

Validation croisée / cross-validation

Toby Dylan Hocking
toby.dylan.hocking@usherbrooke.ca

September 17, 2024

La validation croisée

Les données sont divisées en :

- ▶ train = entraînement, utilisé pour apprendre la fonction de prévision f .
- ▶ test, utilisé pour évaluer la qualité de la fonction de prévision f .

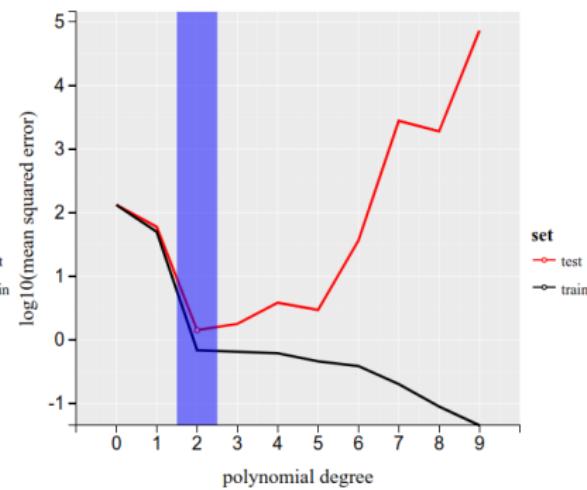
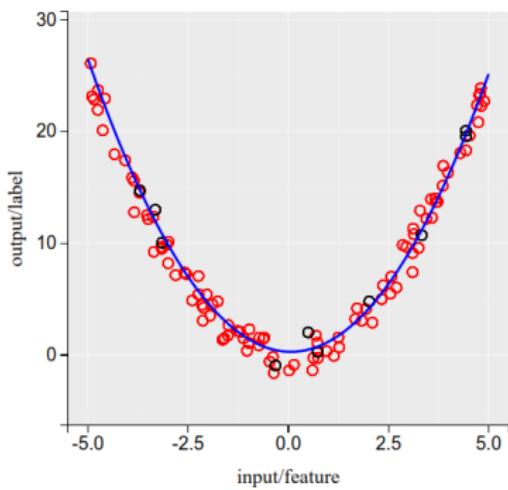
Sur-apprentissage et Sous-apprentissage

Jeux de données standards

Simulations : quand est-ce que l'apprentissage est possible ?

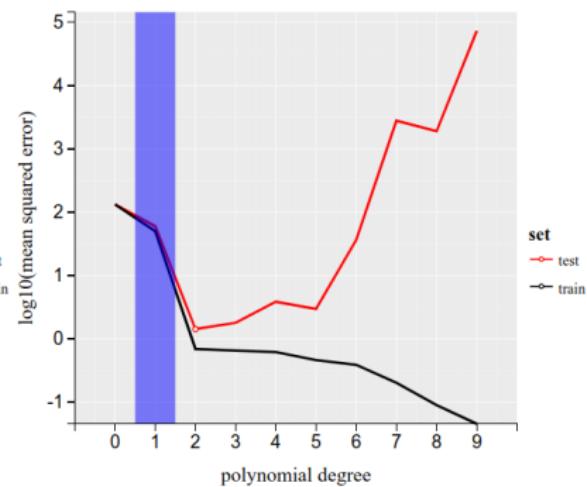
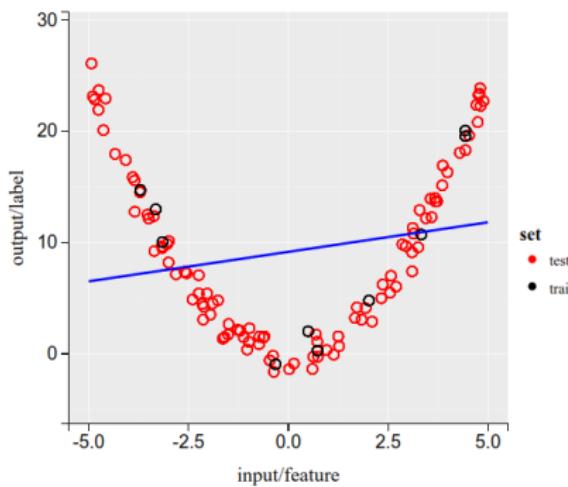
Bon apprentissage

- ▶ Fonction de bonne complexité (polynome degré 2)
- ▶ Bon régularité, bon variabilité.
- ▶ <https://tdhock.github.io/2020-02-03-capacity-polynomial-degree/>



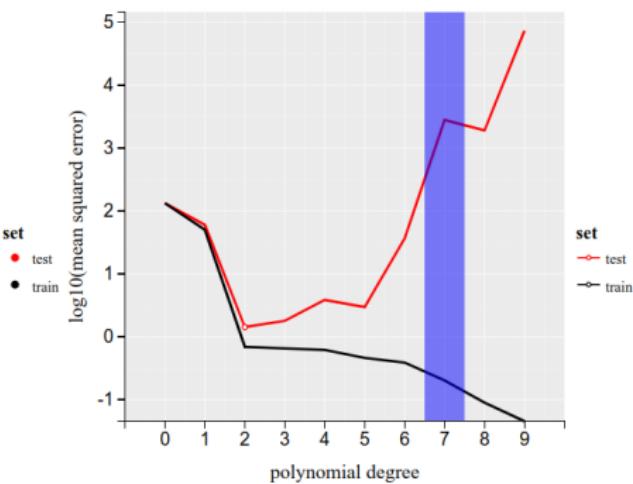
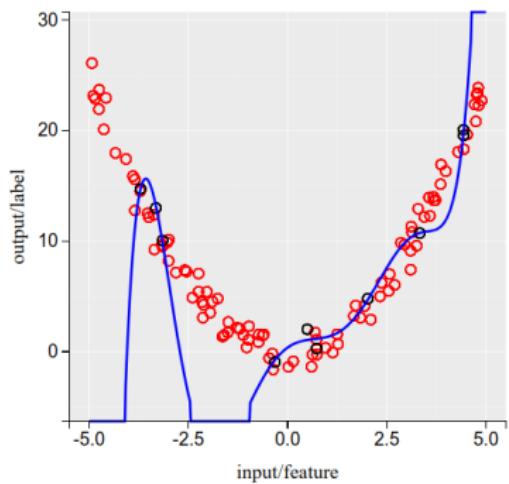
Sous-apprentissage

- ▶ Fonction trop simple (polynome degré 1)
- ▶ Trop régulier, pas assez variable.
- ▶ <https://tdhock.github.io/2020-02-03-capacity-polynomial-degree/>



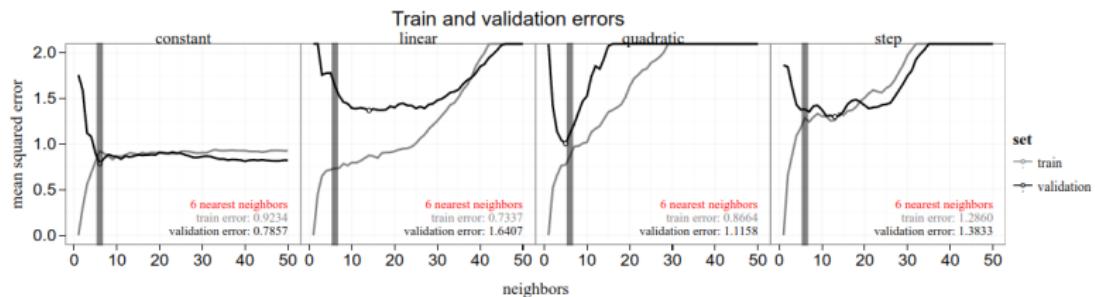
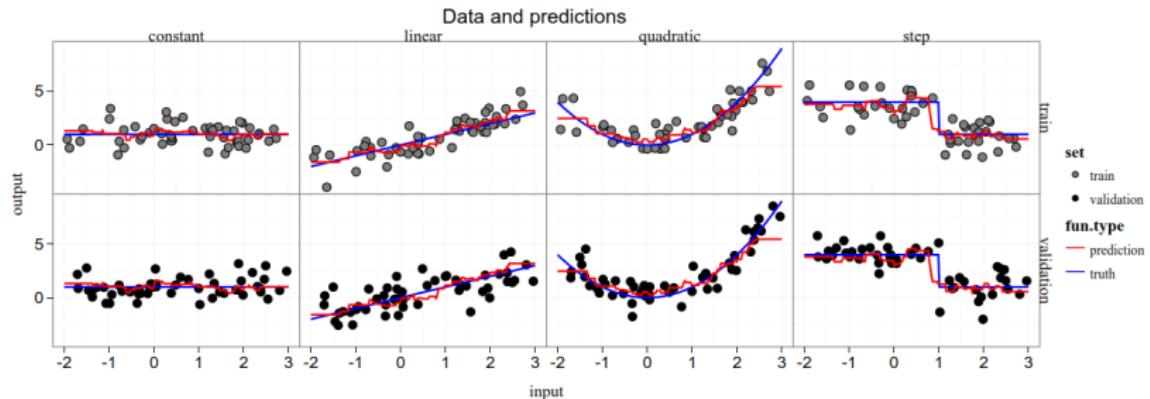
Sur-apprentissage

- ▶ Fonction trop complexe (polynome degré 7)
- ▶ Pas assez régulier, trop variable.
- ▶ <https://tdhock.github.io/2020-02-03-capacity-polynomial-degree/>



Sur- et Sous-apprentissage

► <https://tdhock.github.io/2019-01-nearest-neighbor-regression-one-split/>



Sur-apprentissage et Sous-apprentissage

Jeux de données standards

Simulations : quand est-ce que l'apprentissage est possible ?

Classification d'images de chiffres (zipUSPS)

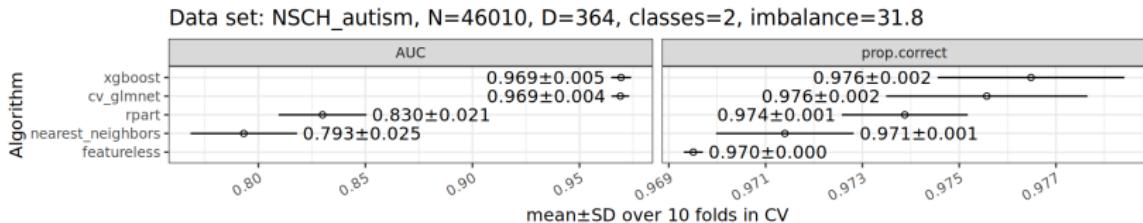
- ▶ prop.correct = proportion correcte
- ▶ xgboost meilleur, mais voisins (nearest_neighbors) est très proche... est-ce que la différence est significative ?

Data set: zipUSPS, N=9298, D=256, classes=10, imbalance=2.2

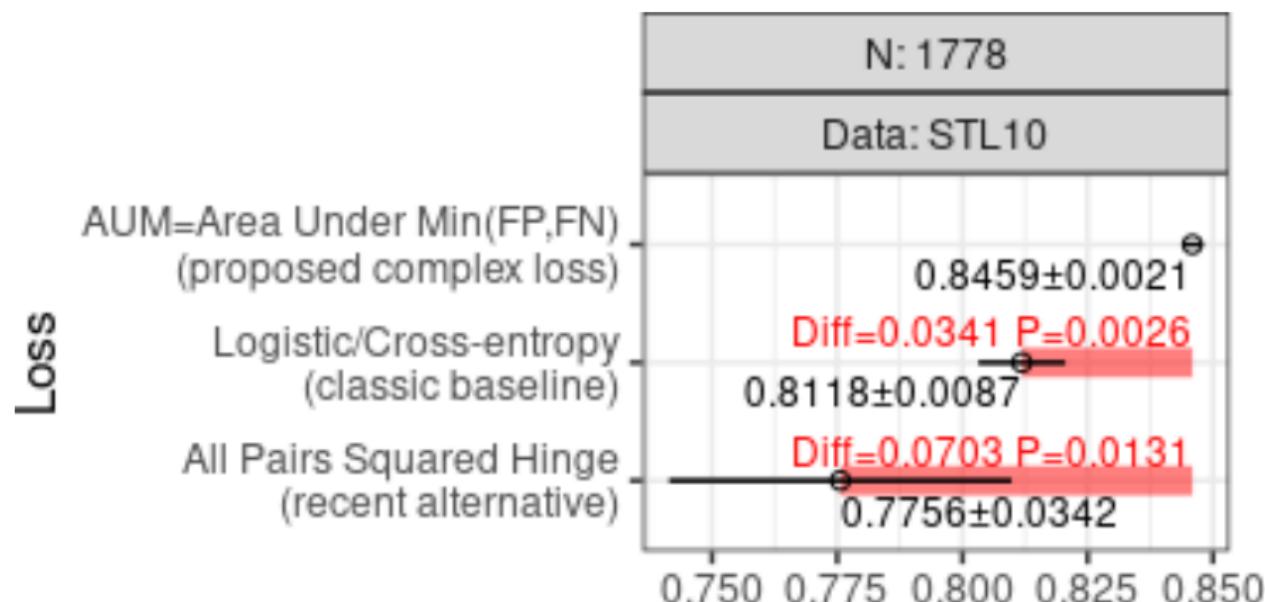


Classification d'autisme

- ▶ prop.correct = proportion correcte
- ▶ AUC = Area Under ROC Curve / Aire sous la courbe ROC
(Taux de Vrai Positive vs. Taux de Faux Positive)
- ▶ xgboost meilleur, mais modèle linéaire (cv_glmnet) est très proche... est-ce que la différence est significative ?

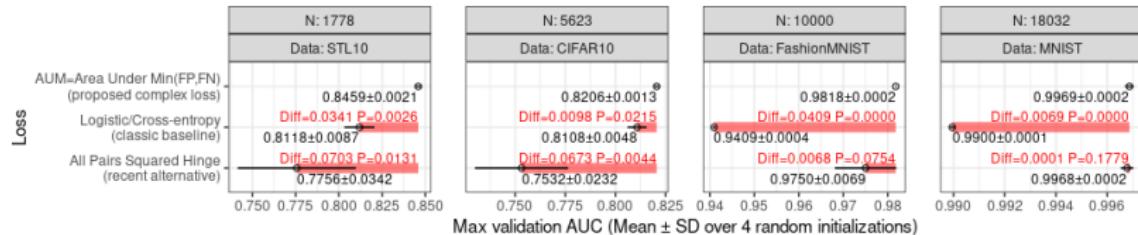


Visualisation du test de Student



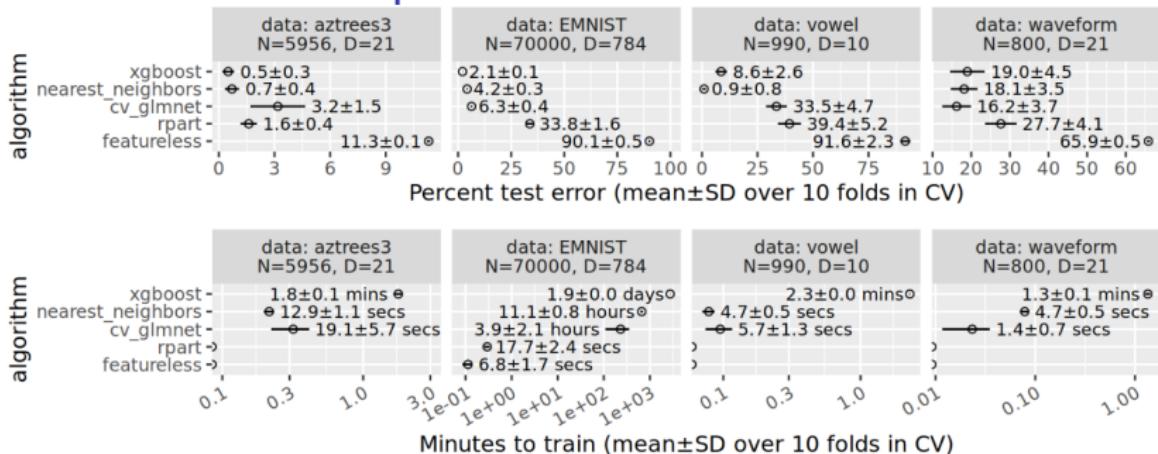
- ▶ X = Aire sous la courbe ROC.
- ▶ $p < 0.05 \Rightarrow$ différence significative.
- ▶ <https://tdhock.github.io/blog/2024/viz-pred-err/>

Visualisation du test de Student



- ▶ $p < 0.05 \Rightarrow$ différence significative.
- ▶ $p > 0.05 \Rightarrow$ différence non-significative.
- ▶ <https://tdhock.github.io/blog/2024/viz-pred-err/>

Taux d'erreur et temps de calcul



- ▶ featureless est le plus rapide, et toujours le plus erroné.
- ▶ xgboost est le plus lent, le moins erroné dans aztrees3, EMNIST.
- ▶ Les plus proches voisins (nearest_neighbors) est le meilleur dans vowel.
- ▶ Modèle linéaire (cv_glmnet) est le meilleur dans waveform.
- ▶ Pour chaque jeu de données, on ne sait pas quel algo est préférable, jusqu'au moment de voir le résultat de la V-C.

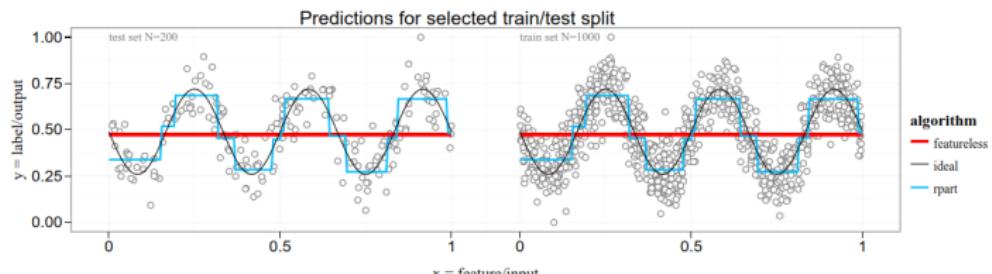
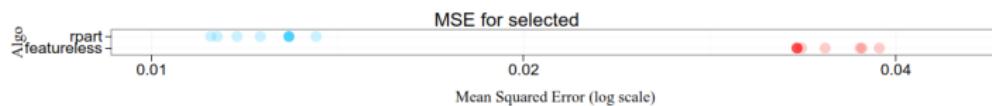
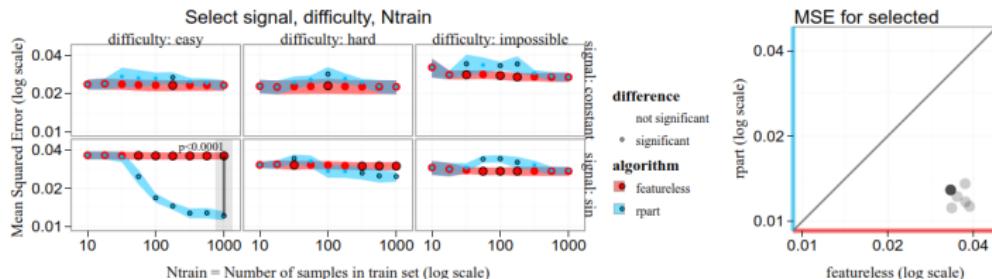
Sur-apprentissage et Sous-apprentissage

Jeux de données standards

Simulations : quand est-ce que l'apprentissage est possible ?

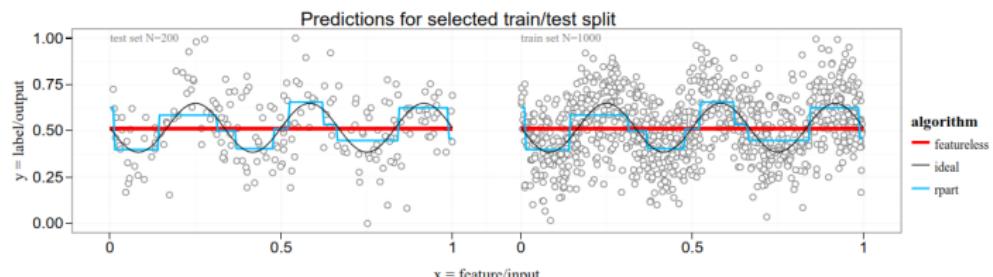
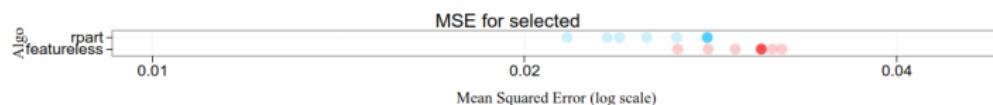
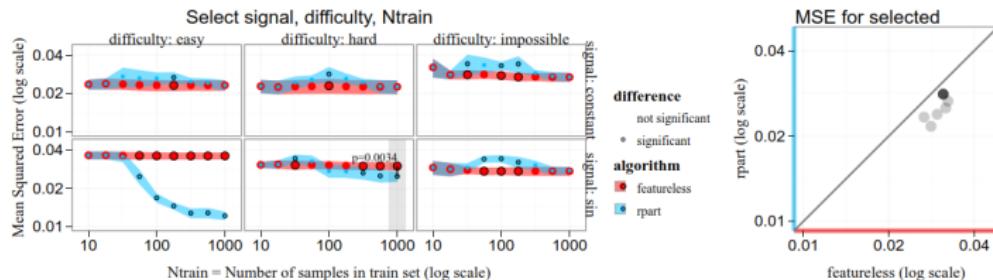
Apprentissage facile / Easy learning

- ▶ $N=1000$, bruit : facile, signal : sin.
- ▶ Erreur de rpart plus petit que featureless, $p < 0.0001$
- ▶ <https://tdhock.github.io/2024-09-16-K-fold-CV-train-sizes-regression/>



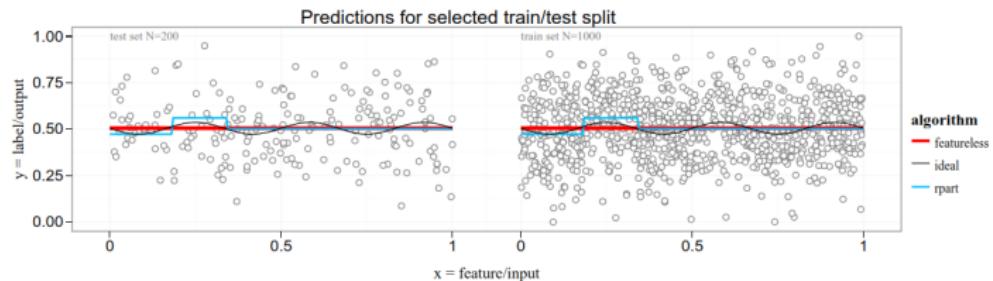
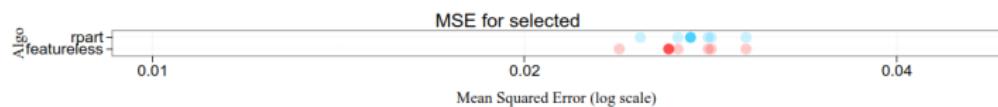
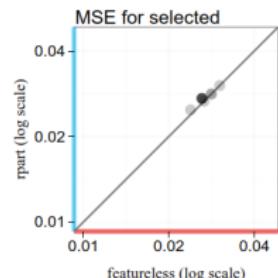
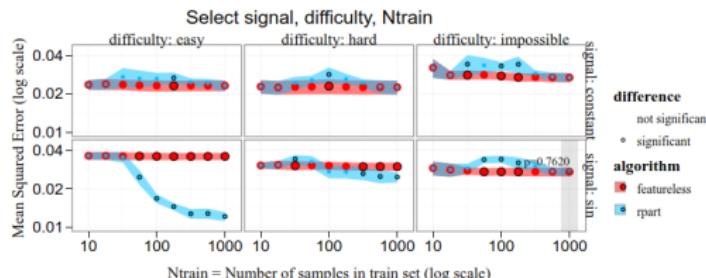
Apprentissage possible / Possible learning

- ▶ $N=1000$, bruit : difficile, signal : sin.
- ▶ Erreur de rpart plus petit que featureless, $p = 0.0034$
- ▶ <https://tdhock.github.io/2024-09-16-K-fold-CV-train-sizes-regression/>



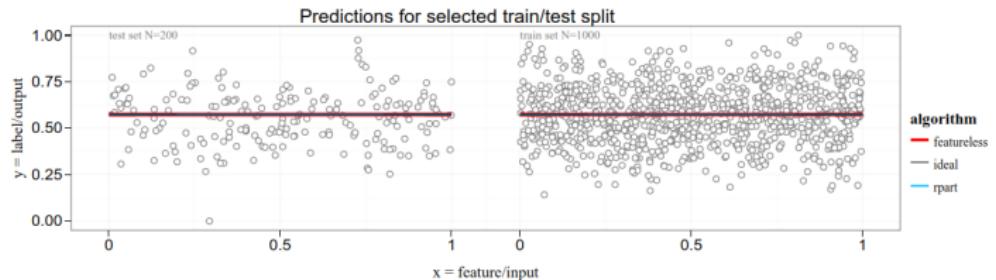
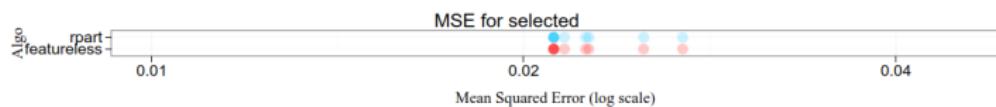
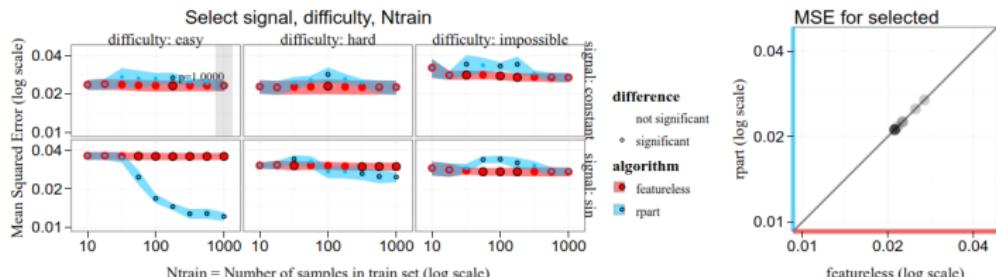
Apprentissage impossible 1 / Impossible learning 1

- ▶ $N=1000$, bruit : impossible, signal : sin.
- ▶ Erreur de rpart équivalent à featureless, $p = 0.7620$.
- ▶ Mode d'échec 1 : trop de bruit / signal pas assez fort.



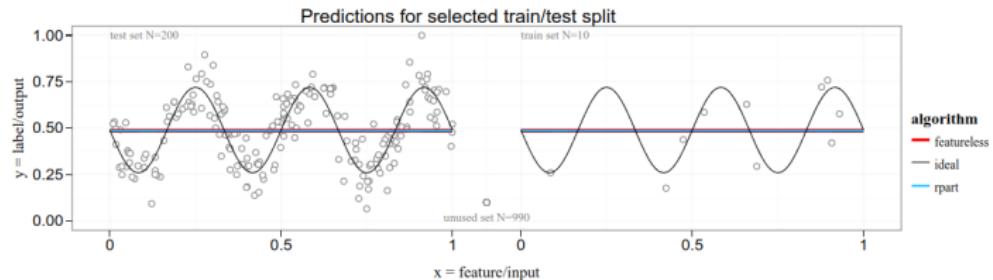
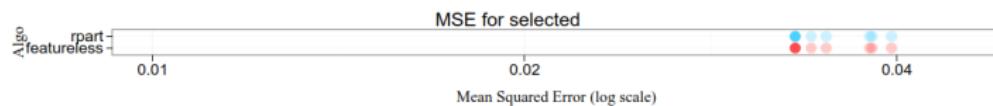
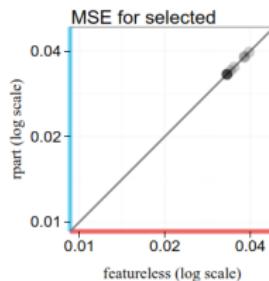
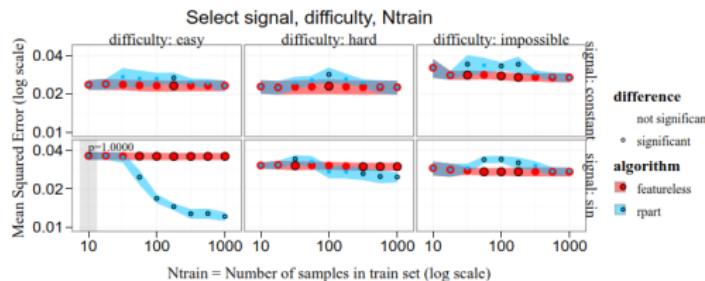
Apprentissage impossible 2 / Impossible learning 2

- ▶ $N=1000$, bruit : facile, signal : constant.
- ▶ Erreur de rpart équivalent à featureless, $p = 1$.
- ▶ Mode d'échec 2 : pas de relation entre entrée x et sortie y .



Apprentissage impossible 3 / Impossible learning 3

- ▶ $N=10$, bruit : facile, signal : sin.
- ▶ Erreur de rpart équivalent à featureless, $p = 1$.
- ▶ Mode d'échec 3 : pas assez de données.



Sur-apprentissage / Overfitting

- ▶ $N=178$, bruit : facile, signal : constant.
- ▶ Erreur de rpart plus grand featureless, $p = 0.0325$.
- ▶ Mode d'échec 3 : pas assez de données.

