Machine Learning
Cours 1

Master 1 DAC

Nicolas Baskiotis
nicolas.baskiotis@sorbonne-universite.fr

équipe MLIA,
Institut des Systèmes Intelligents et de Robotique (ISIR)
Sorbonne Université

S2 (2024-2025)

Plan

1. Organisation de l'UE
2. Introduction
3. Les problématiques générales
4. Classification bayésienne
5. Estimation de densité par histogramme
6. Estimation de densité par noyaux
7. Estimation de densité et classification

Informations administratives

Crénaux

- Cours : Mercredi 16h-18h
- TD/TME :
  - groupe 1 : Mardi 8h30-12h45 (Nicolas Baskiotis)
  - groupe 2 : Jeudi 8h30-12h45 (Clément Rambour)
  - groupe MLL+CogSup : Mercredi 8h30-12h45 (Stéphane Doncieux/Arnaud Dapony)

Supports et références

- Site du master : `http://dac.lip6.fr/master/ml/`
- Beaucoup de références on-line, beaucoup de ebooks et de livres, cf site
- en cas de questions/problèmes : $\rightarrow$ Mattermost : channel `ML` (en priorité) $\rightarrow$ email : `prénom.nom@sorbonne-universite.fr`

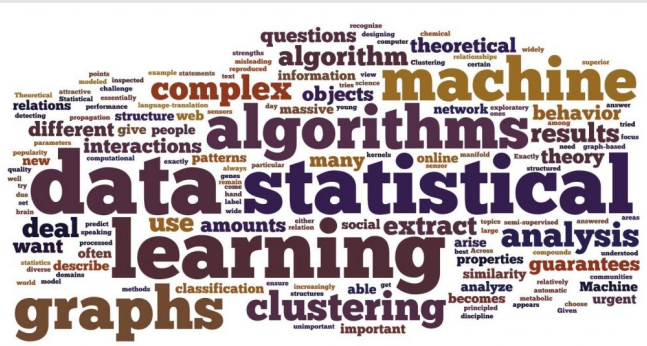
Évaluation

- CC : travail en TME, projet et partiel
- Examen
- Pour MLL : que partiel/examen et TME.

Plan

1. Organisation de l'UE
2. **Introduction**
3. Les problématiques générales
4. Classification bayésienne
5. Estimation de densité par histogramme
6. Estimation de densité par noyaux
7. Estimation de densité et classification

Apprentissage artificielle ? (Machine Learning)

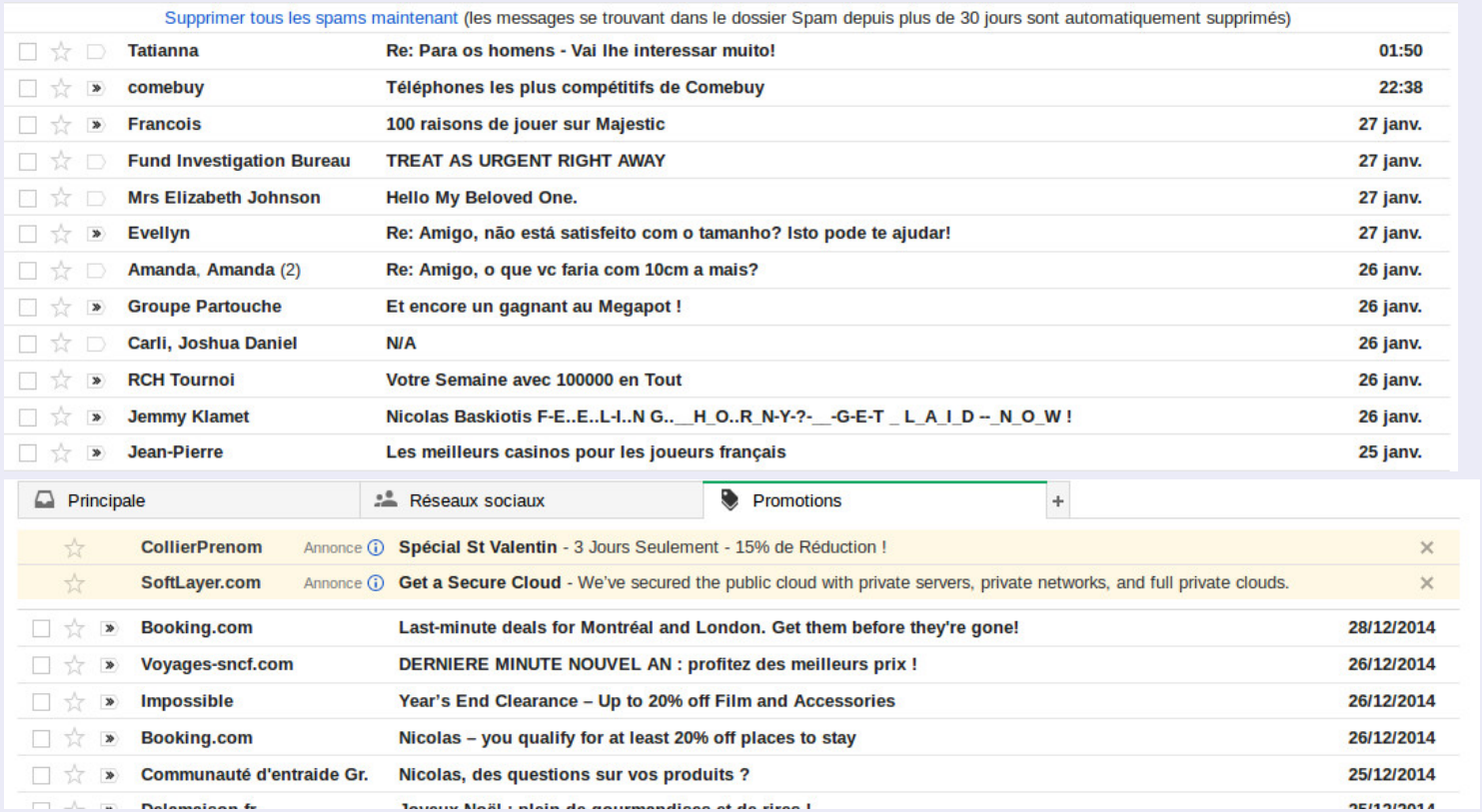


A votre avis, ça regroupe quoi ?

En texte

Classification de documents

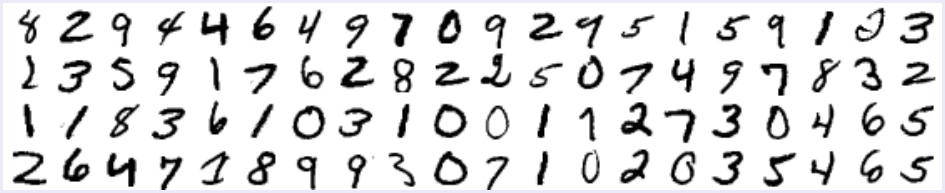
E-mails en spam, shopping, travail, . . .



gmail.com

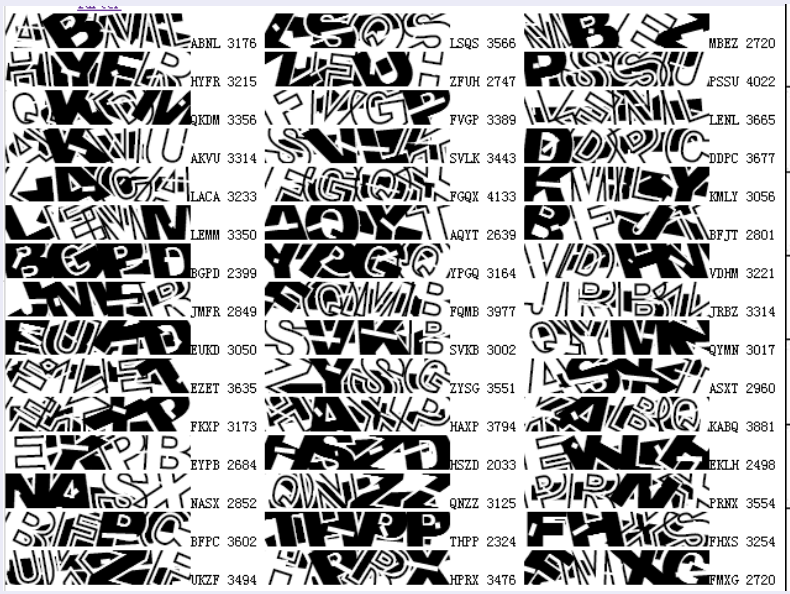
En texte toujours

Reconnaissance de chiffres



Ou de captcha

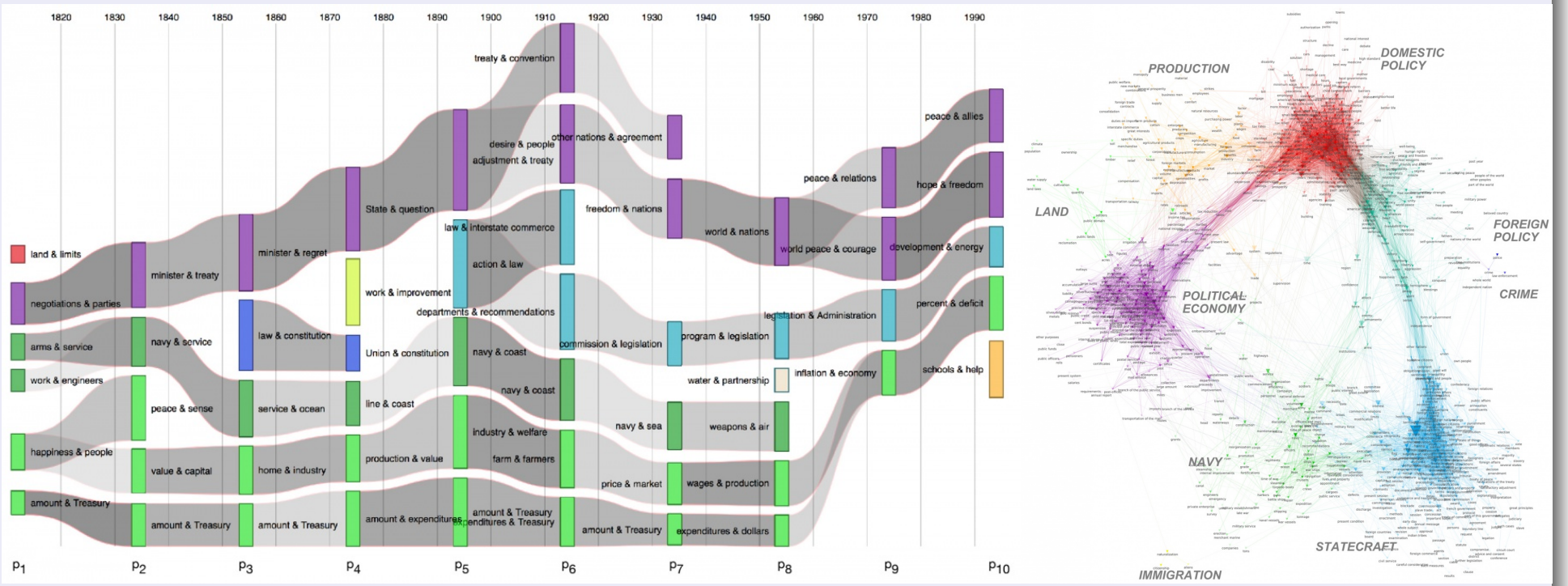
[Yann et al. 08], Newcastle University



Characters under typical distortions	Recognition rate
	~100%
	96+%
	100%
	98%
	~100%
	95+%

Sur des documents

Détection de thèmes (topic detection)



Analyse de 255 discours de l'état de l'union, États-Unis [Rule et al, 2014]

Et plein d'autres applications : traduction, détection de plagiat, résumé automatique, . . .

$\Rightarrow$ U.E. Traitement Automatique du Langage

En image

Détection de visages (opencv)

Mais aussi ... (betafaceapi.com)

	Score: 0.42 X: 398.67 Y: 29.66 Width: 26.79 Height: 26.79 Angle: -5.45	age : 37 (16%), gender : male, race : white, chin size : average, color background : 4c5042 (15%), color clothes middle : 3295eb (48%), color clothes sides : 38a9f5 (96%), color eyes : ac8066, color hair : fbf2ea (80%), color mustache : a56855 (65%), color skin : dbb5a1, eyebrows corners : extra low, eyebrows position : average, eyebrows size : extra thin, eyes corners : low, eyes distance : average, eyes position : average, eyes shape : extra round, glasses rim : no, hair beard : none, hair color type : blond (80%), hair forehead : yes, hair length : none, hair mustache : thick, hair sides : very thin, hair top : short, head shape : average, head width : extra narrow, mouth corners : low, mouth height : extra thin, mouth width : extra small, nose shape : extra straight, nose width : wide, teeth visible : no [collapse]
	Score: 0.57 X: 216.66 Y: 155.08 Width: 28.34 Height: 28.34 Angle: 0.95	age : 46 (23%), gender : male, race : white, chin size : extra small, color background : 0c0c0d (36%), color beard : 4a2617 (50%), color clothes middle : a22e55 (82%), color clothes sides : a54031 (74%), color eyes : 966a58, color hair : 655348 (77%) , color skin : b98f78, eyebrows corners : average, eyebrows position : extra high, eyebrows size : extra thin, eyes corners : average, eyes distance : close, eyes position : extra low, eyes shape : extra thin, glasses rim : no, hair beard : short, hair color type : brown light (77%), hair forehead : no, hair length : short, hair mustache : none, hair sides : thin, hair top : short, head shape : rect, head width : extra wide, mouth corners : average, mouth height : extra thin, mouth width : average, nose shape : average, nose width : extra narrow, teeth visible : no [collapse]

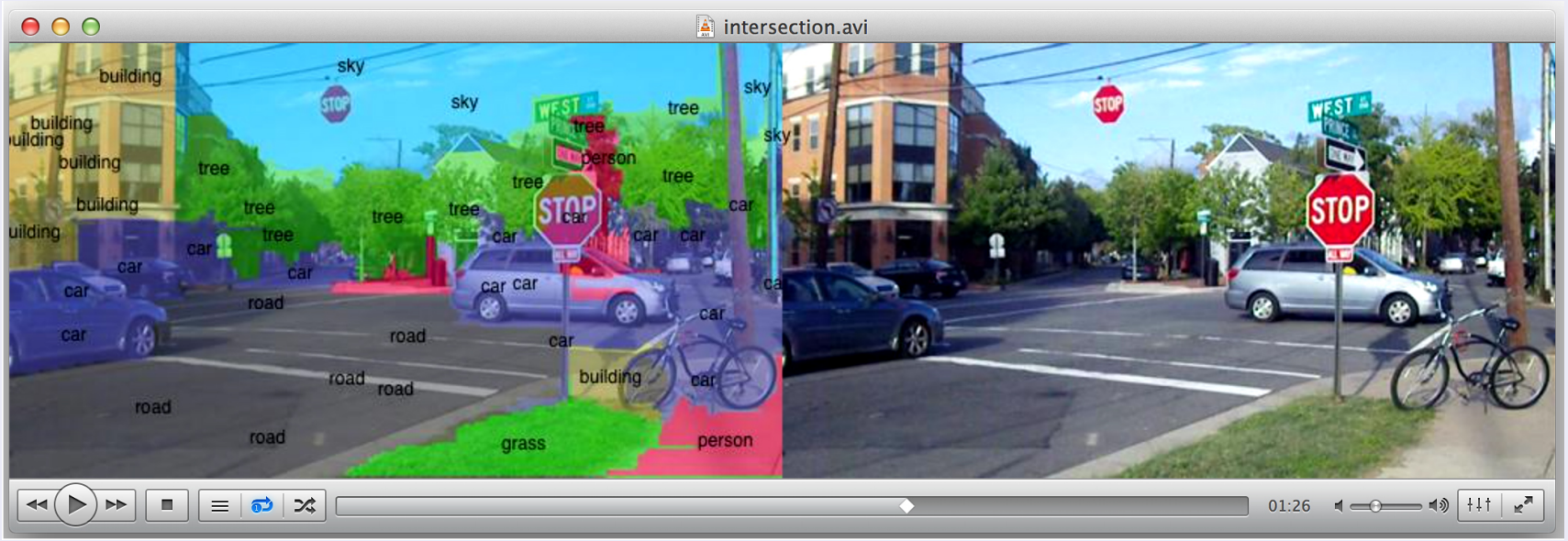
En image

Catégorisation et organisation automatique

En image

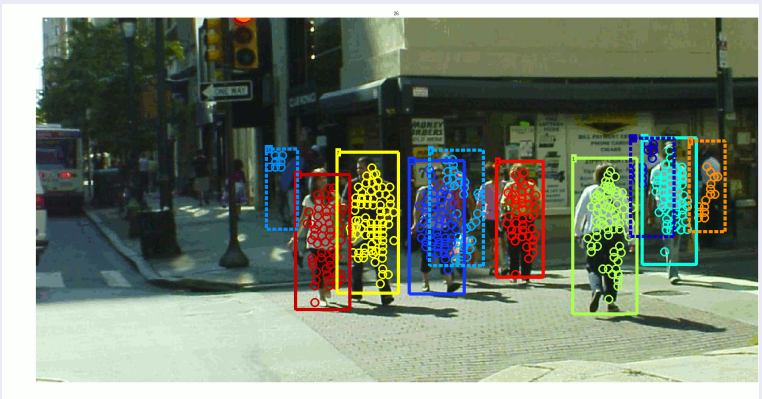
Détection d'objets

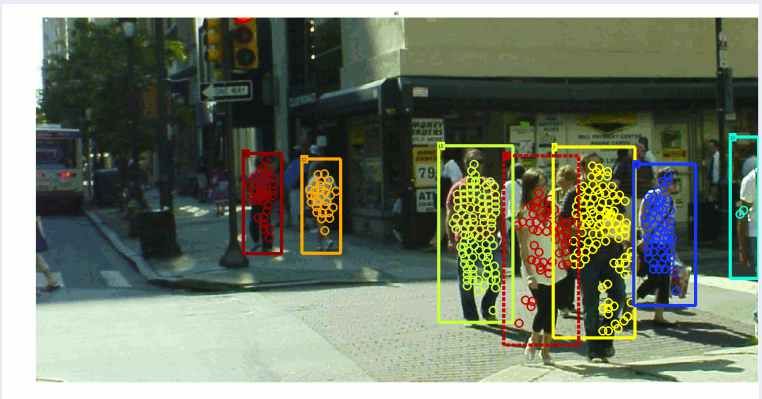
teradeep.com, Purdue University



Tracking

[Fragkiadaki et al. 12], Pennsylvania University

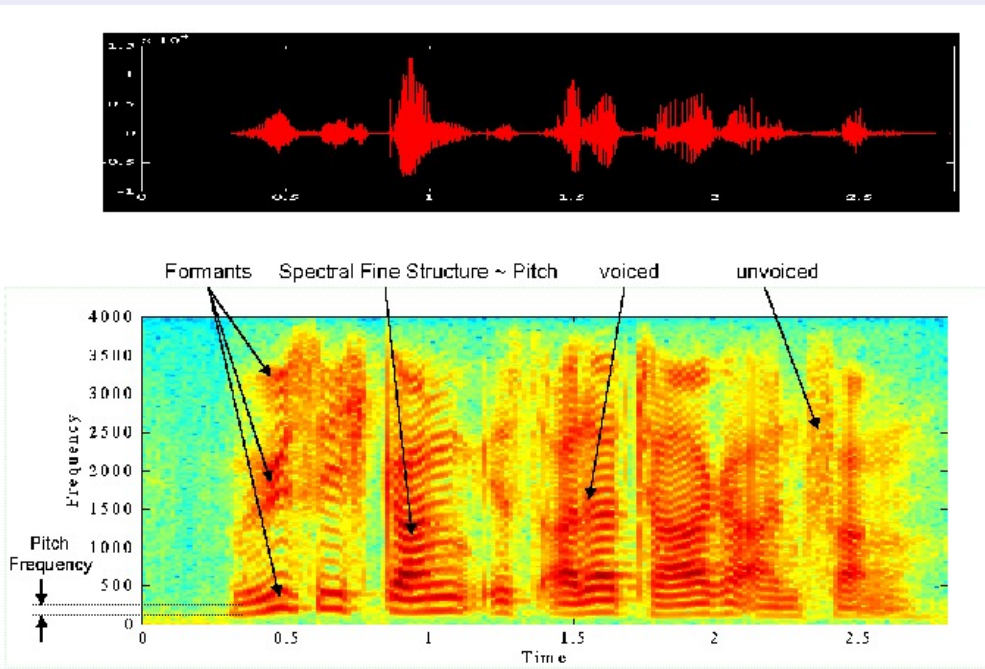


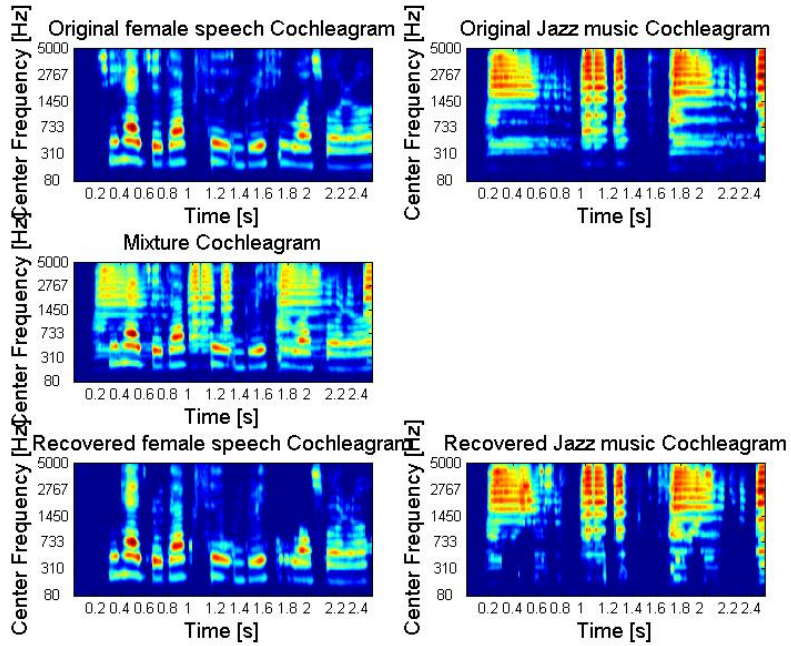


Et l'audio . . .

Reconnaissance de la parole, séparation de sources

http://markus-hauenstein.de

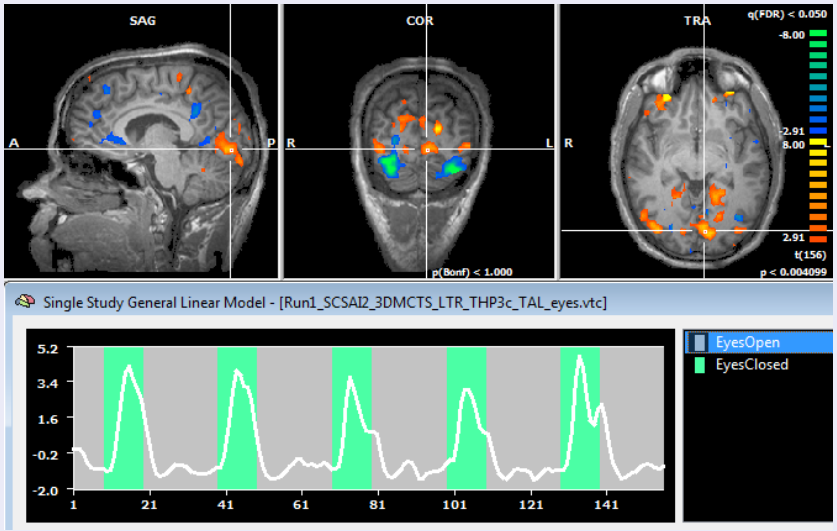




Mais aussi débruitage, transcription musicale, reconnaissance du locuteur, classification/identification de musiques. . .

Interface cerveau-machine (BCI)

Classification d'actions, de pensées

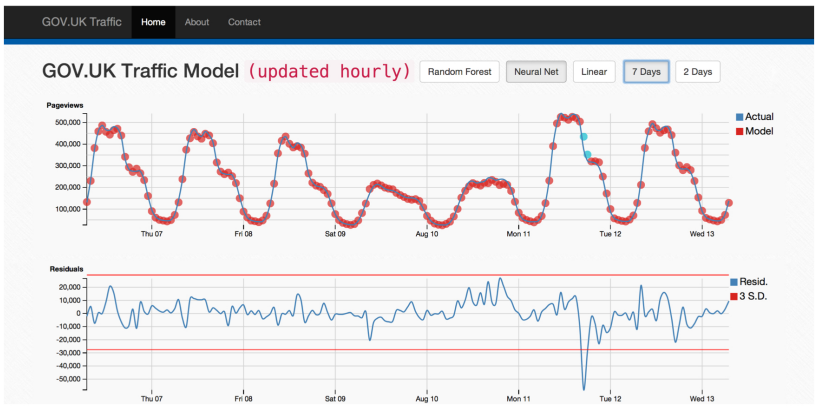


Contrôle

Objets connectés

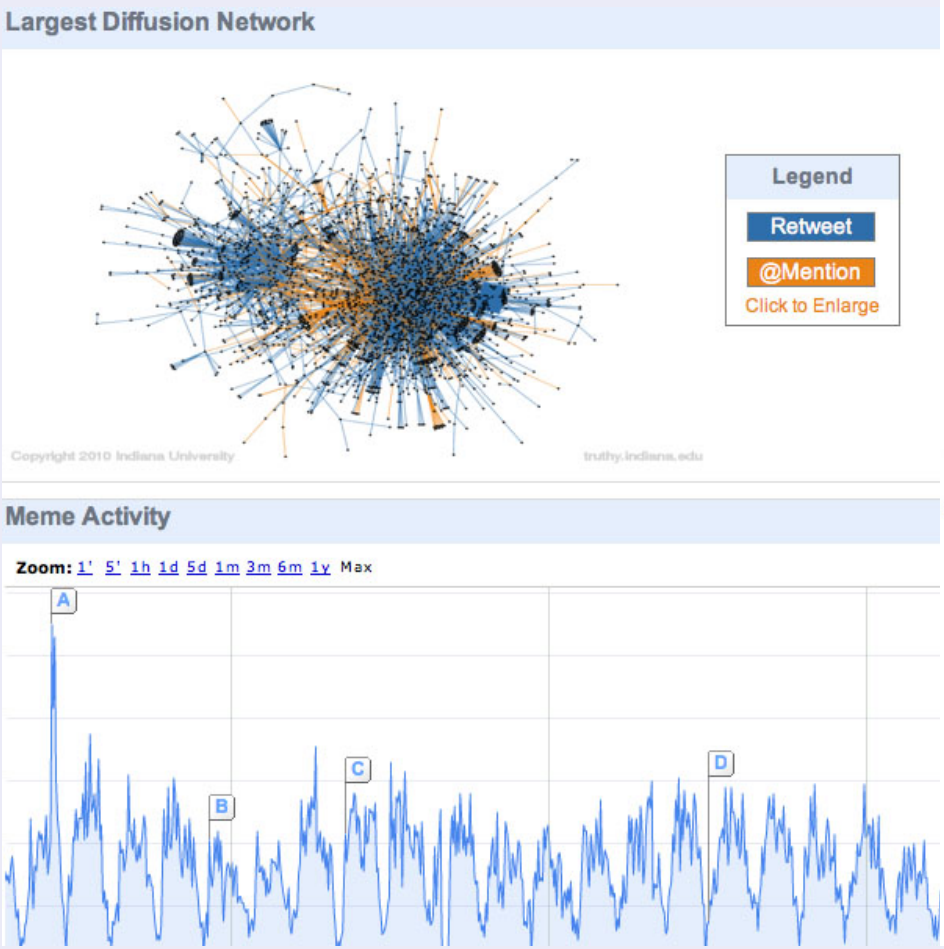
Traqueurs d'activité

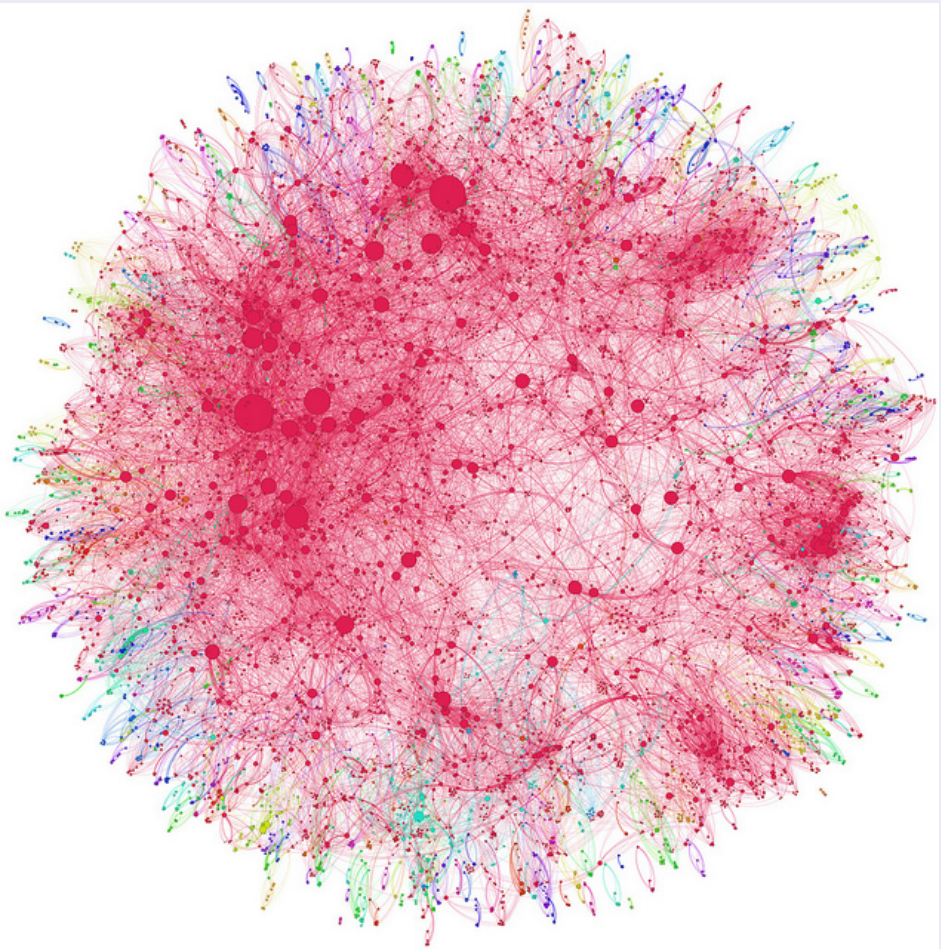
Surveillance vidéo, monitoring consommation électrique, sécurité réseau



Réseaux sociaux

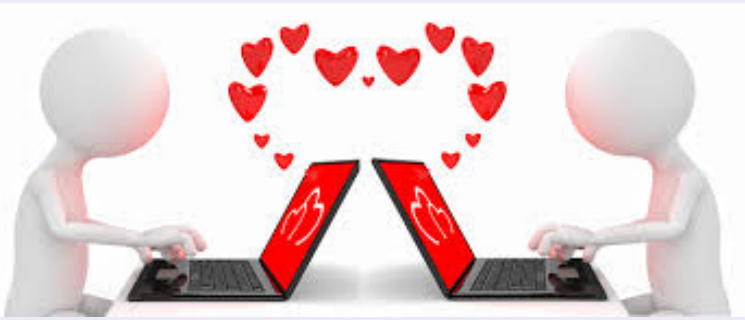
Détection de communauté, phénomènes de diffusions, classification





Matchmaking

de profils, sites de rencontre



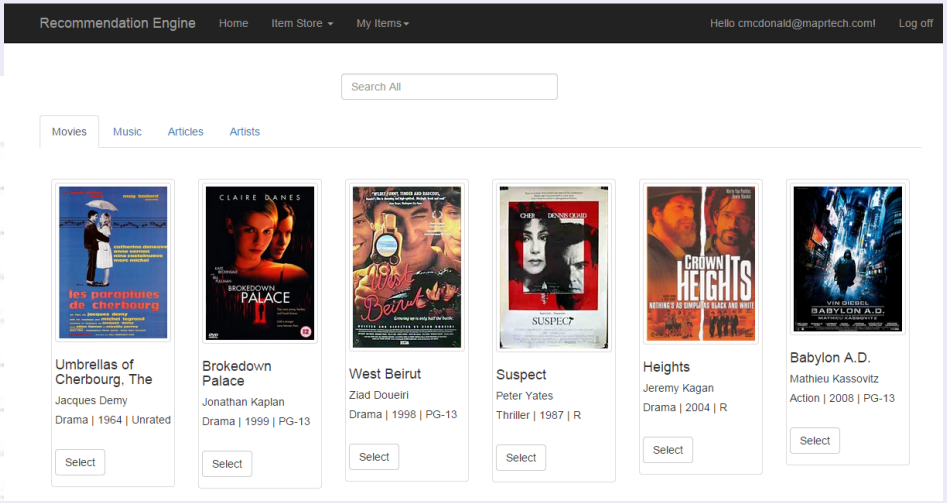
badoo tinder meetic adopteunmec.com

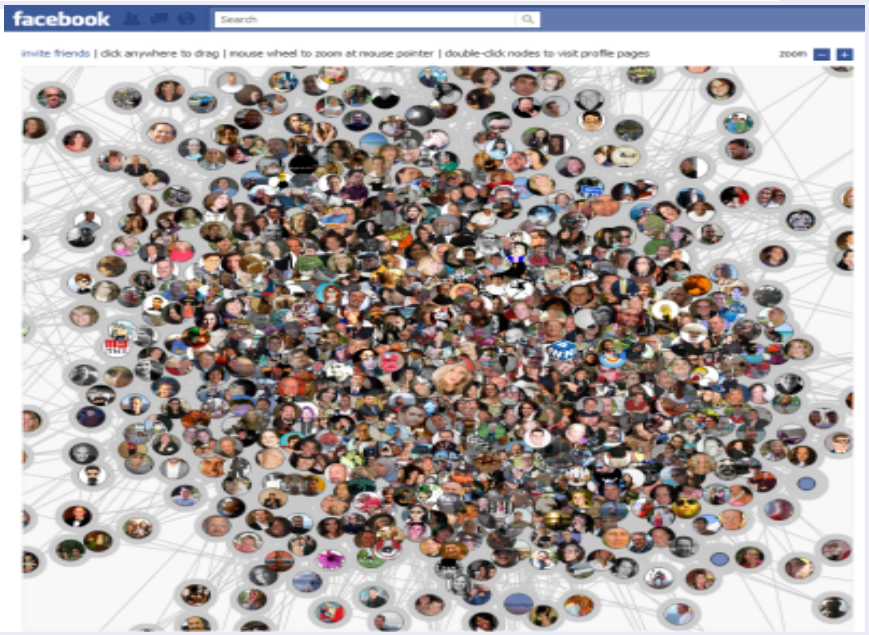
Experts, CV - Emplois, Jeux

LinkedIn viadeo

Systèmes de recommendation

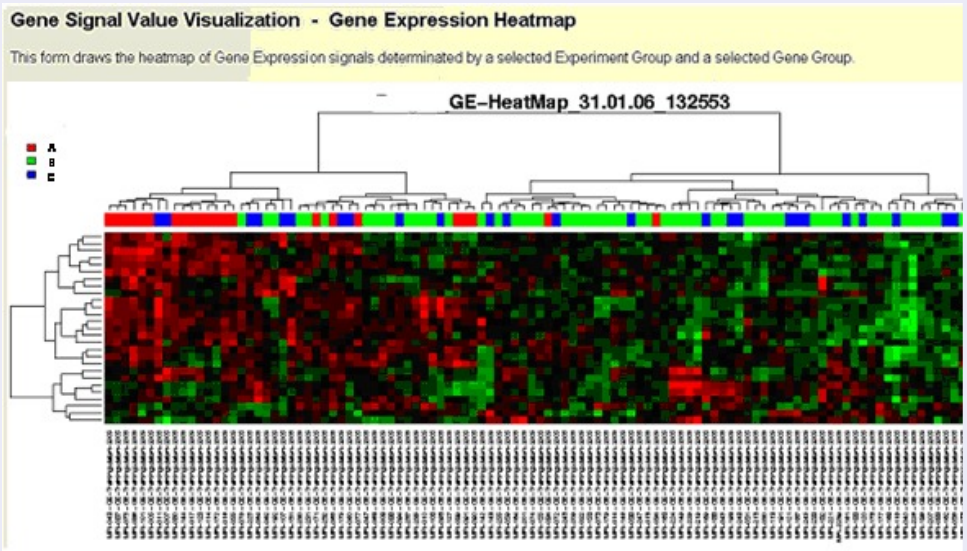
De musiques, de films, de produits, d'amis





Et dans d'autres sciences

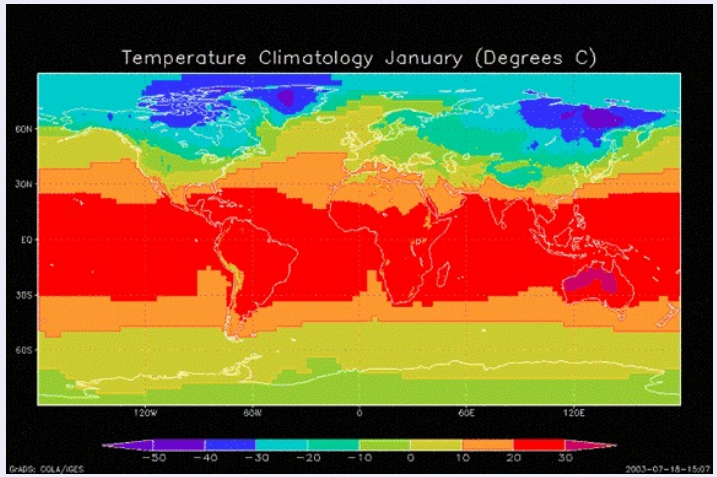
Biologie IZBI, Leipzig University



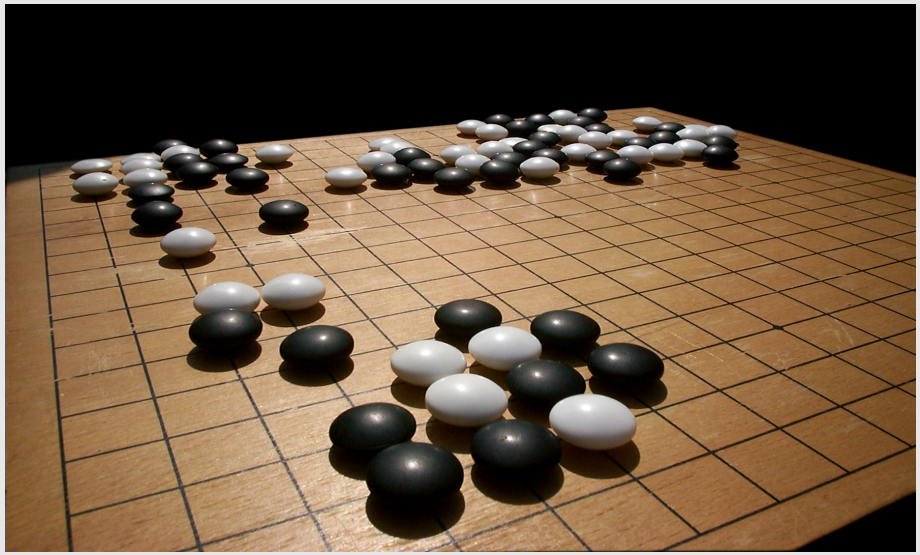
Économie

Astronomie

Climatologie (complétion données)



Dans les jeux et la robotique



Dans l'industrie

Le Machine Learning défini par lui même

NI

Donne moi une courte définition du Machine Learning

Le Machine Learning est une technique d'apprentissage automatique utilisée en informatique pour créer des modèles capables de prédire et de résoudre des problèmes complexes en utilisant des données en grande quantité. Ces modèles sont capables d'apprendre par eux-mêmes en s'ajustant en fonction des données qu'on leur fournit, sans qu'on ait besoin de les programmer explicitement pour effectuer chaque tâche.

NI

Qu'est ce que l'apprentissage automatique ?

L'apprentissage automatique est un domaine de l'informatique qui s'intéresse à la création de modèles informatiques capables d'apprendre et de s'améliorer de manière autonome en utilisant des données en grande quantité. Ces modèles sont souvent utilisés pour résoudre des problèmes complexes, comme la reconnaissance vocale, la reconnaissance d'images ou encore la prédiction de tendances financières.

(ChatGPT d'OpenAI : https://chat.openai.com/chat)

L'apprentissage (selon M. Sahani, UCL)

En quelques mots

- Trouver des structures, des régularités dans des observations.
- Prédire de nouvelles observations.

Touche à beaucoup de domaine, interdisciplinarité très forte

- Statistiques : théorie de l'apprentissage, fouille de données, inférence
- Informatique : IA, vision, RI
- Ingénierie : signal, contrôle, robotique
- Science cognitive, psychologie, neuroscience, épistémologie
- Économie : théorie de la décision, théorie des jeux

L'apprentissage artificiel

- étudie les algorithmes qui améliorent leur performance sur une tâche donnée en fonction de leur expérience.
- fondements mathématiques, informatiques et applications concrètes des systèmes qui apprennent, raisonnent et agissent.

Quand appliquer l'apprentissage ?

Lorsque :

- l'expertise humaine est absente
- impossible d'expliquer cette expertise
- les solutions sont dynamiques
- les solutions doivent être adaptées à beaucoup de cas spécifiques
- la taille du problème est trop grand pour que l'humain puisse le résoudre

Plan

1. Organisation de l'UE
2. Introduction
3. **Les problématiques générales**
4. Classification bayésienne
5. Estimation de densité par histogramme
6. Estimation de densité par noyaux
7. Estimation de densité et classification

Les grandes familles

Apprentissage supervisé

- Classification
- Régression
- Forecasting
- Complétion de données
- Ranking
- Recommandation

Apprentissage non supervisé

- Clustering
- Apprentissage de représentation, de dictionnaire
- Analyse de séquences
- Représentation hiérarchique
- Détection d'anomalies

Apprentissage par renforcement

- Apprendre à jouer
- Apprendre à interagir avec l'environement

Apprentissage supervisé

Données du problème

- Une représentation X des objets de l'étude
- Une sortie d'intérêt y qui peut être numérique, catégorielle, structurée, complexe (label, réponse, étiquette, ...)
- Un ensemble d'exemples, d'échantillons, sous leur représentation X et avec leur sortie connue $\{(x_1, y_1), \ldots, (x_n, y_n)\}$

Objectifs

- Prédire de manière précise la sortie y pour un nouvel exemple x non vu
- Comprendre quels facteurs influencent la sortie
- Évaluer la qualité de nos prédictions

Apprentissage non supervisé

Données du problème

- Une représentation X des objets de l'étude
- Un ensemble d'exemples, d'échantillons, sous leur représentation X, $\{x_1, \ldots, x_n\}$
- Pas de variable de sortie !

Objectifs

- Trouver des groupes d'objets "semblables"
- Organiser les données d'une manière "logique"
- Trouver les "similarités" des objets
- Trouver des "représentations" des objets

$\Rightarrow$ on ne sait pas bien ce que l'on cherche

$\Rightarrow$ tout un art !

Apprentissage par renforcement

Apprentissage continu en fonction du retour d'expérience

Données du problème

- Un état décrit l'environement courant
- Un ensemble d'actions sont possibles
- Une politique permet de choisir en fonction de l'état l'action à effectuer
- A l'issue de chaque action, une récompense est observée

Objectifs

- S'améliorer ! (améliorer la politique de choix de l'action)
- Éviter les situations d'échecs
- Comprendre la dynamique du problème

Ce cours

Centré sur le ML jusqu'aux années 2010 !

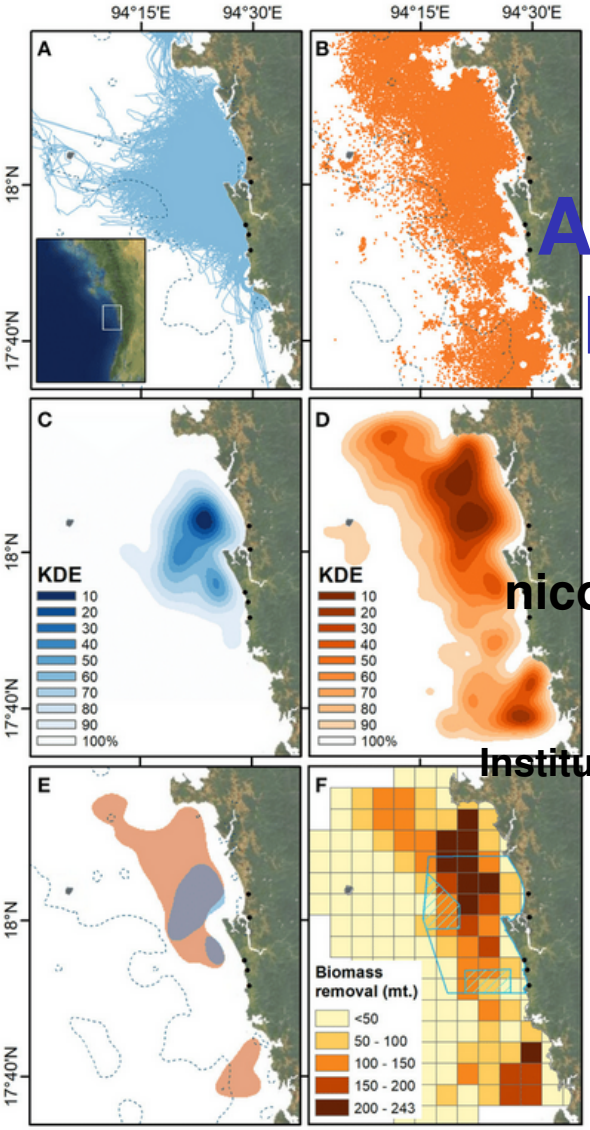
- Problématiques générales (biais, variance, évaluation, sur-apprentissage, représentation des données)
- Algorithmes supervisés (k-nn, bayésien, perceptron, réseaux de neurones, svm, . . .)
- Algorithmes non supervisés (hiérarchique, k-means, . . .)
- Une prise en main du Deep (approfondissement en M2)

Objectifs

- Comprendre les différentes techniques en profondeur, principalement algorithmiquement (et un peu théoriquement)
- Comprendre les notions fondamentales de l'apprentissage
- Savoir choisir et évaluer une approche

Plan du cours

1. Intro, Estimation de densité (MLL)
2. Modèles linéaires, Descente de gradient (MLL)
3. Réseaux de neurones 1
4. Réseaux de neurones 2
5. SVMs et noyaux (MLL)
6. Ensemble Learning, Boosting, Théorie de l'apprentissage (MLL)
7. Apprentissage non supervisé, Recommandation (MLL)
8. Séries temporelles
9. Processus Gaussien
10. Apprentissage par renforcement



Apprentissage bayésien
Estimation de densité

Nicolas Baskiotis

nicolas.baskiotis@sorbonne-universite.fr

équipe MLIA,
Institut des Systèmes Intelligents et de Robotique (ISIR)
Sorbonne Université

S2 (2024-2025)

Plan

1. Organisation de l'UE
2. Introduction
3. Les problématiques générales
4. **Classification bayésienne**
5. Estimation de densité par histogramme
6. Estimation de densité par noyaux
7. Estimation de densité et classification

Classification binaire

Formalisation

- Deux classes : $\mathcal{Y} = \{y_+, y_-\}$
- un ensemble $\mathcal{X} \subseteq \mathbb{R}^d$ de représentation des exemples (d la dimension)
- un exemple : $\mathbf{x} = (x_1, x_2, \ldots, x_d) \in \mathcal{X}$
- objectif : prendre une décision sur la classe d'un exemple $\mathbf{x} \in \mathcal{X}$

$\Rightarrow$ on cherche une fonction $f : \mathcal{X} \to \mathcal{Y}$ (classifieur)

- on notera souvent $\hat{y}$ la décision prise sur un exemple $\mathbf{x}$, $\hat{y} = f(\mathbf{x})$

Films et avis

- Deux classes : j'aime (y_+) et je n'aime pas (y_-)
- Un film décrit par : (année, budget, durée) (3 dimensions, $\mathcal{X} = \mathbb{R}^3$)
- Une fonction de prédiction : $f(\mathbf{x}) = y_+$ si $x_1 \geq 2000$ sinon y_-

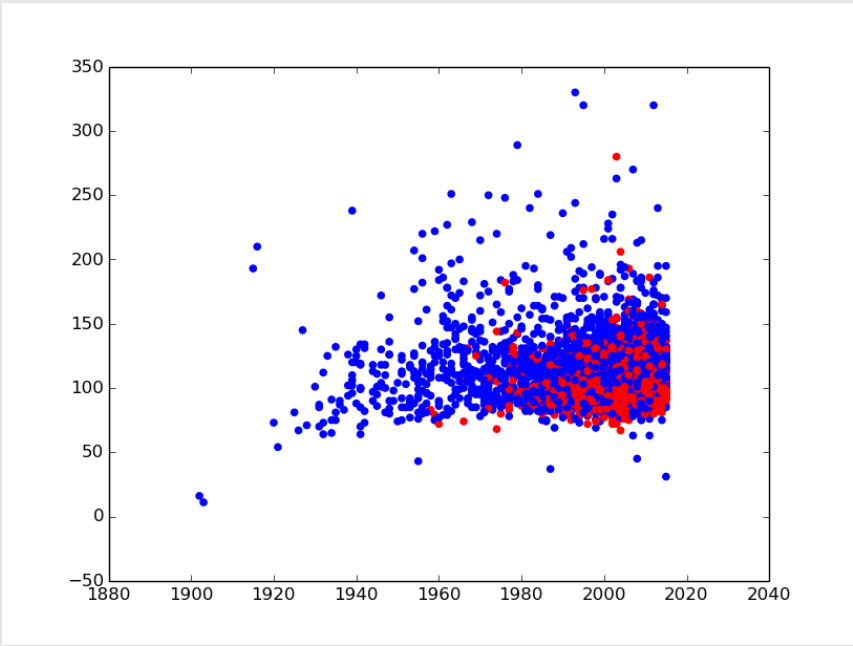
Tweets de Trump

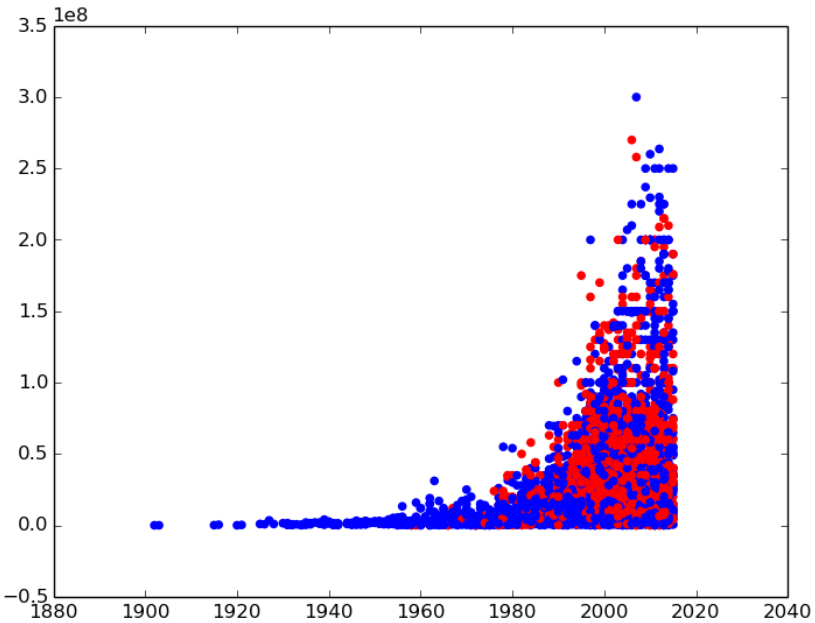
- Deux classes : le mot *Trump* apparaît dans le tweet ou non
- Un tweet peut être décrit par son heure, le jour de la semaine, le mois, ...

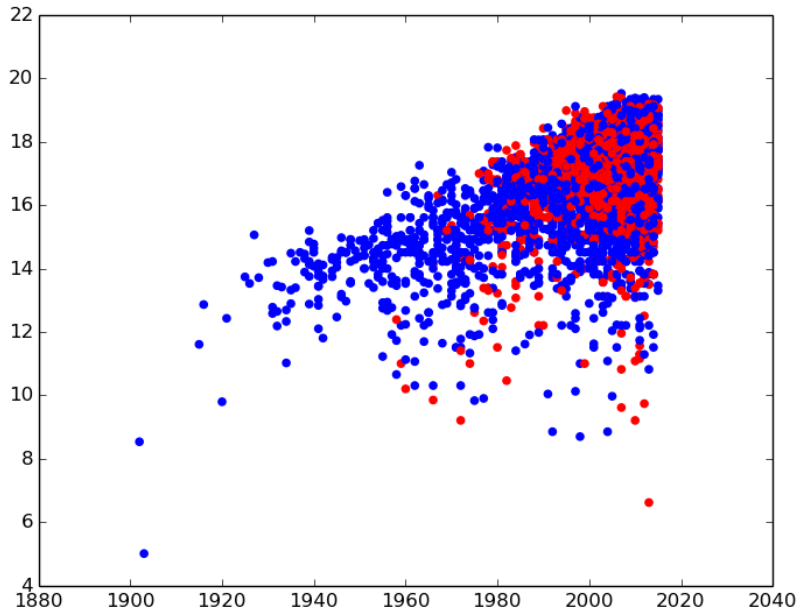
Classification binaire : IMDB

Sur la base imdb . . . :

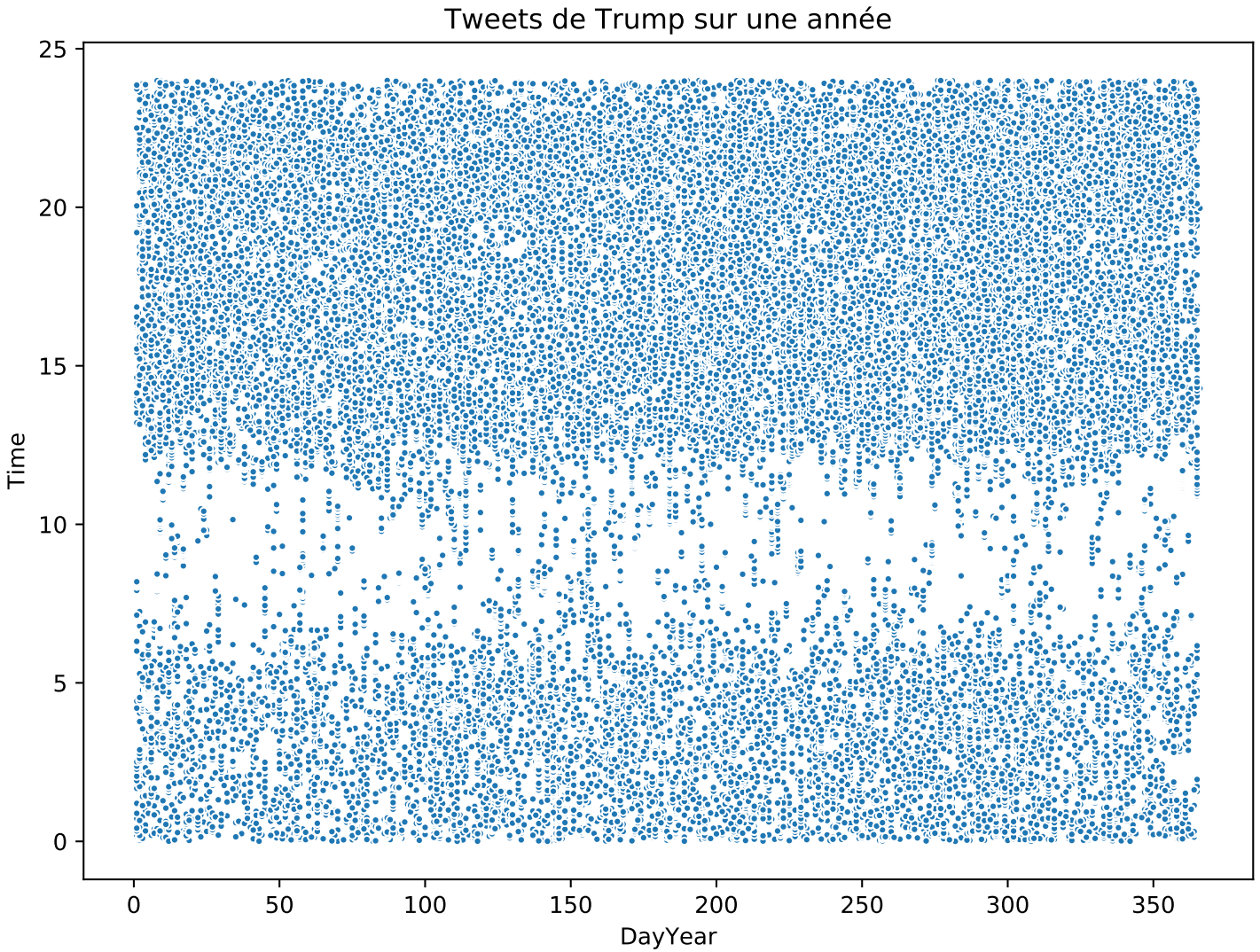
- Année vs Durée
- Année vs Budget



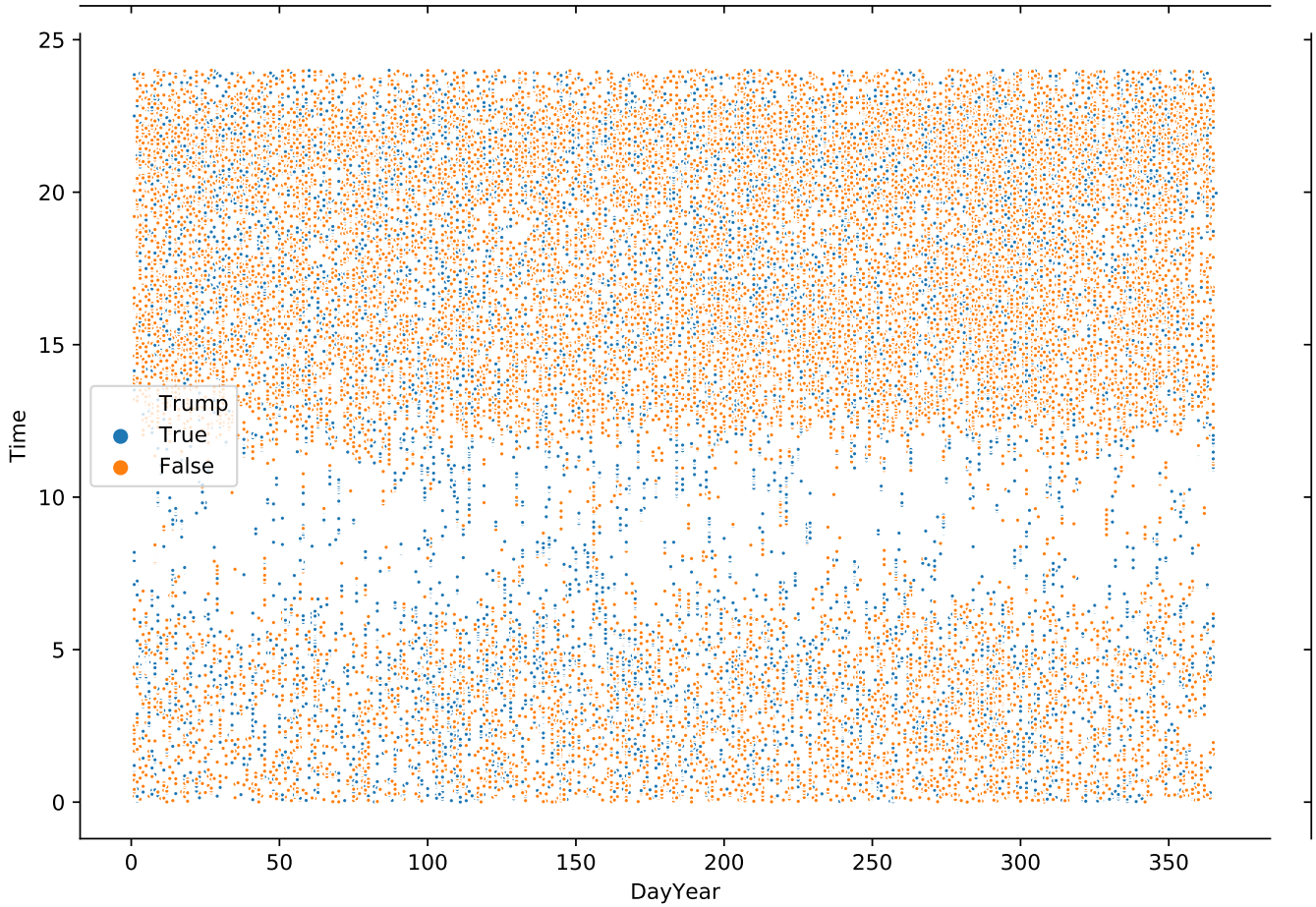




Classification binaire : tweets



Classification binaire : tweets



Première approche

Le plus simple

Si on dispose de $P(y = y_+)$ et $P(y = y_-)$, probabilités a priori :

- elles décrivent notre connaissance générique du problème
- peuvent dépendre des situations
- on peut décider y_+ si $P(y_+) > P(y_-)$, y_- dans le cas contraire
- Quel est le risque de se tromper ?

Première approche

Le plus simple

Si on dispose de $P(y = y_+)$ et $P(y = y_-)$, probabilités a priori :

- elles décrivent notre connaissance générique du problème
- peuvent dépendre des situations
- on peut décider y_+ si $P(y_+) > P(y_-)$, y_- dans le cas contraire
- Quel est le risque de se tromper ?

Problèmes

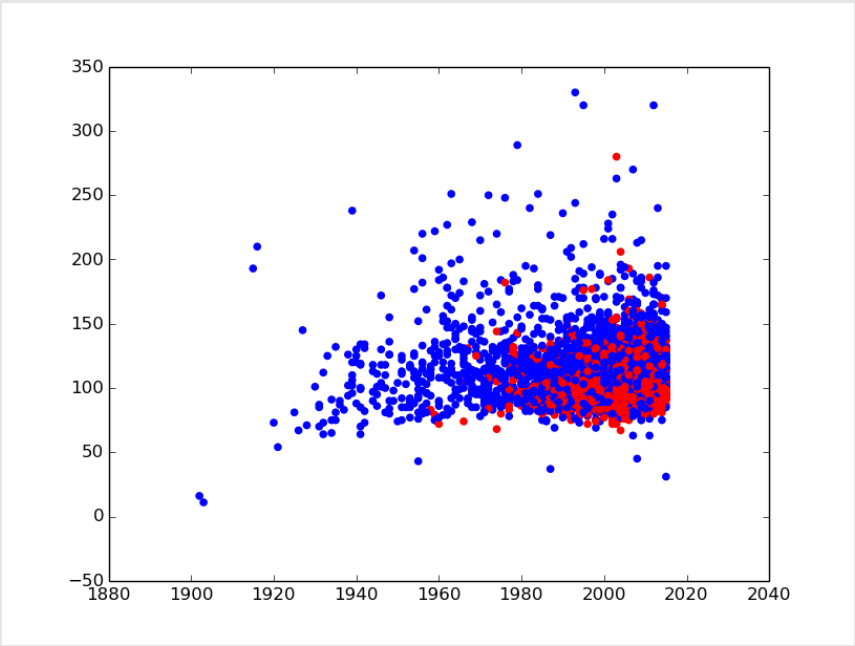
- Toujours la même décision
- On ne tient pas compte de la description $\mathbf{x} \in \mathcal{X}$.
- Évaluation du risque : $R = min(P(y_+), P(y_-))$

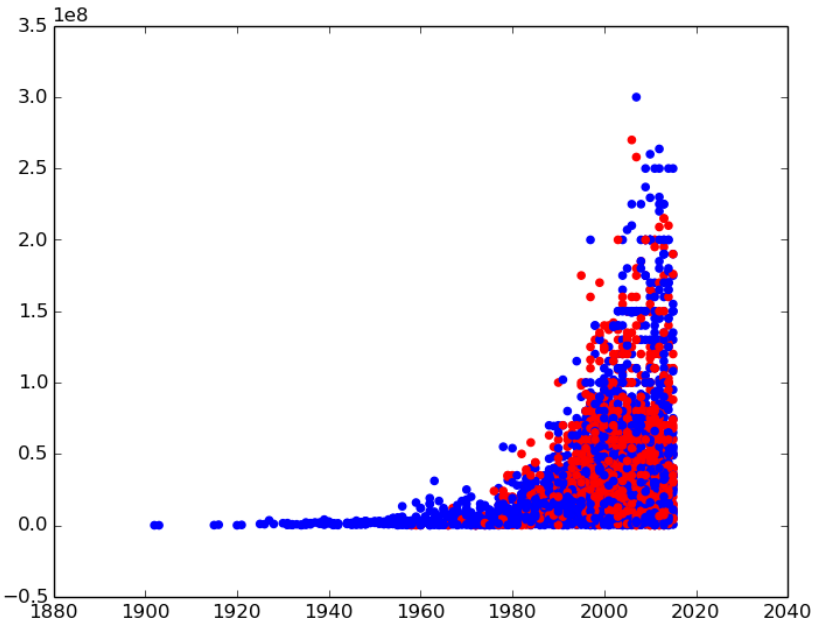
Comment faire mieux ?

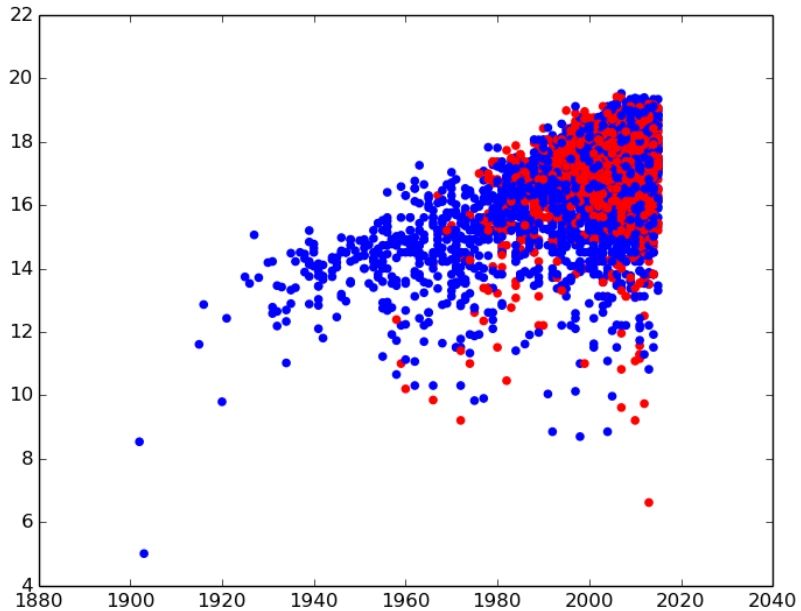
Classification binaire

Sur la base imdb . . . :

- Année vs Durée
- Année vs Budget







Dans un monde idéal (bayésien)

Si on dispose . . .

de $P(y)$ (probabilité a priori) et de $p(\mathbf{x}|y)$:

Dans un monde idéal (bayésien)

Si on dispose . . .

de $P(y)$ (probabilité a priori) et de $p(\mathbf{x}|y)$:

- $p(y, \mathbf{x}) = p(y|\mathbf{x})p(\mathbf{x}) = p(\mathbf{x}|y)p(y)$
- $p(\mathbf{x}) = p(\mathbf{x}|y_+)p(y_+) + p(\mathbf{x}|y_-)p(y_-)$
- $p(y|\mathbf{x}) = \frac{p(\mathbf{x}|y)p(y)}{p(\mathbf{x})} = \frac{p(\mathbf{x}|y)p(y)}{p(\mathbf{x}|y_+)P(y_+)+p(\mathbf{x}|y_-)P(y_-)}$

Dans un monde idéal (bayésien)

Si on dispose ...

de $P(y)$ (probabilité a priori) et de $p(\mathbf{x}|y)$:

- $p(y, \mathbf{x}) = p(y|\mathbf{x})p(\mathbf{x}) = p(\mathbf{x}|y)p(y)$
- $p(\mathbf{x}) = p(\mathbf{x}|y_+)p(y_+) + p(\mathbf{x}|y_-)p(y_-)$
- $p(y|\mathbf{x}) = \frac{p(\mathbf{x}|y)p(y)}{p(\mathbf{x})} = \frac{p(\mathbf{x}|y)p(y)}{p(\mathbf{x}|y_+)P(y_+)+p(\mathbf{x}|y_-)P(y_-)}$

Alors

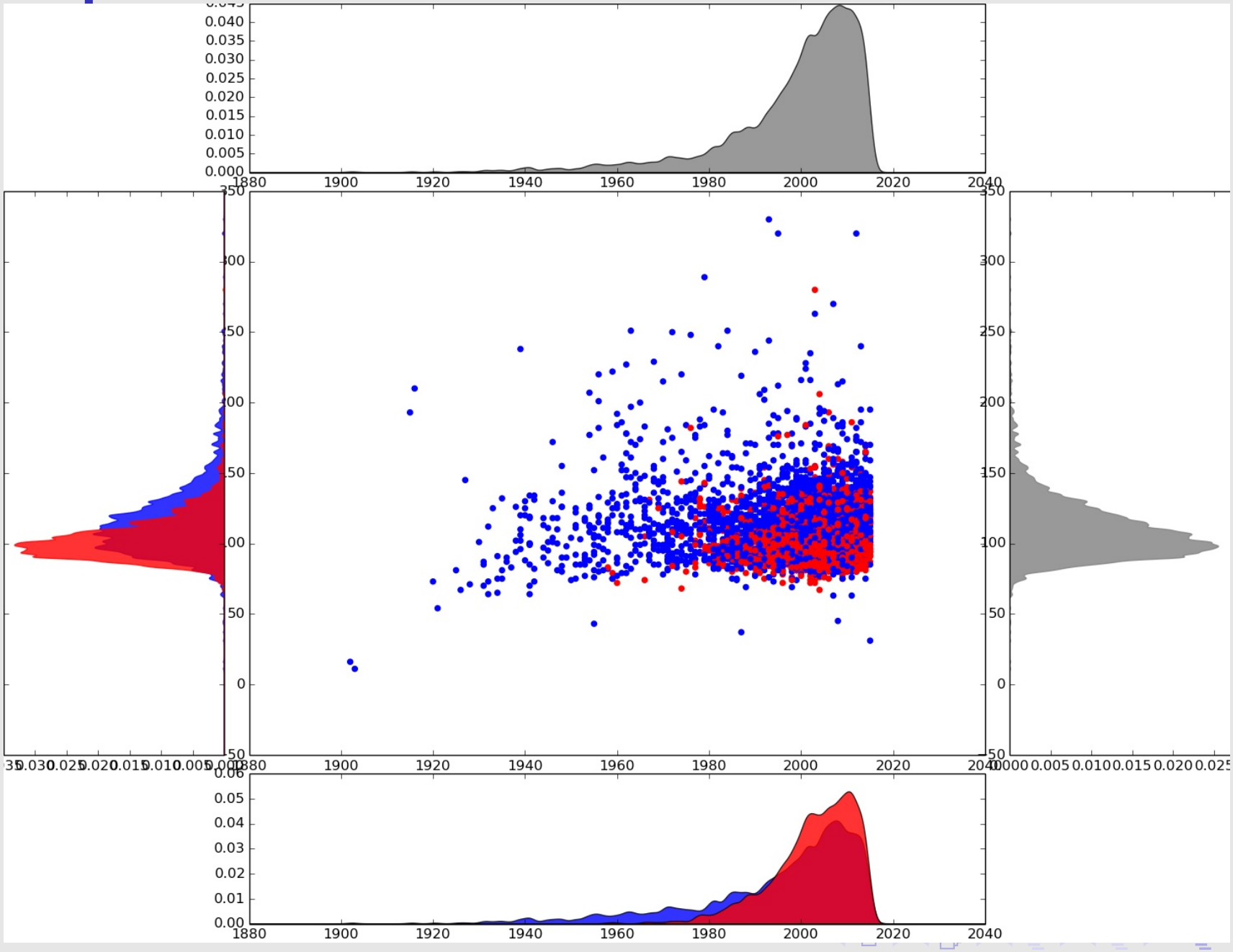
En observant $\mathbf{x}$, on peut étudier la *probabilité a posteriori* $p(y|\mathbf{x})$.

- On appelle $p(\mathbf{x}|y)$ la vraisemblance de $\mathbf{x}$ par rapport à y.
- décision bayésienne : choisir y_+ si $p(y_+|\mathbf{x}) > p(y_-|\mathbf{x})$, le contraire sinon

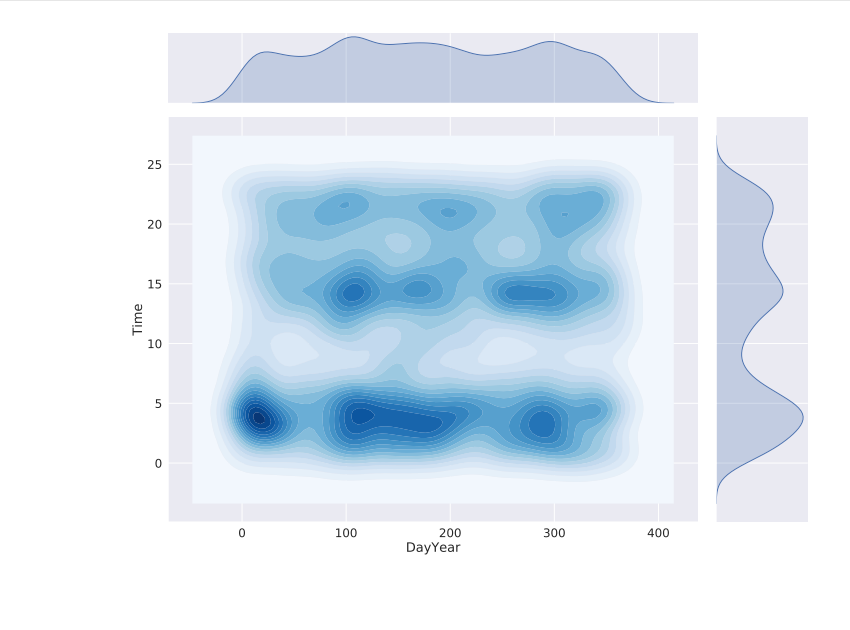
$\Rightarrow f(\mathbf{x}) = argmax_y p(y|\mathbf{x}) = argmax_y \frac{p(\mathbf{x}|y)p(y)}{p(\mathbf{x})}$

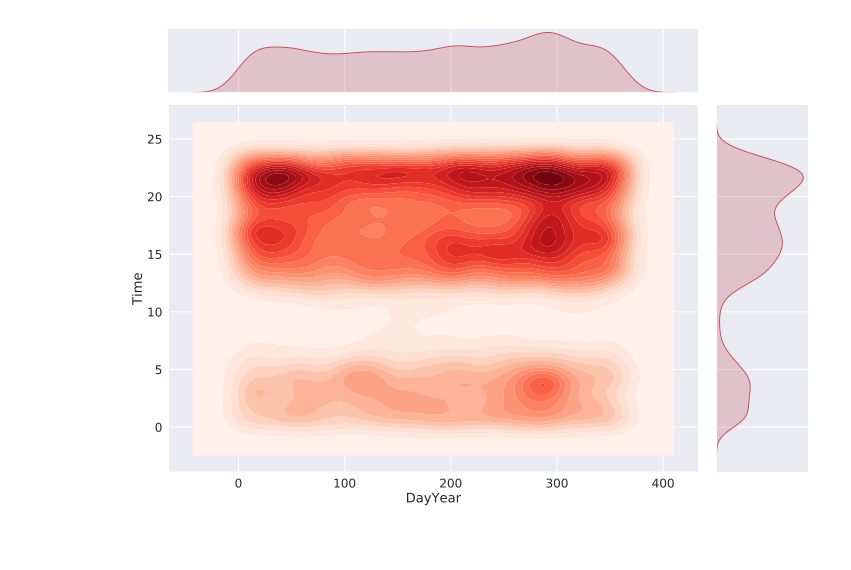
- $p(\mathbf{x})$ est-il important ?

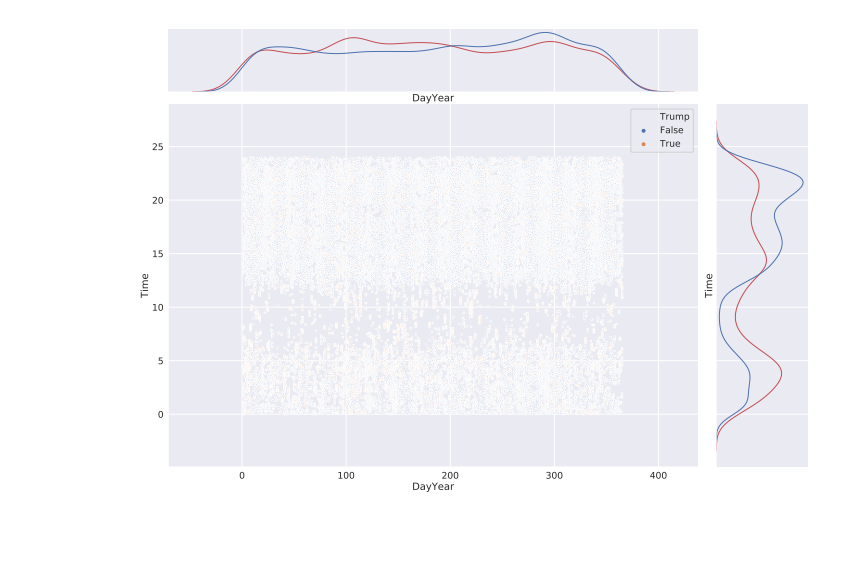
Exemple imdb

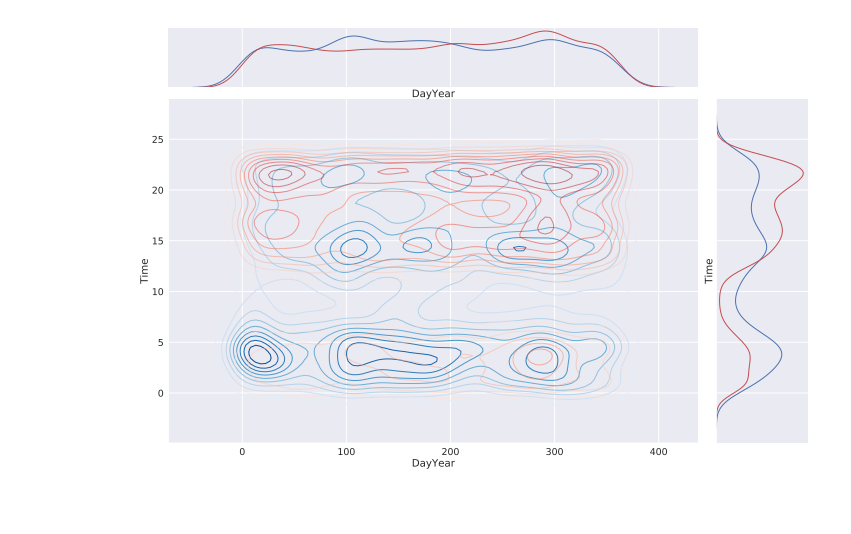


Exemple Tweets









Comment évaluer l'erreur d'un classifieur?

Fonction de perte : quantifié une erreur

- Notion d'erreur, de perte associée à une décision $f(\mathbf{x})$
- Erreur simple : à chaque fois qu'on se trompe, on compte 1

$\Rightarrow$ fonction de perte : $\ell(f(\mathbf{x}), y) = \begin{cases} 1 & \text{si } f(\mathbf{x}) \neq y \\ 0 & \text{sinon} \end{cases}$ *0-1 loss*

- Risque associé : $R(y_i|\mathbf{x}) = \sum_j l(y_i, y_j) P(y_j|\mathbf{x}) = 1 - P(y_i|\mathbf{x})$
- $R(f) = \int_x R(f(\mathbf{x})|\mathbf{x}) p(\mathbf{x}) d\mathbf{x}$
- Peut-on toujours avoir un risque nul ? souvent ?

Probabilité de l'erreur

Caclul de l'erreur

- $P(\text{erreur}|\mathbf{x}) = \begin{cases} P(y_+|\mathbf{x}) & \text{si on décide } y_- \\ P(y_-|\mathbf{x}) & \text{si on décide } y_+ \end{cases}$
- $P(\text{erreur}) = \int P(\text{erreur}|\mathbf{x})p(\mathbf{x})d\mathbf{x}$
- $P(\text{erreur}|\mathbf{x}) = min(P(y_+|\mathbf{x}), P(y_-|\mathbf{x}))$
- $P(\text{erreur}|\mathbf{x}) = min(P(\mathbf{x}|y_+)P(y_+), P(\mathbf{x}|y_-)P(y_-))$
- Si $p(\mathbf{x}|y_+) = p(\mathbf{x}|y_-)$?
- Si $P(y_+) = P(y_-)$?

Risque bayésien : $\int R(f(\mathbf{x})|\mathbf{x})p(\mathbf{x})d\mathbf{x}$

- Classifieur bayésien : f qui minimise le risque
- On peut montrer que c'est le meilleur classifieur possible (cf TD)
- alors est-ce que c'est fini ?

Probabilité de l'erreur

Caclul de l'erreur

- $P(\text{erreur}|\mathbf{x}) = \begin{cases} P(y_+|\mathbf{x}) & \text{si on décide } y_- \\ P(y_-|\mathbf{x}) & \text{si on décide } y_+ \end{cases}$
- $P(\text{erreur}) = \int P(\text{erreur}|\mathbf{x})p(\mathbf{x})d\mathbf{x}$
- $P(\text{erreur}|\mathbf{x}) = min(P(y_+|\mathbf{x}), P(y_-|\mathbf{x}))$
- $P(\text{erreur}|\mathbf{x}) = min(P(\mathbf{x}|y_+)P(y_+), P(\mathbf{x}|y_-)P(y_-))$
- Si $p(\mathbf{x}|y_+) = p(\mathbf{x}|y_-)$?
- Si $P(y_+) = P(y_-)$?

Risque bayésien : $\int R(f(\mathbf{x})|\mathbf{x})p(\mathbf{x})d\mathbf{x}$

- Classifieur bayésien : f qui minimise le risque
- On peut montrer que c'est le meilleur classifieur possible (cf TD)
- alors est-ce que c'est fini ?

$\Rightarrow$ Malheureusement non, $p(\mathbf{x}|y)$ rarement disponible . . .

Que faire ?

Apprentissage paramètrique, bayésien : estimation de $p(\mathbf{x}, y)$

- attention ! $\mathbf{x} \in \mathcal{X}$, de dimension d plutôt grand (voir très grand!)
- en vérité : $p(\mathbf{x}|y) = p(x_1, x_2, \ldots, x_d|y)$
- dans le cas binaire ($x_i \in \{0, 1\}$), $2 * 2^d$ paramètres !!
- une solution simple : *naive bayes*, considérer chaque dimension indépendante

$\Rightarrow$ $p(\mathbf{x}|y) = p(x_1|y)p(x_2|y)\ldots p(x_d|y)$, $2 * d$ paramètres.

- ou poser des lois a priori, estimation de paramètres des lois $\rightarrow$ estimation bayésienne, maximum de vraisemblance
- modèles graphiques, recherche d'indépendance entre dimension, ...

Ou s'en affranchir (en partie)

- C'est la suite de ce cours !

Plan

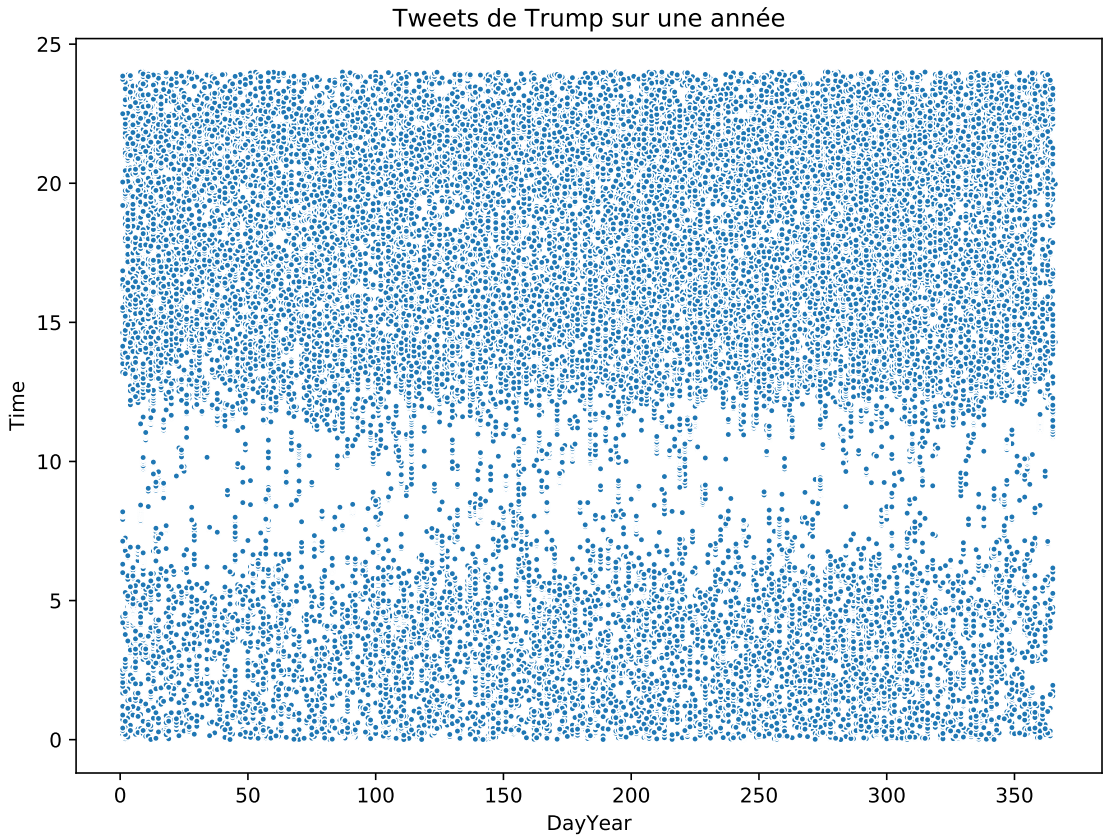
1. Organisation de l'UE
2. Introduction
3. Les problématiques générales
4. Classification bayésienne
5. **Estimation de densité par histogramme**
6. Estimation de densité par noyaux
7. Estimation de densité et classification

Le problème

Données

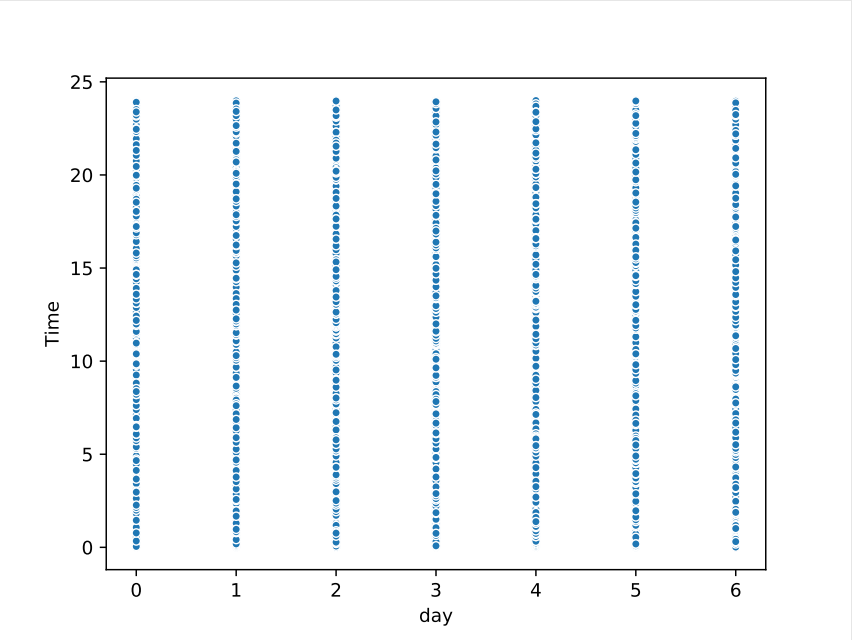
Un échantillon est décrit selon des caractéristiques (dimensions) continues/catégorielles/ordinales

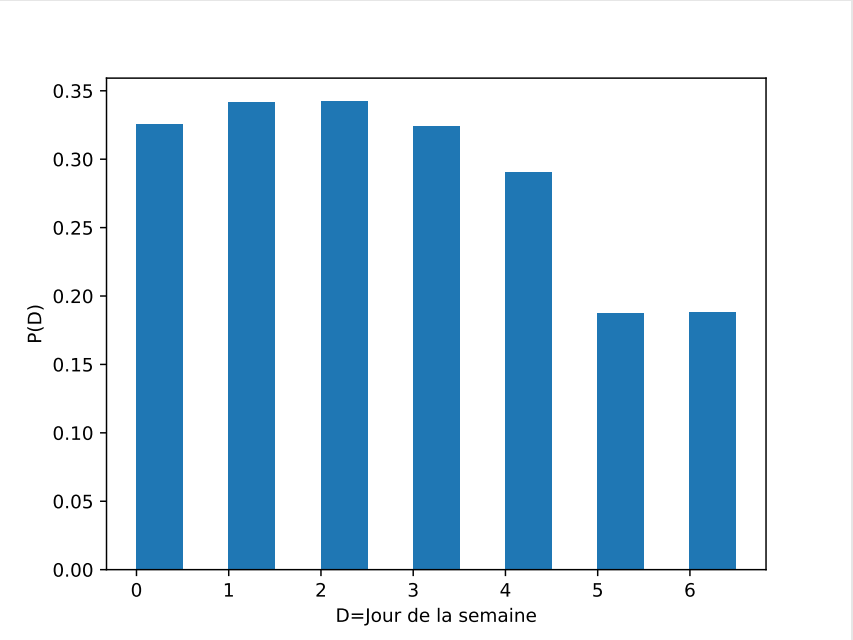
$\Rightarrow$ Quelle est la loi sous-jacente de la distribution des données ?



Lorsque les variables sont discrètes

Soit la dimension d indiquant le jour de la semaine, on observe :





Estimation par histogramme:

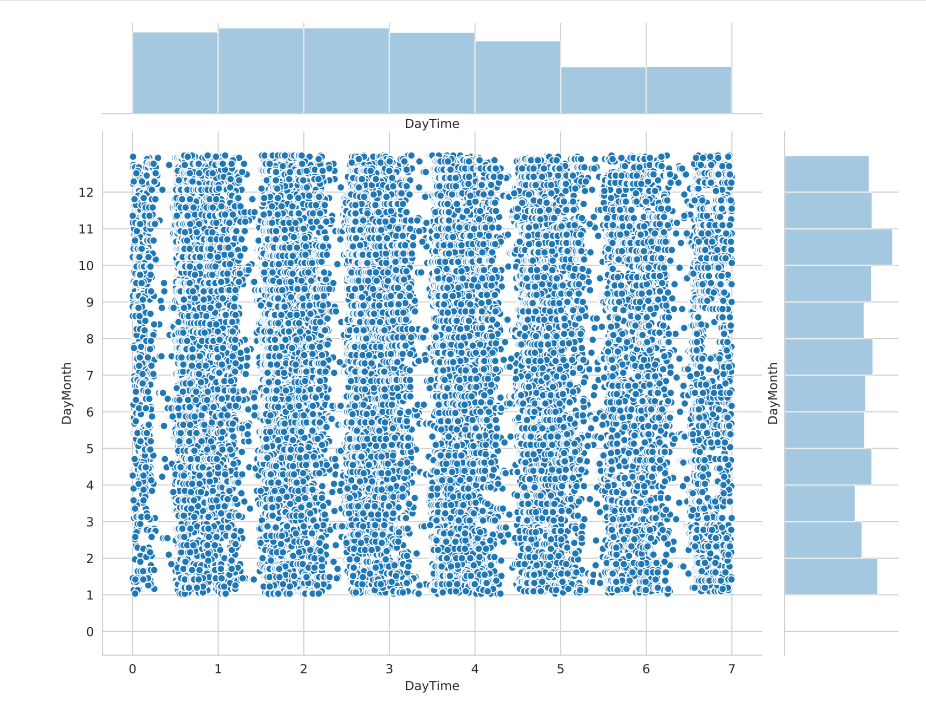
Soit $E = \{\mathbf{x}_i\}_{i=1}^{N}$ un échantillon de N tweets, x_i^d indique le numéro du jour de la semaine du i-ème tweet :

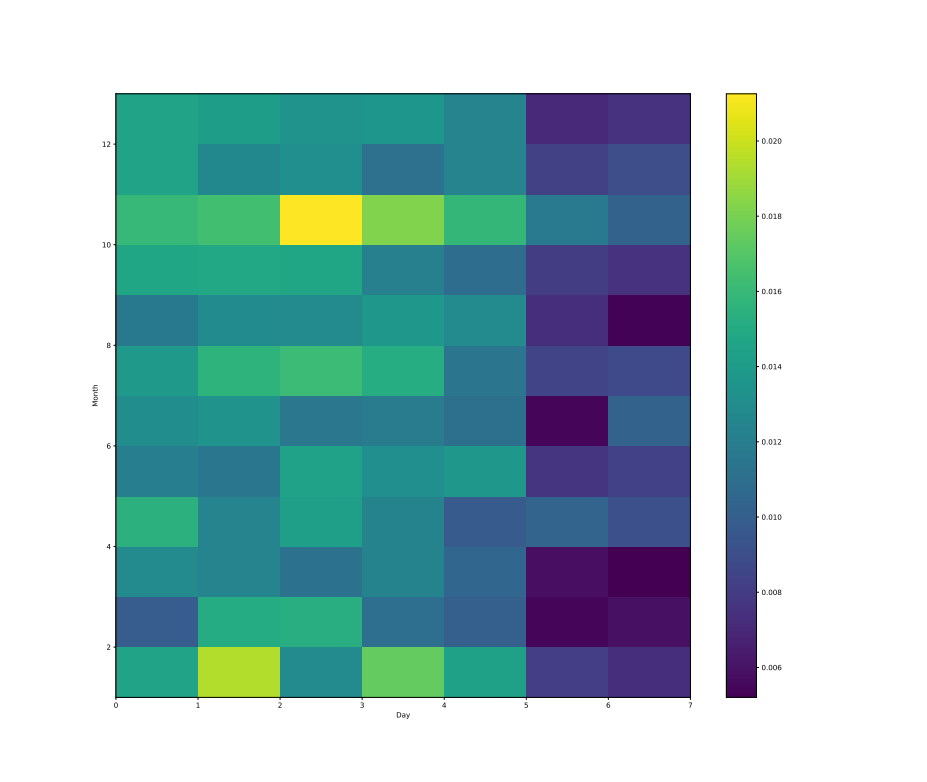
- $P(D = k) = \frac{|\{\mathbf{x}_i | x_i^d = k\}|}{N} = \frac{\sum_{i=1}^{N} \mathbf{1}_{x_i^d = k}}{N}$
- Si l'échantillonnage est i.i.d, l'estimation de la v.a. discrète converge vers la loi avec N.

Généralisation à plusieurs variables

Soit la dimension d indiquant le jour de la semaine et m le mois :

$$P(D=d, M=m) = \frac{|\{\mathbf{x}_i | x_i^d = k, x_i^m = m\}|}{N} = \frac{\sum_{i=1}^{N} \mathbf{1}_{x_i^d = d, x_i^m = m}}{N}$$



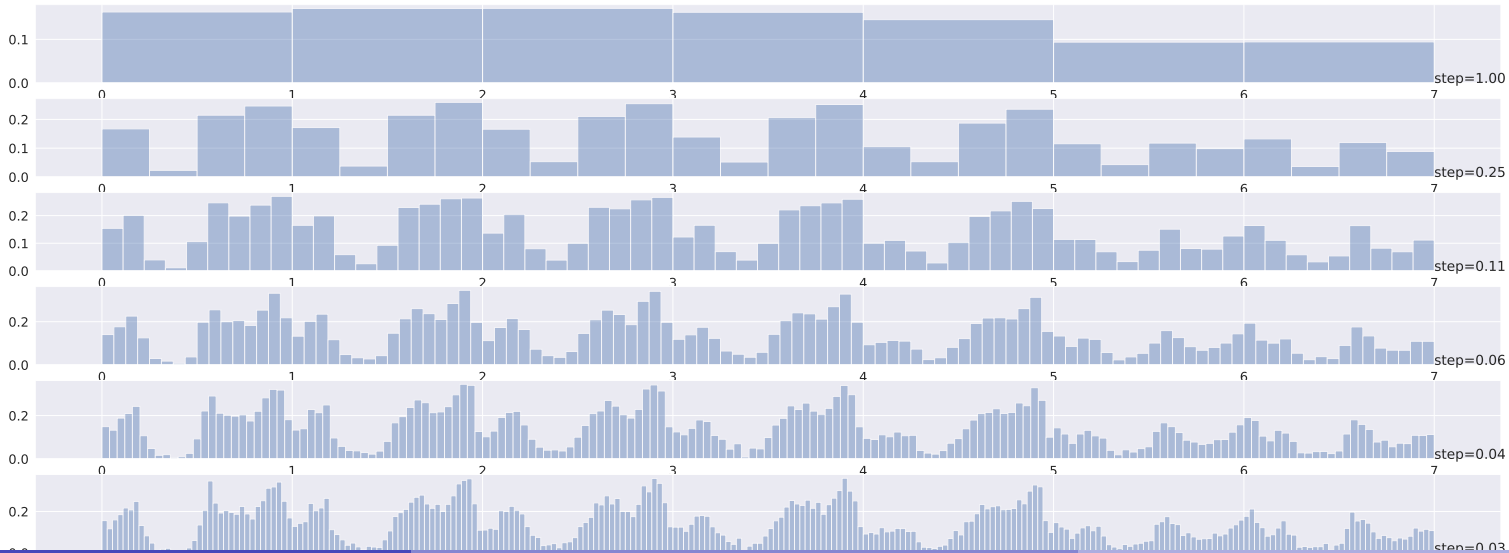


Lorsque les variables sont continues

Ex : $x_i^t \in [0, 7]$ indique le moment h du i-ème tweet dans la semaine (unité d'un jour).

Estimation par une variable aléatoire discrète H

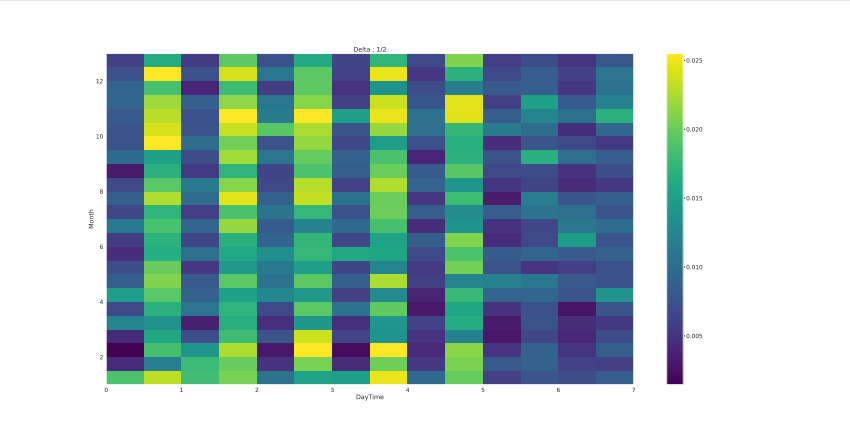
- Discrétisation des valeurs de la v.a.
- Choix d'un pas de discrétisation : 0.5 jours par exemple $\Delta = 0.5 \Rightarrow 7/\Delta$ créneaux T_j.
- L'estimation discrète est alors : $P(H \in T_j) = \frac{|\{\mathbf{x}_i | x_i^t \in T_j\}|}{N}$
- Densité de probabilité associée : $p(h \in T_j) = \frac{P(H \in T_j)}{\Delta^d}$ (d la dimension, ici 1).
- Importance de la discrétisation : petit $\rightarrow$ sur-apprentissage, trop grand $\rightarrow$ sous-apprentissage

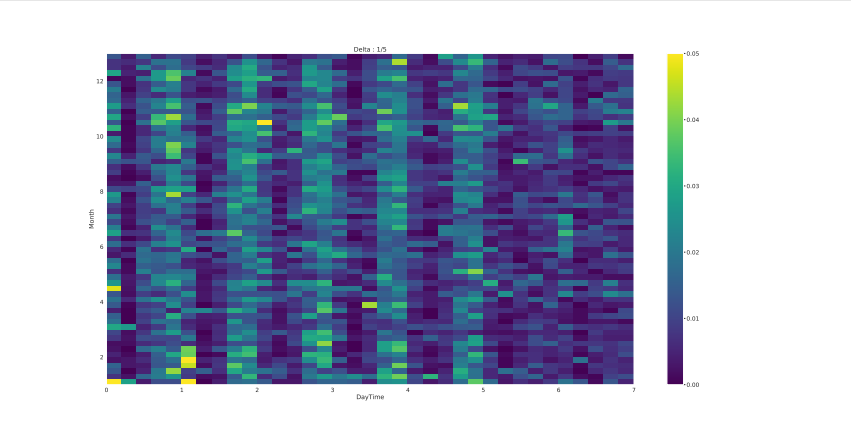


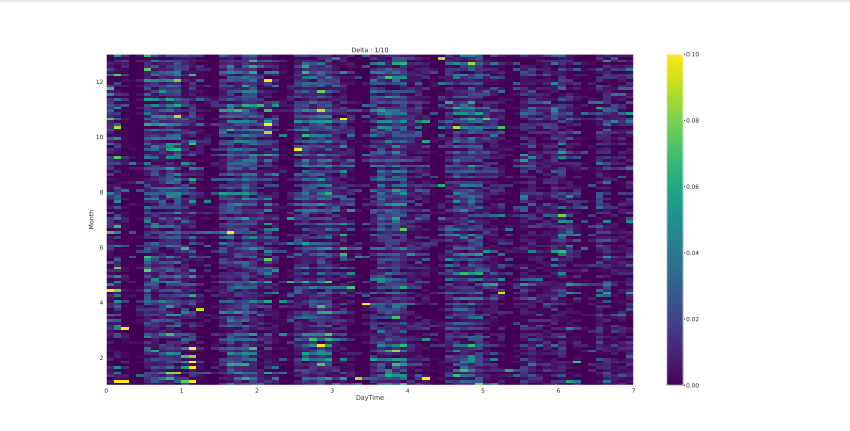
Limites de la méthode des histogrammes

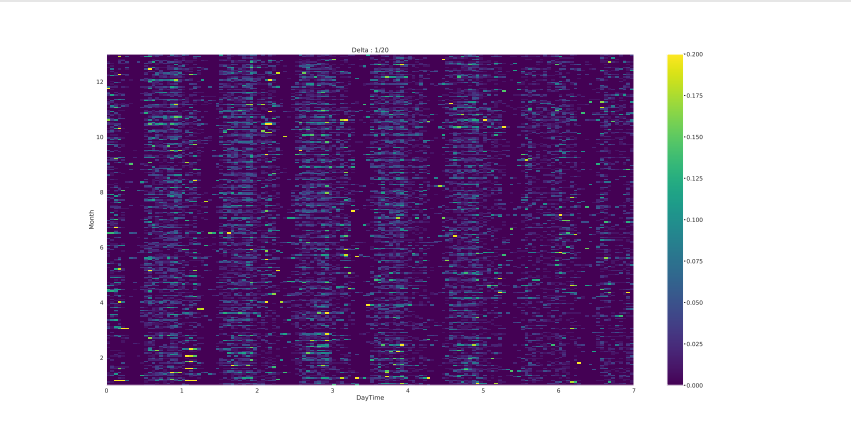
En grande dimension d :

- la taille du modèle (le nombre de cases) augmente exponentiellement en $\left(\frac{D}{\Delta}\right)^d$
- Beaucoup de cases sans aucun échantillon
- Celles qui en ont en ont un nombre faible $\rightarrow$ peu représentatives





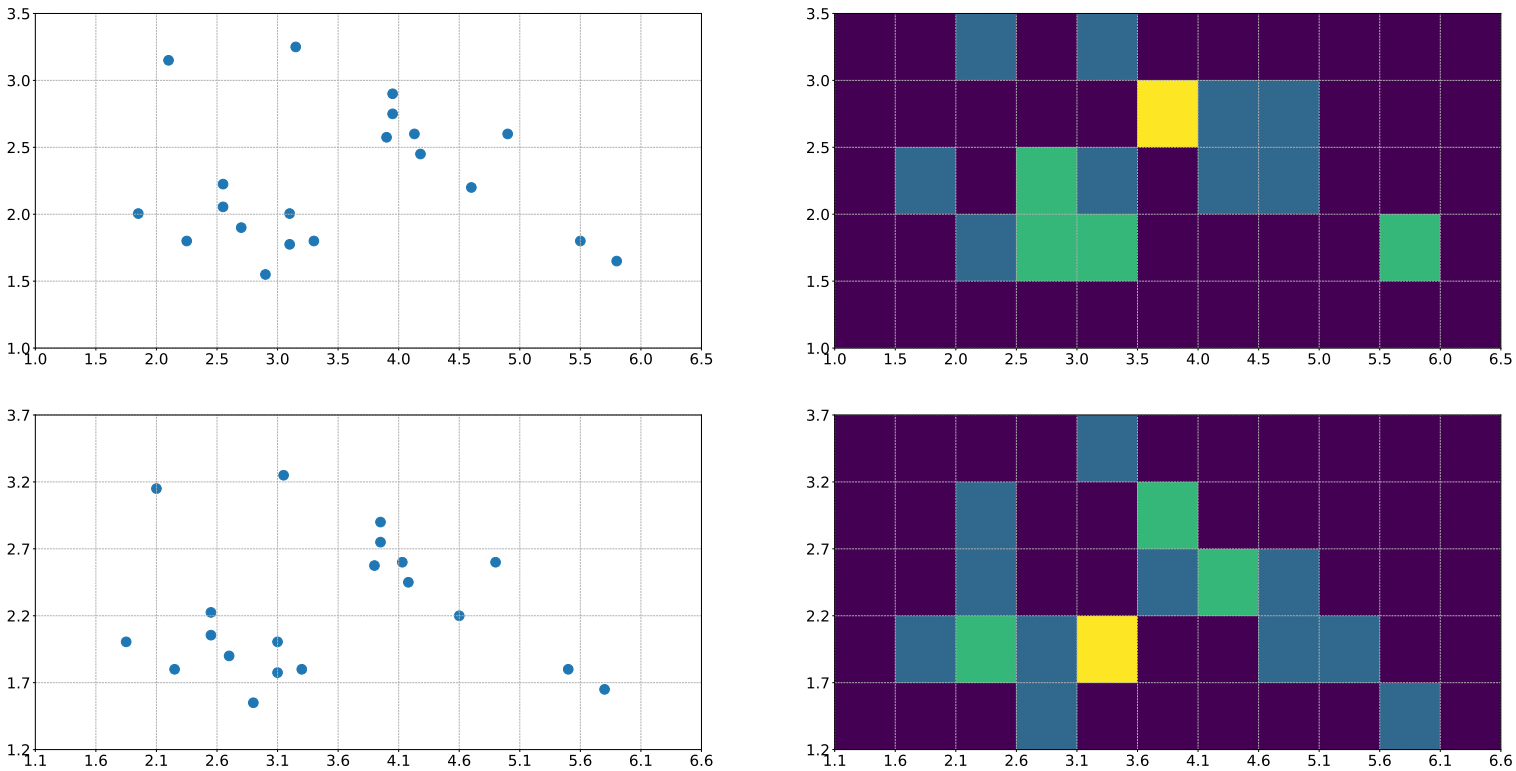




Limites de la méthode des histogrammes

Effet de bords

Déplacer légèrement la discrétisation peut provoquer de grands changements d'estimation.

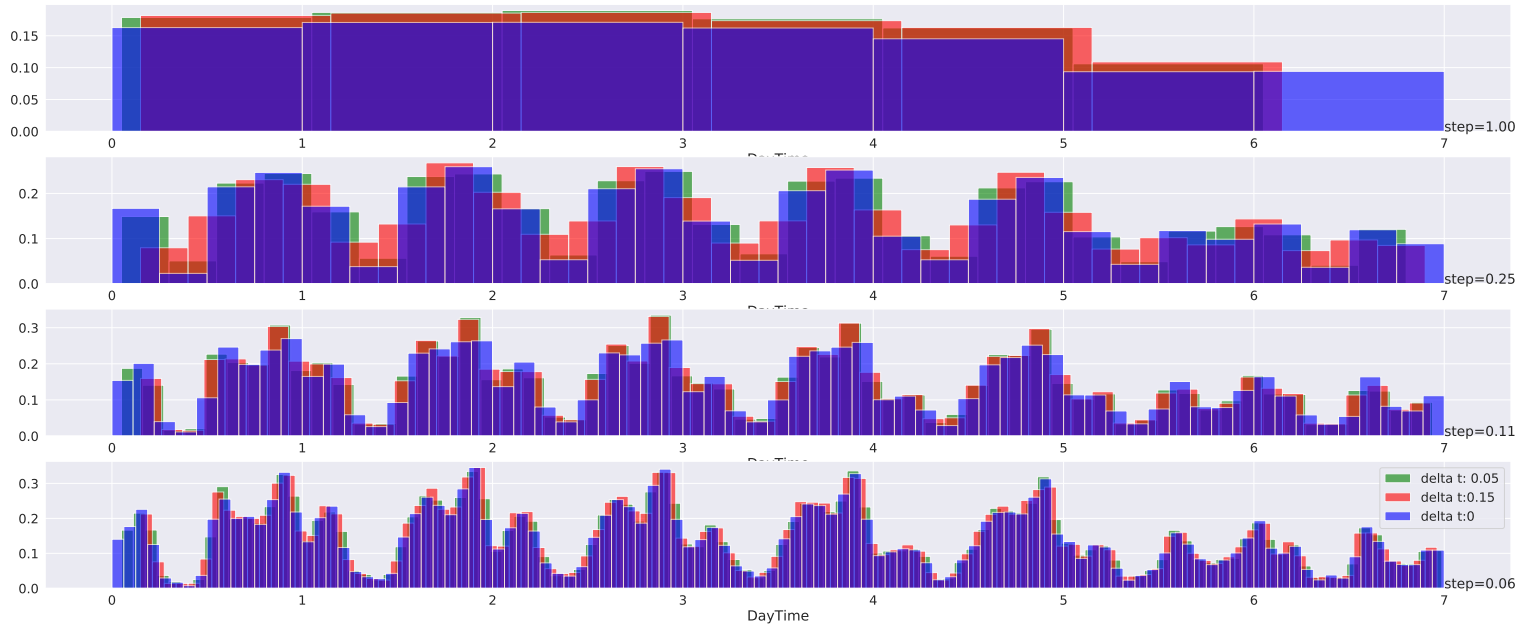


Exemple données artificielles

Limites de la méthode des histogrammes

Effet de bords

Déplacer légèrement la discrétisation peut provoquer de grands changements d'estimation.



Données Tweets

Plan

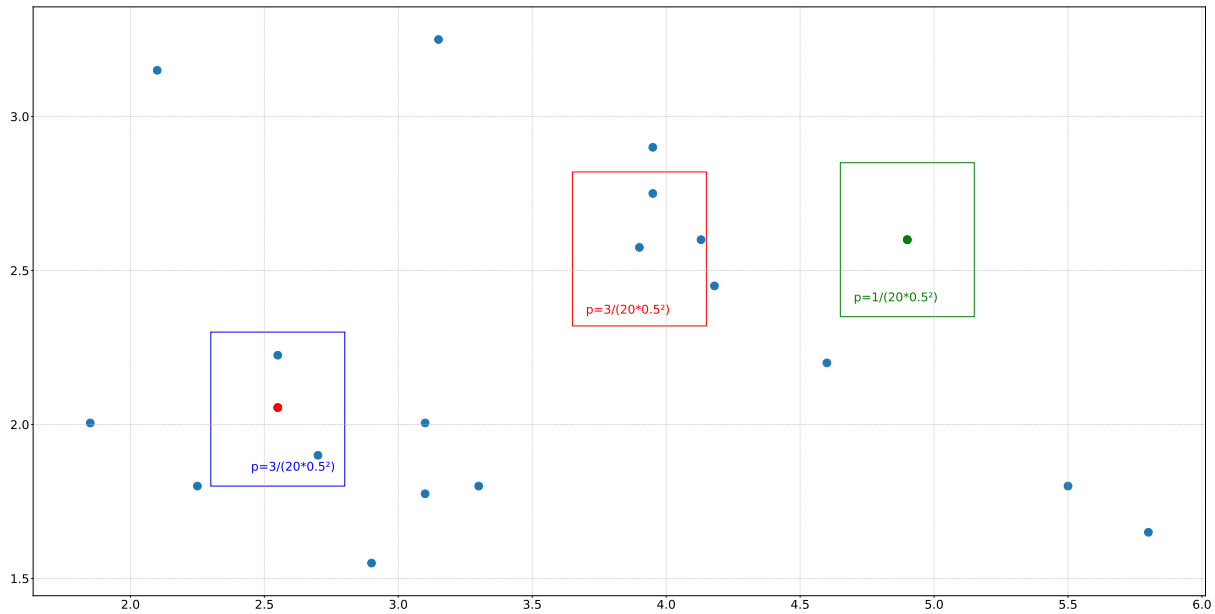
1. Organisation de l'UE
2. Introduction
3. Les problématiques générales
4. Classification bayésienne
5. Estimation de densité par histogramme
6. **Estimation de densité par noyaux**
7. Estimation de densité et classification

Estimation non paramétrique par noyaux

Intuition : histogramme centré au point d'intérêt

- Plutôt que de décider d'une discrétisation a priori, l'estimation est faîte en centrant une fenêtre autour du point d'intérêt $\mathbf{x}_0$ (dans un espace de dimension d)
- Soit $\mathcal{R}$ l'hypercube centré en $\mathbf{x}_0$ de longueur r et $p(\mathbf{x}_0)$ la densité à estimer
- Hypothèse : densité constante autour du point
- Probabilité discrète qu'un point soit dans l'hypercube : $P_{\mathcal{R}} = \int_{\mathcal{R}} p(\mathbf{x}_0) d\mathbf{x} = r^d p(\mathbf{x}_0)$

$\Rightarrow$ Donc $p(\mathbf{x}_0) = \frac{P_{\mathcal{R}}}{r^d}$



Estimation non paramétrique par noyaux

Intuition : histogramme centré au point d'intérêt

- Plutôt que de décider d'une discrétisation a priori, l'estimation est faîte en centrant une fenêtre autour du point d'intérêt $\mathbf{x}_0$ (dans un espace de dimension d)
- Soit $\mathcal{R}$ l'hypercube centré en $\mathbf{x}_0$ de longueur r et $p(\mathbf{x}_0)$ la densité à estimer
- Hypothèse : densité constante autour du point
- Probabilité discrète qu'un point soit dans l'hypercube : $P_{\mathcal{R}} = \int_{\mathcal{R}} p(\mathbf{x}_0) d\mathbf{x} = r^d p(\mathbf{x}_0)$

$\Rightarrow$ Donc $p(\mathbf{x}_0) = \frac{P_{\mathcal{R}}}{r^d}$
Justification mathématique :

- Soit X la v.a. du nombre de $\mathbf{x}_i$ dans $\mathcal{R}$ pour un échantillon de N points
- $P(X = k) = C_N^k P_{\mathcal{R}}^k (1 - P_{\mathcal{R}})^{N-k}$, $\mathbb{E}[X] = N P_{\mathcal{R}}$, donc $P_{\mathcal{R}} = \frac{\mathbb{E}[X]}{N}$

$\Rightarrow$ $p(\mathbf{x}_0) \simeq \frac{k/N}{r^d}$

Fenêtre de Parzen

Formalisation pour un échantillon de taille N

- $\mathcal{R}$ est un hypercube, chaque côté de longueur r
- $V = r^d$, d la dimension de l'espace de représentation
- $\phi(\mathbf{x}) = \begin{cases} 1 & \text{si } |x^i| \leq 1/2 \\ 0 & \text{sinon} \end{cases}$ fonction indicatrice de l'hypercube unitaire
- ϕ définie un hypercube unitaire centré à l'origine.

$\Rightarrow$ $\phi(\frac{\mathbf{x}_0 - x}{r}) = 1$ ssi $\mathbf{x}$ est dans l'hypercube de volume V centré en $\mathbf{x}_0$.

Conséquence

- Nombre d'échantillons dans l'hypercube : $k = \sum_{i=1}^{N} \phi(\frac{(\mathbf{x}_0 - \mathbf{x}_i)}{r})$
- Densité estimée :

$$p(\mathbf{x}_0) = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^{N} \frac{1}{V} \phi(\frac{\mathbf{x}_0 - \mathbf{x}_i}{r})$$

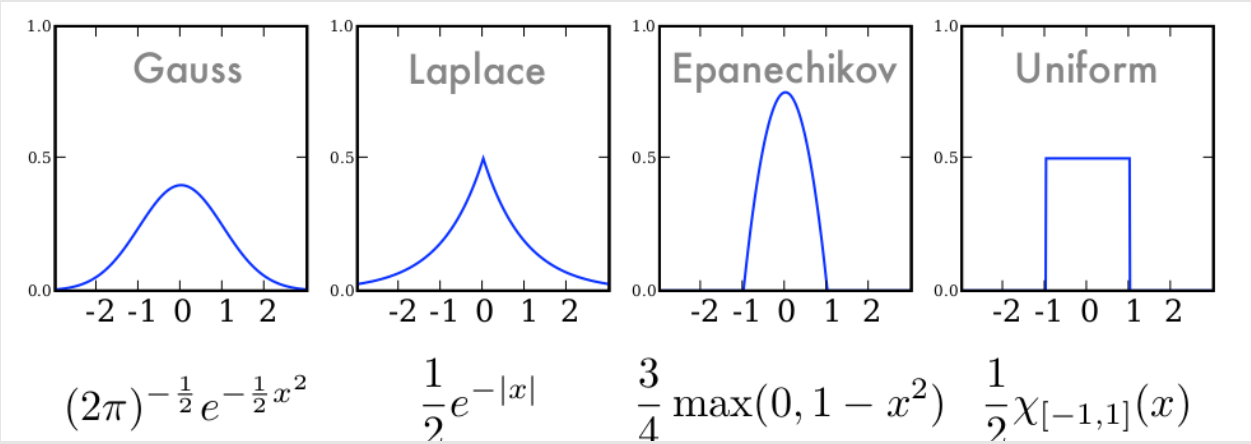
- On note $\delta(\mathbf{x}) = \frac{1}{V}\phi(\frac{\mathbf{x}}{r})$, alors

$$p(\mathbf{x}_0) = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^{N} \delta(\mathbf{x}_0 - \mathbf{x}_i)$$

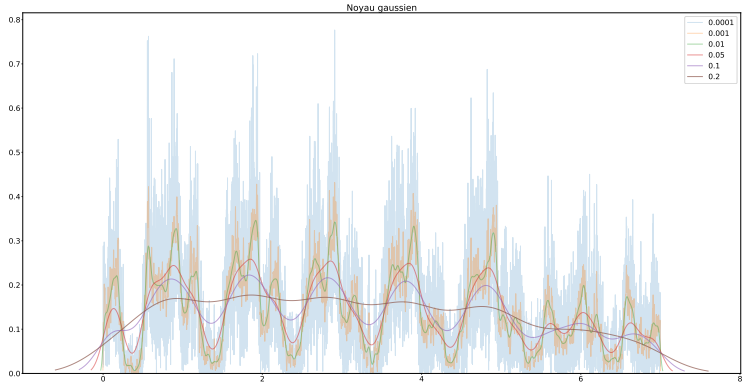
Discussion

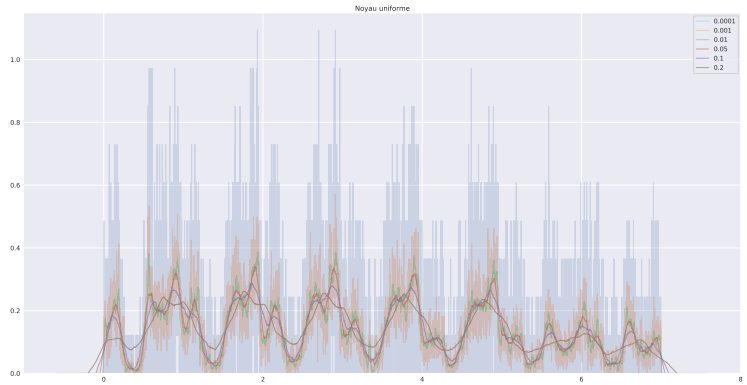
Pourquoi se limiter à des hypercubes ?

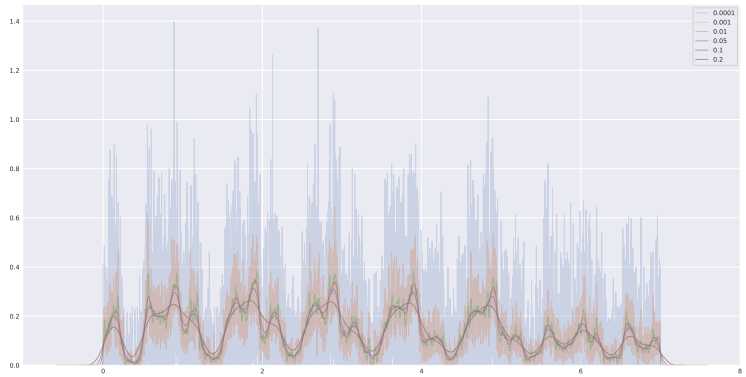
- ϕ peut être plus générale (noyaux)
- permet de pondérer différement selon la distance au point d'estimation
- conditions nécessaires :
  - $\phi(x) \geq 0$
  - $\int \phi(x)dx = 1$
  - $\phi(x)$ symétrique
  - $\phi(x)$ maximale en 0 et double monotonie.

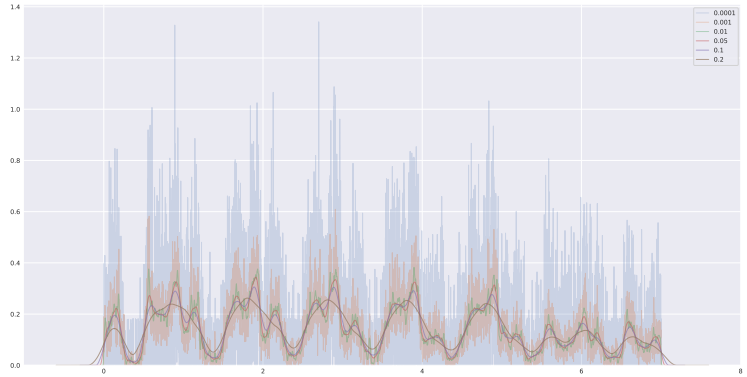


Discussion : exemples Tweets

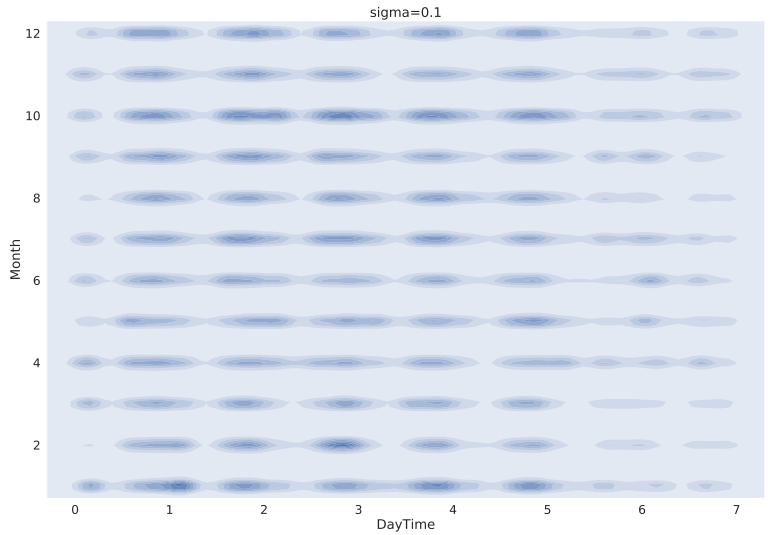


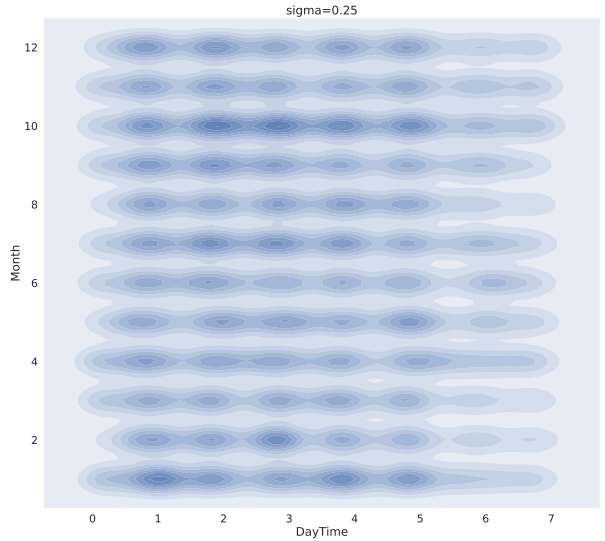


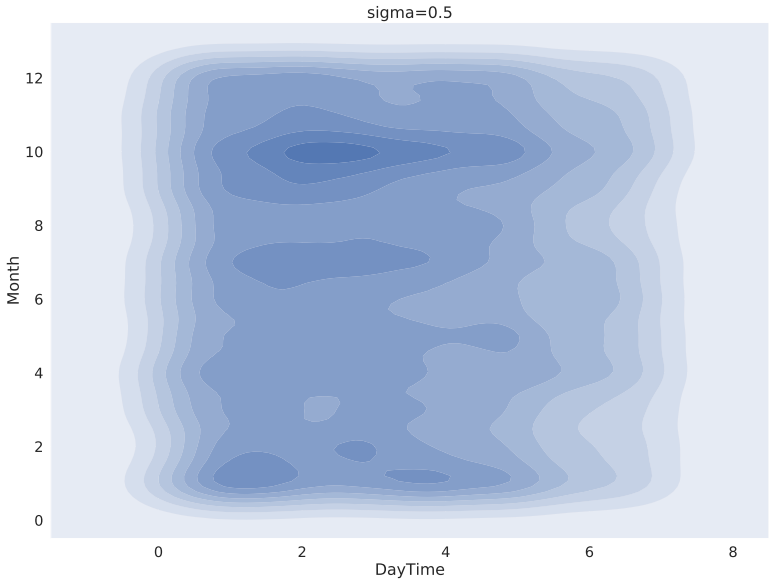


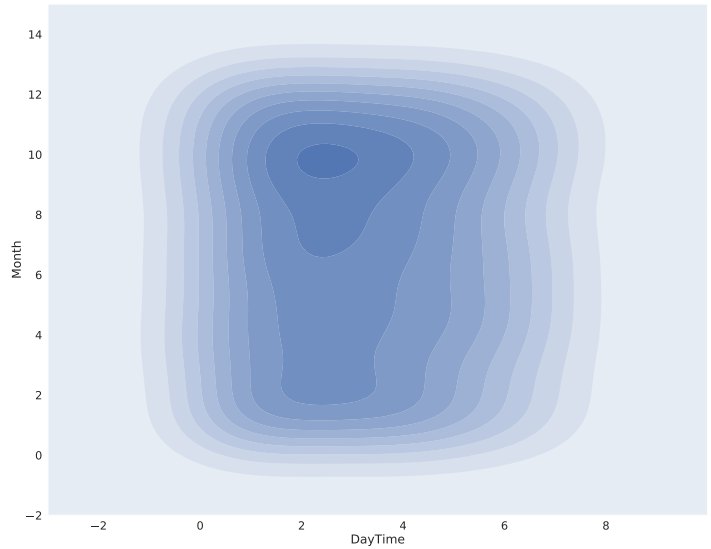


Discussion : exemples Tweets

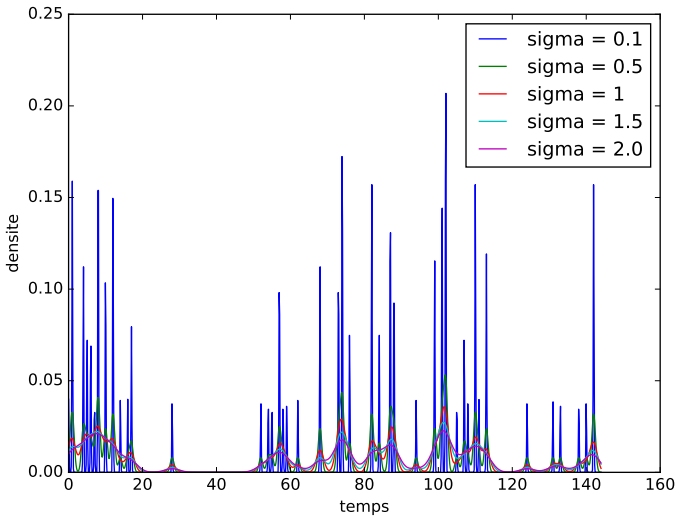


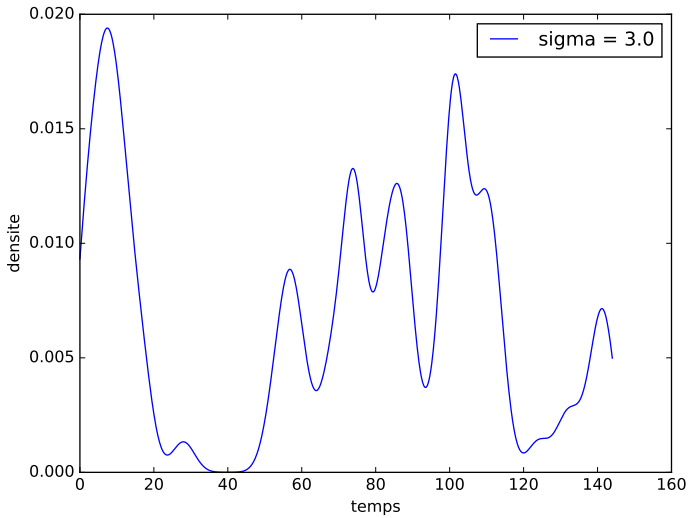


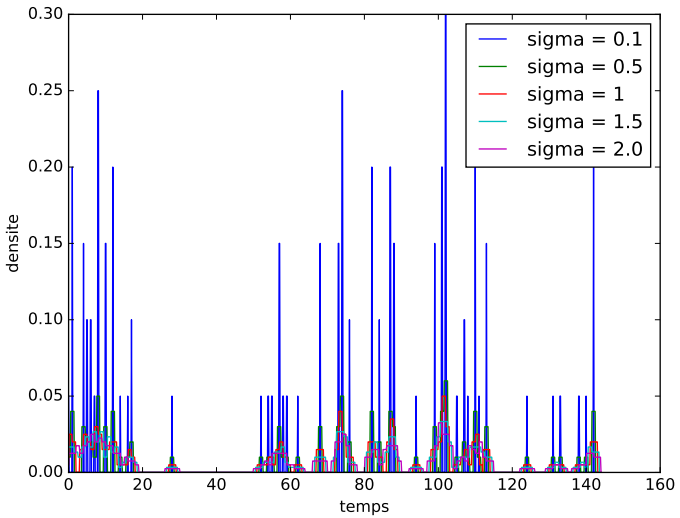


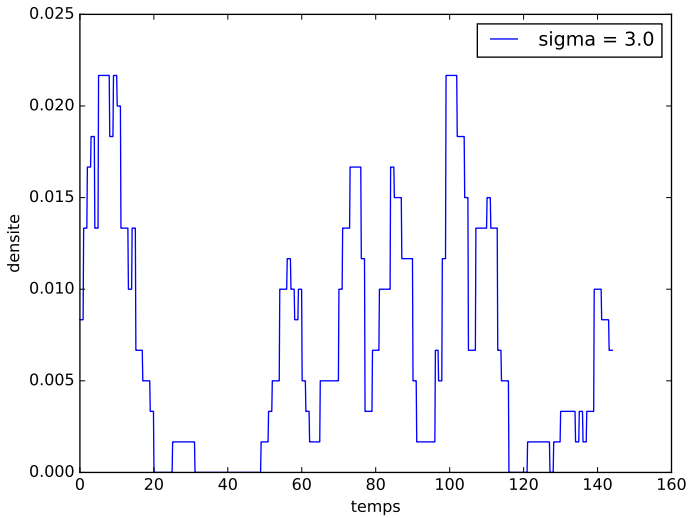


Discussion : exemples velib





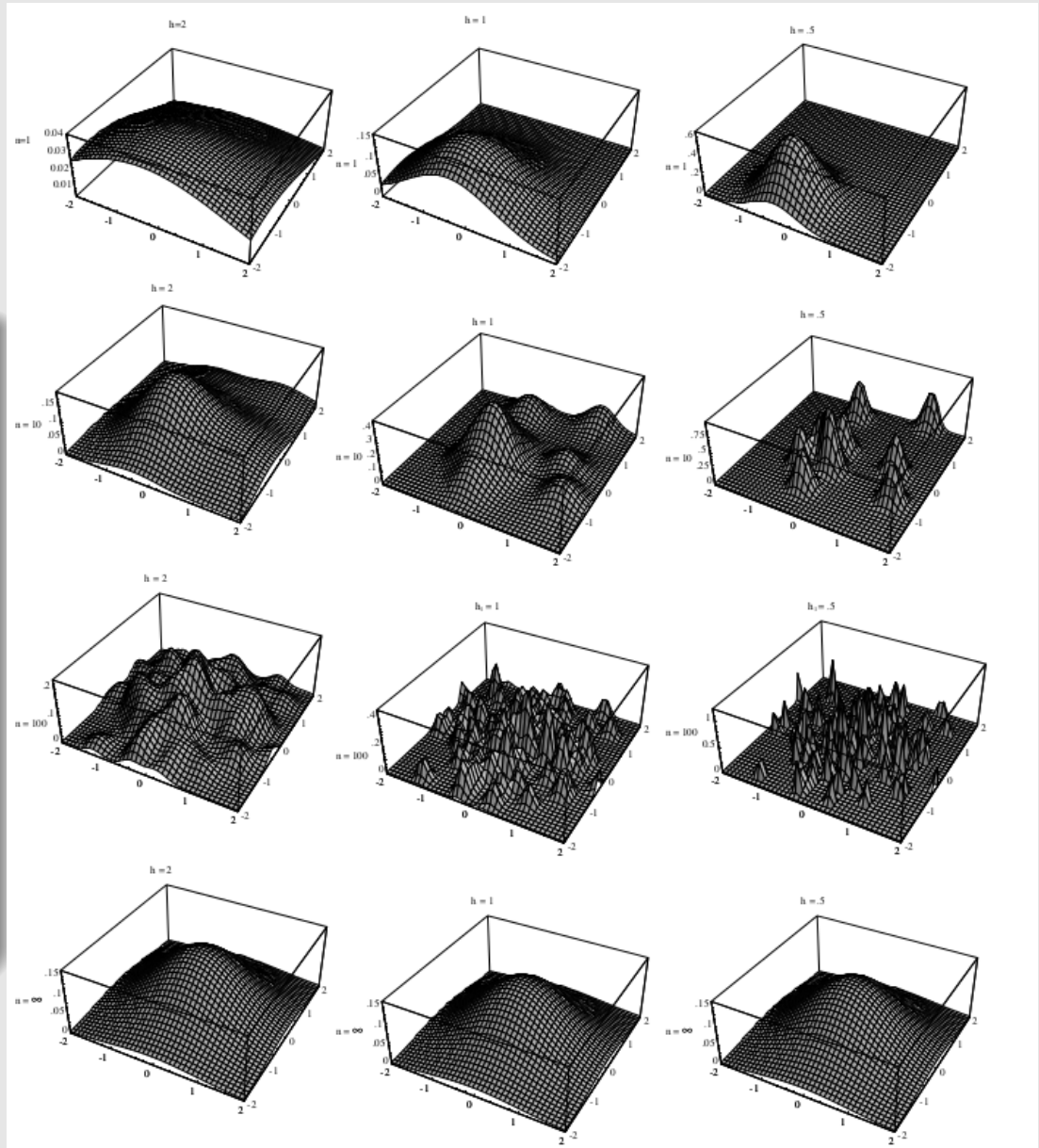




Discussion

Effet de r

- r grand
  $\rightarrow \delta$ peu sensible, paysage homogène
- r petit
  $\rightarrow \delta$ tend vers un pic de Dirac.
- compromis entre petite résolution et grande variabilité



Duda et. al. 01

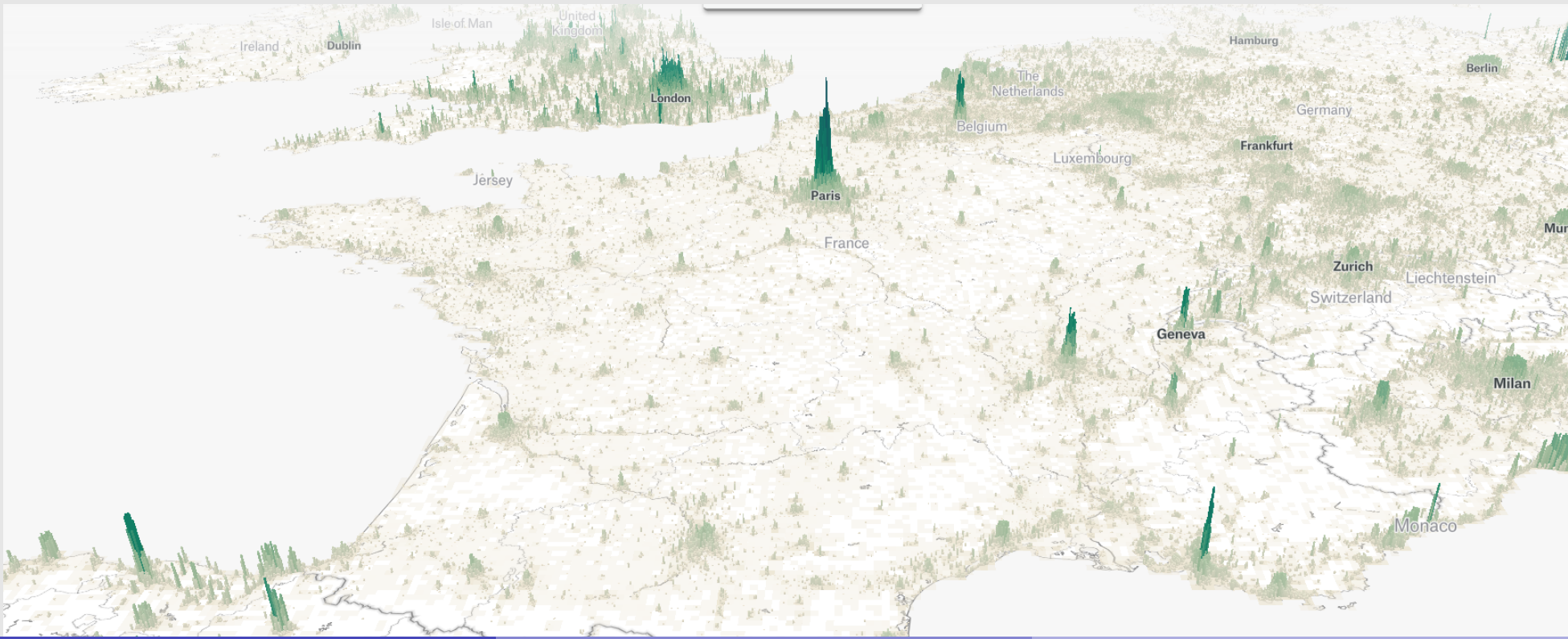
Évaluation qualitative du modèle

Visualisation de la densité estimée

- Discrétisation de l'espace
- Évaluation en chaque point discret de l'espace de la densité

$\Rightarrow$ comme pour les histogrammes, mais ici le modèle est continu !

$\Rightarrow$ En plus, très belles visualisations



Évaluation quantitative du modèle

Important pour la sélection de l'hyper-paramètre (le rayon du noyau)

- Mesure d'évaluation : vraisemblance !
- Soit $E = \{\mathbf{x}_i\}_{i=1}^N$ un échantillon

$$L(\theta; E) = p_\theta(E) = \prod_{i=1}^{N} p_\theta(\mathbf{x}_i)$$

(ou plutôt log-vraisemblance . . .)

- Problème : vraisemblance maximale pour un rayon infiniment petit
- Pic de Dirac le plus performant (mais nul en généralisation)

$\Rightarrow$ Partition en ensemble d'apprentissage/test (et/ou validation croisée)

Estimation de densité : conclusion

Contexte

- Estimer la densité d'une variable aléatoire (ou la loi jointe de plusieurs)
- à partir d'un ensemble de réalisation : un échantillon d'exemples.

Applications multiples

- Estimation de file d'attentes, d'occupation de lieux, des stocks, des pics de pollution
- Réponse à un problème plus général : lissage des données, traitement de données de capteurs :
  On a accès qu'à la réalisation d'une variable aléatoire à certains pas de temps, mais la mesure qui nous intéresse est une mesure continue . . .

Deux méthodes principales :

- Histogramme : rapide, mais coûteuse en mémoire, effet de bords
- Par noyaux : lent, plus flexible, sensibilité de la taille du noyau

$\Rightarrow$ Dans tous les cas, la dimension doit être faible . . .

Plan

1. Organisation de l'UE
2. Introduction
3. Les problématiques générales
4. Classification bayésienne
5. Estimation de densité par histogramme
6. Estimation de densité par noyaux
7. **Estimation de densité et classification**

Estimateur de Nadaraya-Watson

De la densité à la classification

On dispose

- d'un label y_i pour chaque $\mathbf{x}_i$, $y_i \in \{-1, 1\}$
- du nombre d'exemples positifs n_+, du nombre d'exemples négatifs n_- .
- d'un noyau δ pour l'estimation de densité.

L'objectif de la classification binaire est de déterminer $p(\mathbf{x}|y=1)$ et $p(\mathbf{x}|y=-1)$

- $p(\mathbf{x}|y=1) = \frac{1}{n_+} \sum_{i|y_i=1} \delta(\mathbf{x}-\mathbf{x}_i)$, $p(\mathbf{x}|y=-1) = \frac{1}{n_-} \sum_{i|y_i=-1} \delta(\mathbf{x}-\mathbf{x}_i)$
- $p(y|\mathbf{x}) = \frac{p(\mathbf{x}|y)p(y)}{p(\mathbf{x})} = \frac{\frac{1}{n_y} \sum_{i|y_i=y} \delta(\mathbf{x}-\mathbf{x}_i) \frac{n_y}{n}}{\frac{1}{n} \sum_i \delta(\mathbf{x}-\mathbf{x}_i)} = \frac{\sum_{i|y_i=y} \delta(\mathbf{x}-\mathbf{x}_i)}{\sum_i \delta(\mathbf{x}-\mathbf{x}_i)}$

$\Rightarrow p(y_+|\mathbf{x}) - p(y_-|\mathbf{x}) = \frac{\sum_{j=1}^N y_j \delta(\mathbf{x}-\mathbf{x}_j)}{\sum_{i=1}^N \delta(\mathbf{x}-\mathbf{x}_i)} = \frac{1}{\sum_{i=1}^N \delta(\mathbf{x}-\mathbf{x}_i)} \sum_{j=1}^N y_j \delta(\mathbf{x}-\mathbf{x}_j)$

- directement adaptable à la régression
- Intuition : moyennage sur le voisinage local du point à estimer (en pondérant par la distance)

Plus proches voisins (k-nearest Neighbors)

Principe

- plutôt que de prendre en compte un noyau ou la distance, prendre en compte le voisinage (immédiat ou non) du point
- un paramètre : k le nombre de voisins à prendre en compte
- $p(y|x) = \frac{1}{k} \sum_{j,\ x_j \in \{k\text{- plus proches}\}} y_j$

Discussion

- Parzen : travail sur le volume, pas de contrôle sur le nombre de points considérés
- Knn : volume libre, mais nombre de points fixe
- dans tous les cas :
  - complexité grande des algorithmes (possible d'utiliser des arbres de partitionnement (KD-tree) et autres heuristiques pour accélérer)
  - des paramètres à choisir ...
- Comment choisir les paramètres ?