Table des matières

Avant-propos **xv**

1 Chapitre 1 : Fondamentaux de l'apprentissage machine (AM) **1**
1.1 Données . . . 4
1.1.1 Terminologie . . . 4
1.1.2 Nature des données . . . 5
1.1.3 Structure des données . . . 7
1.2 Paradigmes d'AM . . . 11
1.2.1 Apprentissage supervisé . . . 12
1.2.2 Apprentissage non supervisé . . . 13
1.2.3 Apprentissage par renforcement . . . 15
1.2.4 Paradigmes complémentaires ou hybrides . . . 17
1.3 Développement d'un modèle d'AM . . . 19
1.3.1 Phase d'entraînement . . . 20
1.3.2 Phase d'inférence . . . 29
1.4 Préparation et prétraitement des données . . . 30
1.4.1 Traitement des valeurs manquantes . . . 31
1.4.2 Détection et traitement des valeurs aberrantes . . . 40
1.4.3 Nettoyage des formats et des types de données . . . 48
1.4.4 Mise à l'échelle des variables numériques . . . 48
1.4.5 Suppression des doublons . . . 52
1.4.6 Encodage des variables catégorielles . . . 53
1.4.7 Discrétisation des variables continues . . . 56
1.5 Partitionnement des données . . . 57
1.5.1 Données d'entraînement, de test et de validation . . . 57
1.5.2 Proportions typiques de partitionnement . . . 58
1.5.3 Reproductibilité . . . 59
1.5.4 Stratification . . . 60
1.6 Validation croisée . . . 62
1.6.1 Validation croisée k-fold . . . 62
1.6.2 Validation croisée Leave-One-Out . . . 63
1.6.3 Validation croisée de Monte Carlo . . . 63
1.6.4 Validation croisée One-Subject-Out . . . 63
1.7 Évaluation d'un système d'AM . . . 65

1.7.1 Métriques pour les modèles de classification . . . 65
1.7.2 Métriques pour les modèles de regroupement . . . 73
1.7.3 Métriques pour les modèles de régression . . . 77
1.8 Sous-apprentissage et surapprentissage . . . 79
1.9 Paramètres et hyperparamètres . . . 80
1.10 Modèles génératifs et discriminatifs . . . 81

2 Chapitre 2 : Modèles de régression 85
2.1 Régression linéaire . . . 87
2.1.1 Entraînement du modèle de régression linéaire . . . 90
2.1.2 Méthode analytique . . . 91
2.1.3 Méthode itérative . . . 98
2.1.4 Fonction de coût . . . 101
2.1.5 Variantes de la descente de gradient . . . 103
2.2 Régression polynomiale . . . 111
2.2.1 Transformation des variables . . . 111
2.2.2 Entraînement de la régression polynomiale . . . 112
2.3 Régression logistique . . . 116
2.3.1 Fonction de coût : Perte logarithmique . . . 118
2.3.2 Entraînement du modèle de régression logistique . . . 119
2.4 La régression logistique multinomiale . . . 125
2.4.1 Fonction de coût : Entropie croisée . . . 127
2.4.2 Entraînement de la régression softmax . . . 127

3 Chapitre 3 : Réseaux de neurones artificiels 131
3.1 Historique des réseaux de neurones . . . 132
3.2 Perceptron . . . 134
3.2.1 Structure du perceptron . . . 134
3.2.2 Entraînement du perceptron . . . 137
3.3 Perceptron multicouche . . . 140
3.3.1 Structure du MLP . . . 141
3.3.2 Entraînement du perceptron multicouche . . . 142
3.3.3 Fonctions d'activation . . . 147
3.4 Perceptron multicouche « profond » . . . 153
3.5 Explicabilité des réseaux de neurones . . . 157
3.5.1 Défis pour l'explicabilité . . . 157
3.5.2 Catégories des modèles d'explicabilité . . . 158
3.5.3 LIME (Local Interpretable Model-agnostic Explanations) . . . 161
3.5.4 SHAP (SHapley Additive exPlanations) . . . 165
3.5.5 LRP (Layer-wise Relevance Propagation) . . . 169

4 Chapitre 4 : Réseaux de neurones profonds – Défis et solutions 177
4.1 Disparition et explosion du gradient . . . 181
4.1.1 Initialisation des poids . . . 183
4.1.2 Fonctions d'activations . . . 186
4.1.3 Normalisation par lots . . . 191
4.1.4 Écrêtage du gradient . . . 193

4.2 Temps de calcul élevé . . . 197
4.2.1 Optimisation avec inertie . . . 198
4.2.2 Gradient accéléré de Nesterov . . . 200
4.2.3 Algorithme du gradient adaptatif (AdaGrad) . . . 201
4.2.4 Estimation adaptative du moment (Adam) . . . 202
4.3 Besoin de grande quantité de données . . . 204
4.3.1 Transfert d'apprentissage . . . 205
4.3.2 Augmentation des données . . . 216
4.3.3 Synthèse de données artificielles . . . 220
4.4 Surapprentissage . . . 221
4.4.1 Arrêt précoce . . . 221
4.4.2 Régularisation . . . 223

5 Chapitre 5 : Réseaux de neurones convolutifs (CNN) 237
5.1 Historique et inspirations . . . 239
5.2 Architecture d'un CNN . . . 243
5.2.1 Couche de convolution . . . 243
5.2.2 Couche de sous-échantillonnage . . . 257
5.2.3 Couche intégralement connectée . . . 266
5.3 Entraînement d'un CNN . . . 266
5.4 Comparaison des réseaux CNN et MLP . . . 271
5.5 Exemples d'architectures de CNN . . . 273
5.5.1 LeNet-5 . . . 273
5.5.2 AlexNet . . . 279
5.5.3 ResNet . . . 286

6 Chapitre 6 : Réseaux de neurones récurrents (RNN) 299
6.1 Historique des RNN . . . 300
6.2 Données séquentielles . . . 302
6.2.1 Types de données séquentielles . . . 302
6.2.2 Représentation des séries temporelles . . . 304
6.2.3 Prétraitement des séries temporelles . . . 307
6.2.4 Problématiques de modélisation des données séquentielles . . . 316
6.3 Architectures des RNN . . . 317
6.4 Réseaux de neurones récurrents simples . . . 319
6.4.1 Couche récurrente . . . 319
6.4.2 Cellule récurrente . . . 320
6.4.3 Dépliement d'un RNN . . . 321
6.4.4 Entraînement d'un RNN simple . . . 323
6.4.5 Réseaux de neurones récurrents profonds . . . 330
6.5 Mémoires à long court terme (LSTM) . . . 331
6.5.1 Architecture des LSTM . . . 332
6.5.2 Entraînement d'un LSTM . . . 336
6.6 Unités récurrentes fermées (GRU) . . . 341
6.6.1 Architecture d'un GRU . . . 343
6.6.2 Entraînement d'un GRU . . . 344

6.7 Réseaux de neurones récurrents bidirectionnels (BiRNN) . . . 348
6.7.1 Architecture du BiRNN . . . 349
6.7.2 Entraînement du BiRNN . . . 350

7 Chapitre 7 : Auto-encodeurs 353
7.1 Historique des auto-encodeurs . . . 355
7.2 Généralités sur les auto-encodeurs . . . 356
7.2.1 Structure des auto-encodeurs . . . 356
7.2.2 Applications des auto-encodeurs . . . 357
7.2.3 Auto-encodeurs empilés (SAE) . . . 358
7.2.4 Auto-encodeur sous-complet et sur-complet . . . 359
7.3 Auto-encodeur de base (AE) . . . 361
7.3.1 Formalisation d'un AE . . . 361
7.3.2 Entraînement d'un AE . . . 362
7.4 Auto-encodeurs débruiteurs (DAE) . . . 369
7.4.1 Formalisation de DAE . . . 370
7.4.2 Fonction de perte pour un DAE . . . 372
7.5 Auto-encodeurs variationnels (VAE) . . . 374
7.5.1 Formalisation d'un VAE . . . 376
7.5.2 Fonction de perte d'un VAE . . . 378
7.5.3 Astuce de reparamétrisation . . . 379
7.5.4 Entraînement d'un VAE . . . 380

8 Chapitre 8 : Modèles génératifs 389
8.1 Historique des modèles génératifs . . . 391
8.2 Classification des modèles génératifs . . . 393
8.2.1 Modèles génératifs probabilistes classiques . . . 394
8.2.2 Réseaux de neurones génératifs . . . 394
8.3 Modèles de Markov cachés (HMM) . . . 396
8.4 Modèles de mélanges gaussiens (GMM) . . . 397
8.4.1 Fondements théoriques des GMM . . . 397
8.4.2 Entraînement des GMM . . . 397
8.4.3 Génération de données avec GMM . . . 399
8.5 Réseaux génératifs antagonistes (GAN) . . . 402
8.5.1 Principe des GAN . . . 404
8.5.2 Entraînement et optimisation des GAN . . . 404
8.5.3 Différences conceptuelles entre la génération de données avec les modèles GMM et les GAN . . . 407
8.6 Auto-encodeur variationnel (VAE) . . . 416
8.6.1 Formulation probabiliste d'un VAE . . . 416
8.6.2 Entraînement d'un VAE . . . 417
8.6.3 Comparaison entre un VAE orienté reconstruction et un VAE orienté génération . . . 419
8.7 Modèles probabilistes de débruitage par diffusion (DDPM) . . . 425
8.7.1 Processus de diffusion avant . . . 427
8.7.2 Processus de diffusion inverse . . . 428

8.7.3 Fonction de perte et entraînement des DDPM 428
8.7.4 Génération de données avec un modèle DDPM 431
8.7.5 Exemples de modèles basés sur les DDPM 438

Mot de fin **441**