Apprentissage statistique : modélisation descriptive et introduction aux réseaux de neurones (RCP208)

Introduction

Michel Crucianu
(prenom.nom@cnam.fr)
http://cedric.cnam.fr/vertigo/Cours/ml/

EPN05 Informatique
Conservatoire National des Arts & Métiers, Paris, France

26 septembre 2024

Plan du cours

Le sujet

« *Essentially, all models are wrong, but some are useful.* » (Box, G. E. P., and Draper, N. R. Empirical Model Building and Response Surfaces, John Wiley & Sons, New York, NY, 1987, p. 424.)

- Reconnaissance des formes (*pattern recognition*) : (sens strict) identifier à quelle catégorie appartient une « forme » décrite par des données brutes
  - « Forme » = observation (ou partie d'observation, ou ensemble d'observations)
  - Exemples : valeurs de variables décrivant un état clinique, partie correspondant à un visage dans une image, ensemble des valeurs prises par le cours d'une action sur une journée
- Fouille de données (*data mining*) : recherche de régularités ou de relations inconnues *a priori* dans de grands volumes de données

⇒ Présenter les éléments de base des méthodes d'analyse et de modélisation des données

- Dans cette UE on ne s'intéresse pas aux spécificités des données massives

Contenu de l'enseignement : problématique et pré-requis

Problématique abordée

- Examiner et comprendre les (caractéristiques des) données → analyses factorielles, visualisation
- Comprendre les problèmes posés par les données → solutions à ces problèmes
- Description des données → classification automatique, estimation de densités, réduction de dimension, quantification vectorielle
- Construction de modèles décisionnels (ou prédictifs) → perceptrons multi-couches (RCP208), autres méthodes (dont forêts d'arbres de décision, SVM, réseaux de neurones profonds : RCP209)

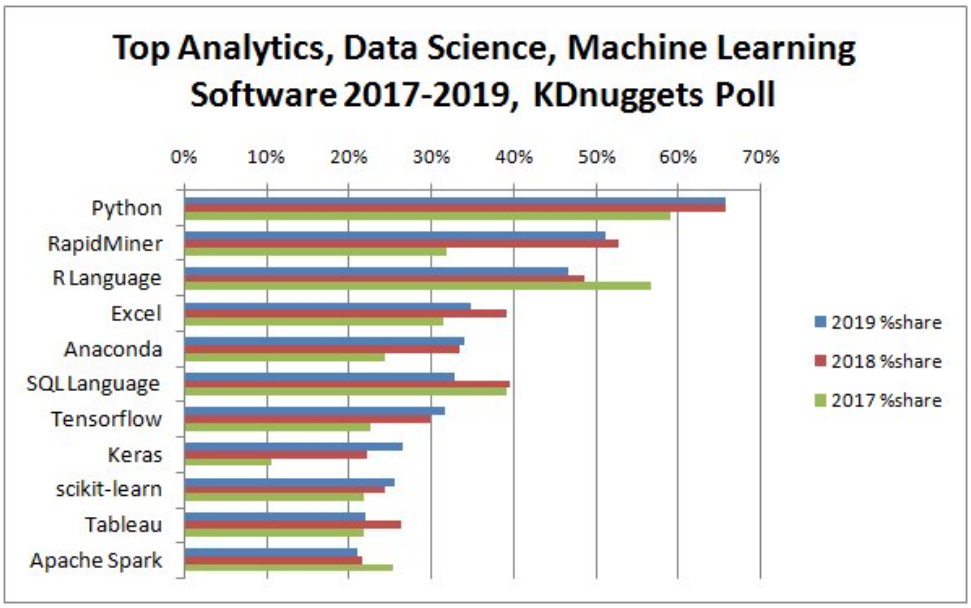
⇒ Capacité à mettre œuvre des méthodes d'analyse des données, de reconnaissance des formes et de fouille de données

Prérequis

- En mathématiques : connaissances de base en algèbre linéaire, probabilités et statistique, dérivation
- En informatique : connaissances de base en programmation

Contenu de l'enseignement : travaux pratiques

- Outil libre et ouvert développé par une large communauté → http ://scikit-learn.org : langage Python, visualisation facile



- Python permet d'utiliser aussi Apache Spark (pour données massives, voir RCP216)

Contenu détaillé de l'UE RCP208

1. Introduction : exemples, nature des problèmes de modélisation, types de variables et leur représentation, nature des difficultés posées par les données. TP : introduction à Python, scikit-learn, Jupyter. (2 séances)
2. Méthodes factorielles (ACP, ACM, AFD) pour l'analyse des données et la réduction de dimension. TP : ACP, AFD. (2 séances)
3. Réduction non-linéaire de dimension : UMAP, t-SNE. TP : UMAP, t-SNE. (2 séances)
4. Classification automatique : k-moyennes (avec initialisation k-means++), DBSCAN. TP : k-means, DBSCAN. (2 séances)
5. Estimation de densités : histogrammes, noyaux, modèles de mélanges, espérance-maximisation. TP : noyaux, modèles de mélanges. (2 séances)
6. Imputation des données manquantes. TP : imputation. (1 séance)
7. Sélection de variables. TP : sélection de variables. (1 séance)
8. Réseaux de neurones multi-couches : architectures, capacités d'approximation, apprentissage et régularisation, représentations internes. TP correspondants. (3 séances)

Références bibliographiques RCP208

- C.-A. Azencott. Introduction au Machine Learning. Dunod, juillet 2019, 240 p.

→ A. Géron. Machine Learning avec Scikit-Learn : mise en œuvre et cas concrets. Dunod, novembre 2019, 320 p.

- M. Crucianu, J.-P. Asselin de Beauville, R. Boné, Méthodes factorielles pour l'analyse des données : méthodes linéaires et extensions non-linéaires. Hermès, 2004, 288 p.

→ G. Saporta, Probabilités, analyse des données et statistique. 622 p., Éditions Technip, Paris, 2006.

Plan du cours

Organisation

- Enseignants : Michel Crucianu, Marc Lafon
- Semestre 1 : hors temps ouvrable (HTO)
  - Cours : jeudi 17h30-19h30
  - Travaux pratiques (TP) : jeudi 19h45-21h45
- Semestre 2 : formation à distance (FOAD)
- Supports détaillés en accès ouvert mis en ligne :

  `http://cedric.cnam.fr/vertigo/Cours/ml/`
  ainsi que `http://lecnam.net` si vous êtes inscrit à l'UE
  - Cours : transparents (PDF) et explications détaillées en HTML ; vidéos en partie
  - TP : contenu détaillé en HTML ; réponses (à la plupart des questions) mises en ligne une à deux semaines après la séance de TP

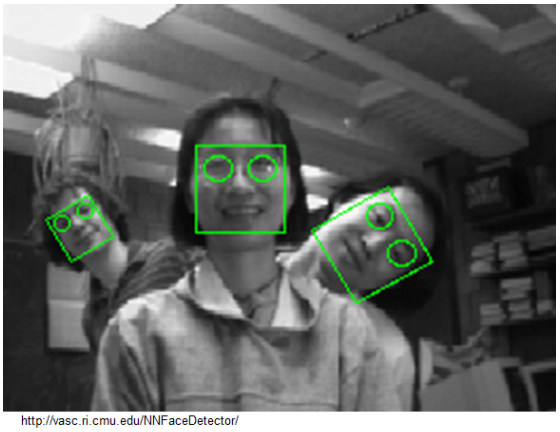
Évaluation

- S1 (HTO) : examen en février avec rattrapage en avril
- S2 (FOD) : examen en juin avec rattrapage en septembre
- Planification des examens : `http://www.cnam-paris.fr/suivre-ma-scolarite/`, onglet Examens
- Seul support écrit autorisé : 2 feuilles A4 (recto-verso) écrites à la main
- Note finale = note d'examen (l'examen peut inclure des questions issues des TP)

Plan du cours

Exemple : détection d'objets

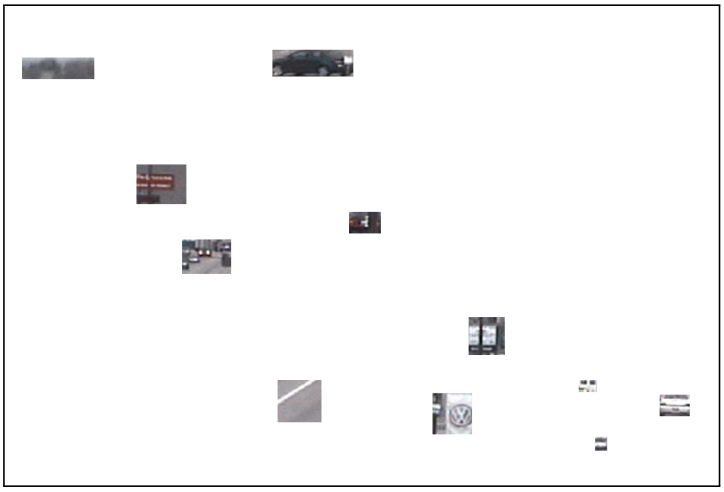
- Objectif : détecter des « objets » d'une ou plusieurs catégories dans des images ou des vidéos



http://vasc.ri.cmu.edu/NNFaceDetector/

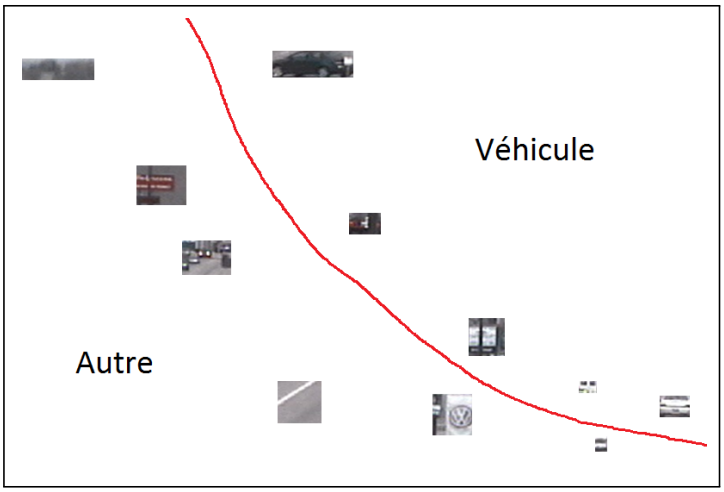
Exemple : détection d'objets (2)

1. Déterminer quelles données devraient permettre de discriminer la classe d'intérêt du « reste du monde »
2. Récolter, examiner, nettoyer les données
3. Représenter les données de façon adéquate



Exemple : détection d'objets (3)

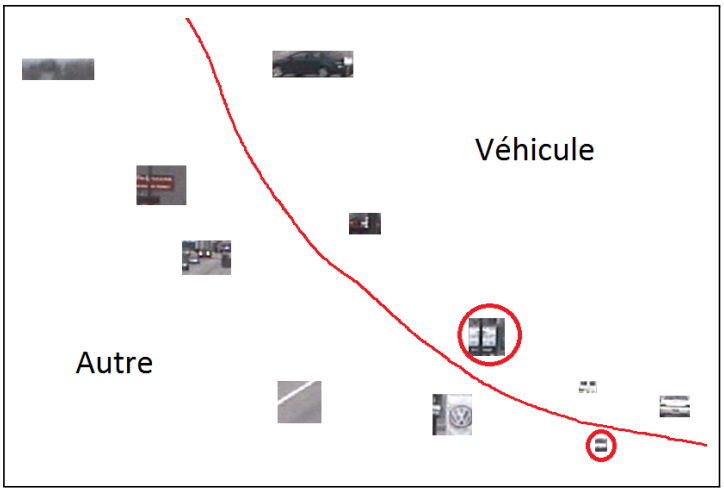
4. Modéliser, à partir des données, la frontière de discrimination entre objets de la classe d'intérêt et autres régions d'images



- Frontière linéaire ou non linéaire, déterminée sur la base de différents critères, directement sur la représentation d'entrée ou en apprenant de nouvelles représentations
- Note : il est également possible de décider sans construire un modèle, voir par ex. la méthode des k plus proches voisins

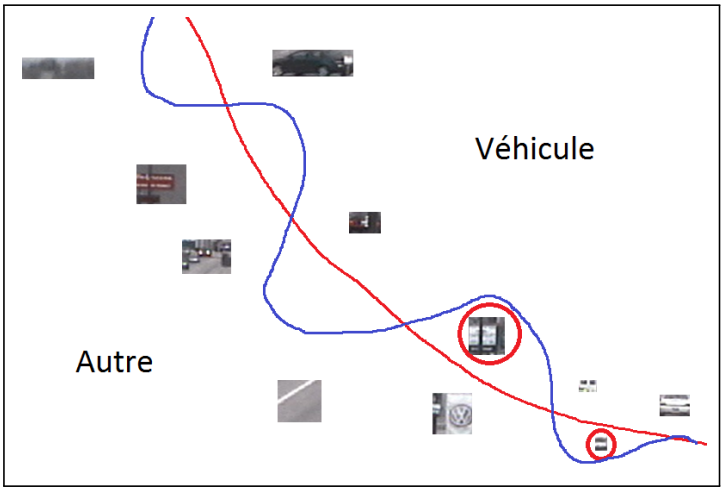
Exemple : détection d'objets (4)

- Un modèle est obtenu sur des données d'apprentissage
- Approche : choix d'une famille paramétrique (par ex. frontières linéaires) et optimisation de paramètres afin de minimiser une fonction de coût (erreur d'apprentissage)



Exemple : détection d'objets (5)

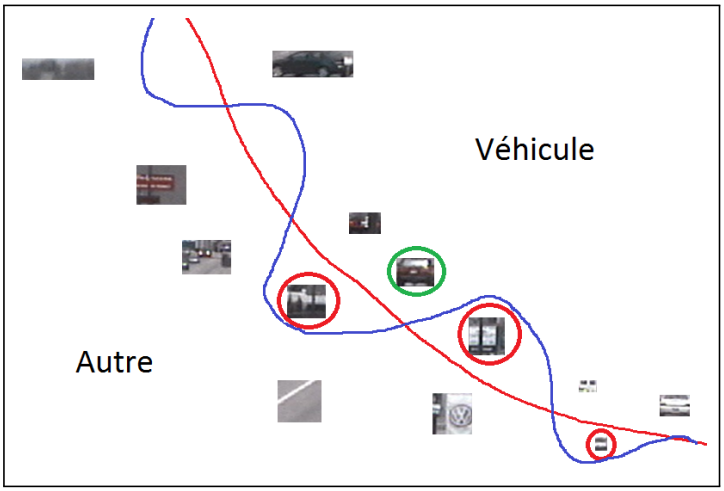
- Avec une autre famille paramétrique peut-on réduire encore l'erreur d'apprentissage ?



- Avec quelles conséquences ?

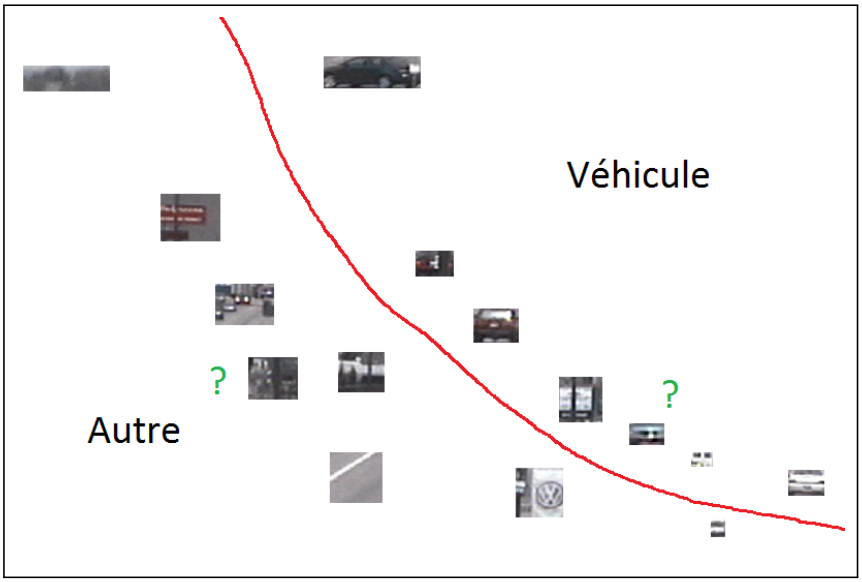
Exemple : détection d'objets (6)

- Les performances d'un modèle ne doivent pas être évaluées sur des données d'apprentissage car cela produirait des estimations trop optimistes !
- L'évaluation se fait sur des données de test, non utilisées pour l'apprentissage



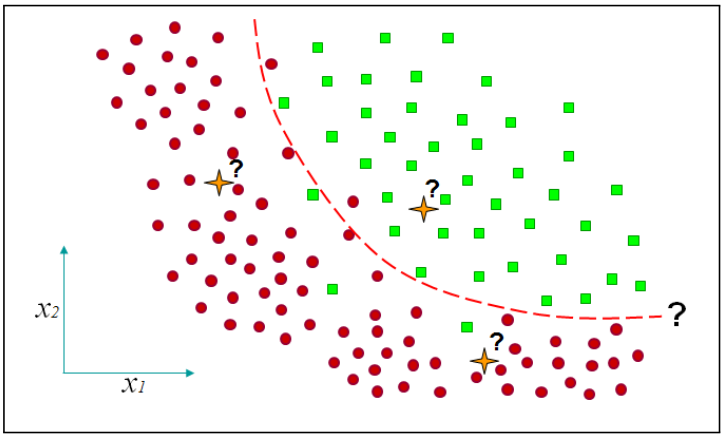
Exemple : détection d'objets (7)

5. Avec le modèle retenu, décider, pour une région d'une nouvelle image, si elle contient ou non un objet d'intérêt



Simplification de l'exemple

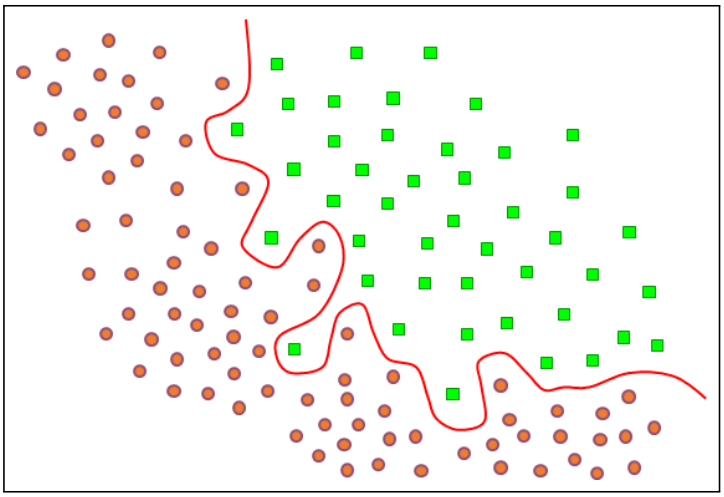
- Les observations sont souvent caractérisées par de nombreuses variables de types variés (que nous examinerons plus tard)
- Pour illustrer nos propos, nous considérerons seulement 2 variables, X_1 et X_2
- Une observation i est donc décrite par (x_{i1}, x_{i2})



Plan du cours

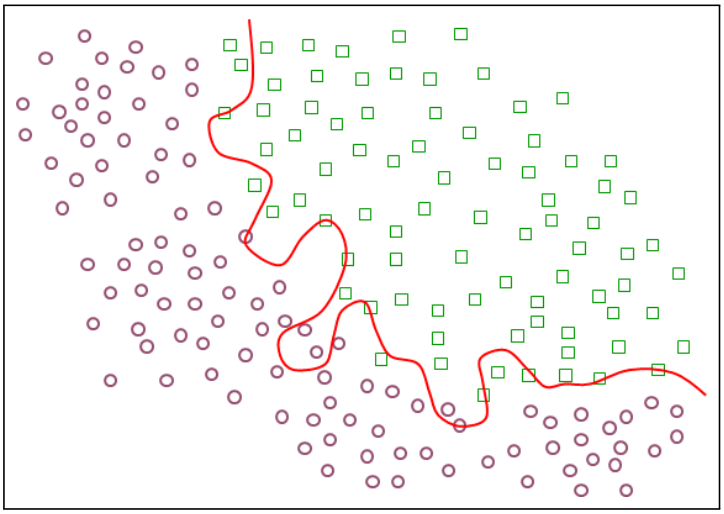
Construction de modèle décisionnel

- Un modèle décisionnel est obtenu à partir de données d'apprentissage, pour lesquelles la classe d'appartenance est connue
- L'erreur résiduelle du modèle sur ces données est appelée erreur d'apprentissage (ou *risque empirique*)



Décision avec un modèle

- L'objectif est d'utiliser le modèle pour décider à quelle classe affecter de futures (nouvelles) données
- L'erreur sur les données futures est l'erreur de généralisation (*risque espéré*)



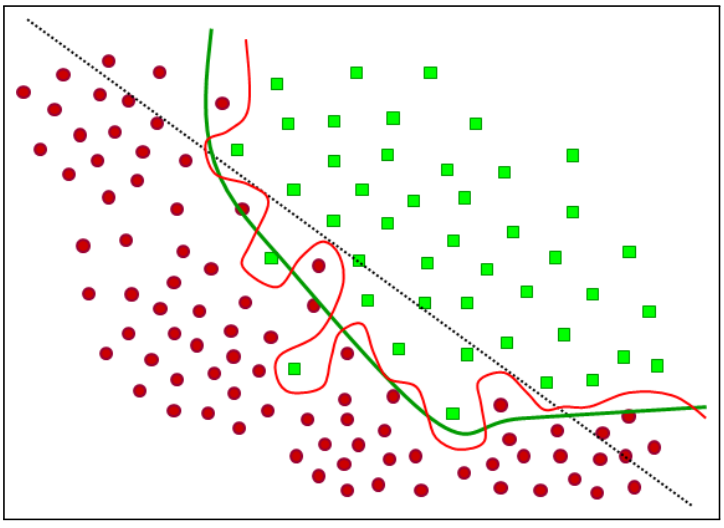
⇒ on souhaite avoir la meilleure généralisation, c'est à dire la plus faible erreur de généralisation (et pas nécessairement la plus faible erreur d'apprentissage) !

Quel modèle présente la meilleure généralisation ?

- L'erreur d'apprentissage peut être (facilement) mesurée
- L'erreur de généralisation ne peut pas être mesurée, comment l'estimer ?
  - → A partir de l'erreur sur des données de test, non utilisées pour l'apprentissage
    - Grâce à une éventuelle borne supérieure sur l'écart entre erreur d'apprentissage et erreur de généralisation
- Hypothèse importante : la distribution des données d'apprentissage est représentative de celle des données futures !
  - Or, la distribution évolue en général dans le temps (n'est pas stationnaire) ⇒ il est nécessaire d'adapter régulièrement le modèle

Quel modèle présente la meilleure généralisation ?

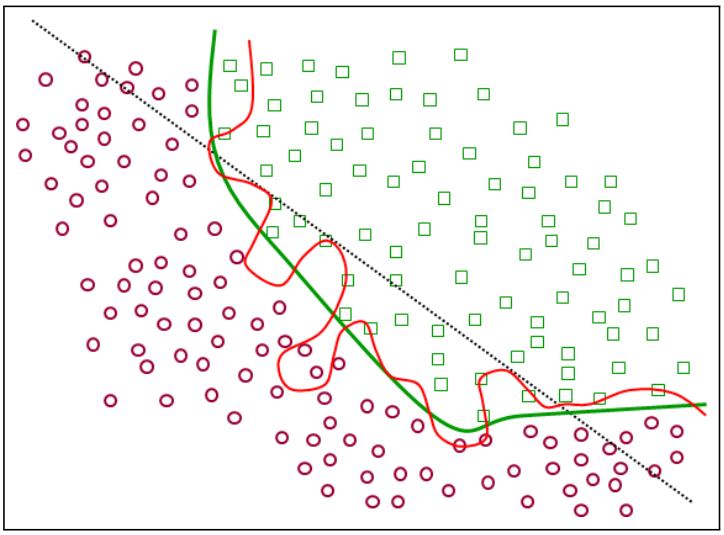
- Obtenir un modèle : choix d'une famille paramétrique, puis optimisation des paramètres pour minimiser l'erreur d'apprentissage
- Plusieurs familles → plusieurs modèles (un par famille), lequel préférer ?



- Sur les données d'apprentissage, certaines familles permettent de trouver un modèle dont l'erreur d'apprentissage est 0

Quel modèle présente la meilleure généralisation ?

- Et l'erreur de généralisation ?



- Explication (qui sera approfondie plus tard) :
  1. Erreur généralisation $\leq$ erreur apprentissage $+$ borne
  2. Or, complexité famille paramétrique $\nearrow \Rightarrow$ borne $\nearrow$...

Plan du cours

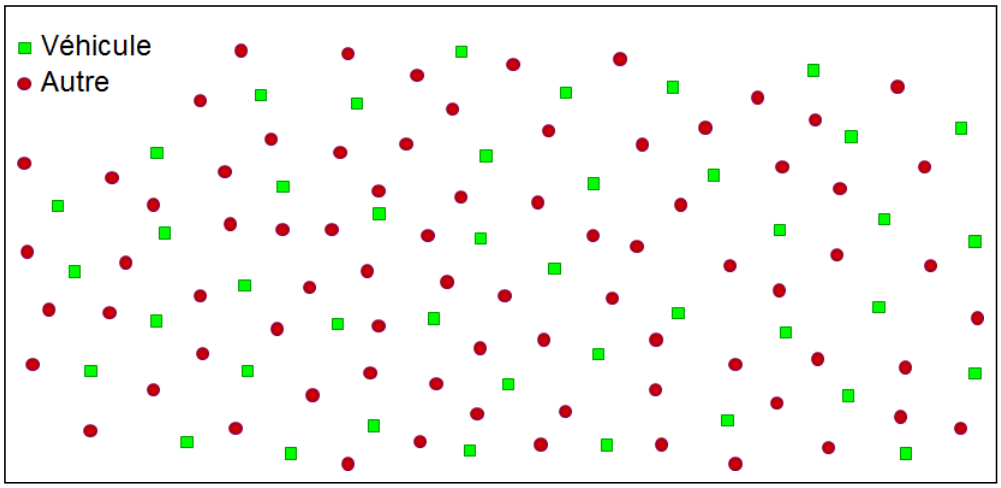
La réalité des données

Quelles caractéristiques des données posent des difficultés particulières à la modélisation ?

1. Données inadaptées
2. Données non représentatives
3. Données aberrantes
4. Données manquantes
5. Classes déséquilibrées
6. Redondance des variables
7. Dimension très élevée des données
8. ...

Données inadaptées

- Dans la situation illustrée, faut-il chercher à tout prix un modèle quelle que soit sa complexité ?
- Un tel modèle généralisera vraisemblablement très mal...

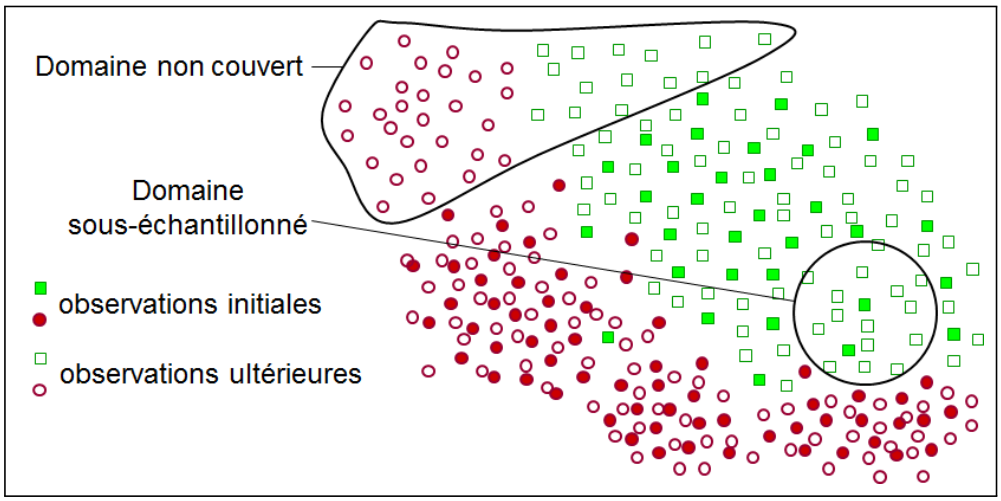


⇒ on conclut que l'information utile est absente des données

⇒ refaire une collecte de données après une analyse du problème

Données non (ou très partiellement) représentatives

- Collecte de données mal menée
  1. Données sous-représentées : par ex., collecte uniquement le dimanche quand la circulation des camions est interdite ($\rightarrow$ images de camions sous-échantillonnées)
  2. Domaines pratiquement absents : par ex., types de véhicules non présents dans le pays de collecte, ou collecte uniquement en ville mais modèle utilisé partout



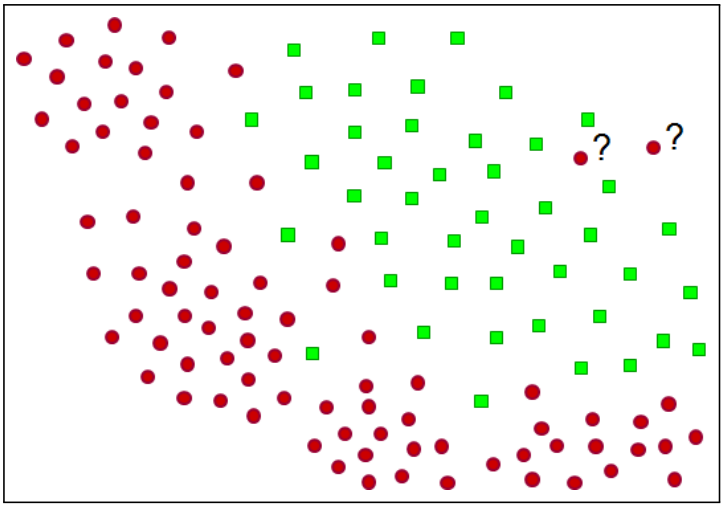
Données non (ou très partiellement) représentatives (2)

$\Rightarrow$ Comprendre comment la collecte a été réalisée

- Que faire ?
  - Être prescripteur pour une nouvelle collecte de données afin de compléter les données là où elles sont absentes (ou insuffisantes)
  - Restreindre le modèle aux régions avec un bon échantillonnage et pouvoir caractériser les limites du modèle (par ex., rejet de non représentativité : refus de décider pour des observations trop éloignées du domaine couvert par les données d'apprentissage)

Données aberrantes

- Données éloignées de toutes les autres ou seulement de celles de leur classe (comme dans l'illustration)



⇒ erreurs d'enregistrement, bruit ou phénomène significatif ?

Données aberrantes (2)

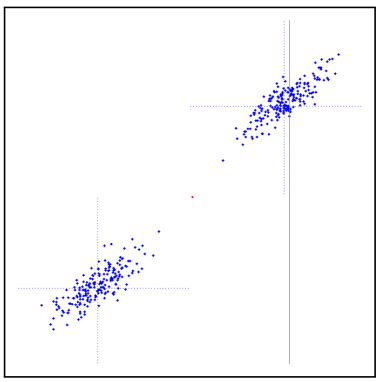
1. Ignorer les données aberrantes
   - De façon implicite : méthodes robustes (par ex. modèles basés sur des distributions à décroissance lente)
   - De façon explicite : détection suivie de suppression
2. Détecter les données aberrantes
   - Tests statistiques
   - Distance aux k plus proches voisins
   - Modélisation du support de la distribution des données « normales »
3. Comprendre les données aberrantes
   - Comment les valeurs aberrantes ont été obtenues
     - ⇒ possibilités de correction des valeurs aberrantes ?
     - ⇒ ces valeurs ne sont pas aberrantes ?
   - Erreurs de mesure, par ex. appareils de mesure défectueux ou fonctionnant parfois dans des conditions extrêmes
   - Erreurs d'étiquetage, par ex. un attelage est-il considéré comme un véhicule ?

Données manquantes

- Pour certaines observations, les valeurs de certaines variables manquent
  - Ex. sondages : absence de réponse à certaines questions
  - Ex. véhicules : un capteur de vitesse fonctionne de façon intermittente
- Solution simple : suppression d'observations ou/et variables $\Rightarrow$ si la proportion de données manquantes est élevée, on peut compromettre la capacité à construire un modèle
  - Supprimer les observations qui présentent des valeurs manquantes pour certaines variables
  - Supprimer les variables qui présentent une proportion importante de valeurs manquantes

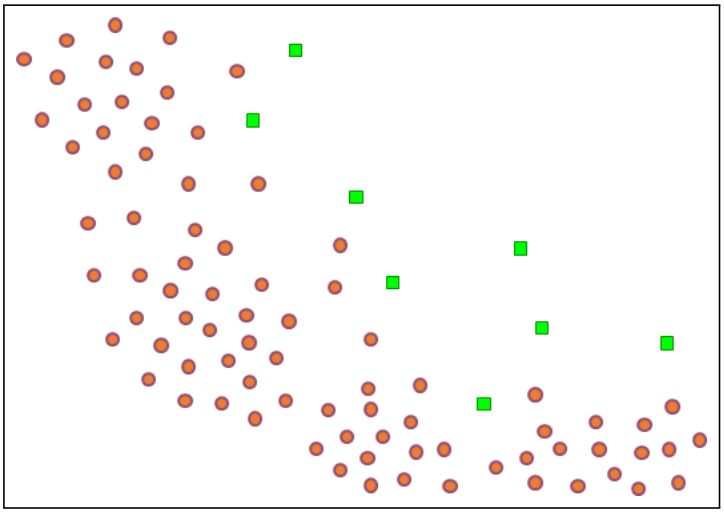
Données manquantes (2)

- Imputation des valeurs manquantes : estimer les valeurs manquantes, employer l'estimation comme une donnée mesurée
  - Estimer par la moyenne (ou la médiane) de la variable sur toutes les observations
  - Estimer par la moyenne de la variable pour les observations de la même classe
  - Estimer par le centre du groupe (*cluster*) issu d'une classification automatique
  - Estimation (lors d'itérations successives) du modèle et des données manquantes (par ex. algorithmes de type espérance-maximisation)
- Exemple : quelle valeur estimer pour la coordonnée verticale (manquante) de la donnée représentée par une barre verticale ?



Classes déséquilibrées

- Le nombre d'observations est beaucoup plus faible pour une classe que pour l'autre



- Classe minoritaire = 5% des observations ⇒ un modèle qui affecte toute observation à la classe majoritaire ne fait que 5% d'erreurs ...

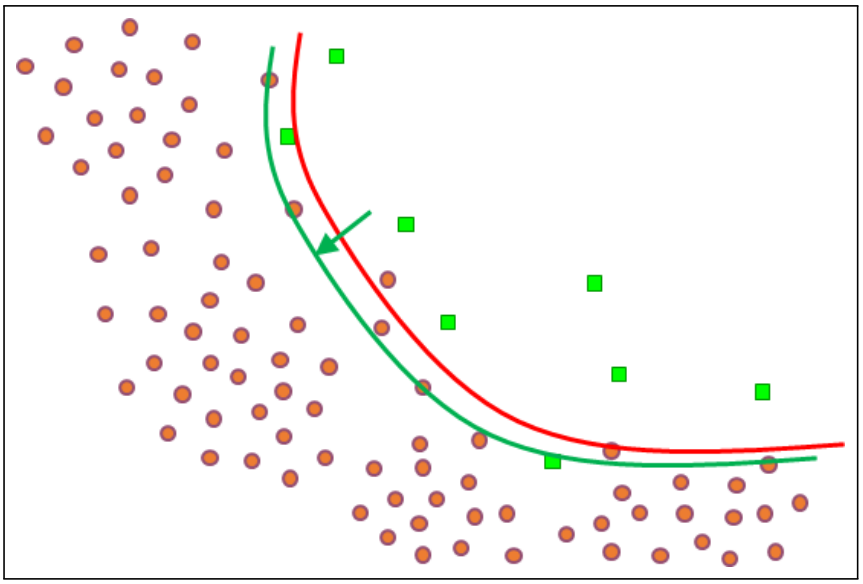
Classes déséquilibrées (2)

Quelques solutions

1. Certaines méthodes de modélisation sont moins sensibles que d'autres au déséquilibre entre les classes
   - Par ex. SVM maximisent une marge ⇒ seules comptent les données les plus proches de la frontière
2. Changer la façon de mesurer la performance du modèle, utiliser par ex.
   - κ (*Kappa*) pour comparer les performances du modèle à une référence aléatoire respectant les fréquences marginales de la matrice de confusion
   - Le rappel mesuré pour la classe minoritaire = proportion d'éléments de la classe détectés comme tels ; attention, le rappel ne dit rien des performances sur la classe majoritaire !

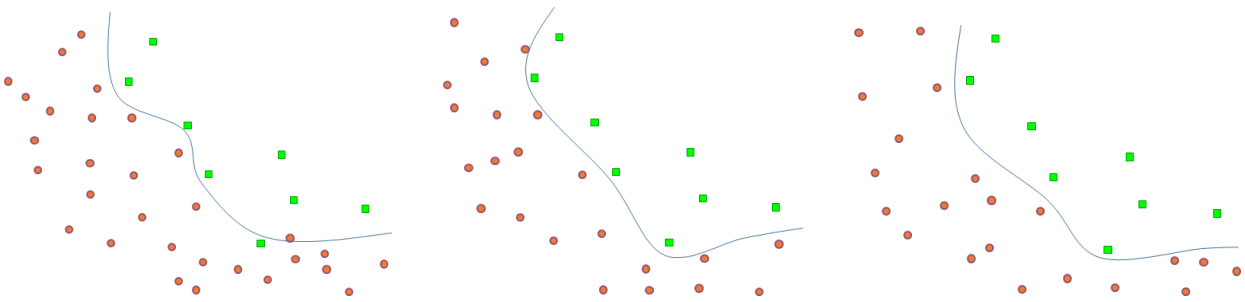
Classes déséquilibrées (3)

3. Utiliser des pénalités supérieures pour les erreurs faites sur la classe minoritaire



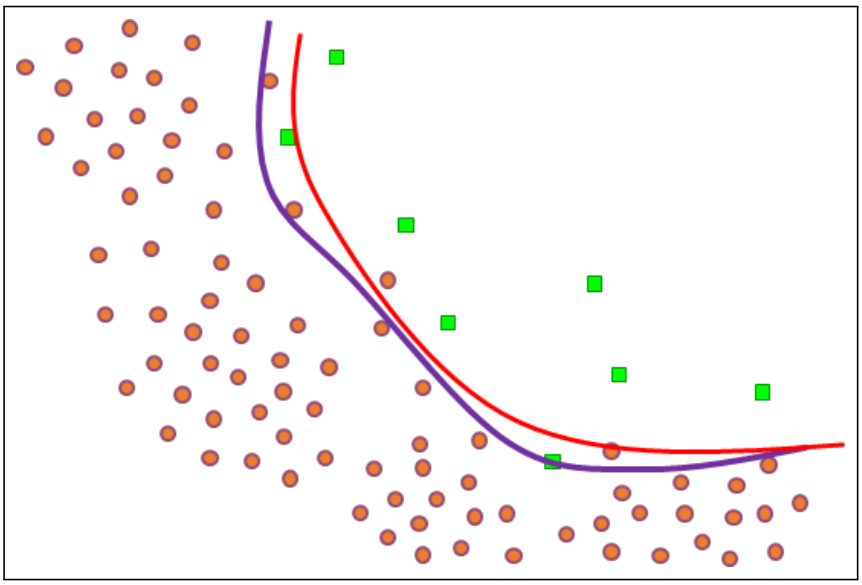
Classes déséquilibrées (4)

4. Employer un ensemble de classifieurs, chacun obtenu sur un échantillon de la classe majoritaire et toutes les données de la classe minoritaire



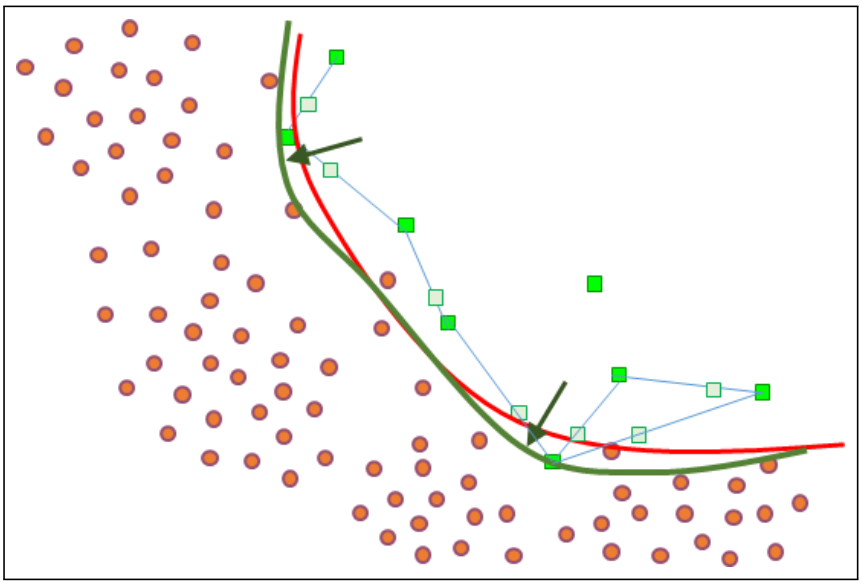
Classes déséquilibrées (5)

4. Employer un ensemble de classifieurs, chacun obtenu sur un échantillon de la classe majoritaire et toutes les données de la classe minoritaire



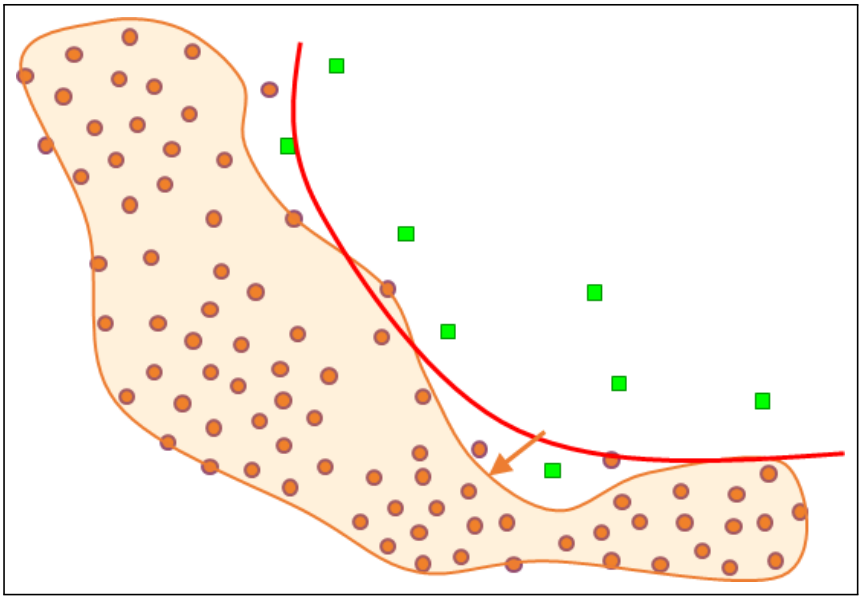
Classes déséquilibrées (6)

5. Générer des observations synthétiques pour la classe minoritaire (par ex. avec *Synthetic Minority Over-sampling TEchnique*, SMOTE)



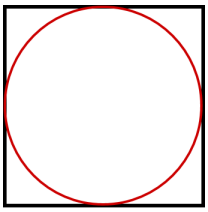
Classes déséquilibrées (7)

6. Reformuler le problème comme une détection d'observations aberrantes (celles de la classe minoritaire)



Dimension très élevée des données

- Dimension d des données : nombre de variables unidimensionnelles qui caractérisent les données
- d élevé $\Rightarrow$ « malédiction de la dimension » (*curse of dimensionality*)
  1. A nombre de données fixé, la densité diminue exponentiellement avec la dimension $\Rightarrow$ problèmes pour l'estimation de densités, tests statistiques
  2. Les données uniformément distribuées dans des volumes en dimension d sont proches des hypersurfaces externes (de dimension $d-1$)

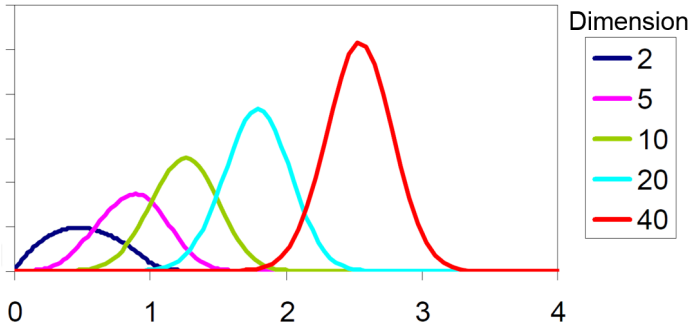


Dimension	Vol. sphère / vol. cube englobant
1	1
2	0,78732
4	0,329707
6	0,141367
8	0,0196735
10	0,00399038

Dimension très élevée des données (2)

3. Augmentation du bruit si nombreuses variables non pertinentes
4. Augmentation du risque de trouver explicatives des variables qui ne le sont pas
5. La variance de la distribution des distances entre observations diminue avec l'augmentation de la dimension (« concentration des mesures »)

   ⇒ problèmes pour l'exploitation des distances dans *k*ppv ou classification automatique
   Exemple pour données issues d'une distribution uniforme :



© Paolo Ciaccia

6. Coût d'analyse / modélisation / décision proportionnel à d^2 ou d^3

Plan du cours

Nature des données

- Observation (*individu*, *entité*, ...) = valeurs que prennent simultanément les variables (*attributs*, *traits*, ...) qui interviennent dans le problème
  - Par ex., une région d'image correspondant (ou non) à un véhicule

Observation	X_1	X_2	...	X_d
e_1	...	...	...	...
e_2	...	...	...	...
...	...	...	...	...
e_n	...	...	...	...

Nature des données (2)

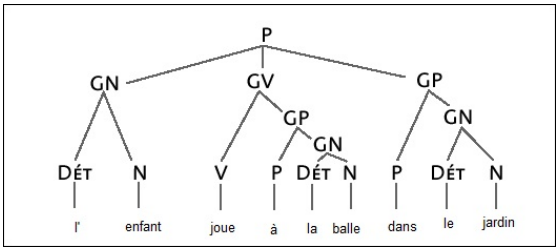
Type d'une variable ← nature des valeurs qu'une variable peut prendre

- Quantitative (ou numérique)
  - Continue : longueur, durée, température, autres mesures physiques, etc.
  - Discrète : population, etc.
- Qualitative (ou catégorielle)
  - Ordinale (un ordre total est présent entre les valeurs possibles) : classement, échelle de Lickert (ex. *Pas du tout d'accord* / *Pas d'accord* / *Ni en désaccord ni d'accord* / *D'accord* / *Tout à fait d'accord*), etc.
  - Nominale : catégorie socio-professionnelle, nom de marque, etc.

Nature des données (3)

Autres types ou distinctions utiles :

- Structurées (↔ non structurées) : chaque valeur possède une structure interne
  - Par ex., une phrase possède une structure grammaticale (arbre syntaxique) qui est en général importante pour le traitement de la phrase



- Valeurs-ensembles : chaque valeur est un sous-ensemble d'un très grand ensemble
  - Par ex., un texte est souvent traité comme un ensemble de mots
- Observations dépendantes : un « voisinage » entre observations → dépendances
  - Dépendances temporelles (entre observations successives) : taux de change, débit rivière, etc.
  - Dépendances spatiales (entre observations spatialement proches) : fertilité du sol, pollution atmosphérique, etc.

Représentation des variables

- Variables ordinales :
  - Représentation par valeurs numériques ?

Pas du tout d'accord	1
Pas d'accord	2
Ni en désaccord ni d'accord	3
...	...

→ introduction de distances arbitraires entre modalités ← à éviter

⇒ Représentation plutôt par des codes binaires :

Pas du tout d'accord	0 0 0 0 1
Pas d'accord	0 0 0 1 1
Ni en désaccord ni d'accord	0 0 1 1 1
...	...

Représentation des variables (2)

- Variables nominales :
  - Représentation par valeurs numériques ?

Enseignant	1
Médecin	2
Technicien	3
...	...

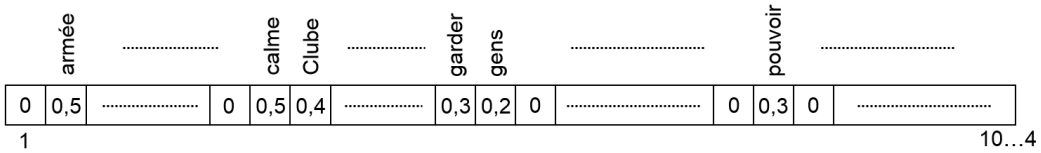
→ introduction d'un ordre arbitraire et de distances arbitraires entre modalités ← à éviter

⇒ Représentation plutôt par un codage disjonctif :

Enseignant	1 0 0 ...0 0 0
Médecin	0 1 0 ...0 0 0
Technicien	0 0 1 ...0 0 0
...	...

Représentation des variables (3)

- Variables à valeurs-ensembles : représentation vectorielle issue de la fonction caractéristique du sous-ensemble correspondant à la valeur



- Variables à valeurs structurées : utilisation de méthodes à noyaux (par ex. noyaux sur arbres, voir l'ingénierie des noyaux dans RCP209)

⇒ La représentation des variables doit être en accord avec la nature des caractéristiques auxquelles les variables correspondent !

Plan du cours

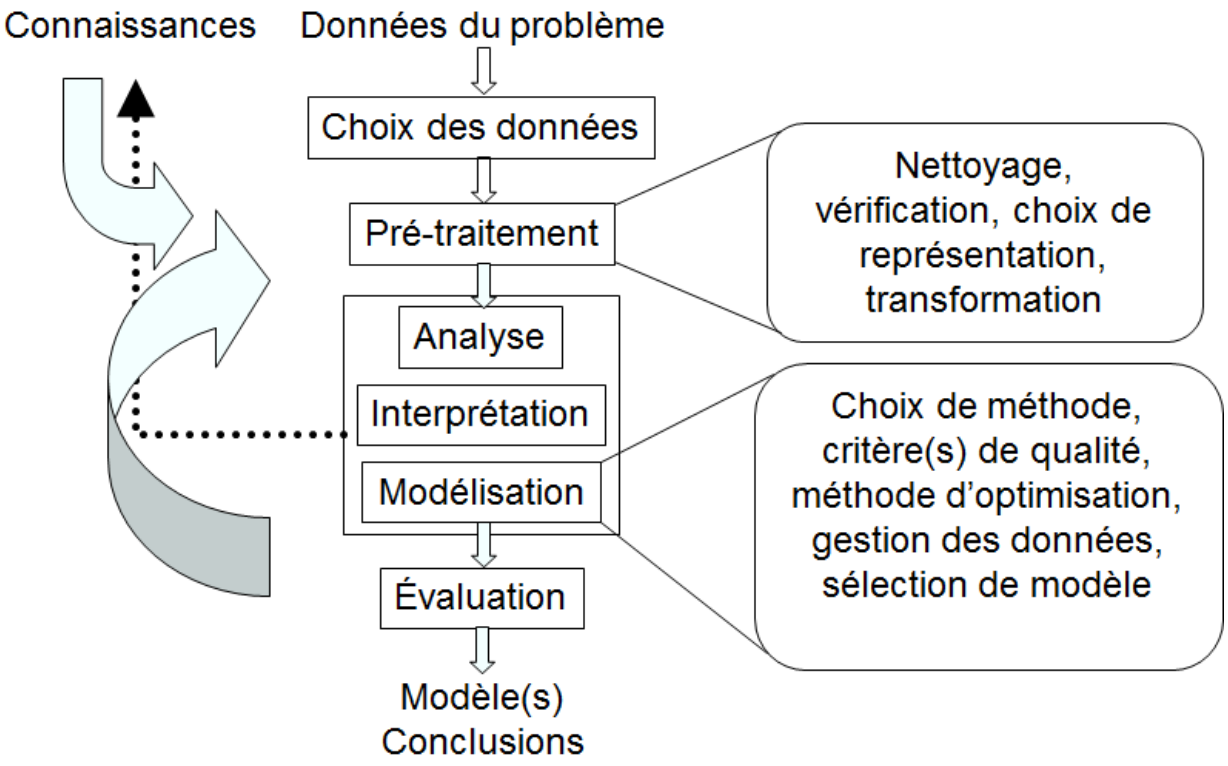
Critères de choix de méthode de modélisation

- Mesure de performance sur les données de test : erreur minimale, AUC (*Area Under Curve*, aire sous la courbe ROC), taux minimal de faux négatifs...
  - Cette performance ne doit pas être l'unique critère de choix !
- Lisibilité (∼*explicability*) : résultats ou décisions interprétables
  - Pour des applications critiques (par ex. contrôle réaction chimique à risque) on ne peut se contenter d'une solution « boîte noire »
  - La lisibilité rend possible la vérification/validation *a priori*
  - Solutions pour rendre lisibles des modèles qui ne le sont pas *a priori* (par ex. extraction de règles d'un réseau de neurones)
- Rapidité de la construction du modèle, de la prise de décision
  - Contraintes de temps sur la (re)construction du modèle ou sur la prise de décision ?
- Eventuellement, autres critères spécifiques à l'application

Critères de choix de méthode de modélisation (2)

- *Usability* : facilité d'emploi
  - Exemple : un expert est indispensable pour mettre au point le modèle et pour toute évolution ultérieure ?
- *Embedability* : facilité d'introduction dans un système global
  - Exemple : la méthode impose des contraintes fortes sur l'échange de données (par ex. codage spécifique des données d'entrée, de sortie) ?
- Flexibilité : adaptation facile au changement de spécifications
  - Exemples : faut-il repartir de zéro si les conditions de mesure changent ou si un capteur est remplacé par un autre de courbe de réponse différente ?
- Passage à l'échelle (*scalability*)
  - Exemple : gros volumes / débits de données

Approche générale de la modélisation



Étapes de la modélisation décisionnelle

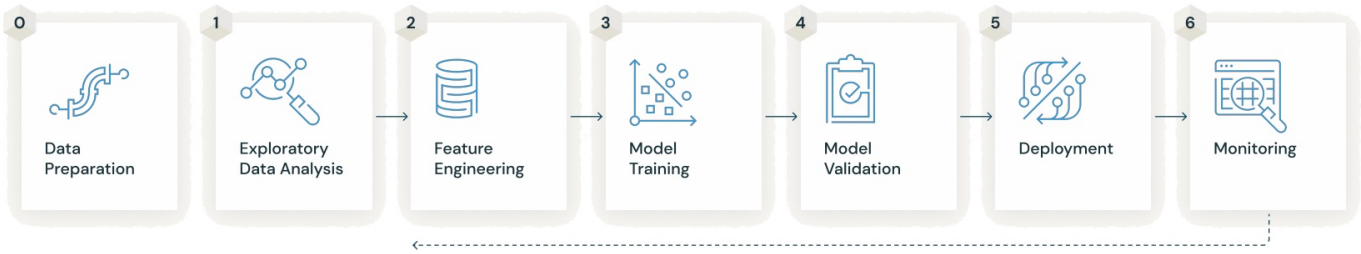


FIG. – Étapes de la modélisation décisionnelle (illustration issue de `mlflow.org`)