particulier du formalisme:
« erreur empirique + régularisation »**

Autres Fonctions de coût

0/1 loss: $l(y, y') = 1[y y' \leq 0]$

Hinge: $l(y, y') = \max(0, 1 - y y')$

Squared loss: $l(y, y') = (y - y')^2$ Exponential: $l(y, y') = \exp(-y y')$



Forme duale du SVM

- Problème d'optimisation sous contrainte

Pour simplifier l'expression des calculs

Primal

$$\operatorname{argmin}_{\mathbf{w}} \frac{\|\mathbf{w}\|^2}{2} + C \sum_i \xi_i \quad \text{Multiplicateurs de Lagrange}$$
$$s. t. \quad \forall i, y_i(\mathbf{w} \cdot \mathbf{x}_i + b) \geq 1 - \xi_i \quad \alpha_i$$
$$\xi_i \geq 0 \quad \beta_i$$

Dual (Lagrangien)

$$L(\mathbf{w}, \xi, \alpha, \beta) = \frac{\|\mathbf{w}\|^2}{2} + \sum_i (C\xi_i - \alpha_i(y_i(\mathbf{w} \cdot \mathbf{x}_i + b) - 1 + \xi_i) - \beta_i\xi_i)$$
$$s. t. \quad \forall i, \alpha_i \geq 0, \beta_i \geq 0$$

Forme duale du SVM

- Lagrangien

$$L(\alpha) = \sum_i \alpha_i - \frac{1}{2} \sum_{i,j} \alpha_i \alpha_j y_i y_j \mathbf{x}_j \cdot \mathbf{x}_i$$

s. t. $\forall i, 0 \leq \alpha_i \leq C$

Maximisation dans le dual!

On garde un pb. quadratique

Dual des contraintes « slack »

Solution optimale (conditions de Karush-Kuhn-Tucker): $\alpha_i (y_i w^T x_i - 1 + \xi_i) = 0$

Interprétation: $\alpha_i = 0$ si la contrainte est satisfaite (bonne classification)

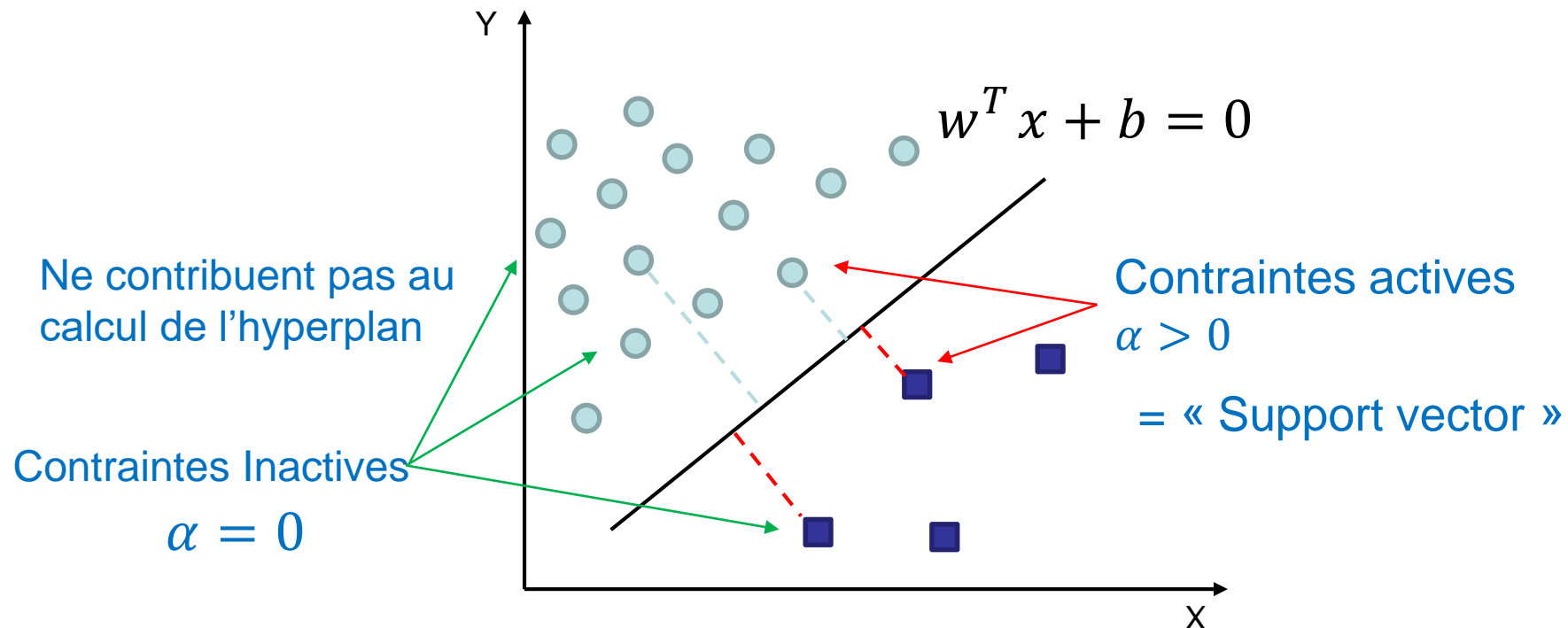
$\alpha_i > 0$ si la contrainte n'est pas satisfaite (mauvaise classification)

Parcimonie du SVM

- Seuls certains α sont non nuls = autre manière de définir les vecteurs de support.

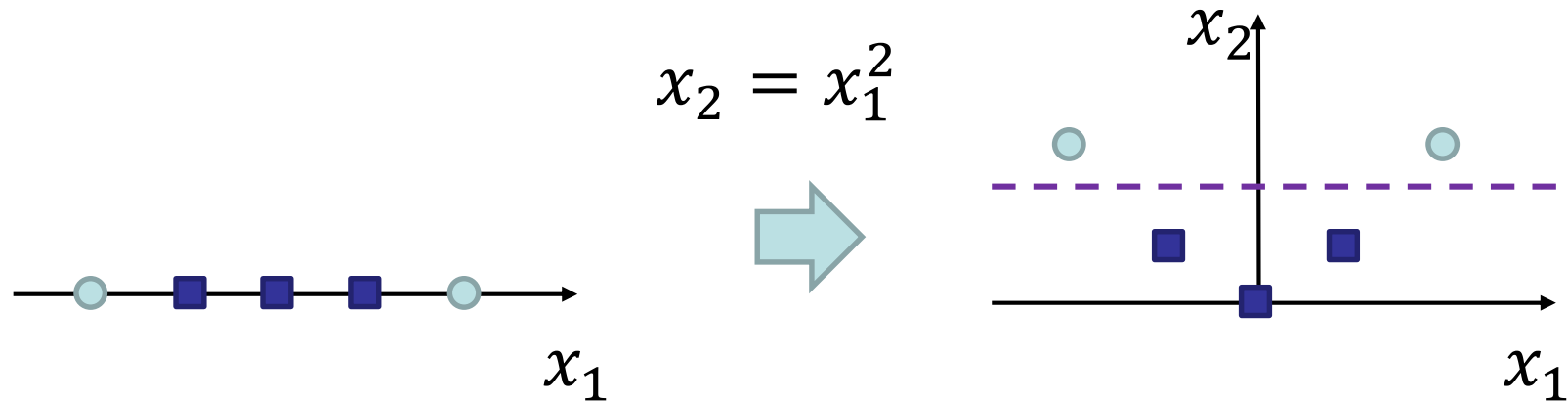
$$\text{Optimalité} = \alpha_i (y_i w^T x_i - 1 + \xi_i) = 0$$

Direction de l'hyperplan séparateur $w = \sum_i \alpha_i y_i x_i$



Données non linéairement séparables

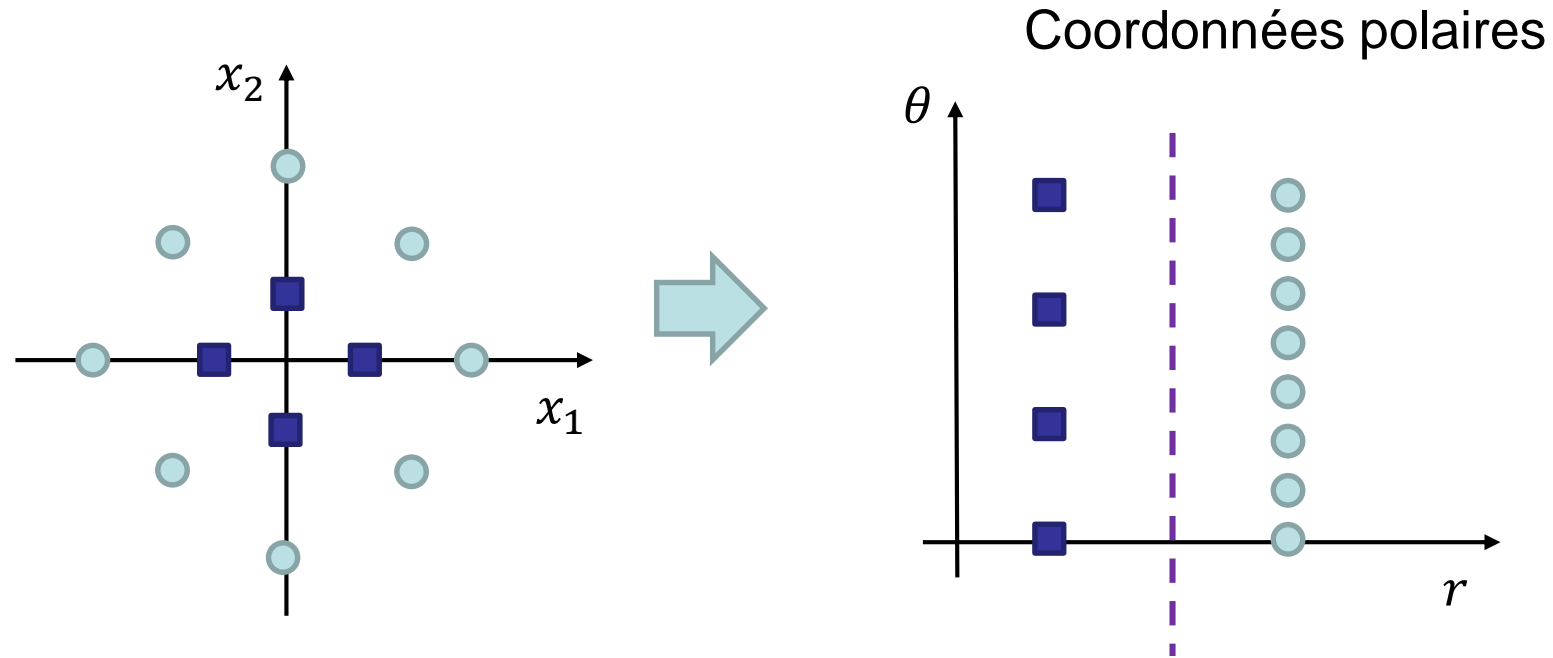
- Transformation non linéaire $\phi(x)$ pour séparer linéairement les données d'origine



$\phi(x)$ = Transformation polynomiale

Données non linéairement séparables

- Transformation non linéaire $\phi(x)$ pour séparer linéairement les données d'origine



$\phi(x)$ = Transformation polaire

Retour sur la formulation duale du SVM

Lagrangien

$$\max_{\alpha} \sum_i \alpha_i - \frac{1}{2} \sum_{i,j} \alpha_i \alpha_j y_i y_j \boxed{x_i x_j}$$

tq $\forall i, 0 \leq \alpha_i \leq C$

Produit scalaire
uniquement

« Kernel trick »

$$\begin{aligned} \max_{\alpha} \quad & \sum_i \alpha_i - \frac{1}{2} \sum_{i,j} \alpha_i \alpha_j y_i y_j K(\mathbf{x}_i, \mathbf{x}_j) \\ \text{tq} \quad & \forall i, 0 \leq \alpha_i \leq C \end{aligned}$$

Noyau

Le noyau K est un produit scalaire dans l'espace transformé:

$$K(\mathbf{x}_i, \mathbf{x}_j) = \phi(\mathbf{x}_i)^T \phi(\mathbf{x}_j)$$

Il est uniquement nécessaire de connaître la similarité entre données pour introduire la non linéarité dans le problème (avec des conditions dites de Mercer de semi-définie positivité de la matrice de Gram: $K(\mathbf{x}_i, \mathbf{x}_j)$).

Utilisation de noyaux dans les SVM

- Permet d'introduire des mesures de similarités propres au domaine étudié et sans avoir à gérer la complexité de la transformation.
- Permet de séparer modélisation = noyau de la classification et SVM (optimisation)
- Définit la fonction de classification à partir de noyaux « centrés » sur les vecteurs de support:

$$F(\mathbf{x}, \mathbf{w}) = b + \sum_i \alpha_i y_i \mathbf{K}(\mathbf{x}_i, \mathbf{x})$$

- La fonction de décision ne dépend que des vecteurs de support et de leur pondération (α_i).

Noyaux courants

- Polynômes de degrés supérieurs à d

$$K(\mathbf{x}, \mathbf{y}) = (\mathbf{x} \cdot \mathbf{y} + 1)^d$$

- Noyau gaussien

$$K(\mathbf{x}, \mathbf{y}) = \exp\left(-\frac{(\mathbf{x} - \mathbf{y})^T (\mathbf{x} - \mathbf{y})}{2\sigma^2}\right)$$

Paramètres à définir
= degré de liberté
supplémentaire

- Intersection d'histogrammes

$$K(\mathbf{x}, \mathbf{y}) = \sum_i \min(x^i, y^i)$$

Résumé sur SVM

- Une formulation optimale quadratique du problème de classification binaire:
 - Primal: optimisation d'un critère empirique + régularisation
 - Dual: permet d'introduire parcimonie et « kernel trick »→ plusieurs manières d'optimiser
- Les solutions s'expriment comme des combinaisons linéaires éparées de noyaux:

$$F(\mathbf{x}) = \text{sign}(b + \sum_i \alpha_i y_i \mathbf{K}(\mathbf{x}_i, \mathbf{x}))$$

où $\alpha_i > 0$ seulement pour les vecteurs de support, 0 sinon.

- En pratique, ce qu'il faut régler:
 - Le coefficient de régularisation: C
 - Le type de noyau et ses caractéristiques
 - Les paramètres de l'optimiseur

Multiclasse

Différents types de classification

- Binaire

$$\mathcal{A} = \{-1, 1\}$$

- Multi classe

$$\mathcal{A} = \{1, 2 \dots L\}$$

- Détection (quoi et où)

$$\mathcal{A} = \{1, 2 \dots L\} \times R^4$$

- Caractérisation des données:

- Rejet
- Anomalie

$$\mathcal{A} = \{1, 2 \dots L, \text{ambigu}, \text{inconnu}\}$$

Hypothèses multiples

- Toutes les classes/hypothèses ne se valent pas
 - Classes plus rares que d'autres (non équilibrées)
 - Coût d'une erreur de classification dépend des classes (Zèbre vs. Gazelle vs. Lion)
- Deux stratégies:
 - Optimiser un critère multi-hypothèse dans l'apprentissage
 - Par exemple entropie dans arbre de décision, softmax dans réseaux de neurones...
 - Utiliser un ensemble de classifieurs binaires
 - SVM, adaboost, perceptron...

Multiclasse à partir de classifieurs

- Comment passer d'une classification binaire à N classes?
- Plusieurs techniques:
 - One vs Rest
 - One vs One (ou All vs All)
- OVO:
 - On apprend autant de classifieurs que de **paires de classes** ($N(N-1)/2$)
 - Classification = choix de la classe ayant le plus de **votes**
 - **Pb**: peut être indécidable dans certains cas
- OVR:
 - On apprend **un classifieur par classe**
 - Classification = choix de la classe ayant **le meilleur score**
 - **Pb**: déséquilibre des données entre classe cible et « reste »

Evaluation du multi-classe

- Erreur globale:

$$Err = \frac{\text{nombre d'échantillons mal classés}}{\text{nombre d'échantillons testés}}$$

- Matrice de confusion:

$\text{conf}(i, j)$ = probabilité de classer comme i | vraie classe est j
estimée sur données de test

- Risque ou coût moyen

$$R = \sum_j \sum_i \lambda(i, j) \text{conf}(i, j) p(j)$$

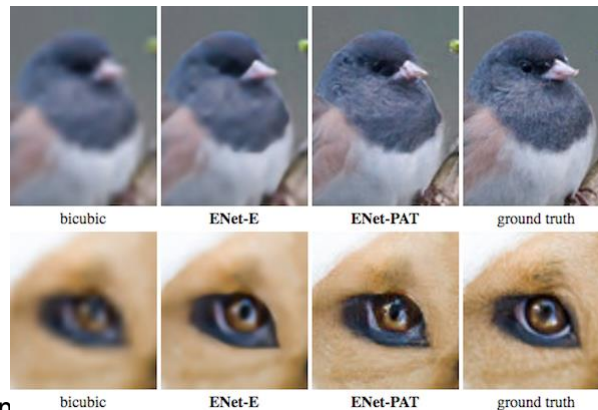
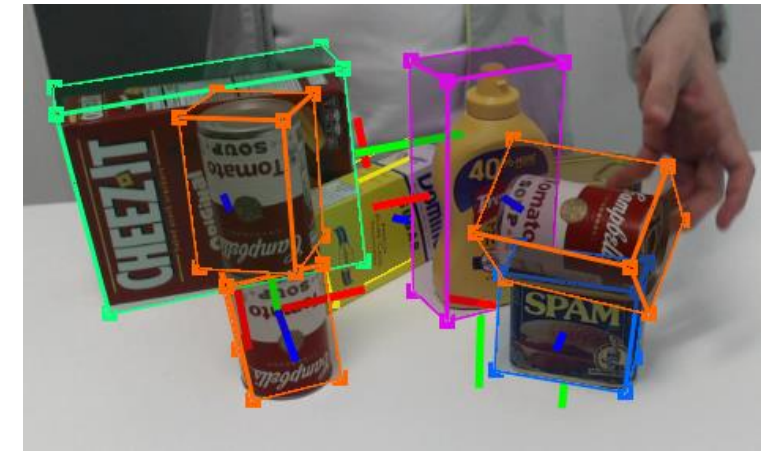
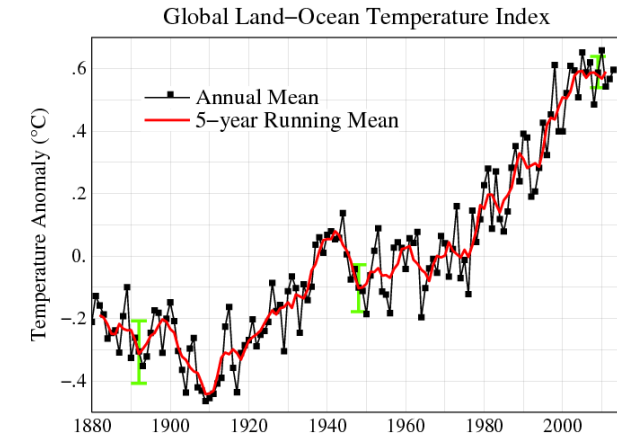
où $\lambda(i, j)$ est le coût de décider i lorsque j est vrai

Régression

A quoi ça sert

- **Prédire** une valeur (interpolation, extrapolation)
- Expliquer/détecter/repérer des corrélations/tendances

- Exemples de prédiction:
 - Prédiction de régime moteur
 - Prédiction de durée de survie
 - Estimation de prix
 - Prévision météo ou climatique
 - Prévision de cours de la bourse
 - Super résolution
 - Estimation de pose d'objet



Formulation de la régression

- Prédicteur: $W, x \mapsto y$
- Modèle : $P(y | x, W)$ ou $y = f(x, W) + \varepsilon$

Où

- entrée $x \in \mathbb{R}^M$, prédiction $y \in \mathbb{R}^p$
 - W paramètres du prédicteur estimé à partir d'un ensemble d'apprentissage: $\mathcal{L} = \{x_i, y_i\}_{i=1..N}$
 - ε variable aléatoire décrivant l'erreur de prédiction (souvent considérée gaussienne)
-
- C'est du « Machine Learning » (Apprentissage supervisé)
 - C'est du « Data Mining » (Estimation de dépendances entre variables)

Modèles linéaires

- La base de la régression
 - Fondements mathématiques solides
 - Calculs analytiques ou optimisation séquentielle
- Plusieurs manières de dépasser la linéarité
 - Modèles linéaires généralisés
 - Modèles à base de noyaux (« kernels »)
- Plusieurs manières de maîtriser la complexité
 - « Large margin » (cf. SVM)
 - Régularisateurs

Modèles linéaires généralisés (cas scalaire $y \in \mathbb{R}$)

- Principe simple: utiliser plusieurs **fonctions de base** ϕ encodant les données source (« features »)

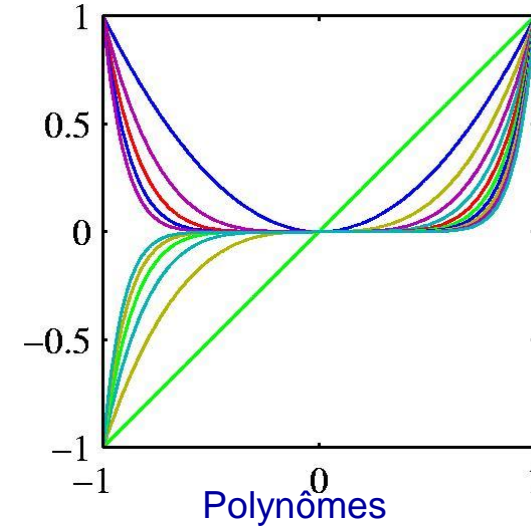
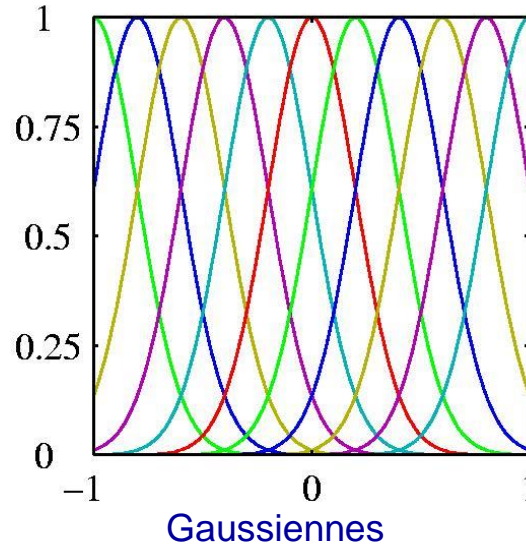
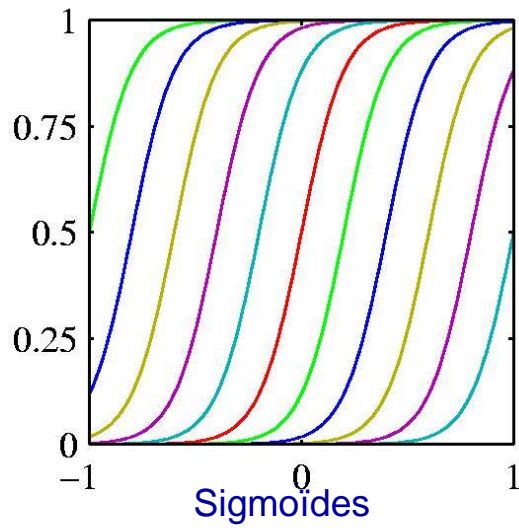
« biais »

$$f(\mathbf{x}, \mathbf{w}) = \underbrace{w_0}_{\text{« biais »}} + w_1 x_1 + w_2 x_2 + \dots = \mathbf{w}^T \mathbf{x}$$

$$f(\mathbf{x}, \mathbf{w}) = w_0 + w_1 \phi_1(\mathbf{x}) + w_2 \phi_2(\mathbf{x}) + \dots = \mathbf{w}^T \Phi(\mathbf{x})$$

- Une fois définies les fonctions, le problème reste **linéaire!**
- Comment trouver ces fonctions?
 - Se les donner
 - Les apprendre

Exemples classiques de fonctions de base 1D



Remarque: les sigmoïdes et gaussiennes sont des fonctions d'activation usuelles dans les réseaux de neurones

➔ les RN permettent d'apprendre les ϕ

Apprentissage = trouver W_{ML}

- Forme du prédicteur

$$y(\mathbf{x}, \mathbf{w}) = \sum_{j=0}^{M-1} w_j \phi_j(\mathbf{x}) = \mathbf{w}^T \boldsymbol{\phi}(\mathbf{x})$$

- Critère d'erreur (évaluation)

$$E_D(\mathbf{w}) = \frac{1}{2} \sum_{n=1}^N \{t_n - \mathbf{w}^T \boldsymbol{\phi}(\mathbf{x}_n)\}^2$$

- Principe statistique: maximum de vraisemblance

$$\mathbf{W}_{ML} = \underset{\mathbf{W}}{\operatorname{argmax}} P(y | \mathbf{x}, \mathbf{W})$$

Solution générale ($y \in \mathbb{R}^P$)

Lorsque les cibles sont vectorielles

$$\mathbf{W}_{\text{ML}} = \left(\Phi^T \Phi \right)^{-1} \Phi^T \mathbf{T}.$$

où $\mathbf{T} = [\mathbf{t}_1, \dots, \mathbf{t}_N]^T$ est la matrice des cibles ($N \times p$) $\mathbf{t}_k = [t_{1k}, \dots, t_{Nk}]^T$

Pour une cible scalaire on a

$$\mathbf{w}_k = \left(\Phi^T \Phi \right)^{-1} \Phi^T \mathbf{t}_k = \Phi^\dagger \mathbf{t}_k$$

où Φ^\dagger ne dépend que des données d'entrée.

$$\Phi = \begin{pmatrix} \phi_0(\mathbf{x}_1) & \phi_1(\mathbf{x}_1) & \cdots & \phi_{M-1}(\mathbf{x}_1) \\ \phi_0(\mathbf{x}_2) & \phi_1(\mathbf{x}_2) & \cdots & \phi_{M-1}(\mathbf{x}_2) \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \phi_0(\mathbf{x}_N) & \phi_1(\mathbf{x}_N) & \cdots & \phi_{M-1}(\mathbf{x}_N) \end{pmatrix}.$$

Moindre carrés régularisés (retour)

Idée: on rajoute une pénalisation des grandes valeurs des paramètres à la fonction de coût:

$$L(\mathbf{W}) = \sum_{i=1}^N (f(\mathbf{x}_i, \mathbf{W}) - y_i)^2 + \lambda \|\mathbf{W}\|^2$$

Coût d'attache
aux données



Dont l'optimum exact est alors:

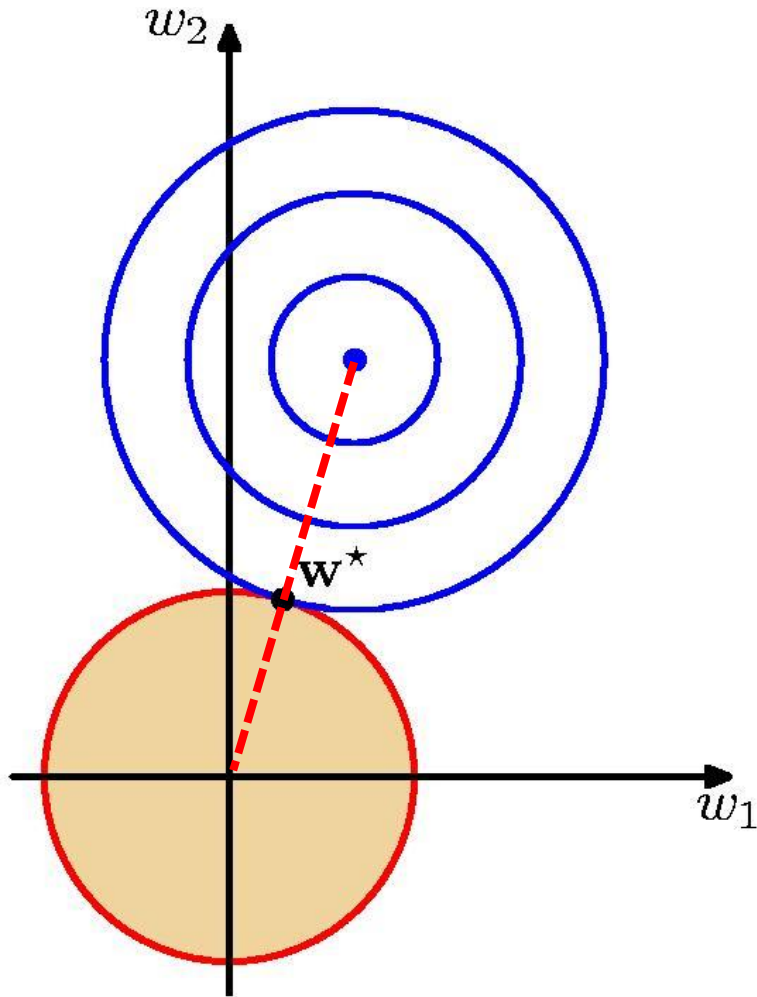
Paramètre de
régularisation



$$\mathbf{W}^* = (\Phi^t \cdot \Phi + \lambda I)^{-1} \Phi^t \mathbf{Y}$$

Si on pénalise les grandes valeurs des coefficients du polynôme, on obtient une fonction moins « zigzagante »

Comment fonctionne la régularisation L2

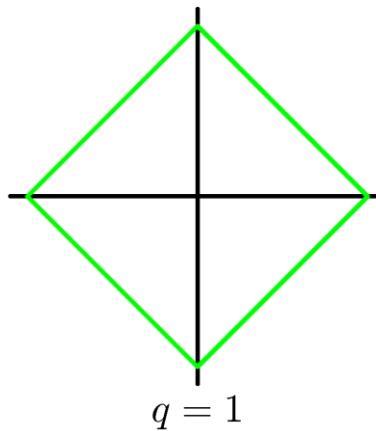
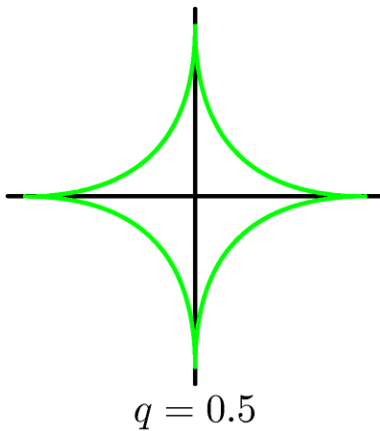


- Le coût global est la somme de deux « cuvettes ».
- La somme est aussi quadratique.
- Le minimum global est sur une ligne joignant l'origine et le minimum sans contrainte.
- La régularisation a pour effet de diminuer les poids.

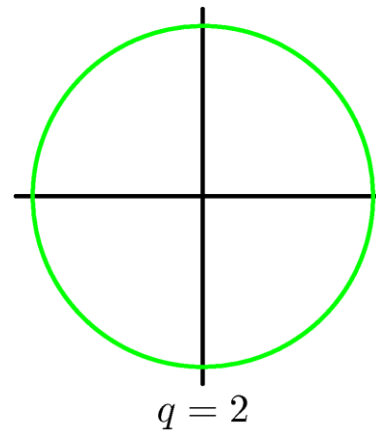
Autres types de régularisation

Une manière simple: utiliser une autre norme

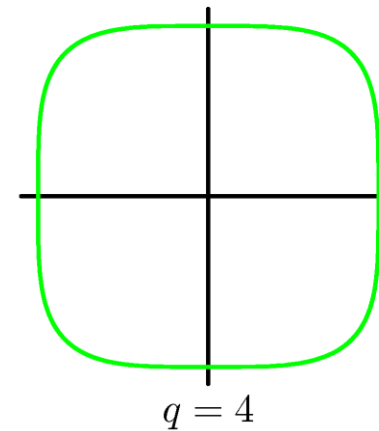
$$\frac{1}{2} \sum_{n=1}^N \{t_n - \mathbf{w}^T \phi(\mathbf{x}_n)\}^2 + \frac{\lambda}{2} \sum_{j=1}^M |w_j|^q$$



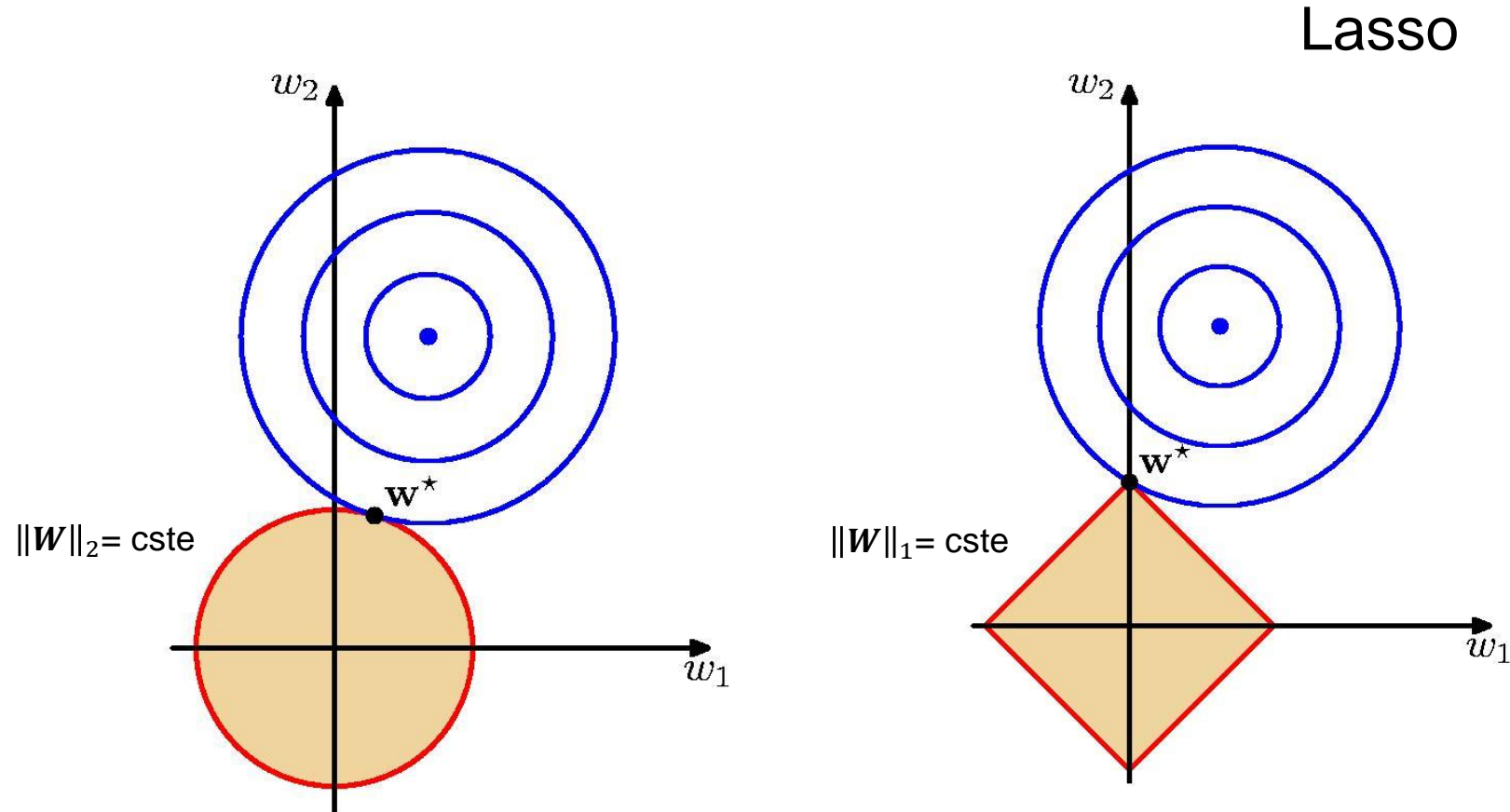
Lasso



Quadratic



Interprétation géométrique



Remarque: $w_1=0$ à l'optimum.
Parcimonie de la solution.

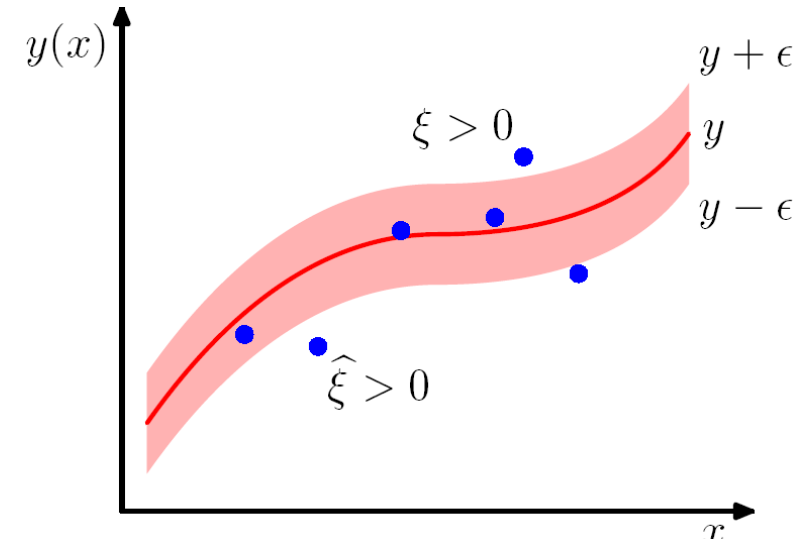
D'autres pénalisations...

- **The Tikhonov regularization:** $\psi(\mathbf{w}) = \frac{1}{2} \|\mathbf{w}\|_2^2$.
- **The ℓ_1 -norm:** $\psi(\mathbf{w}) = \|\mathbf{w}\|_1$.
- **The Elastic-Net:** $\psi(\mathbf{w}) = \|\mathbf{w}\|_1 + \gamma \|\mathbf{w}\|_2^2$.
- **The Fused-Lasso:** $\psi(\mathbf{w}) = \|\mathbf{w}\|_1 + \gamma \|\mathbf{w}\|_2^2 + \gamma_2 \sum_{i=1}^{p-1} |\mathbf{w}_{i+1} - \mathbf{w}_i|$.
- **The group Lasso:** $\psi(\mathbf{w}) = \sum_{g \in G} \eta_g \|\mathbf{w}_g\|_2$, where G are groups of variables.
- **The group Lasso with ℓ_∞ -norm:** $\psi(\mathbf{w}) = \sum_{g \in G} \eta_g \|\mathbf{w}_g\|_\infty$, where G are groups of variables.
- **The sparse group Lasso:** same as above but with an additional ℓ_1 term.
- **The tree-structured sum of ℓ_2 -norms:** $\psi(\mathbf{w}) = \sum_{g \in G} \eta_g \|\mathbf{w}_g\|_2$, where G is a tree-structured set of groups [15], and the η_g are positive weights.
- **The tree-structured sum of ℓ_∞ -norms:** $\psi(\mathbf{w}) = \sum_{g \in G} \eta_g \|\mathbf{w}_g\|_\infty$. See [15]
- **General sum of ℓ_∞ -norms:** $\psi(\mathbf{w}) = \sum_{g \in G} \eta_g \|\mathbf{w}_g\|_\infty$, where no assumption are made on the groups G .
- **The path-coding penalties of [24].**
- **the ℓ_1 -constraint.**

<https://gitlab.inria.fr/thoth/spams-devel>

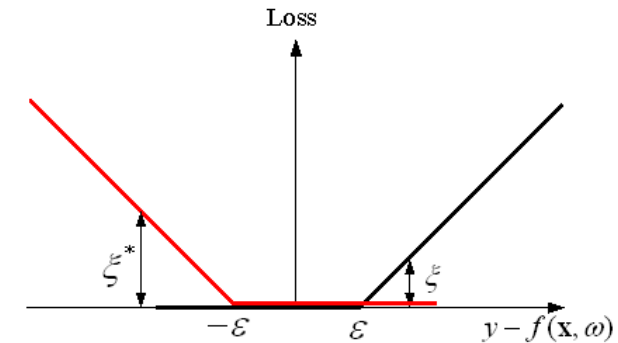
Support Vector Regression

$$\begin{aligned} & \text{Min } \frac{1}{2} \|w\|^2 + C \sum_{i=1}^n (\xi_i + \xi_i^*) \\ & \text{subject to } \begin{cases} u_i - \mathbf{w}^T \mathbf{x}_i - b \leq \epsilon + \xi_i \\ \mathbf{w}^T \mathbf{x}_i + b - u_i \leq \epsilon + \xi_i^* \\ \xi_i \geq 0, \xi_i^* \geq 0 \end{cases} \end{aligned}$$



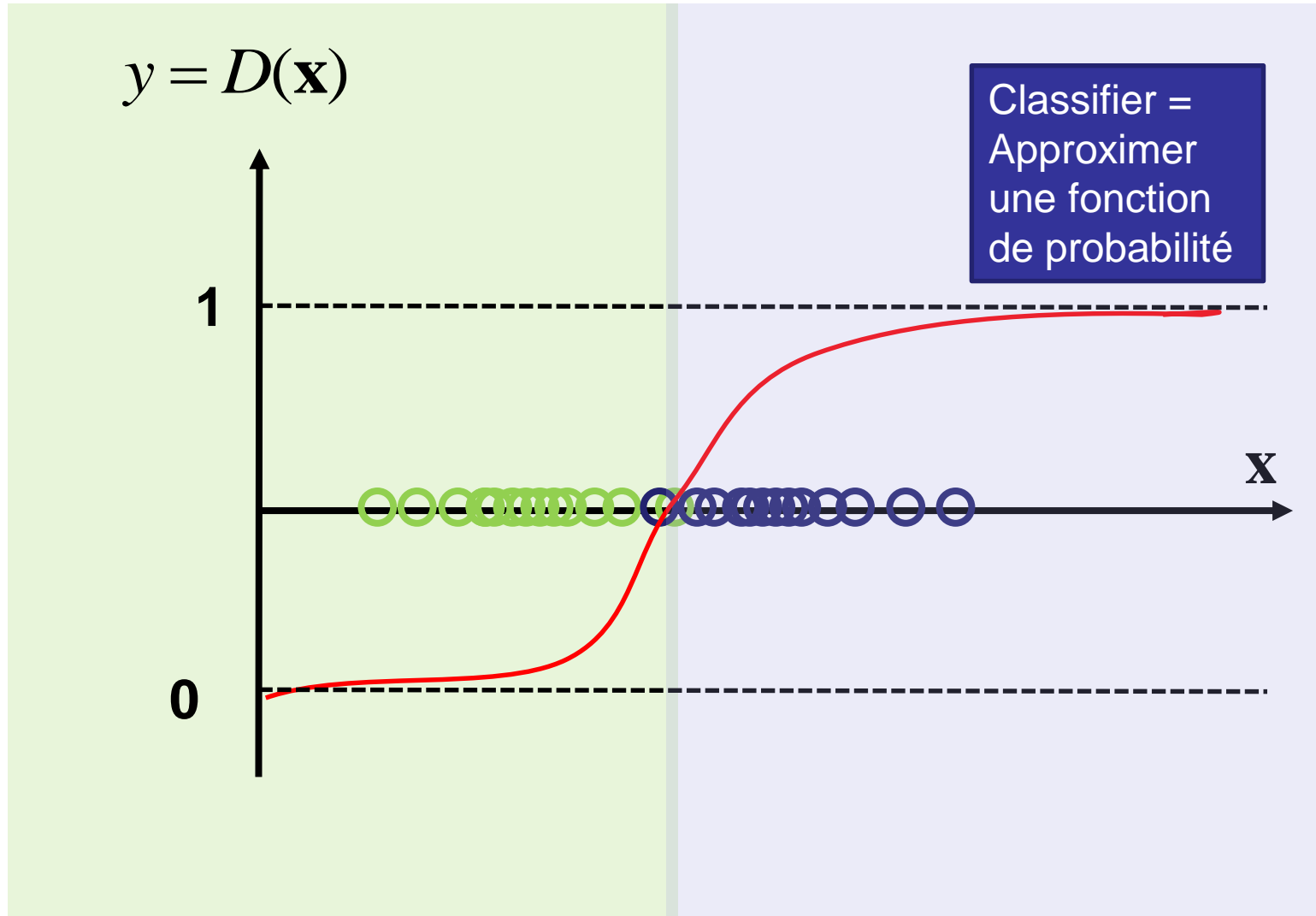
Formulation comparable à celle de la classification

- Fonction de coût différente (dépend d'un paramètre)
- Expression du « soft margin » symétrique
- « Kernel trick » applicable
- Sparsité de la solution



$$L_{\epsilon}(y, f(\mathbf{x}, \omega)) = \max(|y - f(\mathbf{x}, \omega)| - \epsilon, 0)$$

Classification et Régression: : même combat



Problème liés à la régularisation globale

- La pénalisation est isotrope: toutes les dimensions sont considérées simultanément, avec le même poids
 - on fait l'hypothèse que les dimensions sont comparables (en unité et signification)
 - Besoin de normaliser ou « blanchir » les données. Mais risque alors de louper les fortes corrélations entre données.
- Beaucoup de types de régularisation (et d'algorithmes d'optimisation...): comment choisir?
 - Validation croisée
 - Structure du problème (on veut forcer certaines dimensions ou certaines corrélations entre dimensions)
 - On veut obtenir une solution interprétable → sparsité. Mais il y a d'autres approches algorithmiques pour la rechercher directement .
- Remarque: la recherche sur les algorithmes « sparse » était très active avant le « deep learning era ». Maintenant moins...

Evaluer une régression

- Deux objectifs: prédiction ou modélisation
- Prédiction: on cherche la fonction ayant l'erreur de généralisation la plus faible
 - ➔ Erreur estimée sur base de test
 - ➔ Recherche des paramètres sur base de validation (validation croisée)
- Modélisation: on cherche la fonction qui explique au mieux les corrélations entre données
 - ➔ Tests statistiques (R^2 et p-values)

Formulation bayésienne

- Principes
 - Considérer la distribution jointe des sorties t conditionnellement aux entrées x comme gaussiennes
 - considérer les poids W comme des variables aléatoires
 - on évolue dans des espaces de distributions
- Loi a priori $P(W)$
- Vraisemblance des entrées $P(t | x, W)$
- Loi a posteriori $P(W | t)$
- Plus hyper paramètres de modélisation des lois (en général prises gaussiennes)

$$p(\mathbf{t} | \mathbf{X}, \mathbf{w}, \beta) = \prod_{n=1}^N \mathcal{N}(t_n | \mathbf{w}^T \mathbf{x}_n, \beta^{-1})$$

Gaussienne
variance du bruit de sortie

← vraisemblance

$$p(\mathbf{w} | \alpha) = \mathcal{N}(\mathbf{w} | 0, \alpha^{-1} \mathbf{I})$$

← prior

$$-\ln p(\mathbf{w} | \mathbf{t}) = \frac{\beta}{2} \sum_{n=1}^N (t_n - \mathbf{w}^T \mathbf{x}_n)^2 + \frac{\alpha}{2} \mathbf{w}^T \mathbf{w} + \text{const}$$

Inverse de la variance du prior

On retrouve une formulation
avec régularisation

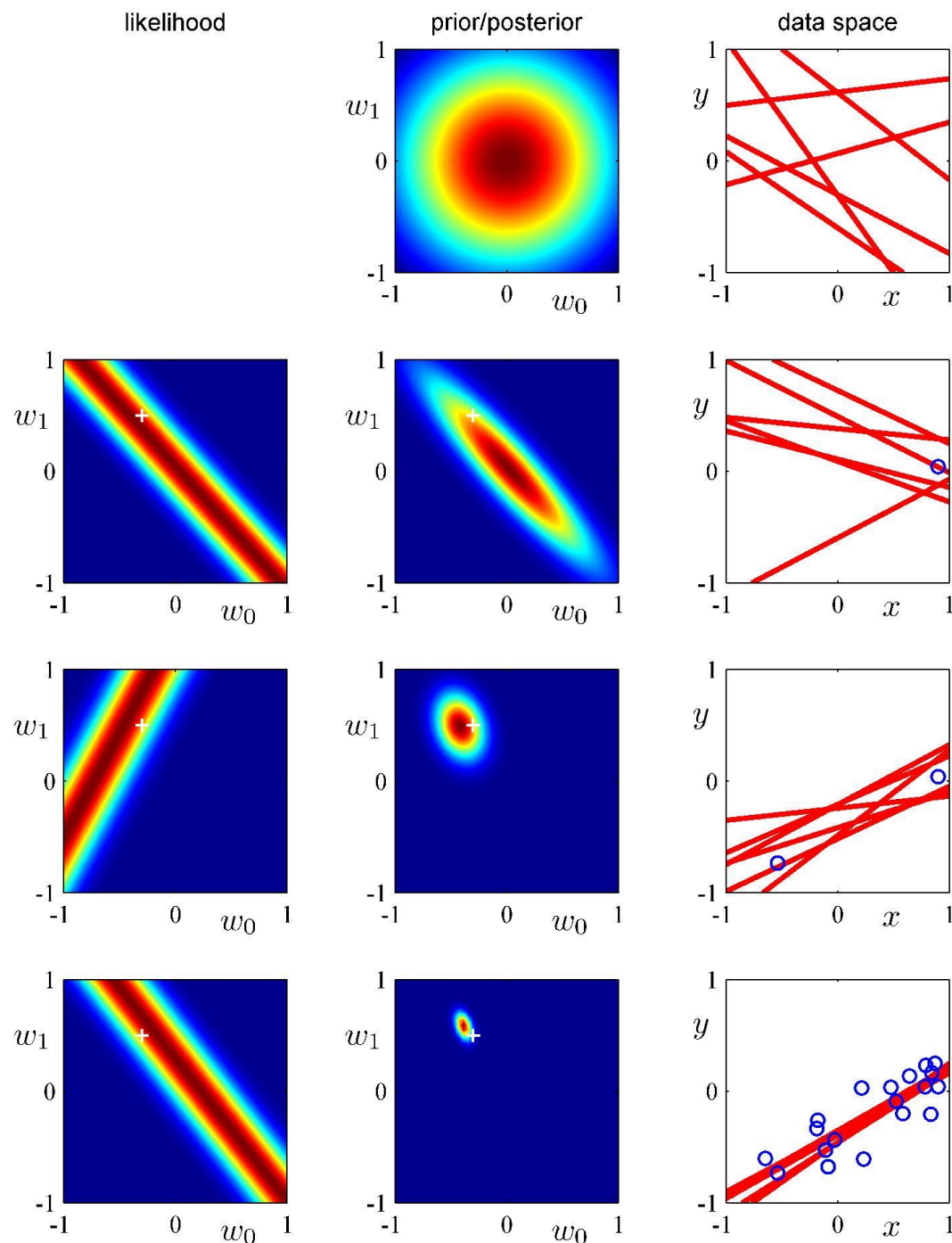
$$\lambda = \frac{\alpha}{\beta}$$

Exemple

- Modèle à deux paramètres:

$$y(x, \mathbf{w}) = w_0 + w_1 x$$

- On peut imaginer la loi a posteriori sur les poids
- La vraisemblance est gaussienne
→ loi a posteriori est aussi gaussienne si la loi a priori l'est



- Sans données, on échantillonne la loi a priori

- La loi a priori a peu d'impact si 20 points

Utilisation de la loi a posteriori

- Elle permet de faire des prédictions, des tirages aléatoires, des estimations d'intervalle de confiance...
- Dans le cas gaussien, on peut calculer explicitement en intégrant sur les paramètres

$$p(t_{test} \mid x_{test}, \alpha, \beta, D) = \int p(t_{test} \mid x_{test}, \beta, \mathbf{w}) p(\mathbf{w} \mid \alpha, \beta, D) d\mathbf{w}$$

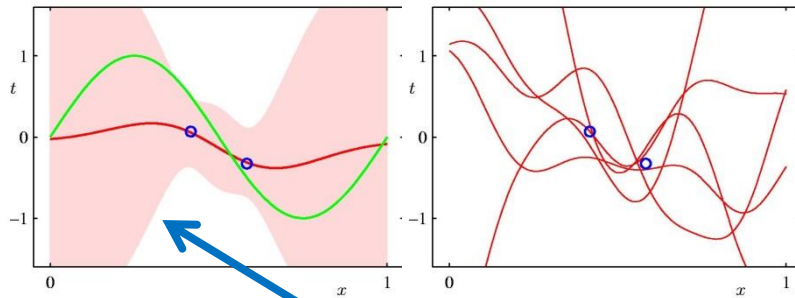
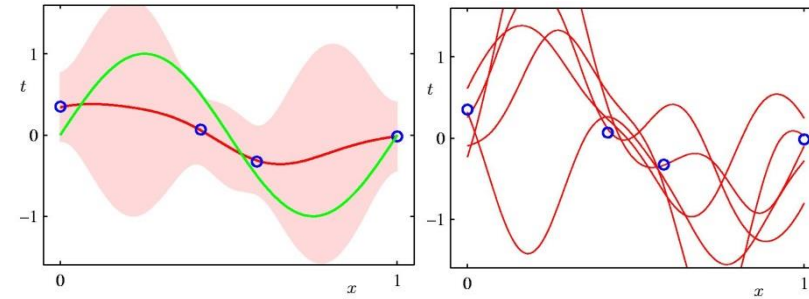
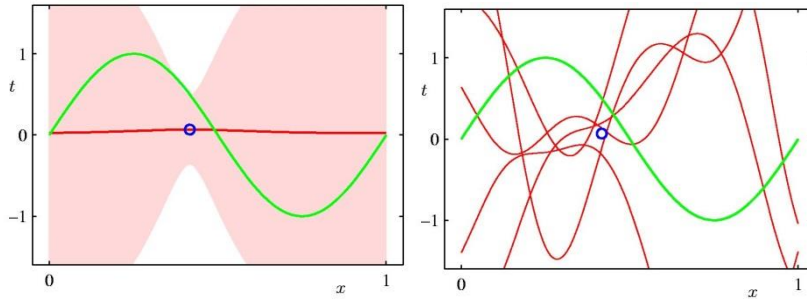
Données
d'apprentissage

Paramètre
du bruit de
sortie

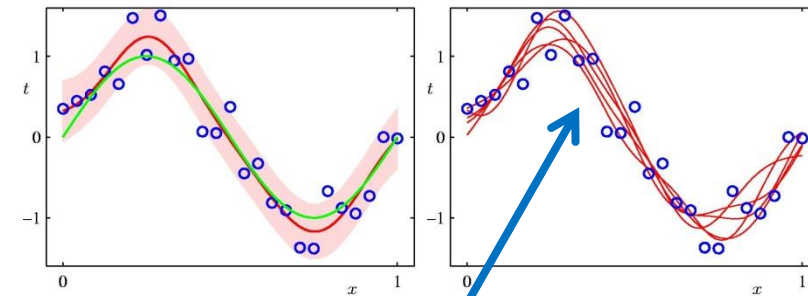
Paramètre
du prior

- On peut aussi introduire directement les corrélations dans les modèles et utiliser le « kernel trick »
- ➔ Processus Gaussiens (« kriging »)

Exemple de prédiction à partir d'une base de fonctions sinusoïdales



Intervalle de confiance
à un écart-type +
moyenne

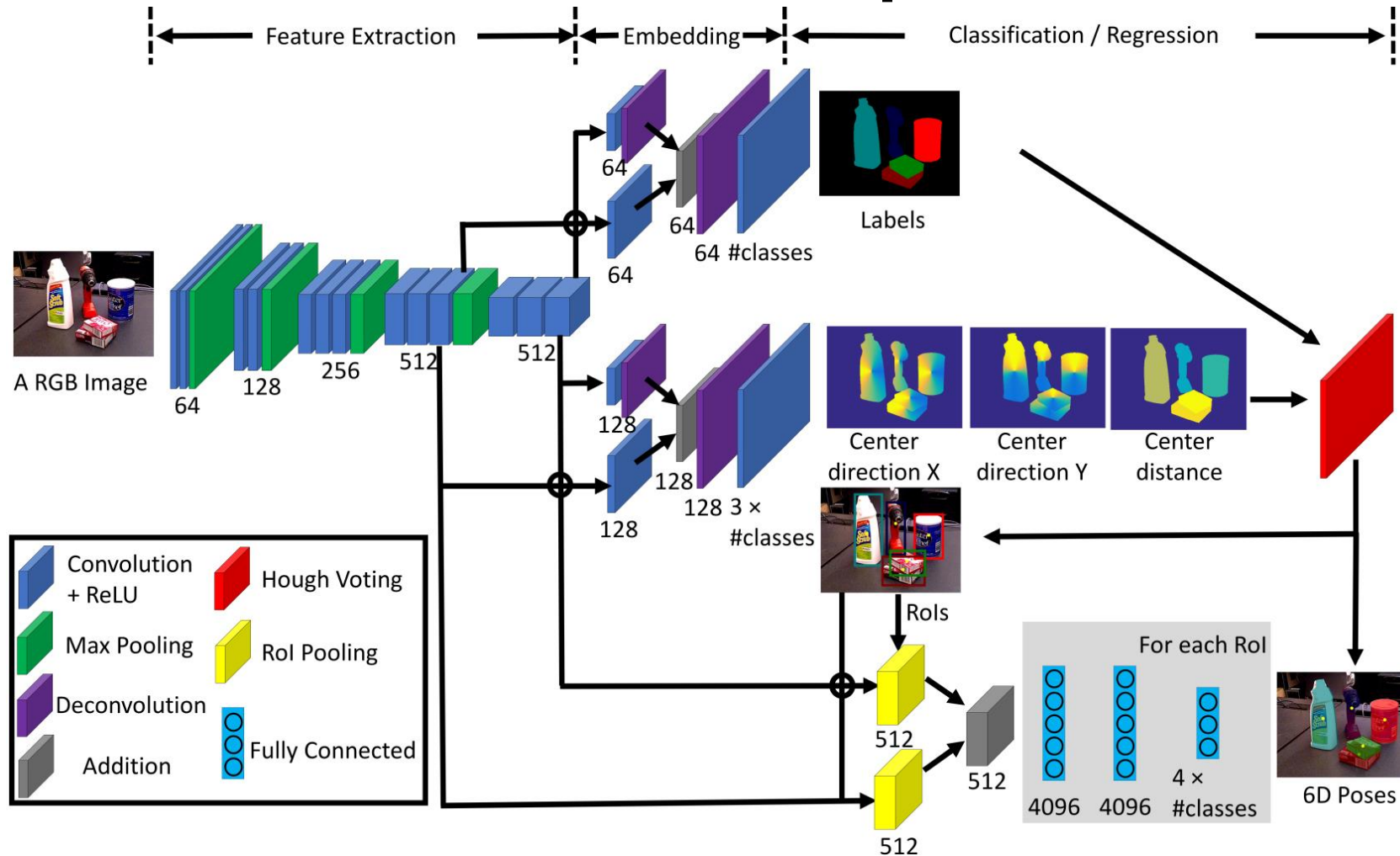


Echantillonnage de
la loi a posteriori

Régression et Deep Learning

- Les RN sont des fonctions paramétriques
- On dispose d'un algorithme « générique » d'optimisation: gradient stochastique (et variantes)
- Fonction de coût: erreur quadratique, cosinus...
- Difficulté: comment introduire la régularisation?
 - « Weight decay » (pénalisation L2)
 - « Drop-out »
 - « Early stopping »
 - Ajout de bruit
 - Multi-tâche
 - Lasso ?
 - Discussion générale ici: <https://www.deeplearningbook.org/contents/regularization.html>

Estimation de pose 6D



<https://www.groundai.com/project/posecnn-a-convolutional-neural-network-for-6d-object-pose-estimation-in-cluttered-scenes/>

« Single image super-resolution » en deep learning

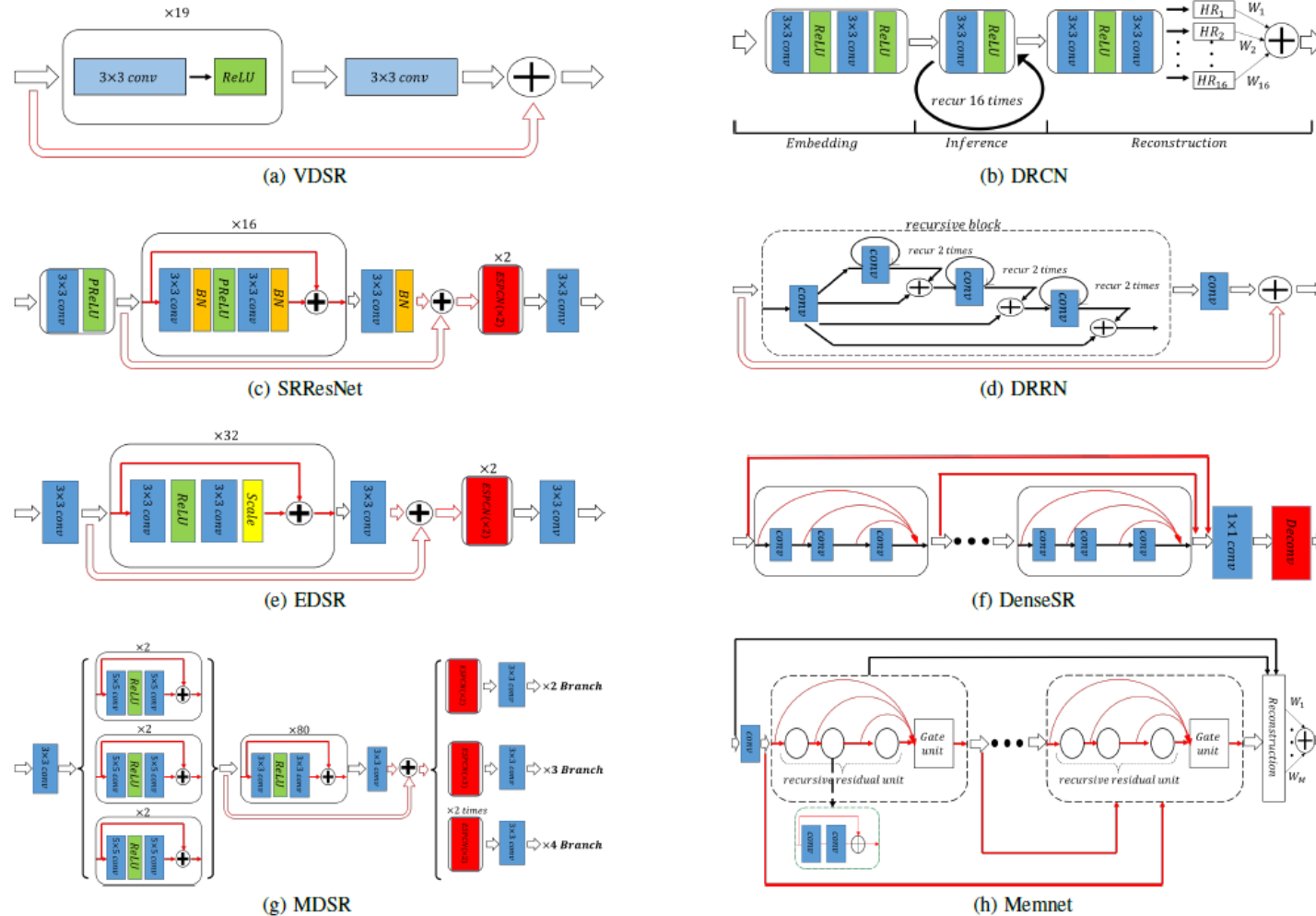


Figure 5: Sketch of several deep architectures for SISR.

Yang, W., Zhang, X., Tian, Y., Wang, W., & Xue, J. H. (2018). Deep learning for single image super-resolution: A brief review. *arXiv preprint arXiv:1808.03344*.

Régression: les questions à se poser

- Quels sont les modèles & algorithmes?
 - Modèles linéaires généralisés
 - Processus gaussiens (krigeage)
 - Ensembles de prédicteurs (random forest, boosting, bagging...)
 - Réseaux de neurones
- Comment valider les modèles?
 - Validation croisée
 - Tests statistiques
- Comment maîtriser les grandes dimensions?
 - Projection / Construction de caractéristiques (« feature construction »)
 - Sélection de caractéristiques (« feature selection »)
 - Sparsité
- Comment contrôler les données aberrantes (« outliers »)?
 - Régularisation
 - Estimateurs robustes
 - RANSAC

A retenir

- Régularisation
 - Un moyen de contrôler le compromis biais-variance
- SVM
 - Un algorithme optimal et flexible qui permet de traiter un grand nombre de configurations de données (en dimension raisonnable)
- Validation croisée
 - Un moyen empirique d'estimer l'erreur de généralisation
 - Une technique pour optimiser les hyper-paramètres (par ex. ceux du SVM)
- Régression
 - Plusieurs types de pénalisation
- Multi-classe
 - Un problème qui peut s'exprimer et se résoudre de différentes manières

Implémentations logicielles

SPAMS

- Bibliothèque orientée sparsité
- <https://gitlab.inria.fr/thoth/spams-devel>

Scikit-learn

- La plupart des modèles classiques implémentés
- Réseaux de neurones (mais pas profonds)
- https://scikit-learn.org/stable/supervised_learning.html#supervised-learning

Pytorch

- Quelques exemples sur le site (<https://github.com/pytorch/examples>)
 - Régression polynomiale, Super-resolution
- Quelques tutoriels sur le web

Tensorflow

- Quelques modules élémentaires
 - LinearRegressor, DNNRegressor
- Un tutoriel https://www.tensorflow.org/tutorials/keras/basic_regression

Kaggle

- Plein d'exemples dans les « kernels »

Références et sources

- Présentations et livre de C. Bishop (<https://www.microsoft.com/en-us/research/people/cmbishop/#!prml-book>)
- Cours de G. Hinton (<http://www.cs.toronto.edu/~hinton/csc2515/lectures.html>)
- Autres livres (en ligne):
 - Elements of Statistical Learning
<https://web.stanford.edu/~hastie/Papers/ESLII.pdf>
 - An Introduction to Statistical Learning
<http://www-bcf.usc.edu/~gareth/ISL/>
 - Gaussian processes
<http://www.gaussianprocess.org/gpml/>
 - Machine Learning: a Probabilistic Perspective
<https://www.cs.ubc.ca/~murphyk/MLbook/index.html>