Techniques d'apprentissage

IFT 603-712

Classification linéaire

Par

Pierre-Marc Jodoin

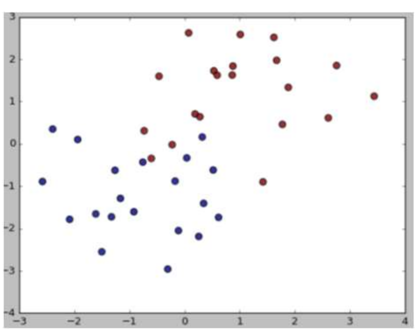
/

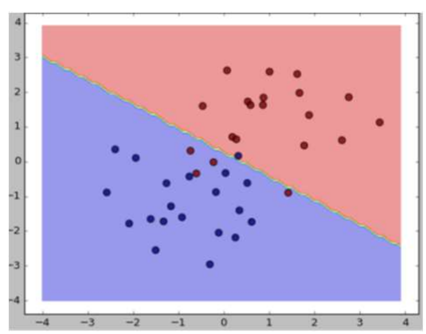
Hugo Larochelle

1

Classification supervisée (illustrée)

Entraînement





Soient des données de 2 classes et
(ici dans un espace 2D)

Le but est de trouver une function $y_{\vec{w}}(\vec{x})$ telle que

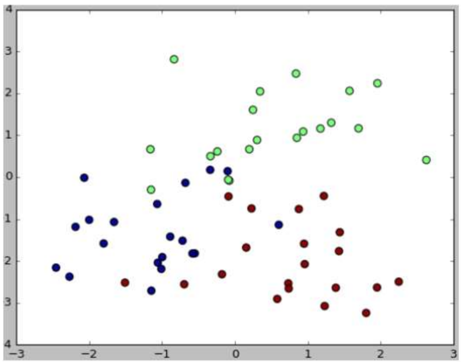
$y_{\vec{w}}(\bullet) =$ classe 1
$y_{\vec{w}}(\bullet) =$ classe 2

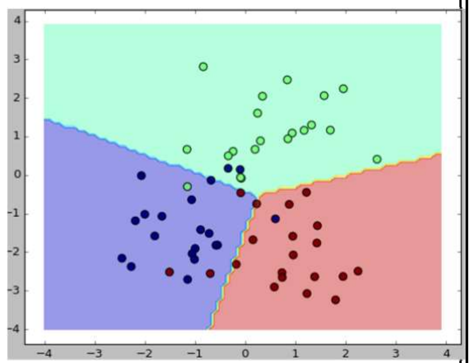
2

2

Classification supervisée (illustrée)

Entraînement avec plus de 2 classes





Soient des données de 3 classes ●, ○ et ●
(ici dans un espace 2D)

Le but est de trouver une function $y_{\vec{w}}(\vec{x})$ telle que

$y_{\vec{w}}(●) =$ classe 1
$y_{\vec{w}}(●) =$ classe 2
$y_{\vec{w}}(○) =$ classe 3

3

3

Notation

Ensemble d'entraînement: $D = \{(\vec{x}_1, t_1), (\vec{x}_2, t_2), \ldots, (\vec{x}_N, t_N)\}$

$\vec{x}_n \in \Re^d$ vecteur de données du n-ème élement
$t_n \in \{c_1, c_2, \ldots, c_K\}$ étiquette de classe du i-ème élément

Fonctions: avec *D*, on doit *apprendre* une **fonction de classification**

$$y_{\vec{w}}(\vec{x}) : \Re^d \rightarrow \{c_1, c_1, \ldots, c_k\}$$

qui nous informe à quelle classe appartient le vecteur $\vec{x}$.

5

5

Au menu : 5 méthodes

Régression
Modèles génératifs
Discriminant de Fisher

Émettent **l'hypothèse** que les données sont **gaussiennes**

Solution de type « ***closed form*** » (inversion de matrice)

Perceptron
Régression logistique

Aucune hypothèse quant à la distribution des données

Solution obtenue grâce à une **descente de gradient**.

6

6

Introduction à la classification linéaire

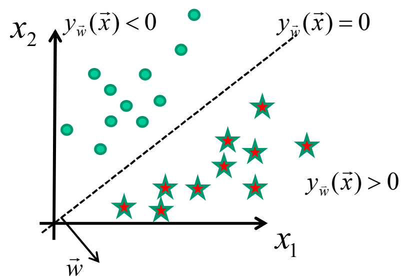
Au tableau !!!

7

7

Séparation linéaire

(2D et 2 classes)



$$y_{\vec{w}}(\vec{x}) = \underbrace{w_0}_{\text{biais}} + \underbrace{w_1 x_1 + w_2 x_2}_{\text{poids}}$$
$$= w_0 + \vec{w}^{\mathrm{T}}\vec{x}$$
$$= \vec{w}'^{\mathrm{T}}\vec{x}'$$

$$y_{\vec{w}}(\vec{x}) = \vec{w}^{\mathrm{T}}\vec{x}$$

Par simplicité

2 grands **advantages**. Une fois l'entraînement terminé,

1. Plus besoin de données d'entraînement
2. Classification est très rapide (**produit scalaire** entre 2 vecteurs)

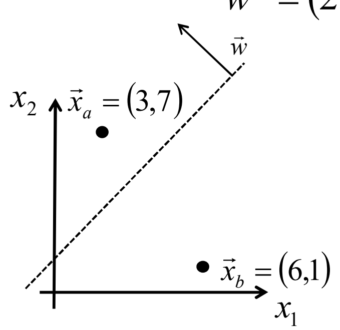
8

8

Séparation linéaire

Exemple jouet

$$\vec{w}^T = (\underbrace{2.2}_{\text{biais}}, \underbrace{-5.5, 4.4}_{\text{poids}})$$



$\vec{x}_a$ est en FACE du plan

$$y_W(\vec{x}_a) = \vec{w}^T\vec{x}_a = (2.2, -5.5, 4.4)\begin{bmatrix}1\\3\\7\end{bmatrix} = 16.5$$

$$y_W(\vec{x}_b) = \vec{w}^T\vec{x}_b = (2.2, -5.5, 4.4)\begin{bmatrix}1\\6\\1\end{bmatrix} = -26.4$$

$\vec{x}_b$ est DERRIÈRE le plan

9

9

10

Régression
Modèles génératifs
Discriminant de Fisher

Émettent l'hypothèque que les données sont **gaussiennes**

Solution de type « ***closed form*** » (inversion de matrice)

Perceptron
Régression logistique

Émettent **aucune hypothèse** quant à la distribution des données

Solution obtenue grâce à une **descente de gradient**.

11

Régression par les moindres carrés

(section 4.1.3, Bishop)

12

12

Régression par les moindres carrés

Cas 2 classes

On peut **classifier des données** en utilisant une approche de **régression** comme celle vue au chapitre précédent.

- On pourrait **prédire directement** la valeur de la cible (t=*1.0* vs t=*-1.0*)
- Si $y_{\vec{w}}(\vec{x}) \geq 0$ on classifie dans *Classe1* sinon dans *Classe2*

13

13

Régression par moindres carrés

RAPPEL

On a vu qu'on peut utiliser une fonction d'erreur **par moindres carrés**

Maximum de vraisemblance

$$\vec{w} = \arg\min_{\vec{w}} \underbrace{\sum_{n=1}^{N} \left(t_n - y_{\vec{w}}(\vec{x}_n)\right)^2}_{E_D(\vec{w})}$$

Maximum *a posteriori*

$$\vec{w} = \arg\min_{\vec{w}} \underbrace{\sum_{n=1}^{N} \left(t_n - y_{\vec{w}}(\vec{x}_n)\right)^2 + \lambda \vec{w}^{\mathrm{T}} \vec{w}}_{E_D(\vec{w})}$$

On peut prendre la même approche pour la classification

14

14

Régression par les moindres carrés

Cas 2 classes

RAPPEL

Maximum de vraisemblance

$$\vec{w} = \arg\min_{\vec{w}} \sum_{n=1}^{N} \left(t_n - y_{\vec{w}}(\vec{x}_n)\right)^2$$

$$\boxed{\vec{w}_{\mathrm{MV}} = \left(X^{\mathrm{T}} X\right)^{-1} X^{\mathrm{T}} T}$$

Maximum *a posteriori*

$$\vec{w} = \arg\min_{\vec{w}} \sum_{n=1}^{N} \left(t_n - y_{\vec{w}}(\vec{x}_n)\right)^2 + \lambda \vec{w}^{\mathrm{T}} \vec{w}$$

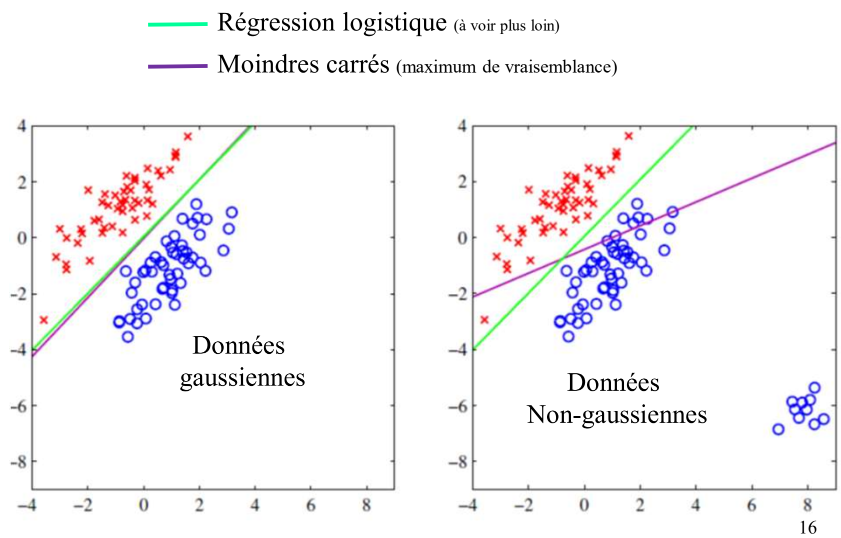
$$\boxed{\vec{w}_{\mathrm{MAP}} = \left(X^{\mathrm{T}} X + \lambda I\right)^{-1} X^{\mathrm{T}} T}$$

Ces fonctions de coût s'appuient sur l'hypothèse de données gaussiennes

15

15

Régression par moindres carrés



16

16

Régression par les moindres carrés

Cas K>2 classes

On va traiter le cas K classes comme une **régression multiple**

- **Cible :** vecteur à K dim. indiquant a quelle classe appartient l'entrée
- **Exemple** : Pour K=5 classes et une entrée associée à la classe 2

$$t_n = \begin{pmatrix} -1 & 1 & -1 & -1 & -1 \end{pmatrix}^{\mathbf{T}}$$

- **Classification**: On classifie dans la classe k une donnée dont la valeur de $y_{\vec{w},k}(\vec{x})$ est la plus élevée.

17

17

Régression par les moindres carrés

Cas K>2 classes

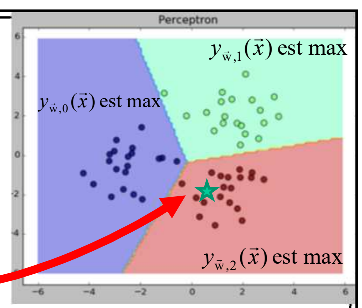
Le modèle doit maintenant **prédire un vecteur**

$$y_{\mathrm{W}}(\vec{x}) = \mathrm{W}^{\mathrm{T}}\vec{x}$$

où W est une matrice ***K* x *d***

Chaque ligne de W peut être vue comme un vecteur $\vec{\mathrm{w}}_k$ du modèle $y_{\vec{\mathrm{w}}_k}(\vec{x}) = \vec{\mathrm{w}}_k^T\vec{x}$ pour la k^e cible

Cas K=3 classes



Example

(1.1, -2.0)

$$y_{\mathrm{W}}(\vec{x}) = \mathrm{W}\vec{x} = \begin{bmatrix} -.6 & -.49 & .4 \\ -.4 & .41 & .24 \\ -.2 & .05 & -.36 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 \\ 1.1 \\ -2.0 \end{bmatrix} = \begin{array}{ll} \begin{bmatrix} -1.9 \\ -.43 \\ .58 \end{bmatrix} & \begin{array}{l} \text{Classe 0} \\ \text{Classe 1} \\ \text{Classe 2} \end{array} \end{array}$$

20

20

Régression
Modèles génératifs
Discriminant de Fisher

Émettent l'hypothèque que les données sont **gaussiennes**

Solution de type « ***closed form*** » (inversion de matrice)

Perceptron
Régression logistique

Émettent aucune hypothèse quant à la distribution des données

Solution obtenue grâce à une **descente de gradient**.

21

21

Modèles probabilistes génératifs

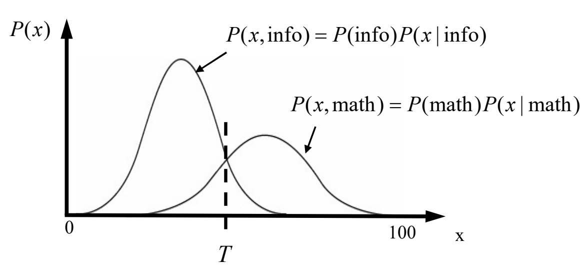
(section 4.2, Bishop)

22

22

Prenons le cas 1D, 2 Classes

Ex: examen de statistiques avec des étudiants en math et en informatique



T est le seuil qui **minimise l'erreur de classification**

$$P(\text{info})P(x = T \mid \text{info}) = P(\text{math})P(x = T \mid \text{math})$$

$$\boxed{P(\text{info})P(x \mid \text{info}) \underset{\text{math}}{\overset{\text{info}}{\gtrless}} P(\text{math})P(x \mid \text{math})}$$

23

23

$$P(\text{info})P(x\,|\,\text{info}) \underset{\text{math}}{\overset{\text{info}}{\gtrless}} P(\text{math})P(x\,|\,\text{math})$$

est équivalent à un **maximum a posteriori**

Inconnue Connue

$$\begin{aligned} t &= \arg\max_t P\left(t\,|\,x\right) \qquad \text{où } t \in \{\text{math}, \text{info}\} \\ &= (\cdots) \\ &= \arg\max_t P(t)P\left(x\,|\,t\right) \end{aligned}$$

24

24

Prenons le cas 1D, 2 Classes

Ex: examen de math avec étudiant en math et en informatique

$$P(\text{info})P(x\,|\,\text{info}) \underset{\text{math}}{\overset{\text{info}}{\gtrless}} P(\text{math})P(x\,|\,\text{math})$$

Si on suppose que la **vraisemblance** de chaque classe est **gaussienne**:

$$P(x\,|\,\text{info}) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma_{\text{info}}} \exp\left(-\frac{(x-\mu_{\text{info}})^2}{2\sigma^2_{\text{info}}}\right)$$

$$P(x\,|\,\text{math}) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma_{\text{math}}} \exp\left(-\frac{(x-\mu_{\text{math}})^2}{2\sigma^2_{\text{math}}}\right)$$

où

μ_{math} : moyenne des étudiants de math .

σ_{math} : écart - type des étudiants de math.

25

25

Prenons le cas 1D, 2 Classes

Ex: examen de math avec étudiant en math et en informatique

$$P(\text{info})P(x\,|\,\text{info}) \underset{\text{math}}{\overset{\text{info}}{\gtrless}} P(\text{math})P(x\,|\,\text{math})$$

Si on suppose que la **vraisemblance** de chaque classe est **gaussienne**:

$$P(x\,|\,\text{info}) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma_{\text{info}}}\exp\left(-\frac{(x-\mu_{\text{info}})^2}{2\sigma_{\text{info}}^2}\right)$$

$$P(x\,|\,\text{math}) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma_{\text{math}}}\exp\left(-\frac{(x-\mu_{\text{math}})^2}{2\sigma_{\text{math}}^2}\right)$$

et que

$$P(\text{info}) = \frac{\text{nb étudiants info}}{\text{nb tot étudiants}}$$ (Proportion des étudiants en info)

$$P(\text{math}) = \frac{\text{nb étudiants math}}{\text{nb tot étudiants}}$$ (Proportion des étudiants en math)

26

26

Modèle probabiliste génératif

Algorithme du seuil « optimal »

$$\mu_{\text{info}} = \frac{1}{N_{\text{info}}}\sum_{t_n=\text{info}} x_n,\quad \mu_{\text{math}} = \frac{1}{N_{\text{math}}}\sum_{t_n=\text{math}} x_n$$

$$\sigma_{\text{info}}^2 = \frac{1}{N_{\text{info}}}\sum_{t_n=\text{info}} (x_n-\mu_{\text{info}})^2,\ \sigma_{\text{math}}^2 = \frac{1}{N_{\text{math}}}\sum_{t_n=\text{math}} (x_n-\mu_{\text{math}})^2$$

$$P(\text{math}) = \frac{N_{\text{math}}}{N_{\text{info}}+N_{\text{math}}},\ P(\text{info}) = \frac{N_{\text{info}}}{N_{\text{info}}+N_{\text{math}}}$$

POUR CHAQUE note x FAIRE

$$P_i = \frac{P(\text{info})}{\sqrt{2\pi}\sigma_{\text{info}}}\exp\left(-\frac{(x-\mu_{\text{info}})^2}{2\sigma_{\text{info}}^2}\right)$$

$$P_m = \frac{P(\text{math})}{\sqrt{2\pi}\sigma_{\text{math}}}\exp\left(-\frac{(x-\mu_{\text{math}})^2}{2\sigma_{\text{math}}^2}\right)$$

SI $P_i > P_m$ ALORS

$t = 1$ /* étudiant « info » */

SINON

$t = 0$ /* étudiant « math » */

27

27

L'algorithme de la page précédente revient à un **classificateur quadratique**

$$y_{\vec{w}}(x) = w_2 x^2 + w_1 x + w_0 = 0$$

28

28

Modèle probabiliste génératif

Classificateur quadratique, cas 1D, 2 Classes

$$P(\text{info})P(x \mid \text{info}) = P(\text{math})P(x \mid \text{math})$$

$$\frac{P(\text{info})}{\sqrt{2\pi}\sigma_{\text{info}}}\exp\left(-\frac{(x-\mu_{\text{info}})^2}{2\sigma_{\text{info}}^2}\right) = \frac{P(\text{math})}{\sqrt{2\pi}\sigma_{\text{math}}}\exp\left(-\frac{(x-\mu_{\text{math}})^2}{2\sigma_{\text{math}}^2}\right)$$

On peut facilement démontrer que

$$\boxed{y_{\vec{w}}(x) = w_2 x^2 + w_1 x + w_0 = 0}$$

$$w_2 = \frac{\sigma_{\text{math}}^2 - \sigma_{\text{info}}^2}{2}$$

$$w_1 = \mu_{\text{math}}\sigma_{\text{info}}^2 - \mu_{\text{info}}\sigma_{\text{math}}^2$$

$$w_0 = \frac{\mu_{\text{info}}^2\sigma_{\text{math}}^2}{2} - \frac{\mu_{\text{math}}^2\sigma_{\text{info}}^2}{2} - \sigma_{\text{info}}^2\sigma_{\text{math}}^2 \ln\left(\frac{\sigma_{\text{math}}P(\text{info})}{\sigma_{\text{info}}P(\text{math})}\right)$$

29

29

Modèle probabiliste génératif

Classificateur linéaire, cas 1D, 2 Classes

Si on suppose que $\sigma_{\text{info}} = \sigma_{\text{math}} = \sigma$

$$P(\text{info})P(x\,|\,\text{info}) = P(\text{math})P(x\,|\,\text{math})$$

$$\frac{P(\text{info})}{\sqrt{2\pi}\sigma}\exp\left(-\frac{(x-\mu_{\text{info}})^2}{2\sigma^2}\right) = \frac{P(\text{math})}{\sqrt{2\pi}\sigma}\exp\left(-\frac{(x-\mu_{\text{math}})^2}{2\sigma^2}\right)$$

$$\boxed{y_{\vec{\mathrm{w}}}(x) = w_1 x + w_0 = 0}$$

$$w_1 = \frac{(\mu_{\text{math}} - \mu_{\text{info}})}{\sigma^2}$$

$$w_0 = \frac{\mu_{\text{info}}^2}{2\sigma^2} - \frac{\mu_{\text{math}}^2}{2\sigma^2} - \ln\left(\frac{P(\text{info})}{P(\text{math})}\right)$$

30

30

Modèle probabiliste génératif

Classificateur linéaire, **cas d-D, 2 Classes**

$$\boxed{y_{\vec{\mathrm{w}}}(\vec{x}) = \vec{\mathrm{w}}^{\mathrm{T}}\vec{x} + w_0 = 0}$$

$$\vec{\mathrm{w}} = \Sigma^{-1}(\vec{\mu}_1 - \vec{\mu}_2)$$

$$w_0 = \frac{\vec{\mu}_2^{\mathrm{T}}\Sigma^{-1}\vec{\mu}_2}{2} - \frac{\vec{\mu}_1^{\mathrm{T}}\Sigma^{-1}\vec{\mu}_1}{2} - \ln\left(\frac{P(\mathrm{C}_2)}{P(\mathrm{C}_1)}\right)$$

31

31

Tel que mentionné au chapitre 4.2.2, lorsque les 2 classes n'ont pas la même variance-covariance, on peut utiliser le modèle linéaire mais avec la matrice

$$\Sigma = P(\mathrm{C}_1)\Sigma_1 + P(\mathrm{C}_2)\Sigma_2$$

32

32

Modèle probabiliste génératif

Classificateur linéaire, cas 1D, 2 Classes

Maximum de vraisemblance

Si on suppose que $P(\text{info}) = P(\text{math})$

$$\cancel{P(\text{info})}P(x\,|\,\text{info}) = \cancel{P(\text{math})}P(x\,|\,\text{math})$$

$$\frac{\cancel{P(\text{info})}}{\sqrt{2\pi}\sigma}\exp\left(-\frac{(x-\mu_{\text{info}})^2}{2\sigma^2}\right) = \frac{\cancel{P(\text{math})}}{\sqrt{2\pi}\sigma}\exp\left(-\frac{(x-\mu_{\text{math}})^2}{2\sigma^2}\right)$$

$$\boxed{y_{\vec{\mathrm{w}}}(x) = w_1 x + w_0 = 0}$$

$$w_1 = \frac{(\mu_{\text{math}} - \mu_{\text{info}})}{\sigma^2}$$

$$w_0 = \frac{\mu_{\text{info}}^2}{2\sigma^2} - \frac{\mu_{\text{math}}^2}{2\sigma^2} - \ln\left(\cancel{\frac{P(\text{info})}{P(\text{math})}}\right)$$

33

33

Modèle probabiliste génératif

Classificateur linéaire, cas d-D, K Classes

On peut généraliser au cas à **plusieurs classes**

- Voir fin des sections 4.2 et 4.2.1

34

34

35

35

Régression
Modèles génératifs
Discriminant de Fisher

Émettent l'hypothèque que les données sont **gaussiennes**

Solution de type « ***closed form*** » (inversion de matrice)

Perceptron
Régression logistique

Émettent **aucune hypothèse** quant à la distribution des données

Solution obtenue grâce à une **descente de gradient**.

36

36

Discriminant linéaire de Fisher

(section 4.1.4, Bishop)

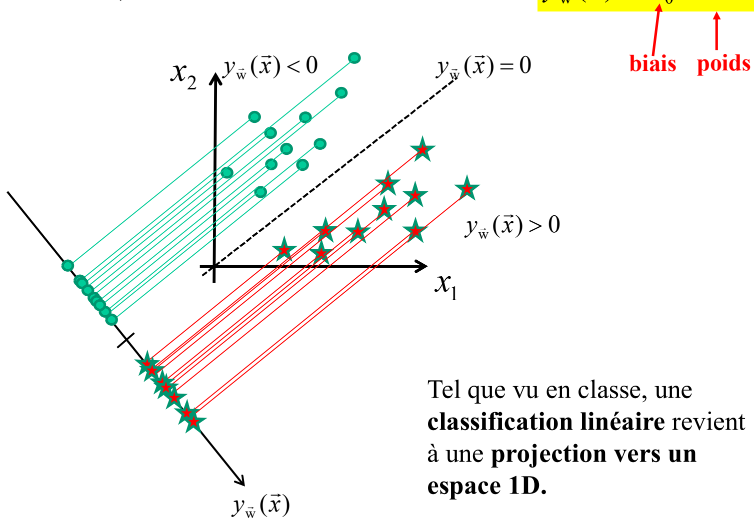
37

37

Classification linéaire = Projection 1D

(2D et 2 classes)

$y_{\vec{w}}(\vec{x}) = w_0 + \vec{w}^{\mathrm{T}}\vec{x}$



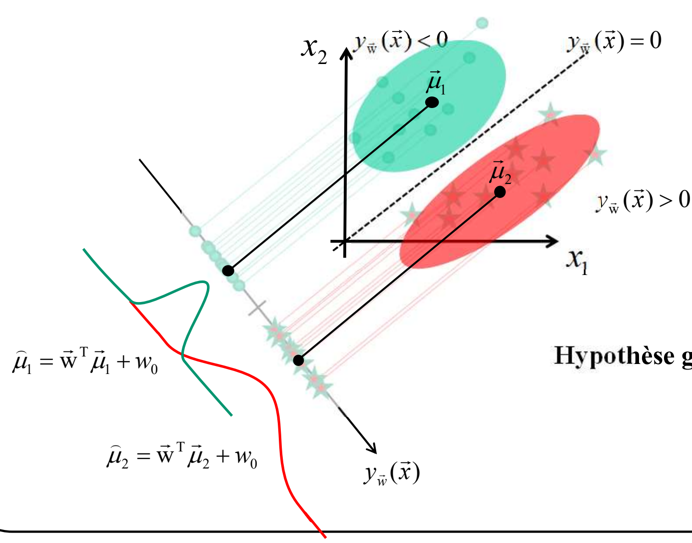
Tel que vu en classe, une **classification linéaire** revient à une **projection vers un espace 1D.**

38

Classification linéaire = Projection 1D

(2D et 2 classes)

$y_{\vec{w}}(\vec{x}) = w_0 + \vec{w}^{\mathrm{T}}\vec{x}$



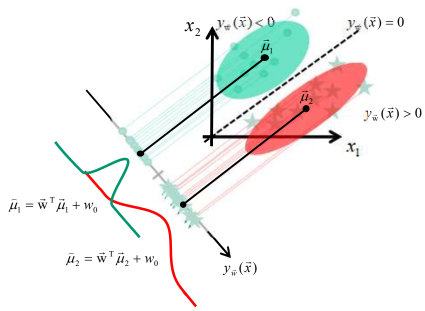
Hypothèse gaussienne…

39

Classification linéaire = Projection 1D

(2D et 2 classes)

$y_{\vec{w}}(\vec{x}) = w_0 + \vec{w}^{\mathrm{T}}\vec{x}$



Intuitivement, une bonne solution $y_{\vec{w}}(\vec{x})$ en est une pour laquelle la **distance entre les moyennes projetées est grande.**

$$\begin{aligned}\vec{w} &= \arg\max_{\vec{w}} \left|\hat{\mu}_1 - \hat{\mu}_2\right| \\ &= \arg\max_{\vec{w}} \left|\vec{w}^{\mathrm{T}}\vec{\mu}_1 + w_0 - \vec{w}^{\mathrm{T}}\vec{\mu}_2 - w_0\right| \\ &= \arg\max_{\vec{w}} \left|\vec{w}^{\mathrm{T}}\left(\vec{\mu}_1 - \vec{\mu}_2\right)\right|\end{aligned}$$

40

40

Classification linéaire = Projection 1D

(2D et 2 classes)

$y_{\vec{w}}(\vec{x}) = w_0 + \vec{w}^{\mathrm{T}}\vec{x}$

$$\vec{w} = \arg\max_{\vec{w}} \left|\vec{w}^{\mathrm{T}}\left(\vec{\mu}_1 - \vec{\mu}_2\right)\right|$$

Ce **problème est mal posé** car il suffit d'augmenter **W** infiniment pour maximiser cette fonction.

41

41

Classification linéaire = Projection 1D

(2D et 2 classes)

$y_{\vec{w}}(\vec{x}) = w_0 + \vec{w}^{\mathrm{T}}\vec{x}$

$$\vec{w} = \arg\max_{\vec{w}} \left| \vec{w}^{\mathrm{T}} (\vec{\mu}_1 - \vec{\mu}_2) \right|$$

Par contre si on impose que la **norme de *w* = 1**

on obtient que

$$\vec{w} \propto (\vec{\mu}_1 - \vec{\mu}_2)$$

(preuve au tableau)

42

42

Discriminant linéaire

Une fois ***w*** calculé, il faut trouver le biais w_0

- Un choix fréquent lorsque les classes sont balancées

$$w_0 = -\frac{\vec{w}^{\mathrm{T}}\vec{\mu}_1 + \vec{w}^{\mathrm{T}}\vec{\mu}_2}{2}$$

- Sinon

$$w_0 = -\vec{w}^{\mathrm{T}} \left(\frac{N_1}{N_1 + N_2}\vec{\mu}_1 + \frac{N_2}{N_1 + N_2}\vec{\mu}_2 \right)$$

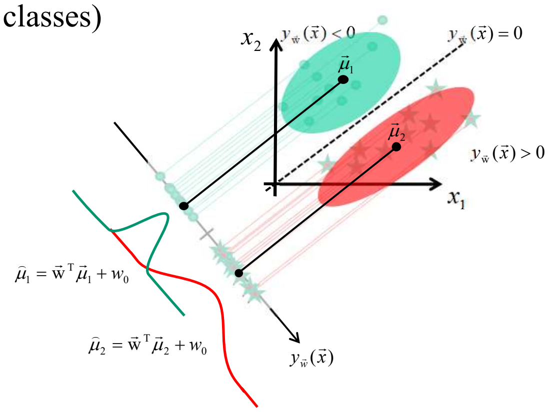
où *N1* et *N2* sont le nombre d'éléments dans chaque classe.

43

43

Discriminant linéaire

(2D et 2 classes)



Les 2 gaussiennes projetées:

$$\widehat{\mu}_1 = \vec{w}^{\mathrm{T}} \vec{\mu}_1 + w_0 \qquad \widehat{\mu}_2 = \vec{w}^{\mathrm{T}} \vec{\mu}_2 + w_0$$

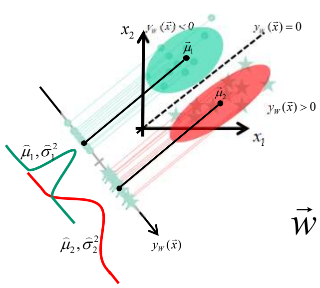
$$\widehat{\sigma}_1^2 = \vec{w}^{\mathrm{T}} \Sigma_1 \vec{w} \qquad \widehat{\sigma}_2^2 = \vec{w}^{\mathrm{T}} \Sigma_2 \vec{w}$$

44

44

Discriminant linéaire **de Fisher**

(2D et 2 classes)



Critère de Fisher

$$\vec{w} = \arg\max_{\vec{w}} \frac{(\widehat{\mu}_1 - \widehat{\mu}_2)^2}{\widehat{\sigma}_1^2 + \widehat{\sigma}_2^2}$$

On obtient le meilleur $\vec{w}$ en forçant le gradient à 0

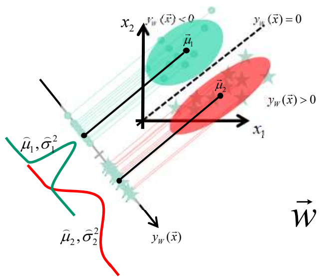
$$\nabla_{\vec{w}} \frac{(\widehat{\mu}_1 - \widehat{\mu}_2)^2}{\widehat{\sigma}_1^2 + \widehat{\sigma}_2^2} = 0$$

45

45

Discriminant linéaire **de Fisher**

(2D et 2 classes)



Critère de Fisher

$$\vec{w} = \arg\max_{\vec{w}} \frac{(\hat{\mu}_1 - \hat{\mu}_2)^2}{\hat{\sigma}_1^2 + \hat{\sigma}_2^2}$$

Maximiser la distance inter-classe

Minimiser la variance intra-classe

On obtient le meilleur $\vec{w}$ en forçant le gradient à 0

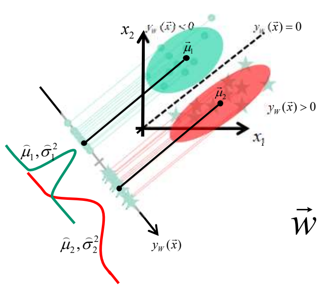
$$\nabla_{\vec{w}} \frac{(\hat{\mu}_1 - \hat{\mu}_2)^2}{\hat{\sigma}_1^2 + \hat{\sigma}_2^2} = 0$$

46

46

Discriminant linéaire **de Fisher**

(2D et 2 classes)



Critère de Fisher

$$\vec{w} = \arg\max_{\vec{w}} \frac{(\hat{\mu}_1 - \hat{\mu}_2)^2}{\hat{\sigma}_1^2 + \hat{\sigma}_2^2}$$

Preuve en classe ou en devoir

$$\Rightarrow \vec{w} \propto \Sigma_{\vec{w}}^{-1}(\vec{\mu}_1 - \vec{\mu}_2)$$

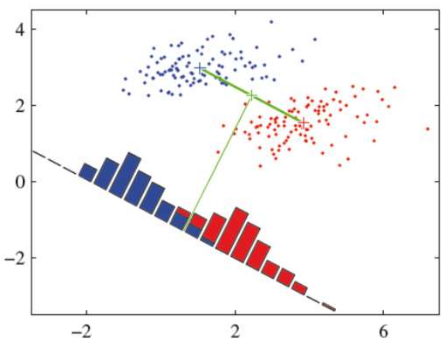
$$\Rightarrow \Sigma_{\vec{w}} = \sum_{t_n = C_1} (\vec{x}_n - \vec{\mu}_1)(\vec{x}_n - \vec{\mu}_1)^{\mathrm{T}} + \sum_{t_n = C_2} (\vec{x}_n - \vec{\mu}_2)(\vec{x}_n - \vec{\mu}_2)^{\mathrm{T}}$$

47

47

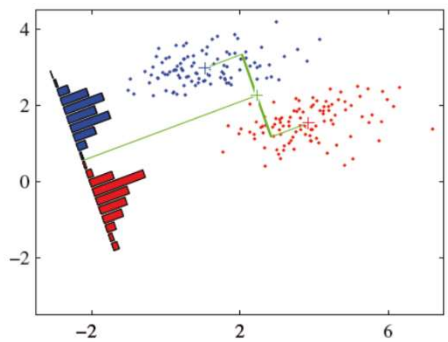
Discriminant linéaire de Fisher

(2D et 2 classes)



Sans minimisation intra-classe

$$\vec{w} \propto \left(\vec{\mu}_1 - \vec{\mu}_2\right)$$



Avec minimisation intra-classe

$$\vec{w} \propto \Sigma_{\vec{w}}^{-1}\left(\vec{\mu}_1 - \vec{\mu}_2\right)$$

Discriminant linéaire de Fisher

Algorithme 2-Classes, entraînement

Calculer $\vec{\mu}_1, \vec{\mu}_2$

$$\Sigma_{\vec{w}} = \sum_{t_n = C_1} (\vec{x}_n - \vec{\mu}_1)(\vec{x}_n - \vec{\mu}_1)^{\mathrm{T}} + \sum_{t_n = C_2} (\vec{x}_n - \vec{\mu}_2)(\vec{x}_n - \vec{\mu}_2)^{\mathrm{T}}$$

$$\vec{w} = \Sigma_{\vec{w}}^{-1}\left(\vec{\mu}_1 - \vec{\mu}_2\right)$$

$$w_0 = -\frac{\vec{w}^{\mathrm{T}}\vec{\mu}_1 + \vec{w}^{\mathrm{T}}\vec{\mu}_2}{2} \qquad \left(\text{ou } w_0 = -\vec{w}^{\mathrm{T}}\left(\frac{N_1}{N_1+N_2}\vec{\mu}_1 + \frac{N_2}{N_1+N_2}\vec{\mu}_2\right)\right)$$

Algorithme 2-Classes, généralisation

POUR CHAQUE donnée test $\vec{x}$ FAIRE

$t = y_{\vec{w}}(\vec{x}) = \vec{w}^{\mathrm{T}}\vec{x} + w_0$

SI $t < 0$ ALORS

t=1

SINON

t=2

Discriminant linéaire de Fisher

- On peut voir l'analyse discriminante linéaire comme un cas particulier des **moindres carrés**
  - ➢ voir section 4.1.5
- Il est possible de généraliser au cas à **plus de 2 classes**
  - ➢ voir section 4.1.6

50

50

51

51

Régression
Modèles génératifs
Discriminant de Fisher

Émettent l'hypothèque que les données sont **gaussiennes**

Solution de type « ***closed form*** » (inversion de matrice)

Perceptron
Régression logistique

Émettent **aucune hypothèse** quant à la distribution des données

Solution obtenue grâce à une **descente de gradient**.

52

52

Perceptron
(section 4.1.7, Bishop)

53

53

Perceptron (2 classes)

Contrairement aux approches précédentes, le perceptron **n'émet pas** l'hypothèse que les données sont **gaussiennes**

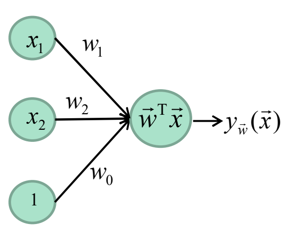
Le perceptron part de la definition brute de la classification binaire par **hyperplan**

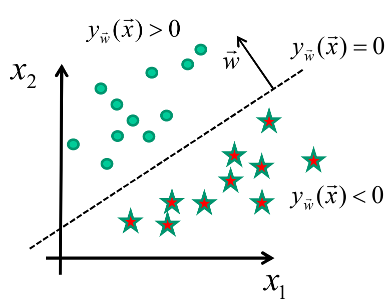
$$
\begin{aligned}
y_{\vec{w}}(\vec{x}) &= sign\left(\vec{w}^T \vec{x}\right) \\
&= sign\left(\underbrace{w_0}_{\text{biais}} + \underbrace{w_1 x_1 + w_2 x_2 + \ldots + w_d x_d}_{\text{poids}}\right)
\end{aligned}
$$

54

Perceptron

(2D et 2 classes)

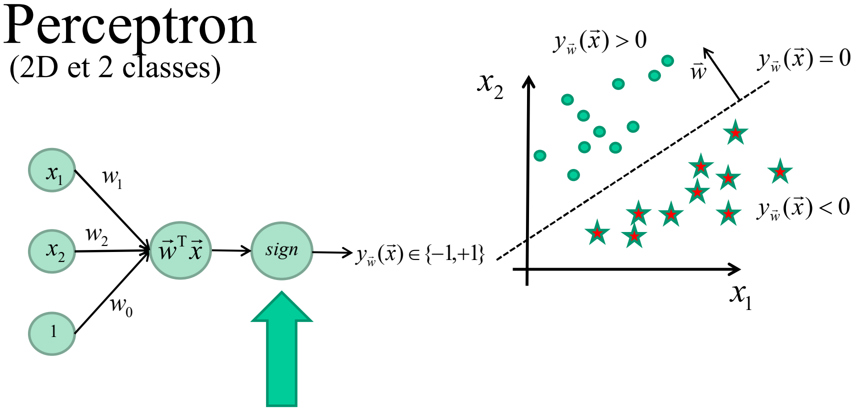




$$
\begin{aligned}
y_{\vec{w}}(\vec{x}) &= w_0 + w_1 x_1 + w_2 x_1 \\
&= \vec{w}^{\mathrm{T}} \vec{x} \\
&= \vec{w}'^{\mathrm{T}} \vec{x}' \\
&\Rightarrow \vec{w}^{\mathrm{T}} \vec{x}
\end{aligned}
$$

55

Perceptron
(2D et 2 classes)



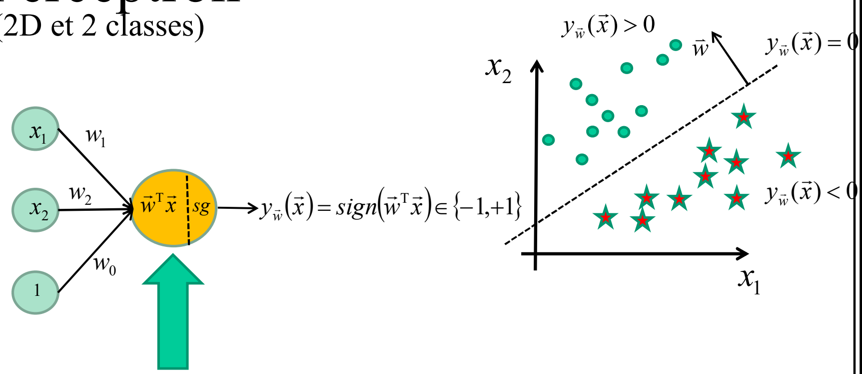
Fonction d'activation

$$y_{\vec{w}}(\vec{x}) = sign(\vec{w}^{\mathrm{T}}\vec{x})$$

56

56

Perceptron
(2D et 2 classes)

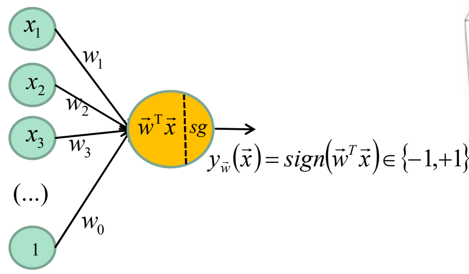


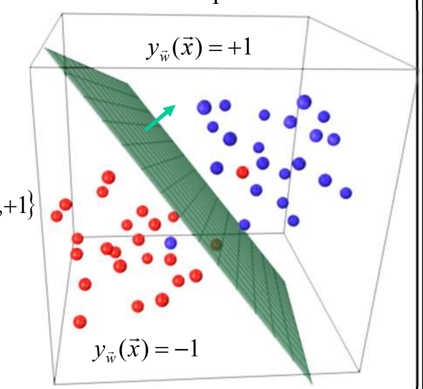
Neurone
Produit scalaire + fonction d'activation

57

57

Perceptron
(N-D and 2-class case)





58

58

Nouvelle fonction de coût pour <u>**apprendre *W***</u>

<u>Le but</u>: avec des données d'entraînement $D = \{(\vec{x}_1, t_1), (\vec{x}_2, t_2), \ldots, (\vec{x}_N, t_N)\}$, estimer $\vec{w}$ afin que:

$$y_{\vec{w}}(\vec{x}_n) = t_n \qquad \forall n$$

En d'autres mots, minimiser **l'erreur d'entraînement**

$$E_D(\vec{w}) = \frac{1}{N}\sum_{n=1}^{N} l(y_{\vec{w}}(\vec{x}_n), t_n)$$

où *l(.,.)* est une **fonction de perte** (*loss function* en anglais).

Trouver la bonne fonction de perte et le bon algorithme **d'optimisation** est un sujet central en **apprentissage machine.**

59

59

Régression et classification

RAPPEL

Vous vous souvenez de la **régression**?

Maximum de vraisemblance

$$\vec{w} = \arg\min_{\vec{w}} \underbrace{\sum_{n=1}^{N} \frac{(t_n - y_{\vec{w}}(\vec{x}_n))^2}{2}}_{E_D(\vec{w})}$$

Maximum *a posteriori*

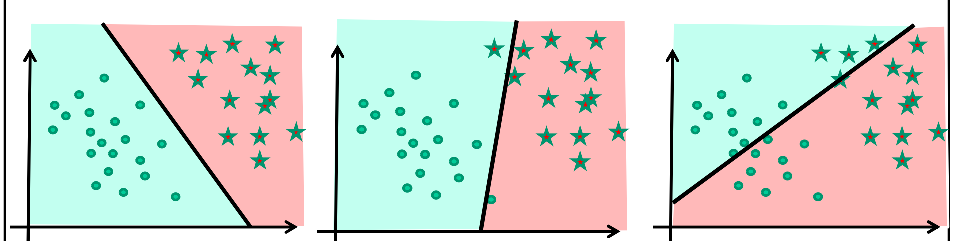
$$\vec{w} = \arg\min_{\vec{w}} \underbrace{\sum_{n=1}^{N} (t_n - y_{\vec{w}}(\vec{x}_n))^2 + \lambda \vec{w}^{\mathrm{T}} \vec{w}}_{E_D(\vec{w})}$$

C'est un peu la même idée pour le Perceptron mais avec une <u>nouvelle fonction de coût</u>.

60

60

Fonction de perte



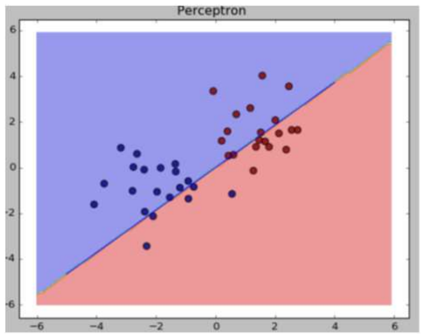
$E_D(y_{\vec{w}}(\vec{x})) \approx 0$ $\quad$ $E_D(y_{\vec{w}}(\vec{x})) > 0$ $\quad$ $E_D(y_{\vec{w}}(\vec{x})) >> 0$

61

Nouvelle fonction de coût pour **apprendre *W***

Une function simple et indépendante de la distribution des données serait de compter 1 pour chaque donnée mal classée et 0 sinon

$$E_D(\vec{w}) = \sum_{\vec{x}_i \in M} 1 \qquad \text{où } M \text{ est l'ensemble des données mal classées}$$

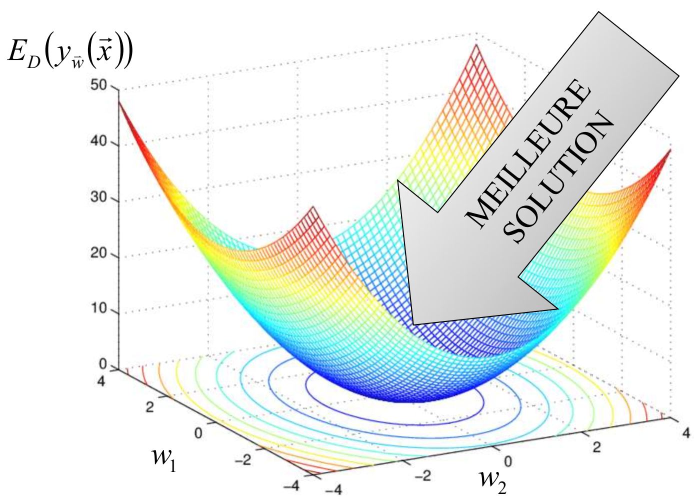


Exemple:

$$E_D(\vec{w}) = 15$$

Ainsi, la meilleure solution serait celle pour laquelle on **aurait aucune donnée mal classée**.

Malheureusement, cette function n'est **pas dérivable** partout et $\nabla_{\vec{w}} E_D(\vec{w}) = 0$ pour des **solutions non-optimales**

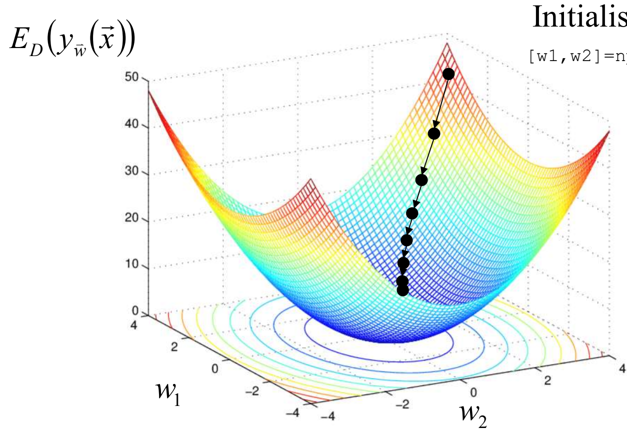


Perceptron

Question: comment trouver la meilleure solution? $\nabla_{\vec{w}} E_D\left(y_{\vec{w}}(\vec{x})\right) = 0$

Initialisation aléatoire

```
[w1,w2]=np.random.randn(2)
```



64

Gradient descent

Question: how to find the best solution? $\nabla E_D\left(y_{\vec{w}}(\vec{x})\right) = 0$

$$\vec{w}^{[k+1]} = \vec{w}^{[k]} - \eta \nabla E_D\left(y_{\vec{w}^{[k]}}(\vec{x})\right)$$

Gradient de la perte

Taux d'apprentissage
(Learning rate)

65

Critère du perceptron (perte)

Observation

Une **donnée mal classée** survient lorsque

$$\vec{w}^{\mathrm{T}}\vec{x}_n > 0 \text{ et } t_n = -1$$
$$\text{ou}$$
$$\vec{w}^{\mathrm{T}}\vec{x}_n < 0 \text{ et } t_n = +1.$$

DONC $-\vec{w}^{\mathrm{T}}\vec{x}_n t_n$ est **TOUJOURS positif pour des données mal classés**

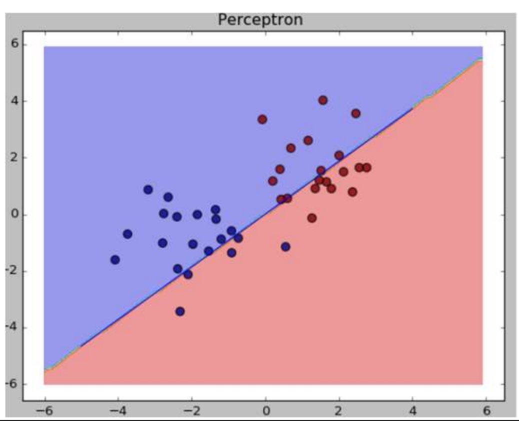
66

66

Critère du perceptron

Le **critère du perception** est une function qui pénalise les données mal classées

$$E_D(\vec{w}) = \sum_{\vec{x}_n \in M} -\vec{w}^{\mathrm{T}}\vec{x}_n t_n \qquad \text{où } M \text{ est l'ensemble des données mal classées}$$



$$E_D(\vec{w}) = 464.15$$

67

67

Perceptron

Question: comment trouver la meilleure solution $\vec{w}$ avec cette function de perte?

Réponse: une solution frequente est la **descente de gradient**.

$$\vec{w}^{[k+1]} = \vec{w}^{[k]} - \eta \nabla E_D\left(\vec{w}^{[k]}\right)$$

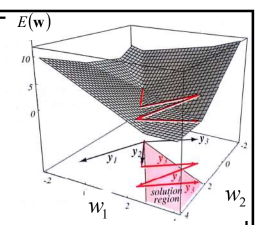
$\nabla E_D\left(\vec{w}^{[k]}\right)$ → Gradient de la function de coût

η → Taux d'apprentissage (*learning rate*).

Descente de gradient de base

Initialiser $\vec{w}$
k=0
FAIRE k=k+1
$\quad \vec{w} = \vec{w} - \eta \nabla E_D(\vec{w})$
JUSQU'À ce que toutes les données soient bien classées

Perceptron



[Duda-Hart-Stork]

Pour le critère du Perceptron

$$\nabla E_D(\vec{w}) = \sum_{\vec{x}_n \in M} -t_n \vec{x}_n$$

Batch optimization

Initialiser $\vec{w}$
k=0
DO k=k+1
$$\vec{w} = \vec{w} - \eta\left(\sum_{\vec{x}_n \in M} -t_n \vec{x}_n\right)$$
UNTIL toutes les données sont bien classées

NOTE importante sur le **taux d'apprentissage** η:

- **Trop faible** => convergence lente
- **Trop grand** => peut ne pas converger (et même diverger)
- Peut **décroître** à chaque itération (e.g. $\eta^{[k]} = cst / k$)

Perceptron

Une autre version de l'algorithme consiste à analyser **une donnée par itération**.

Descente de gradient stochastique

Initialiser $\vec{w}$
k=0
DO k=k+1
FOR n = 1 to N
IF $\vec{w}^{\mathrm{T}}\vec{x}_n t_n < 0$ THEN /* donnée mal classée */
$\vec{w} = \vec{w} + \eta t_n \vec{x}_n$
UNTIL toutes les données sont bien classées.

70

70

Critère du perceptron

Fonctions d'énergie similaires au critère du Perceptron dont le **gradient est le même**

$$E_D(\vec{w}) = \sum_{\vec{x}_n \in M} -\vec{w}^{\mathrm{T}}\vec{x}_n t_n$$ où M est l'ensemble des données mal classées

$$E_D(\vec{w}) = \sum_{n=1}^{N} \max\left(0, -t_n \vec{w}^T \vec{x}_n\right)$$

$$E_D(\vec{w}) = \sum_{n=1}^{N} \max\left(0, 1 - t_n \vec{w}^T \vec{x}_n\right)$$ "Hinge Loss" or "SVM" Loss

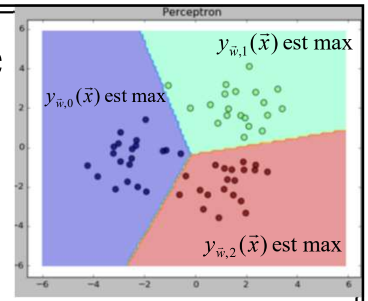
Chapitre 6

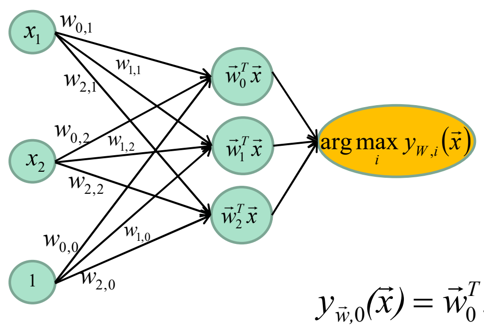
71

71

Perceptron Multiclasse

(2D et 3 classes)





$$y_{\vec{w},0}(\vec{x}) = \vec{w}_0^T\vec{x} = w_{0,0} + w_{0,1}x_1 + w_{0,2}x_2$$

$$y_{\vec{w},1}(\vec{x}) = \vec{w}_1^T\vec{x} = w_{1,0} + w_{1,1}x_1 + w_{1,2}x_2$$

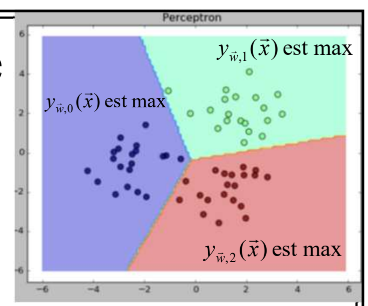
$$y_{\vec{w},2}(\vec{x}) = \vec{w}_2^T\vec{x} = w_{2,0} + w_{2,1}x_1 + w_{2,2}x_2$$

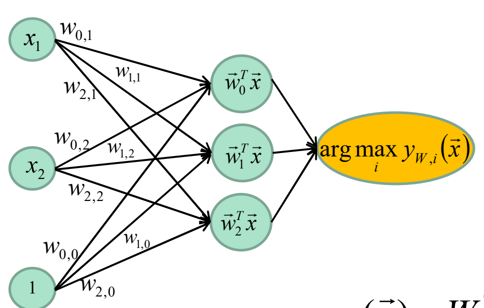
72

72

Perceptron Multiclasse

(2D et 3 classes)





$$y_W(\vec{x}) = W^{\mathrm{T}}\vec{x}$$

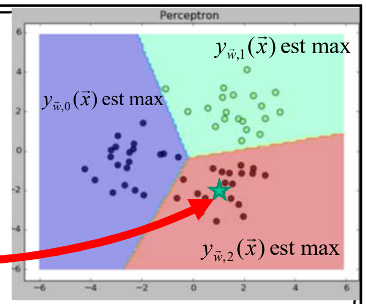
$$y_W(\vec{x}) = \begin{bmatrix} w_{0,0} & w_{0,1} & w_{0,2} \\ w_{1,0} & w_{1,1} & w_{1,2} \\ w_{2,0} & w_{2,1} & w_{2,2} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 \\ x_1 \\ x_2 \end{bmatrix}$$

73

Perceptron Multiclasse

Exemple

(1.1, -2.0)

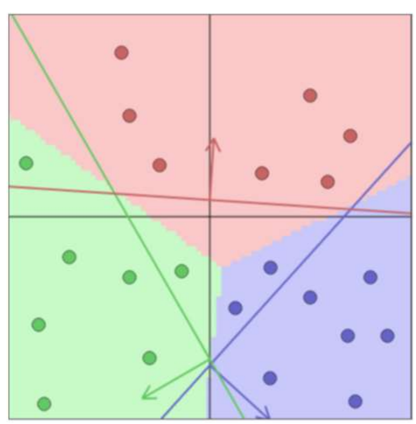


$$y_W(\vec{x}) = \begin{bmatrix} -2 & -3.6 & 0.5 \\ -4 & 2.4 & 4.1 \\ -6 & 4 & -4.9 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 \\ 1.1 \\ -2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -6.9 \\ -9.6 \\ 8.2 \end{bmatrix} \begin{matrix} \text{Classe 0} \\ \text{Classe 1} \\ \text{Classe 2} \end{matrix}$$

74

$$y_W(\vec{x}) = \begin{bmatrix} w_{0,0} & w_{0,1} & w_{0,2} \\ w_{1,0} & w_{1,1} & w_{1,2} \\ w_{2,0} & w_{2,1} & w_{2,2} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 \\ x_1 \\ x_2 \end{bmatrix}$$

Tel qu'illustré ici, chaque **ligne de la matrice W** contient les paramètres (**normale + biais**) du **plan de séparation** linéaire de chaque classe.

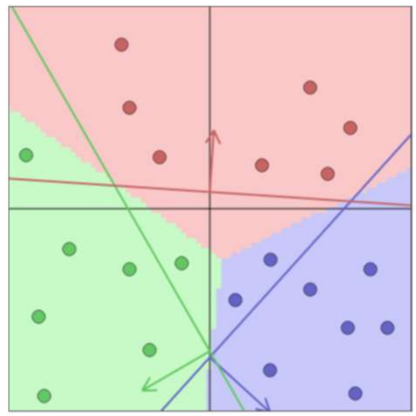


http://vision.stanford.edu/teaching/cs231n-demos/linear-classify/

75

$$y_W(\vec{x}) = \begin{bmatrix} w_{0,0} & w_{0,1} & w_{0,2} \\ w_{1,0} & w_{1,1} & w_{1,2} \\ w_{2,0} & w_{2,1} & w_{2,2} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 \\ x_1 \\ x_2 \end{bmatrix}$$

La **zone bleue** est la zone pour laquelle le score de la **classe 0** est le plus élevé.

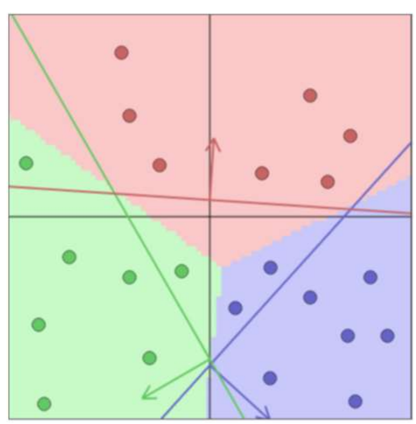


76

76

$$y_W(\vec{x}) = \begin{bmatrix} w_{0,0} & w_{0,1} & w_{0,2} \\ w_{1,0} & w_{1,1} & w_{1,2} \\ w_{2,0} & w_{2,1} & w_{2,2} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 \\ x_1 \\ x_2 \end{bmatrix}$$

La **zone verte** est la zone pour laquelle le score de la **classe 1** est le plus élevé.

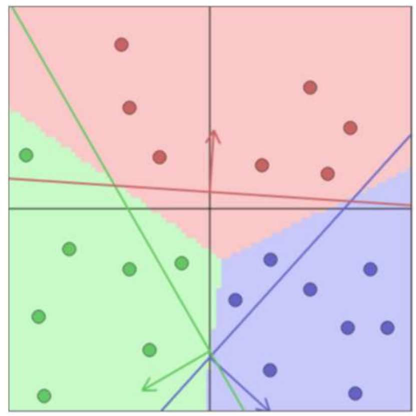


77

77

$$y_W(\vec{x}) = \begin{bmatrix} w_{0,0} & w_{0,1} & w_{0,2} \\ w_{1,0} & w_{1,1} & w_{1,2} \\ w_{2,0} & w_{2,1} & w_{2,2} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 \\ x_1 \\ x_2 \end{bmatrix}$$

La **zone rouge** est la zone pour laquelle le score de la **classe 2** est le plus élevé.



78

78

Perceptron Multiclasse

Fonction de coût

$$E_D(W) = \sum_{\vec{x}_n \in M} \left(\vec{w}_j^T \vec{x}_n - \vec{w}_{t_n}^T \vec{x}_n \right)$$

Somme sur l'ensemble des données mal classées

Score de la mauvaise classe

Score de la bonne classe

$$\nabla E_D(\mathrm{W}) = \sum_{\vec{x}_n \in M} \vec{x}_n$$

79

79

Perceptron Multiclasse

Descente de gradient stochastique

Initialiser **W**
k=0, i=0
DO k=k+1
  FOR n = 1 to N
    $j = \arg\max \mathrm{W}^T \vec{x}_n$
    IF $j \neq t_i$ THEN /* donnée mal classée*/
      $\vec{w}_j = \vec{w}_j - \eta \vec{x}_n$
      $\vec{w}_{t_n} = \vec{w}_{t_n} + \eta \vec{x}_n$

UNTIL toutes les données sont bien classées.

80

Perceptron Multiclasse

Exemple d'entraînement (η=*1*)

$$\vec{x}_n = (0.4, -1), t_n = 0$$

$$y_W(\vec{x}) = \begin{bmatrix} -2 & 3.6 & 0.5 \\ -4 & 2.4 & 4.1 \\ -6 & 4 & -4.9 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 \\ 0.4 \\ -1 \end{bmatrix} = \begin{array}{cl} \begin{bmatrix} -1.6 \\ -7.1 \\ 0.5 \end{bmatrix} & \begin{array}{l} \text{Classe 0} \\ \text{Classe 1} \\ \text{Classe 2} \end{array} \end{array}$$

FAUX!

81

Perceptron Multiclasse

Exemple d'entraînement ($\eta=1$)

$$\vec{x}_n = (0.4, -1.0), t_n = 0$$

$$\vec{w}_0 \leftarrow \vec{w}_0 + \vec{x}_n \qquad \begin{bmatrix} -2.0 \\ 3.6 \\ 0.5 \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} 1 \\ 0.4 \\ -1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -1.0 \\ 4.0 \\ -0.5 \end{bmatrix}$$

$$\vec{w}_2 \leftarrow \vec{w}_2 - \vec{x}_n \qquad \begin{bmatrix} -6.0 \\ 4.0 \\ -4.9 \end{bmatrix} - \begin{bmatrix} 1 \\ 0.4 \\ -1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -7.0 \\ 3.6 \\ -3.9 \end{bmatrix}$$

82

82

En résumé

2 classes

$$E_D(\vec{w}) = \sum_{\vec{x}_n \in M} -t_n \vec{w}^T \vec{x}_n \quad \text{où } M \text{ est l'ensemble des données mal classées}$$

$$E_D(\vec{w}) = \sum_{n=1}^{N} \max(0, -t_n \vec{w}^T \vec{x}_n)$$

$$E_D(\vec{w}) = \sum_{n=1}^{N} \max(0, 1 - t_n \vec{w}^T \vec{x}_n) \quad \text{“Hinge Loss” or “SVM” Loss}$$

K classes

$$E_D(W) = \sum_{\vec{x}_n \in M} \left(\vec{w}_j^T \vec{x}_n - \vec{w}_{t_n}^T \vec{x}_n\right) \quad \text{où } M \text{ est l'ensemble des données mal classées}$$

$$E_D(W) = \sum_{n=1}^{N} \sum_j \max(0, \vec{w}_j^T \vec{x}_n - \vec{w}_{t_n}^T \vec{x}_n)$$

$$E_D(W) = \sum_{n=1}^{N} \sum_j \max(0, 1 + \vec{w}_j^T \vec{x}_n - \vec{w}_{t_n}^T \vec{x}_n) \quad \text{“Hinge Loss” or “SVM” Loss}$$

83

83

84

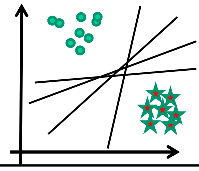
84

Perceptron

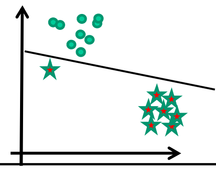
Advantages:
- Très simple
- Ne suppose pas que les données sont **gaussiennes**.
- Si les données sont linéairement séparables, le Perceptron est **garanti(!) de converger** en un nombre fini d'itérations (voir Duda-Hart-Stork pour la preuve)

Limitations:
- Gradient nul pour plusieurs solutions => plusieurs solutions "optimales"
- Les données doivent être **linéairement séparables**

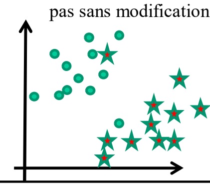
Plusieurs solutions "optimales"



Solution sous-optimale



Ne fonctionne pas sans modification



85

85

Perceptron

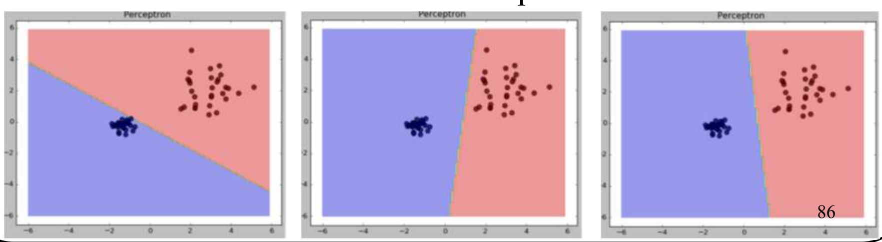
Advantages:

- Très simple
- Ne suppose pas que les données sont **gaussiennes**.
- Si les données sont linéairement séparables, le Perceptron est **<u>garanti </u>(!) de converger** en un nombre fini d'iterations (see Duda-Hart-Stork for proof)

Limitations:

- Gradient nul pour plusieurs solutions => plusieurs solutions "optimales"
- Les données doivent être **linéairement séparables**

Plusieurs solutions "optimales"



86

86

Comment améliorer le Perceptron?

Trois façons d'améliorer le Perceptron

1. Nouvelle **fonction d'activation** + nouvelle **fonction de coût**

Régression logistique

2. Utiliser des **fonctions de base**

Méthodes à noyau (chap. 5-6)

3. Nouveau réseau

Réseaux de neurones multicouches (chap. 7)

87

87

Régression logistique

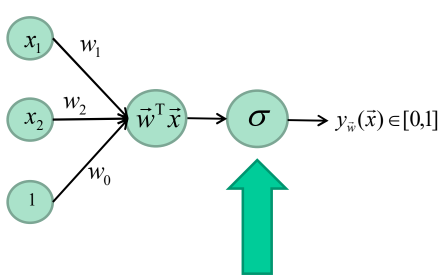
(Sections 4.2.0, 4.3.2, 5.2.0 –Bishop)

88

Amélioration du Perceptron

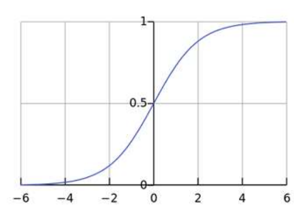
(2D, 2 classes)

Nouvelle fonction d'activation : **sigmoïde logistique**



Fonction d'activation sigmoïdale

$$\sigma(v) = \frac{1}{1+e^{-v}}$$



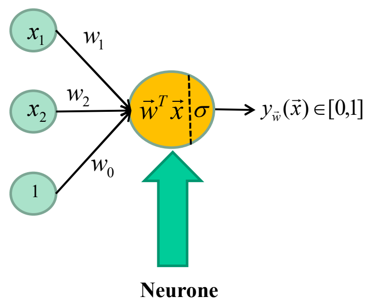
$$\boxed{y_{\vec{w}}(\vec{x}) = \sigma\left(\vec{w}^T\vec{x}\right) = \frac{1}{1+e^{-\vec{w}^T\vec{x}}}}$$

89

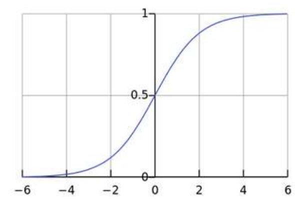
Amélioration du Perceptron

(2D, 2 classes)

Nouvelle fonction d'activation : **sigmoïde logistique**



$$\sigma(t) = \frac{1}{1+e^{-t}}$$



$$\boxed{y_{\vec{w}}(\vec{x}) = \sigma\left(\vec{w}^T\vec{x}\right) = \frac{1}{1+e^{-\vec{w}^T\vec{x}}}}$$

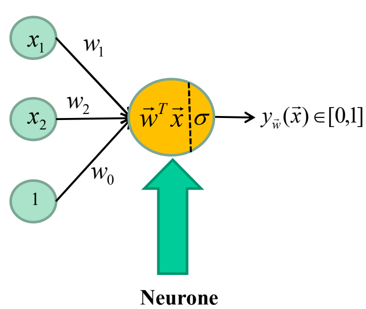
90

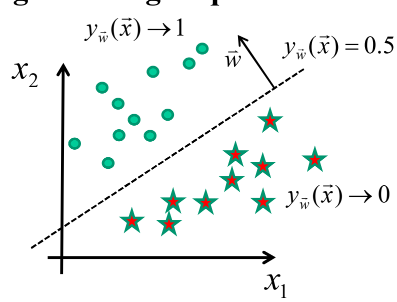
90

Amélioration du Perceptron

(2D, 2 classes)

Nouvelle fonction d'activation : **sigmoïde logistique**





$$y_{\vec{w}}(\vec{x}) = \sigma\left(\vec{w}^T\vec{x}\right)$$

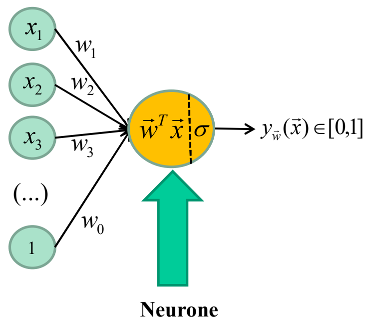
91

91

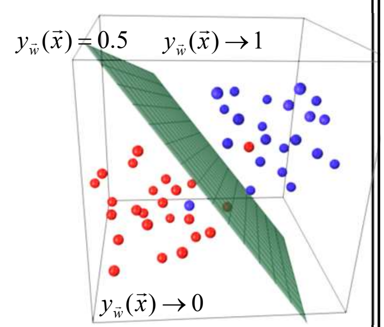
Amélioration du Perceptron

(N-D, 2 classes)

Nouvelle fonction d'activation : **sigmoïde logistique**



Example 3D

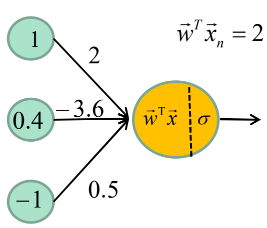


Amélioration du Perceptron

(N-D, 2 classes)

Exemple

$$\vec{x}_n = (0.4, -1.0), \vec{w} = [2.0, -3.6, 0.5]$$



$$\vec{w}^T\vec{x}_n = 2 - 3.6 * 0.4 - 0.5 = -1.94$$

$$y_{\vec{w}}(\vec{x}) = \sigma(-1.94) = \frac{1}{1+e^{1.94}} = 0.125$$

Puisque 0.125 est inférieur à 0.5, $\vec{x}_n$ est <u>**derrière**</u> le plan.

Amélioration du Perceptron
(N-D, 2 classes)

Avec une sigmoïde, on peut **simuler une probabilité conditionnelle** sur c_1 étant donné $\vec{x}$

$$y_{\vec{w}}(\vec{x}) = \sigma\left(\vec{w}^T \vec{x}\right) \Rightarrow P(c_1 \mid \vec{x})$$

Preuve:

$$P(c_1 \mid \vec{x}) = \frac{P(\vec{x} \mid c_1)P(c_1)}{P(\vec{x} \mid c_0)P(c_0) + P(\vec{x} \mid c_1)P(c_1)} \qquad \text{(Bayes)}$$

$$= \frac{1}{1 + \frac{P(\vec{x} \mid c_0)P(c_0)}{P(\vec{x} \mid c_1)P(c_1)}}$$

$$= \frac{1}{1+e^{-a}} \qquad \text{où } a = \ln\left[\frac{P(\vec{x} \mid c_0)P(c_0)}{P(\vec{x} \mid c_1)P(c_1)}\right]$$

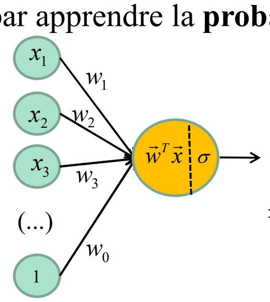
$$= \sigma(a)$$

94

94

Amélioration du Perceptron
(N-D, 2 classes)

En d'autres mots, si on entraîne correctement un réseau logistique, on finit par apprendre la **probabilité conditionnelle de la classe c_1.**



$$y_{\vec{w}}(\vec{x}) = \sigma\left(\vec{w}^T \vec{x}\right) = P(c_1 \mid \vec{w}, \vec{x})$$

$$\Rightarrow P(c_0 \mid \vec{w}, \vec{x}) = 1 - P(c_1 \mid \vec{w}, \vec{x}) = 1 - y_{\vec{w}}(\vec{x})$$

Quelle est la function de coût d'un réseau logistique?

95

95

Fonction de coût d'un réseau logistique?

(2 classes)

Dans le cas d'un réseau logistique nous avons

Ensemble d'entraînement : $D = \{(\vec{x}_1, t_1), (\vec{x}_2, t_2), \ldots, (\vec{x}_n, t_n)\}$

Sortie du réseau: $y_{\vec{w}}(\vec{x}) = \sigma(\vec{w}^T \vec{x}) = P(c_1 \mid \vec{w}, \vec{x})$

$$P(D \mid \vec{w}) = \prod_{n=1}^{N} P(c_1 \mid \vec{w}, \vec{x}_n)^{t_n} (1 - P(c_1 \mid \vec{w}, \vec{x}_n))^{1-t_n}$$

$$= \prod_{n=1}^{N} y_{\vec{w}}(\vec{x}_n)^{t_n} (1 - y_{\vec{w}}(\vec{x}_n))^{1-t_n}$$

101

101

Fonction de coût d'un réseau logistique?

(2 classes)

$$P(D \mid \vec{w}) = \prod_{n=1}^{N} y_{\vec{w}}(\vec{x}_n)^{t_n} (1 - y_{\vec{w}}(\vec{x}_n))^{1-t_n}$$

Solution : Maximum de vraisemblance

$$W = \arg\max_W P(D \mid W)$$

$$= \arg\max_W \prod_{n=1}^{N} y_W(\vec{x}_n)^{t_n} \left(1 - y_W(\vec{x}_n)\right)^{1-t_n}$$

$$= \arg\min_W \sum_{n=1}^{N} - \ln\left[y_W(\vec{x}_n)^{t_n} \left(1 - y_W(\vec{x}_n)\right)^{1-t_n} \right]$$

$$= \arg\min_W \underbrace{- \sum_{n=1}^{N} t_n \ln\left(y_W(\vec{x}_n)\right) + (1 - t_n) \ln\left(1 - y_W(\vec{x}_n)\right)}_{E_D(\vec{w})}$$

102

102

Fonction de coût d'un réseau logistique?

(2 classes)

$$P(D\,|\,\vec{w}) = -\prod_{n=1}^{N} y_{\vec{w}}(\vec{x}_n)^{t_n}\left(1-y_{\vec{w}}(\vec{x}_n)\right)^{1-t_n}$$

La fonction de coût est **–ln de la vraisemblance**

$$\underbrace{E_D(\vec{w}) = -\sum_{n=1}^{N} t_n \ln\left(y_{\vec{w}}(\vec{x}_n)\right) + (1-t_n)\ln\left(1-y_{\vec{w}}(\vec{x}_n)\right)}$$

Entropie croisée (*Cross entropy*)

On peut également démontrer que

$$\underbrace{\nabla_{\vec{w}} E_D(\vec{w}) = \sum_{n=1}^{N} \left(y_{\vec{w}}(\vec{x}_n) - t_n\right)\vec{x}_n}$$

Contrairement au Perceptron
le gradient ne depend pas seulement
des données mal classées

Preuve en classe
ou en devoir

103

Optimisation d'un réseau logistique

Optimisation par batch

Initialiser $\vec{w}$
k=0, i=0
DO k=k+1

$$\frac{dE_D(\vec{w})}{d\vec{w}} = \sum_{n=1}^{N}\left(y_{\vec{w}}(\vec{x}_n) - t_n\right)\vec{x}_n$$

$$\vec{w} = \vec{w} - \eta\frac{dE_D(\vec{w})}{d\vec{w}}$$

UNTIL K==K_MAX.

Descente de gradient stochastique

Initialiser $\vec{w}$
k=0, i=0
DO k=k+1
FOR n = 1 to N

$$\vec{w} = \vec{w} - \eta\left(y_{\vec{w}}(\vec{x}_n) - t_n\right)\vec{x}_n$$

UNTIL K==K_MAX.

104

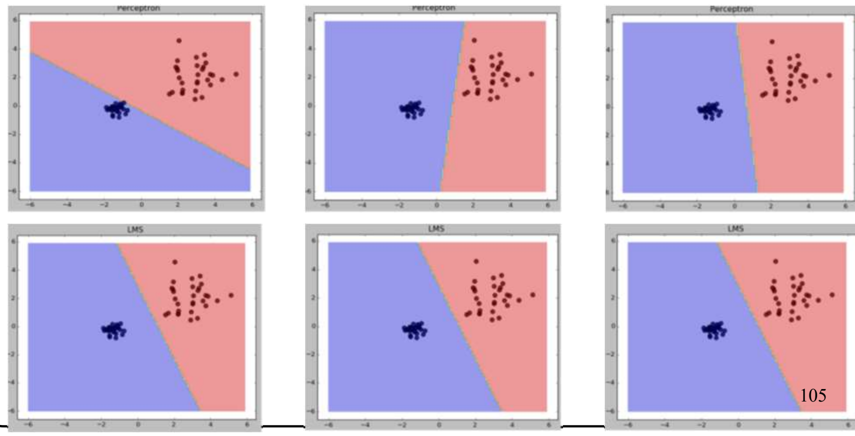
Réseau logistique

Advantages:

- **Plus stable que le Perceptron**
- Fonctionne mieux avec des **données non séparables**

Perceptron

Réseau logistique



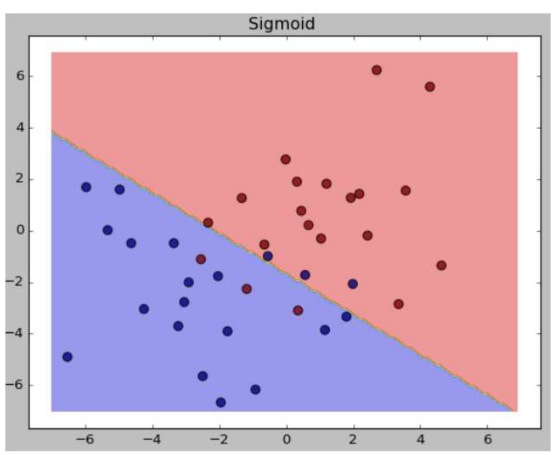
105

105

Réseau logistique

Advantages:

- **Plus stable que le Perceptron**
- Fonctionne mieux avec des **données non séparables**

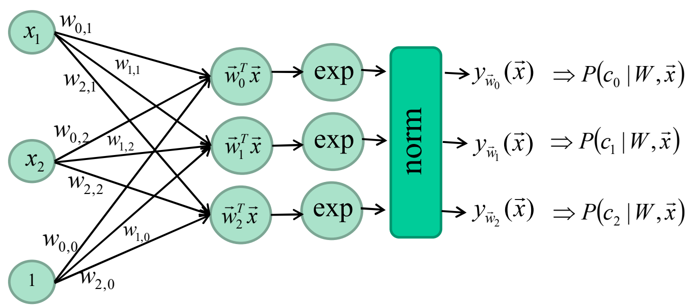


106

106

Et pour K>2 classes?

Nouvelle fonction d'activation : **Softmax**



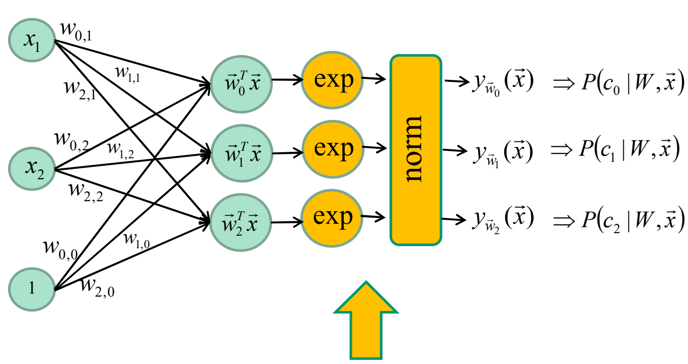
$$y_{\vec{w}_i}(\vec{x}) = \frac{e^{\vec{w}_i^T \vec{x}}}{\sum_c e^{\vec{w}_c^T \vec{x}}}$$

107

107

Et pour K>2 classes?

Nouvelle fonction d'activation : **Softmax**

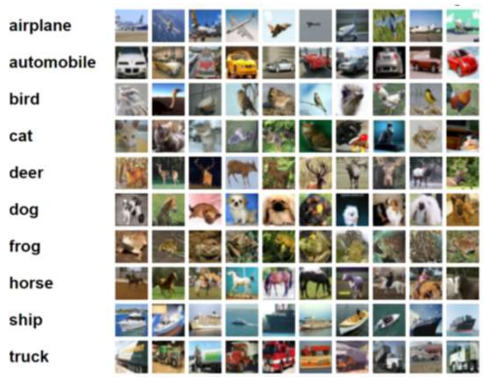


Softmax

108

108

Et pour K>2 classes?



'airplane' $\Rightarrow t = [1000000000]$
'automobile' $\Rightarrow t = [0100000000]$
'bird' $\Rightarrow t = [0010000000]$
'cat' $\Rightarrow t = [0001000000]$
'deer' $\Rightarrow t = [0000100000]$
'dog' $\Rightarrow t = [0000010000]$
'frog' $\Rightarrow t = [0000001000]$
'horse' $\Rightarrow t = [0000000100]$
'ship' $\Rightarrow t = [0000000010]$
'truck' $\Rightarrow t = [0000000001]$

Étiquettes de classe : **one-hot vector** 109

109

Et pour K>2 classes?

$$P(D \mid W) = \prod_{n=1}^{N} \prod_{k=1}^{K} \left(P(t_n \mid W, \vec{x}_n)\right)^{t_{nk}}$$

Entropie croisée (*cross entropy*)

$$E_D(\mathrm{W}) = -\ln(P(D \mid W)) = -\sum_{n=1}^{N} \sum_{k=1}^{K} t_{kn} \ln P(t_n \mid W, \vec{x}_n)$$

Puisqu'on veut que la sortie du réseau $y_W(\vec{x}_n)$ soit égale à $P(t_n \mid W, \vec{x}_n)$

$$\boxed{E_D(\mathrm{W}) = -\sum_{n=1}^{N} \sum_{k=1}^{K} t_{kn} \ln y_{W_k}(\vec{x}_n)}$$

110

110

Et pour K>2 classes?

En general, on ajoute 1/N pour normaliser le calcul de la loss

$$E_D(\mathrm{W}) = -\frac{1}{N}\sum_{n=1}^{N}\sum_{k=1}^{K} t_{kn} \ln y_W(\vec{x}_n)$$

On peut montrer que

$$\boxed{\nabla_W E_D(\mathrm{W}) = \frac{1}{N}\sum_{n=1}^{N} \vec{x}_n \left(y_W(\vec{x}_n) - t_{kn}\right)}$$

111

111

Optimisation d'un réseau logistique multiclasse

Optimisation par batch

Initialiser **W**
k=0, i=0
DO k=k+1

$$\nabla_W E(\mathrm{W}) = \frac{1}{N}\sum_{n=1}^{N}\left(y_W(\vec{x}_n) - t_n\right)\vec{x}_n$$

$$\mathrm{W} = \mathrm{W} - \eta \nabla_W E(\mathrm{W})$$

UNTIL K==K_MAX.

Descente de gradient stochastique

Initialiser **W**
k=0, i=0
DO k=k+1
FOR n = 1 to N

$$\mathrm{W} = \mathrm{W} - \eta\left(y_W(\vec{x}_n) - t_n\right)\vec{x}_n$$

UNTIL K==K_MAX.

112

112

Wow! Beaucoup d'information…

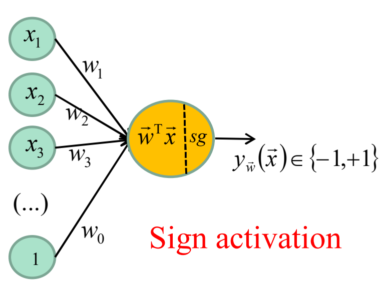
Résumons…

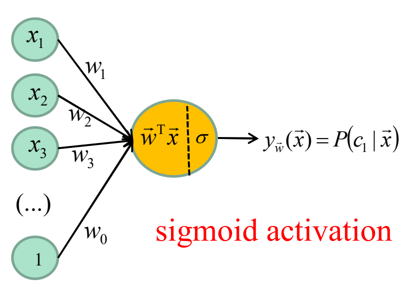
113

113

Réseaux de neurones

2 classes



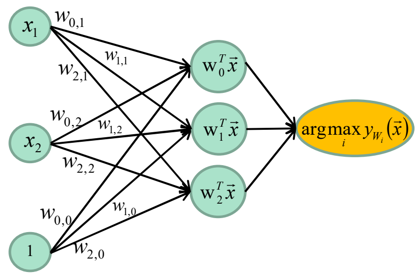


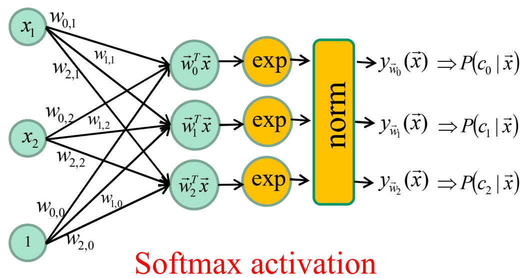
114

114

Réseaux de neurones

K classes





Softmax activation

115

Fonctions de coûts

2 classes

$$E_D(\vec{w}) = \sum_{\vec{x}_n \in M} -t_n \vec{w}^{\mathrm{T}} \vec{x}_n$$ où M est l'ensemble des données mal classées

$$E_D(\vec{w}) = \sum_{n=1}^{N} \max\left(0, -t_n \vec{w}^{\mathrm{T}} \vec{x}_n\right)$$

$$E_D(\vec{w}) = \sum_{n=1}^{N} \max\left(0, 1 - t_n \vec{w}^{\mathrm{T}} \vec{x}_n\right)$$ "Hinge Loss" ou "SVM" Loss

$$E_D(\vec{w}) = -\sum_{n=1}^{N} t_n \ln\left(y_{\vec{w}}(\vec{x}_n)\right) + (1-t_n)\ln\left(1 - y_{\vec{w}}(\vec{x}_n)\right)$$ Entropie croisée (ou *cross entropy*)

116

Fonctions de coûts

K classes

$$E_D(\mathrm{W}) = \sum_{\vec{x}_n \in M} \left(\mathrm{W}_j^{\mathrm{T}} \vec{x}_n - \mathrm{W}_{t_n}^{\mathrm{T}} \vec{x}_n \right)$$ où M est l'ensemble des données mal classées

$$E_D(\mathrm{W}) = \sum_{n=1}^{M} \sum_{j} \max\left(0, \mathrm{W}_j^{\mathrm{T}} \vec{x}_n - \mathrm{W}_{t_n}^{\mathrm{T}} \vec{x}_n \right)$$

$$E_D(\mathrm{W}) = \sum_{n=1}^{N} \sum_{j} \max\left(0, 1 + \mathrm{W}_j^{\mathrm{T}} \vec{x}_n - \mathrm{W}_{t_n}^{\mathrm{T}} \vec{x}_n \right)$$ "Hinge Loss" ou "SVM" Loss

$$E_D(\mathrm{W}) = -\sum_{n=1}^{N} \sum_{k=1}^{K} t_{kn} \ln y_{W,k}(\vec{x}_n)$$ Entropie croisée avec « *one hot vector* » (ou *cross entropy*)

117

117

Optimisation

Descente de gradient

$$\vec{\mathrm{w}}^{[k+1]} = \vec{\mathrm{w}}^{[k]} - \eta^{[k]} \nabla E$$

∇E → Gradient de la function de coût

$\eta^{[k]}$ → Taux d'apprentissage ou "learning rate".

Optimisation par Batch

Initialiser $\vec{\mathrm{w}}$
k=0
FAIRE k=k+1

$$\vec{w} = \vec{w} - \eta^{[k]} \sum_i \nabla E(\vec{x}_i)$$

JUSQU'À ce que toutes les données sont bien classées ou k==MAX_ITER

Descente de gradient stochastique

Initialiser $\vec{\mathrm{w}}$
k=0
FAIRE k=k+1
FOR n = 1 to N

$$\vec{w} = \vec{w} - \eta^{[k]} \nabla E(\vec{x}_n)$$

JUSQU'À ce que toutes les données sont bien classées ou k== MAX_ITER

Parfois $\eta^{[k]} = cst / k$

118

118

Régularisation

119

Régularisation

Différents poids peuvent donner le même score

$$\vec{x} = (1.0, 1.0, 1.0)$$
$$\vec{w}_1 = [1, 0, 0]$$
$$\vec{w}_2 = [1/3, 1/3, 1/3]$$

Quels poids sont les meilleurs?

$$\vec{w}_1 \vec{x} = \vec{w}_2 \vec{x} = 1$$

Solution: Maximum a posteriori

120

Maximum *a posteriori*

Régularisation

Maximum de vraisemblance

$$W = \underset{W}{\mathrm{argmax}} P(D|W)$$

$$\ldots$$

$$= \underset{W}{\mathrm{argmin}} \underbrace{\sum_{n=1}^{N} -\ln P(t_n \mid \vec{x}_n, W)}_{E_D(W)}$$

Maximum *a posteriori*

$$W = \underset{W}{\mathrm{argmax}} P(W \mid D)$$

$$\ldots$$

$$= \underset{W}{\mathrm{argmin}} \underbrace{\sum_{n=1}^{N} -\ln P(t_n \mid \vec{x}_n, W)}_{E_D(W)} + \lambda R(W)$$

121

121

Note :

il est fréquent de combiner différentes **fonctions de coût** avec différentes **fonctions de régularisation**

123

123

Maximum *a posteriori*

Constante

$$E(\mathrm{W}) = \sum_{n=1}^{N} l\left(y_W(\vec{x}_n), t_n\right) + \lambda R(\mathrm{W})$$

Fonction de perte

Regularisation

$$R(\theta) = \|W\|_1 \ ou \ \|W\|_2$$

124

124

Maximum *a posteriori*

Exemple : ***Hinge loss*** + **régularisation L2**

$$E(\mathrm{w}) = \sum_{n=1}^{N} \max\left(0, 1 - t_n \mathrm{w}^T \vec{x}_n\right) + \lambda \|\mathrm{w}\|^2$$

$$\nabla_{\mathrm{W}} E(\mathrm{w}) = \sum_{\vec{x}_n \in M} -t_n \vec{x}_n + 2\lambda \sum_{d=0}^{D} w_d$$

125

125

Maximum *a posteriori*

Exemple : entropie croisée + régularisation L2

$$\arg\min_W -\ln(P(D|W)) + \lambda\|W\|^2$$

$$\arg\min_W -\sum_{n=0}^{N} t_n \ln(y_W(\vec{x}_n)) + (1-t_n)\ln(1-y_W(\vec{x}_n)) + \lambda\sum_{i=1}^{d}(w_i)^2$$

$$\nabla_W E(\mathrm{w}) = \sum_{n=1}^{N}(y_W(\vec{x}_n)-t_n)\vec{x}_n + 2\lambda\sum_{d=0}^{D} w_d$$

126

126

Exemples

```
from sklearn.linear_model import SGDClassifier

C = SGDClassifier(loss='perceptron',learning_rate='constant',
                  eta0=1, n_iter=1000)



C = SGDClassifier(loss='log', learning_rate ='constant',
                  eta0=1, n_iter=1000)



C = SGDClassifier(loss='hinge',penalty='l2',alpha=0.01,
                  learning_rate ='invscaling', eta0=1, n_iter=1000)
```

127

127

128

128

Mieux comprendre

Entropie croisée vs *Hinge loss*

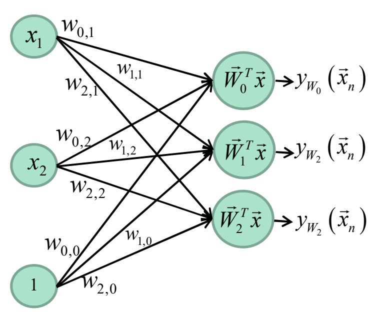
129

129

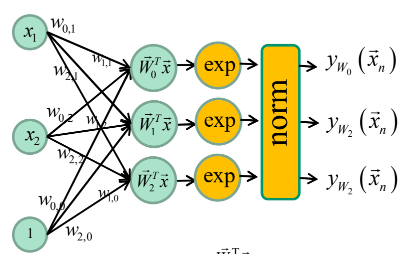
Entropie croisée vs *Hinge Loss*

Dépendamment de la *loss* utilisée, la **sortie du réseau** sera différente

- *Hinge loss* : sortie multiplication matrice-vecteur
- Entropie croisée : sortie softmax



$$y_{W_i}(\vec{x}_n) = \vec{W}_i^{\mathrm{T}}\vec{x}$$



$$y_{W_i}(\vec{x}_n) = \frac{e^{\vec{W}_i^{\mathrm{T}}\vec{x}}}{\sum_j e^{\vec{W}_j^{\mathrm{T}}\vec{x}}}$$

130

130

$$\vec{x} = \begin{bmatrix} -15 \\ 22 \\ -44 \\ 56 \end{bmatrix}, t = 2$$

$$\underbrace{\begin{bmatrix} 0.0 & 0.01 & -0.05 & 0.1 & 0.05 \\ 0.2 & 0.7 & 0.2 & 0.05 & 0.16 \\ -0.3 & 0.0 & -0.45 & -0.2 & 0.03 \end{bmatrix}}_{W} \underbrace{\begin{bmatrix} 1 \\ -15 \\ 22 \\ -44 \\ 56 \end{bmatrix}}_{\vec{x}}$$

Hinge loss

Score

$$\begin{bmatrix} -2.85 \\ 0.86 \\ 0.28 \end{bmatrix} \quad \begin{aligned} &\max(0,-2.85-0.28+1)+ \\ &\max(0,0.86-0.28+1) \\ &= \\ &\max(0,-2.13)+\max(0,1.58) \\ &= \\ &\boldsymbol{1.58} \end{aligned}$$

Entropie croisée

Score

$$\begin{bmatrix} -2.85 \\ 0.86 \\ 0.28 \end{bmatrix} \xrightarrow{\text{exp}} \begin{bmatrix} 0.06 \\ 2.36 \\ 1.32 \end{bmatrix} \xrightarrow{\text{norm}} \begin{bmatrix} 0.02 \\ 0.63 \\ 0.35 \end{bmatrix} \quad -\ln(0.35) = \boldsymbol{0.452}$$

(Softmax)

131

131

$$\vec{x} = \begin{bmatrix} -15 \\ 22 \\ -44 \\ 56 \end{bmatrix}, t = 2$$

$$\begin{bmatrix} 0.0 & 0.01 & -0.05 & 0.1 & 0.05 \\ 0.2 & 0.7 & 0.2 & 0.05 & 0.16 \\ -0.3 & 0.0 & -0.45 & -0.2 & 0.03 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 \\ -15 \\ 22 \\ -44 \\ 56 \end{bmatrix}$$

Hinge loss

Score

$$\begin{bmatrix} -2.85 \\ 0.86 \\ 0.28 \end{bmatrix}$$

$$\max(0, -2.85 - 0.28 + 1) + \max(0, 0.86 - 0.28 + 1) = \max(0, -2.13) + \max(0, 1.58) = \mathbf{1.58}$$

Entropie croisée

Score

$$\begin{bmatrix} -2.85 \\ 0.86 \\ 0.28 \end{bmatrix} \xrightarrow{\text{exp}} \begin{bmatrix} 0.06 \\ 2.36 \\ 1.32 \end{bmatrix} \xrightarrow{\text{norm}} \begin{bmatrix} 0.02 \\ 0.63 \\ 0.35 \end{bmatrix} \quad -\ln(0.35) = \mathbf{0.452}$$

(Softmax)

Q1: Qu'arrive-t-il si le score de la classe 0 (donc -2.85) change un peu?

132

132

$$\vec{x} = \begin{bmatrix} -15 \\ 22 \\ -44 \\ 56 \end{bmatrix}, t = 2$$

$$\begin{bmatrix} 0.0 & 0.01 & -0.05 & 0.1 & 0.05 \\ 0.2 & 0.7 & 0.2 & 0.05 & 0.16 \\ -0.3 & 0.0 & -0.45 & -0.2 & 0.03 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 \\ -15 \\ 22 \\ -44 \\ 56 \end{bmatrix}$$

Hinge loss

Score

$$\begin{bmatrix} -2.85 \\ 0.86 \\ 0.28 \end{bmatrix}$$

$$\max(0, -2.85 - 0.28 + 1) + \max(0, 0.86 - 0.28 + 1) = \max(0, -2.13) + \max(0, 1.58) = \mathbf{1.58}$$

Entropie croisée

Score

$$\begin{bmatrix} -2.85 \\ 0.86 \\ 0.28 \end{bmatrix} \xrightarrow{\text{exp}} \begin{bmatrix} 0.06 \\ 2.36 \\ 1.32 \end{bmatrix} \xrightarrow{\text{norm}} \begin{bmatrix} 0.02 \\ 0.63 \\ 0.35 \end{bmatrix} \quad -\ln(0.35) = \mathbf{0.452}$$

(Softmax)

Q2: Qu'arrive-t-il si le score de la classe 1 (donc 0.86) augmente?

133

133

$$\vec{x} = \begin{bmatrix}-15\\22\\-44\\56\end{bmatrix}, t = 2$$

$$\begin{bmatrix}0.0 & 0.01 & -0.05 & 0.1 & 0.05\\0.2 & 0.7 & 0.2 & 0.05 & 0.16\\-0.3 & 0.0 & -0.45 & -0.2 & 0.03\end{bmatrix}\begin{bmatrix}1\\-15\\22\\-44\\56\end{bmatrix}$$

Hinge loss

Score

$$\begin{bmatrix}-2.85\\0.86\\0.28\end{bmatrix}$$

$$\max(0,-2.85-0.28+1)+\max(0,0.86-0.28+1) = \max(0,-2.13)+\max(0,1.58) = \mathbf{\mathit{1.58}}$$

Entropie croisée

Score

$$\begin{bmatrix}-2.85\\0.86\\0.28\end{bmatrix}\xrightarrow{\text{exp}}\begin{bmatrix}0.06\\2.36\\1.32\end{bmatrix}\xrightarrow{\text{norm}}\begin{bmatrix}0.02\\0.63\\0.35\end{bmatrix}\quad -\ln(0.35) = \mathbf{\mathit{0.452}}$$

(Softmax)

Q3: quelles sont les valeurs MIN/MAX de ces deux loss?

134

$$\vec{x} = \begin{bmatrix}-15\\22\\-44\\56\end{bmatrix}, t = 2$$

$$\begin{bmatrix}0.0 & 0.01 & -0.05 & 0.1 & 0.05\\0.2 & 0.7 & 0.2 & 0.05 & 0.16\\-0.3 & 0.0 & -0.45 & -0.2 & 0.03\end{bmatrix}\begin{bmatrix}1\\-15\\22\\-44\\56\end{bmatrix}$$

Hinge loss

Score

$$\begin{bmatrix}-2.85\\0.86\\0.28\end{bmatrix}$$

$$\max(0,-2.85-0.28+1)+\max(0,0.86-0.28+1) = \max(0,-2.13)+\max(0,1.58) = \mathbf{\mathit{1.58}}$$

Entropie croisée

Score

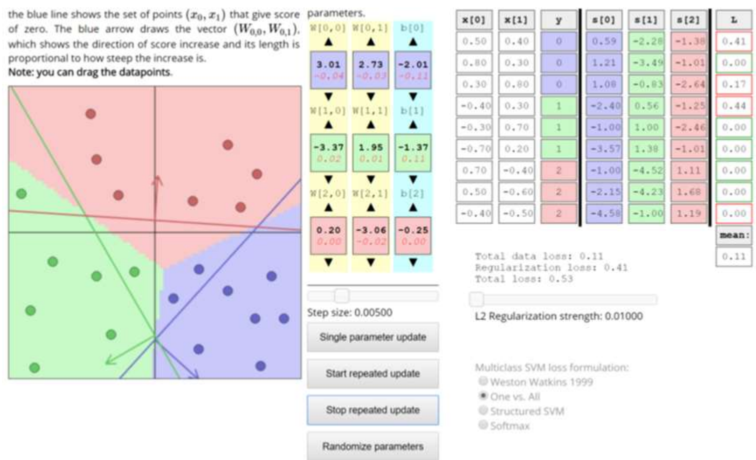
$$\begin{bmatrix}-2.85\\0.86\\0.28\end{bmatrix}\xrightarrow{\text{exp}}\begin{bmatrix}0.06\\2.36\\1.32\end{bmatrix}\xrightarrow{\text{norm}}\begin{bmatrix}0.02\\0.63\\0.35\end{bmatrix}\quad -\ln(0.35) = \mathbf{\mathit{0.452}}$$

(Softmax)

Q4: quelle serait la loss totale si on devait ajouter un terme de régularisation L2?

135

Superbe système en ligne de Stanford pour illustrer la classification multiclasses



http://vision.stanford.edu/teaching/cs231n-demos/linear-classify/

136