Approches mathématiques du machine learning

Gilles Stoltz

Directeur de recherche CNRS

au Laboratoire de mathématiques d'Orsay

(unité mixte de recherche Université Paris-Sud / CNRS)

Exemple des bandits stochastiques

Bandits stochastiques à K bras

K–uplet de lois de paiements $\underline{\nu} = (\nu_1, \ldots, \nu_K)$
d'espérances $\mu_1, \ldots, \mu_K$ $\longrightarrow$ $\mu^\star = \max_{k=1,\ldots,K} \mu_k$

A chaque tour $t = 1, 2, \ldots,$
1. La statisticienne choisit un bras $I_t \in \{1, \ldots, K\}$
2. Elle reçoit un paiement Y_t de loi ν_{I_t} conditionnellement à I_t
3. Ce paiement est le seul retour sur son choix

$\longrightarrow$ Dilemme exploration–exploitation
estimer les lois ν_k vs. obtenir de bons paiements Y_t

Regret : $$R_T = \sum_{t=1}^{T} \big(\mu^\star - \mathbb{E}[Y_t]\big)$$

Extension au cas de contextes $\longrightarrow$ sélection de publicités, traitements médicaux, etc.

Résultats fondateurs entre 1985 et 2002 revus et améliorés

1. Création d'algorithmes p.ex. de la forme

$$I_t \in \underset{j \in \{1,\dots,K\}}{\arg\max} \quad \underbrace{\widehat{\mu}_j(t) + \sqrt{\frac{\ln t}{N_j(t)}}}_{\text{moyenne empirique + bonus d'exploration}}$$

2. Dérivation de bornes supérieures sur le regret de ces algorithmes

distribution-dependent	$R_T \leqslant C(\underline{\nu}) \ln T$
distribution-free	$\sup_{\underline{\nu} \text{ sur } [0,1]} R_T \leqslant 50\sqrt{KT}$

3. Dérivation de bornes inférieures sur le regret de tout algorithme

Résultats fondateurs entre 1985 et 2002 revus et améliorés

$\longrightarrow$ Focus sur les bornes inférieures

Pour tout modèle $\mathcal{D}$,
pour tout algorithme « raisonnable »,
pour tout problème de bandits $\underline{\nu} \in \mathcal{D}$,

$$\liminf \frac{R_T}{\ln T} \geqslant \sum_{a=1}^{K} \frac{\mu^\star - \mu_a}{\mathcal{K}_{\inf}(\nu_a, \mu^\star, \mathcal{D})},$$

où $\mathcal{K}_{\inf}(\nu_a, \mu^\star, \mathcal{D}) = \inf\left\{\mathrm{KL}(\nu_a, \nu'_a) : \nu'_a \in \mathcal{D} \text{ t.q. } \mu'_a > \mu^\star\right\}$

Preuve : Pour toute v.a. Z à valeurs dans $[0,1]$ et mesurable en l'information H_T disponible à la fin du tour T,

$$\sum_{k=1}^{K} \mathbb{E}_{\underline{\nu}}[N_k(T)]\, \mathrm{KL}(\nu_k, \nu'_k) = \mathrm{KL}\left(\mathbb{P}_{\underline{\nu}}^{H_T}, \mathbb{P}_{\underline{\nu}'}^{H_T}\right) \geqslant \mathrm{kl}\left(\mathbb{E}_{\underline{\nu}}[Z], \mathbb{E}_{\underline{\nu}'}[Z]\right)$$

Résultats fondateurs entre 1985 et 2002 revus et améliorés

$\longrightarrow$ Focus sur les bornes inférieures

Pour tout algorithme (même non raisonnable),

$$\sup_{\underline{\nu} \text{ sur } [0,1]} R_T \geqslant \frac{1}{20}\sqrt{KT}$$

A noter : écart 1 000 entre 50 et 1/20 $\longrightarrow$ à améliorer

Preuve : Pour toute v.a. Z à valeurs dans $[0,1]$ et mesurable en l'information H_T disponible à la fin du tour T,

$$\sum_{k=1}^{K} \mathbb{E}_{\underline{\nu}}[N_k(T)]\,\mathrm{KL}(\nu_k, \nu_k') = \mathrm{KL}\Big(\mathbb{P}_{\underline{\nu}}^{H_T}, \mathbb{P}_{\underline{\nu}'}^{H_T}\Big) \geqslant \mathrm{kl}\big(\mathbb{E}_{\underline{\nu}}[Z], \mathbb{E}_{\underline{\nu}'}[Z]\big)$$

L'approche de la mathématicienne

Quatre étapes

1. Cadre et objectif de prévision (= modélisation)
2. Enoncé d'un algorithme,
   si possible computationnellement efficace
3. Borne supérieure de performance sur le critère
4. Optimalité : borne inférieure pour tout algorithme

Difficulté de chaque étape variable selon les problèmes

Parfois l'étape 1 est la plus difficile

Particulièrement vrai pour problèmes industriels : savoir par quel bout le prendre

Mathématicienne = particulièrement intéressée par l'optimalité

Sujet typique au LMO : apprentissage statistique

1. Cadre et objectif

Données (x_j, y_j) modélisées comme la réalisation de (X_j, Y_j) i.i.d.

Prévoir étiquette Y pour nouveau contexte X

Y à valeurs 0–1 ou dans $\mathbb{R}$

Fonction de perte $\ell : \mathcal{X} \times \mathcal{Y} \to \mathbb{R}_+$

Ensemble $\mathcal{F}$ de prédicteurs $\longrightarrow$ trouver le meilleur dans $\mathcal{F}$

I.e., construire $\widehat{f}_n \in \mathcal{F}$ tel que

$$\mathbb{E}\Big[\ell\big(\widehat{f}_n(X),\ Y\big)\Big] \qquad \text{proche de} \qquad \inf_{f \in \mathcal{F}} \mathbb{E}\Big[\ell\big(f(X),\ Y\big)\Big]$$

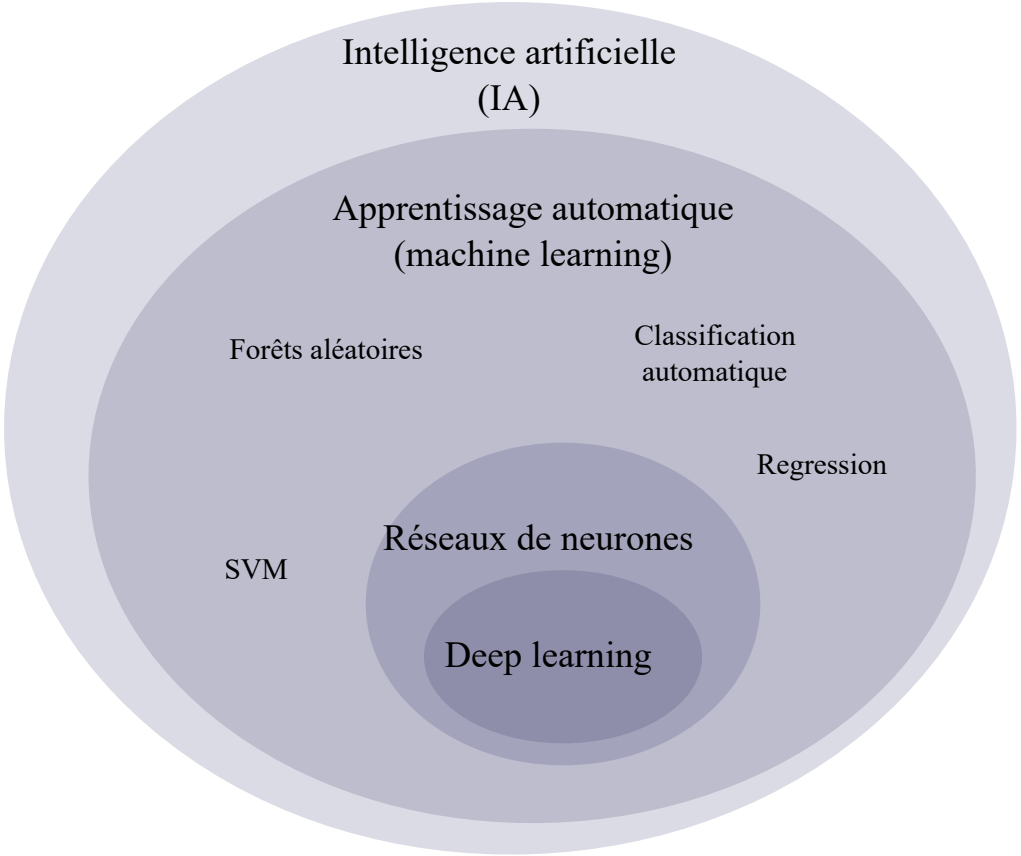
2. Algorithme ?

« Empirical risk minimizer » $\longrightarrow$ NP-difficile à calculer

Exemple de difficulté quant à 3. Borne supérieure de performance

Forêts aléatoires (cf. travaux au LMO et au CMAP en ce sens)

Deep learning



La mathématicienne veut établir des garanties de performance

Dernier challenge relevé au LMO (résolu le mois dernier !) :

4. Adaptation optimale à la régularité de Hölder en bandits

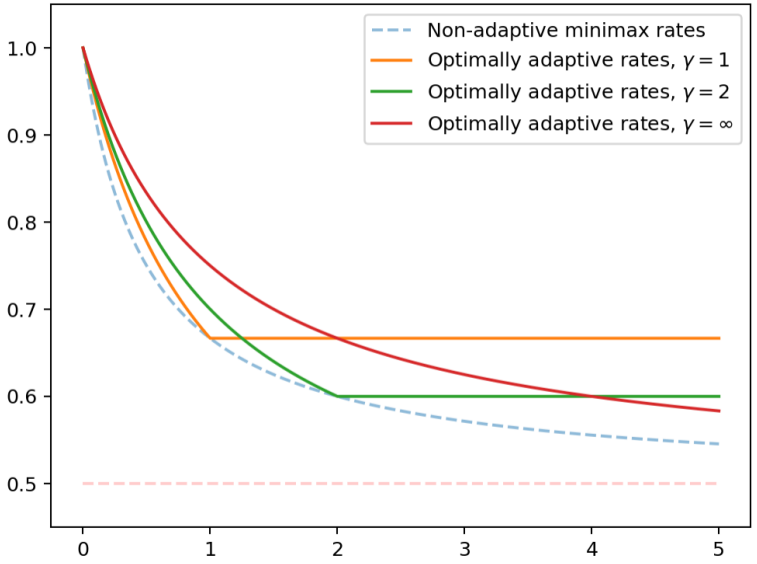
Cadre : Bandits stochastiques indexés par intervalle $[a, b]$

Fonction de paiement f régulière : α–Hölder avec constante L

Mais α et L inconnus ; s'ils étaient connus,

$$R_T \leqslant \mathcal{O}\big(L^{1/(2\alpha+1)}\, T^{(\alpha+1)/(2\alpha+1)}\big)$$

cf. courbe bleue pointillés ; mais prix à payer, en puissances de T (surprenant !)



Conclusion (s'il en fallait une)

Mathématiciens focalisés sur « core AI »

= analyse mathématique des méthodes de machine learning

Travail principal = produire des théorèmes

= bornes supérieures et bornes inférieures sur la performance d'algorithme (si possible « matching »)

Mais aussi

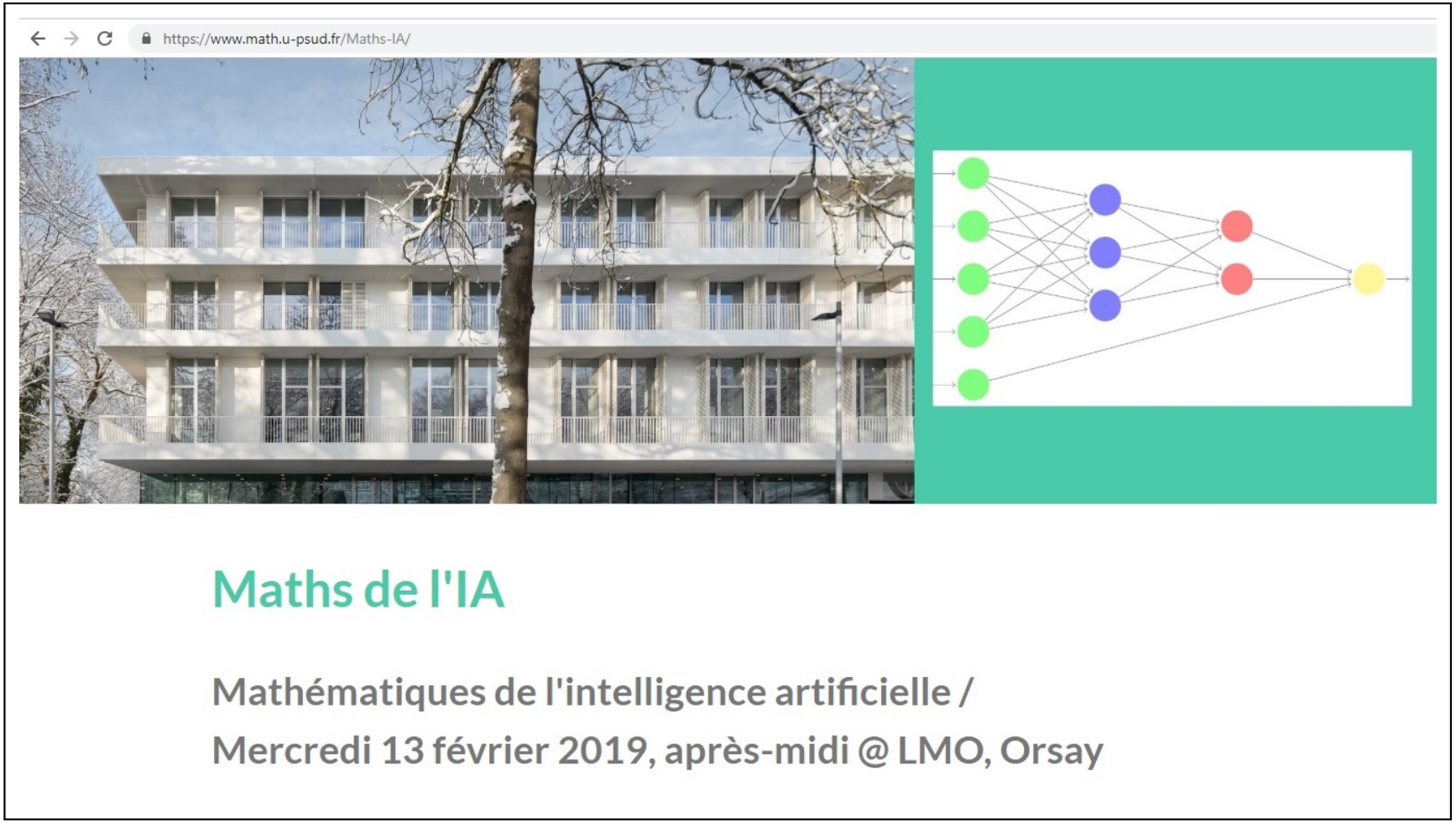
- intérêt au côté computationnel
- écriture de packages R et Python
- collaborations industrielles

En France : machine learning traité dans les laboratoires d'informatique et de mathématiques avec une approche un peu différente

Mais on croise majoritairement des collègues de « computer science » dans les conférences NIPS, COLT, ICML

Beaucoup de postes académiques encore à pourvoir !

Tout doctorat de mathématiques permet de briller en IA, cf.



Vidéos sur le site du LMO $\longrightarrow$ `www.math.u-psud.fr/Maths-IA`

Ex : Jérôme Pesenti, VP IA de FaceBook et ancien du LMO