Apprentissage automatique Formulation probabiliste - rappel de la théorie des probabilités



Sujets: variable aléatoire

• La théorie des probabilités est l'outil idéal pour formaliser nos hypothèses et incertitudes par rapport à nos données

- On va traiter nos données comme des variables aléatoires
 - la valeur d'une variable aléatoire est incertaine (avant de l'observer)
 - la loi de probabilité de la variable aléatoire caractérise notre incertitude par rapport à sa valeur



Sujets: variable aléatoire discrète, probabilité jointe

- Soit X et Y des variables aléatoires **discrètes**
 - X peut prendre comme valeurs x_1, \dots, x_M
 - Y peut prendre comme valeurs y_1, \ldots, y_M

• La **probabilité jointe** qu'on observe $X=x_i$ et $Y=y_j$ est notée

$$p(X = x_i, Y = y_j)$$



Sujets: probabilité marginale

- Une **probabilité marginale** est lorsqu'on ne s'intéresse pas à toutes les variables aléatoire qu'on a défini
 - exemple : la probabilité marginale d'observer $X \!=\! x_i$

$$p(X = x_i) = \sum_{j=1}^{L} p(X = x_i, Y = y_j)$$



Sujets: probabilité conditionnelle

- Une probabilité conditionnelle est lorsqu'on s'intéresse la valeur d'une variable aléatoire «étant donnée» une valeur assignée à d'autres variables
 - exemple : la probabilité que $Y = y_i$ si on suppose que $X = x_i$

$$p(Y = y_j | X = x_i) = \frac{p(Y = y_j, X = x_i)}{p(X = x_i)}$$

• utile si on veut raisonner par rapport à Y, après avoir observé que $X = x_i$







Sujets: règle du produit

• Une probabilité jointe peut toujours être décomposée dans le produit d'une probabilité conditionnelle et marginale

$$p(X = x_i, Y = y_j) = p(Y = y_j | X =$$

- En mots :
 - la probabilité d'observer $X = x_i$ et $Y = y_j$, c'est la probabilité d'observer $X = x_i$ multipliée par la probabilité d'observer $Y = y_i$ étant donné que $X = x_i$



$= x_i)p(X = x_i)$

Sujets: probabilités jointes, marginales et conditionnelles



p(X)





p(X|Y=1)



Sujets: règle de Bayes, loi a priori

• La **règle de Bayes** permet d'inverser l'ordre de la conditionnelle

$$p(Y|X) = \frac{p(X|Y)p(Y)}{p(X)} \text{ , où } p(X) = 2$$

- + p(Y) est appelée loi de probabilité a priori (prior)
- p(Y|X) est appelée loi de probabilité a posteriori (posterior)

x_i et y_j ont disparu, seulement pour simplifier la notation

 $\sum p(X|Y)p(Y)$

Sujets: indépendance

- Deux variables aléatoires X et Y sont indépendantes si
 - p(X,Y) = p(X) p(Y) ou
 - p(Y|X) = p(Y) ou
 - $p(X \mid Y) = p(X)$

• En mots : observer la valeur d'une variable ne nous apprend rien sur la valeur de l'autre



Apprentissage automatique Formulation probabiliste - variable aléatoire continue



Sujets: variable aléatoire continue, fonction de densité

- Soit X une variable aléatoire continue
 - X peut prendre un nombre infini de valeurs possibles (e.g. \mathbb{R})
 - X est associée à une **fonction de densité** de probabilité p(x)
 - la probabilité que X appartienne à un intervalle (a,b) est

$$p(x \in (a, b)) = \int_{a}^{b} p(x) \, \mathrm{d}x$$

Sujets: variable aléatoire continue, fonction de densité

- Soit X une variable aléatoire continue
 - la fonction de densité doit satisfaire

$$p(x) \ge 0$$
$$\int_{-\infty}^{\infty} p(x) \, \mathrm{d}x = 1$$

- à noter que, contrairement aux probabilités d'une variable discrète, la fonction de densité peut être > 1.
- peut être vu comme la probabilité que X appartienne à un intervalle infinitésimalement petit centrée en x

Sujets: fonction de probabilité cumulative

- Soit X une variable aléatoire continue
 - la fonction de répartition P(z) (cumulative distribution function) donne la probabilité que X appartienne à l'intervalle $(-\infty, z)$

$$P(z) = \int_{-\infty}^{z} p(x) \, \mathrm{d}x$$

- les mêmes règles des probabilités marginales et conditionnelles s'appliquent à la fonction de densité
 - les sommes sont remplacées par des intégrales -



Sujets: variable aléatoire continue





Sujets: fonction de densité jointe

- Soit X et Y deux variables aléatoires continues
 - elles sont associées à une fonction de densité jointe p(x,y)telle que :

$$p(x \in (a_x, b_x), y \in (a_y, b_y)) = \int_{a_x}^{b_x} \int_{a_y}^{b_y} p(x, y)$$

) dy dx

Sujets: fonction de densité marginale et conditionnelle

- Soit X et Y deux variables aléatoires continues
 - la fonction de densité marginale s'obtient en intégrant l'autre variable :

$$p(x) = \int p(x, y) \mathrm{d}y$$

la **fonction de densité conditionnelle** s'obtient en divisant par la marginale :

$$p(y|x) = \frac{p(x,y)}{p(x)}$$

Apprentissage automatique Formulation probabiliste - espérance, variance et covariance



Sujets: espérance

• L'espérance d'une fonction f d'une variable X est

$$\mathbb{E}[f] = \sum_{x} p(x) f(x) \qquad \text{(cas discret)}$$

$$\mathbb{E}[f] = \int p(x)f(x) \, \mathrm{d}x$$
 (cas continu)

• donne une «idée générale» de la valeur de f(x)



Sujets: variance

• La **variance** d'une fonction f d'une variable X est

$$\operatorname{var}[f] = \mathbb{E}\left[\left(f(x) - \mathbb{E}[f(x)]\right)^2\right]$$

• mesure à quelle point les valeurs de f(x) varient autour de l'espérance



Sujets: propriétés de l'espérance et la variance

• L'espérance d'une transformation linéaire satisfait

$$\mathbb{E}\left[ax + by\right] = a\mathbb{E}\left[x\right] + b\mathbb{E}\left[y\right]$$

• La variance d'une transformation linéaire satisfait

$$\operatorname{var}\left[ax + by\right] = a^{2}\operatorname{var}\left[x\right] + b^{2}\operatorname{var}\left[y\right]$$

seulement si X et Y sont indépendantes

HUGO LAROCHELLE



a et b sont des constantes

Sujets: espérance et variance conditionnelle

• L'espérance et la variance se généralise au cas conditionnel :

$$\mathbb{E}[f(x)|y] = \int f(x)p(x|y)\mathrm{d}x$$
 (cas contin

$$\operatorname{var}[f(x)|y] = \mathbb{E}\left[(f(x) - \mathbb{E}[f(x)|y])^2 | y\right]$$

HUGO LAROCHELLE



nu)

Sujets: covariance

• La **covariance** entre deux variables X et Y est

$$\operatorname{cov}[x, y] = \mathbb{E}_{x, y} \left[\left\{ x - \mathbb{E}[x] \right\} \left\{ y - \mathbb{E}[y] \right\} \right]$$
$$= \mathbb{E}_{x, y} [xy] - \mathbb{E}[x] \mathbb{E}[y]$$

- mesure à quel point on peut prédire X à partir de Y (linéairement), et vice-versa
- si X et Y sont indépendantes, alors la covariance est 0
- l'inverse n'est pas nécessairement vrai



Sujets: variable aléatoires multidimensionnelles

- Une variable aléatoire peut être un vecteur
 - la loi de probabilité du vecteur discret est une probabilité jointe

$$p(\mathbf{X} = \mathbf{x}) = p(X_1 = x_1, \dots, X_D = x_D)$$

la fonction de densité d'un vecteur continu intègre à 1

$$\int p(\mathbf{x}) \, \mathrm{d}\mathbf{x} = \int_{x_1} \dots \int_{x_D} p(\mathbf{x}) \, \mathrm{d}x_D \dots \mathrm{d}x_1 = 1$$

où $p(\mathbf{x}) \geq 0$



Sujets: variable aléatoires multidimensionnelles

- Une variable aléatoire peut être une vecteur
 - l'espérance d'un vecteur et le vecteur des espérances

$$\mathbb{E}[\mathbf{x}] = (\mathbb{E}[x_1], \dots, \mathbb{E}[x_D])^{\mathrm{T}}$$

la covariance entre deux vecteurs est la matrice des covariances

$$\begin{aligned} \operatorname{cov}[\mathbf{x},\mathbf{y}] &= & \mathbb{E}_{\mathbf{x},\mathbf{y}}\left[\{\mathbf{x} - \mathbb{E}[\mathbf{x}]\}\{\mathbf{y}^{\mathrm{T}} - \mathbb{E}[\mathbf{y}^{\mathrm{T}}] \\ &= & \mathbb{E}_{\mathbf{x},\mathbf{y}}[\mathbf{x}\mathbf{y}^{\mathrm{T}}] - \mathbb{E}[\mathbf{x}]\mathbb{E}[\mathbf{y}^{\mathrm{T}}]. \end{aligned} \end{aligned}$$

• on note
$$\operatorname{cov}[\mathbf{x}] \equiv \operatorname{cov}[\mathbf{x}, \mathbf{x}]$$

HUGO LAROCHELLE



Sujets: variable aléatoires multidimensionnelles

• L'espérance d'une transformation linéaire satisfait

$\mathbb{E}[\mathbf{A}\mathbf{x} + \mathbf{b}] = \mathbf{A}\mathbb{E}[\mathbf{x}] + \mathbf{b}$

• La covariance d'une transformation linéaire satisfait

$$cov[Ax + b, Cy + d] = Acov[x, y]C^{T}$$
$$cov[Ax + b] = Acov[x]A^{T}$$







Sujets: loi gaussienne (loi normale)

- La loi gaussienne (aussi appelée loi normale) est une loi simple et pratique pour exprimer notre incertitude sur une quantité continue
 - assigne la densité de probabilité la plus élevée à une valeur moyenne μ
 - notre incertitude est exprimée par la variance σ^2 (ou l'écart-type σ)
 - exemple : «la réclamation des clients prend une valeur autour de μ \$, mais varie selon un écart-type de σ \$»



Sujets: loi gaussienne (loi normale)

• Une variable aléatoire suivant une loi gaussienne a la fonction de densité suivante :

$$p(x) = \mathcal{N}(x|\mu, \sigma^2) = \frac{1}{(2\pi\sigma^2)^{1/2}} \exp\left\{-\frac{1}{2\sigma^2}(x-\mu)\right\}$$

+ paramétrée par sa moyenne μ et sa variance σ^2

$$\mathbb{E}[x] = \int_{-\infty}^{\infty} \mathcal{N}(x|\mu, \sigma^2) x \, \mathrm{d}x = \mu$$
$$\operatorname{var}[x] = \int_{-\infty}^{\infty} \mathcal{N}(x|\mu, \sigma^2) (x-\mu)^2 \, \mathrm{d}x = \sigma^2$$

 $(u)^2$

Sujets: loi gaussienne (loi normale)



Sujets: loi gaussienne multidimensionnelle

• La version multidimensionnelle a une forme similaire

$$p(\mathbf{x}) = \mathcal{N}(\mathbf{x}|\boldsymbol{\mu}, \boldsymbol{\Sigma}) = \frac{1}{(2\pi)^{D/2}} \frac{1}{|\boldsymbol{\Sigma}|^{1/2}} \exp\left\{-\frac{1}{2}(\mathbf{x}-\boldsymbol{\mu})\right\}$$

• paramétrée par sa moyenne μ et sa matrice de covariance Σ

$$\mathbb{E}[\mathbf{x}] = \boldsymbol{\mu} \qquad \operatorname{cov}[\mathbf{x}] = \boldsymbol{\Sigma}$$

 Σ permet de représenter des dépendances entre les élément de x

 $\boldsymbol{\mu})^{\mathrm{T}} \boldsymbol{\Sigma}^{-1}(\mathbf{x} - \boldsymbol{\mu}) \bigg\}$

Sujets: loi gaussienne multidimensionnelle



Sujets: loi gaussienne multidimensionnelle

• Exemple : $\mathbf{x} = (x_1, x_2)$



Sujets: loi gaussienne multidimensionnelle

• Exemple : $\mathbf{x} = (x_1, x_2)$



Sujets: loi gaussienne multidimensionnelle

• Exemple : $\mathbf{x} = (x_1, x_2)$



 x_1

Sujets: combinaison de variables gaussiennes

• Une combinaison linéaire de variables aléatoires gaussiennes est également gaussienne

- Exemple
 - soit x une variable gaussienne de moyenne μ_1 et variance σ_1^2
 - soit y une variable gaussienne de moyenne μ_2 et variance σ_2^2
 - alors ax + by suit une loi gaussienne de moyenne $a\mu_1 + b\mu_2$ et variance $a^2\sigma_1^2 + b^2\sigma_2^2$ (x et y sont indépendantes)

Apprentissage automatique Formulation probabiliste - régression polynomiale revisitée



Sujets: formulation probabiliste de la régression

- Retournons à notre exemple de régression
 - entrée : scalaire x
 - cible : scalaire t
- Données d'entraînement ${\cal D}$ contiennent :
 - $\mathbf{X} \equiv (x_1, \dots, x_N)^{\mathrm{T}}$
 - , $\mathbf{t} \equiv (t_1, \ldots, t_N)^{\mathrm{T}}$
- Objectif :
 - faire une prédiction \hat{t} pour une nouvelle entrée \hat{x}





t

Sujets: formulation probabiliste de la régression

 On va supposer qu'une bonne prédiction aurait une forme polynomiale

$$y(x, \mathbf{w}) = w_0 + w_1 x + w_2 x^2 + \ldots + w_M x^M$$

= $\sum_{j=0}^{M} w_j x^j$

• $y(x, \mathbf{w})$ est notre **modèle**

38

- représente nos hypothèses sur le problème à résoudre
- a normalement des paramètres, qu'on doit trouver (w ici)
 HUGO LAROCHELLE



Sujets: loi gaussienne conditionnelle

 On va formuler ce qui n'est pas expliqué par de façon probabiliste

$$p(t|x, \mathbf{w}, \beta) = \mathcal{N}\left(t|y(x, \mathbf{w}), \beta^{-1}\right)$$

- t a été générée selon une loi gaussienne de moyenne $y(x,\mathbf{w})$ et variance $\beta^{-1} = \sigma^2$
- c'est une loi gaussienne conditionnelle



Sujets: formulation probabiliste de la régression



Sujets: hypothèse i.i.d.

• On va supposer que chaque cible a été générée indépendamment

$$p(\mathbf{t}|\mathbf{x}, \mathbf{w}, \beta) = \prod_{n=1}^{N} \mathcal{N}\left(t_n | y(x_n, \mathbf{w}), \beta^{-1}\right)$$

• Hypothèse de variables **indépendantes et** identiquement distribuées (i.i.d.)

Sujets: maximum de vraisemblance

- Un bon modèle serait un modèle (w) qui associe la plus haute (log-)probabilité possible à nos données
 - on appelle ça la solution **maximum de vraisemblance**

$$\ln p(\mathbf{t}|\mathbf{x}, \mathbf{w}, \beta) = -\frac{\beta}{2} \sum_{n=1}^{N} \{y(x_n, \mathbf{w}) - t_n\}^2 + \frac{N}{2} \ln \frac{\beta}{2} + \frac{N}{2} \ln \frac{N}{2} + \frac{N}{2} + \frac{N}{2} + \frac{N}{2} + \frac{N}{2} + \frac{N}{2} + \frac{$$

• Maximiser cette expression est équivalent à minimiser

$$E(\mathbf{w}) = \frac{1}{2} \sum_{n=1}^{N} \left\{ y(x_n, \mathbf{w}) - t_n \right\}^2$$

Hugo Larochelle

$n\beta - \frac{N}{2}\ln(2\pi)$





Sujets: maximum de vraisemblance

- Un bon modèle serait un modèle (w) qui associe la plus haute (log-)probabilité possible à nos données
 - on appelle ça la solution **maximum de vraisemblance**

$$\ln p(\mathbf{t}|\mathbf{x}, \mathbf{w}, \beta) = -\frac{\beta}{2} \sum_{n=1}^{N} \{y(x_n, \mathbf{w}) - t_n\}^2 + \frac{N}{2} \ln \frac{\beta}{2} + \frac{N}{2} \ln \frac{N}{2} + \frac{N}{2} + \frac{N}{2} + \frac{N}{2} + \frac{N}{2} + \frac{N}{2} + \frac{$$

• Maximiser cette expression est équivalent à minimiser

$$E(\mathbf{w}) = \frac{1}{2} \sum_{n=1}^{N} \left\{ y(x_n, \mathbf{w}) - t_n \right\}^2$$

Hugo Larochelle

$n\beta - \frac{N}{2}\ln(2\pi)$

Sujets: loi a priori et loi a posteriori

- Et si on a une petite idée a priori de la solution w
 - exemple : w n'est pas très loin de 0
- On peut formuler également de façon probabiliste
 - exemple : w suit une loi gaussienne centrée à 0

$$p(\mathbf{w}|\alpha) = \mathcal{N}(\mathbf{w}|\mathbf{0}, \alpha^{-1}\mathbf{I}) \qquad \text{à quel point w s'éloigne de}$$
$$= \left(\frac{\alpha}{2\pi}\right)^{(M+1)/2} \exp\left\{-\frac{\alpha}{2}\mathbf{w}^{\mathrm{T}}\mathbf{w}\right\}$$

HUGO LAROCHELLE

0

Sujets: loi a priori et loi a posteriori

- $p(\mathbf{w}|\alpha)$ exprime notre croyance a priori sur la valeur de w
 - c'est une loi a priori (prior)
- Lorsqu'on observe des données, on peut mettre à jour notre croyance

$$p(\mathbf{w}|\mathbf{x}, \mathbf{t}, \alpha, \beta) \propto p(\mathbf{t}|\mathbf{x}, \mathbf{w}, \beta)p(\mathbf{w}|\alpha)$$

c'est la loi a posteriori (posterior)



Sujets: maximum a posteriori

- On pourrait choisir le modèle w qui est le plus (log-)probable selon nos croyances a posteriori $p(\mathbf{w}|\mathbf{x}, \mathbf{t}, \alpha, \beta)$
 - on appelle ça la solution **maximum a posteriori**

$$\frac{\beta}{2} \sum_{n=1}^{N} \{y(x_n, \mathbf{w}) - t_n\}^2 + \frac{\alpha}{2} \mathbf{w}^{\mathrm{T}} \mathbf{w}$$

• Équivalent à la perte régularisée si $\lambda = \alpha/\beta$

$$\widetilde{E}(\mathbf{w}) = \frac{1}{2} \sum_{n=1}^{N} \left\{ y(x_n, \mathbf{w}) - t_n \right\}^2 + \frac{\lambda}{2} \|\mathbf{w}\|^2$$
HUGO LAROCHELLE







Sujets: théorie de l'information

- Les probabilités sont également utiles pour quantifier l'information présente dans des données
 - exemple : quel est le nombre minimum de bits nécessaire pour encoder un message ?

- Cette question est intimement liée à la probabilité d'observer ce message
 - plus le message est «surprenant» (improbable), plus on aura besoin de bits



Sujets: codage de Huffman

- Codage de Huffman :
 - façon optimale d'encoder des symboles indépendants de façon binaire
 - plus un symbole est «fréquent» (probable), plus son code sera court





Sujets: codage de Huffman

- Codage de Huffman :
 - façon optimale d'encoder des symboles indépendants de façon binaire
 - plus un symbole est «fréquent» (probable), plus son code sera court





Sujets: codage de Huffman

- Codage de Huffman :
 - façon optimale d'encoder des symboles indépendants de façon binaire
 - plus un symbole est «fréquent» (probable), plus son code sera court





Sujets: codage de Huffman

- Codage de Huffman :
 - façon optimale d'encoder des symboles indépendants de façon binaire
 - plus un symbole est «fréquent» (probable), plus son code sera court





Sujets: codage de Huffman

- Codage de Huffman :
 - façon optimale d'encoder des symboles indépendants de façon binaire
 - plus un symbole est «fréquent» (probable), plus son code sera court



| Symbole | Code |
|---------|------|
| 'a' | 0 |
| ʻb' | 100 |
| ʻc' | 101 |
| ʻd' | 11 |



Sujets: entropie, information

- Soit p(x) la probabilité d'observer le symbole x
 - la taille moyenne du code d'un symbole est

 $0.4 \times 1 + 0.05 \times 3 + 0.2 \times 3 + 0.35 \times 2 = 1.85$ (bits)

• Entropie :

$$H[x] = -\sum_{x} p(x) \log_2 p(x) \approx 1.7393$$

- Claude Shannon a démontré qu'il est impossible de compresser l'information dans un plus petit code moyen
- $-\log_2 p(x)$ est l'information contenue par x





Sujets: entropie

- L'entropie donne une façon standard de quantifier l'information moyenne contenue par une observation x
 - plus p(x) est proche d'une loi uniforme, plus l'entropie est élevée
 - exemple : $x \in \{a, b, c, d, e, f, g, h\}$



$$H[x] = -8 \times \frac{1}{8} \log_2 \frac{1}{8} = 3$$
 bits



Sujets: entropie

- L'entropie donne une façon standard de quantifier l'information moyenne contenue par une observation x
 - plus p(x) est proche d'une loi uniforme, plus l'entropie est élevée





Sujets: entropie

- L'entropie est une fonction d'une loi de probabilité
 - elle reflète l'incertitude représentée par la loi
 - si p(x) = 1 pour une seule valeur de x, l'entropie est 0

• On peut généraliser l'entropie à une loi jointe sur plusieurs variables

$$H[x, y] = -\sum_{x} \sum_{y} p(x, y) \log_2 p(x, y)$$

HUGO LAROCHELLE



y

Sujets: entropie conditionnelle

• L'entropie conditionnelle quantifie l'information **additionnelle** qu'apporte une nouvelle observation y

$$H[y|x] = -\sum_{x} \sum_{y} p(x, y) \log_2 p(y|x)$$

• On peut démontrer que

$$H[x, y] = H[y|x] + H[x]$$



Sujets: entropie différentielle

• On peut généraliser l'entropie au cas continu :

$$H[\mathbf{x}] = -\int p(\mathbf{x}) \ln p(\mathbf{x}) \, \mathrm{d}\mathbf{x}$$

- l'entropie différentielle peut être négative
- lorsqu'on utilise le logarithme naturel, on parle de «nats» à la place de bits
- l'interprétation comme mesure de l'incertitude associée à une loi de probabilité demeure pertinente



Sujets: entropie différentielle

- Plus la fonction de densité est «piquée», plus l'entropie sera basse
 - si $x \in [a,b]$, la loi uniforme a l'entropie maximale
 - si $x \in \mathbb{R}$ avec moyenne μ et variance σ^2 , la loi gaussienne a l'entropie maximale

$$H[x] = \frac{1}{2} \left\{ 1 + \ln(2\pi\sigma^2) \right\}$$







Sujets: divergence de Kullback-Leibler ou entropie relative

- Si on ne connait pas p(x), on va vouloir l'estimer
- Si q(x) est notre estimation, on définit la **divergence de** Kullback-Leibler (K-L) comme suit :

$$\begin{aligned} \operatorname{KL}(p \| q) &= -\int p(\mathbf{x}) \ln q(\mathbf{x}) \, \mathrm{d}\mathbf{x} - \left(-\int p(\mathbf{x}) \ln p(\mathbf{x}) \, \mathrm{d}\mathbf{x} \right) \\ &= -\int p(\mathbf{x}) \ln \left\{ \frac{q(\mathbf{x})}{p(\mathbf{x})} \right\} \, \mathrm{d}\mathbf{x}. \end{aligned}$$

dans le cas discret (avec des sommes), correspond au nombre de bits additionnels par rapport à ce qui serait optimal

HUGO LAROCHELLE



 $(\mathbf{x}) \, \mathrm{d}\mathbf{x}$

Sujets: information mutuelle

- Utilisée comme «distance» entre deux lois
 - est toujours positive
 - n'est pas symétrique (contrairement à une vraie distance)
- Peut mesurer à quel point deux variables sont dépendantes

$$I[\mathbf{x}, \mathbf{y}] \equiv KL(p(\mathbf{x}, \mathbf{y}) || p(\mathbf{x}) p(\mathbf{y}))$$

= $-\iint p(\mathbf{x}, \mathbf{y}) \ln \left(\frac{p(\mathbf{x}) p(\mathbf{y})}{p(\mathbf{x}, \mathbf{y})} \right) d\mathbf{x} d\mathbf{y}$

on appelle cette mesure l'information mutuelle

HUGO LAROCHELLE



V