

---

# Principe et Applications du Machine Learning (2)

 **Corentin Allaire**

Remerciement à **David Rousseau** et **Françoise Bouvet** pour une partie des figures

# A quoi s'attendre

---

## Machine Learning :

- Concepts fondamentaux de « L'IA »
- Les différentes techniques de Machine Learning :
  - Supervisé
  - Non-supervisé
- Application à la recherche du boson de Higgs

## Deep Learning :

- Brève histoire du réseau de neurones
- Les différentes techniques de Deep Learning :
  - Perceptron multi-couche
  - L'auto-encoder
  - Réseaux à base de graphe
- Application à la reconstruction d'objet en physique des hautes énergies

# A quoi s'attendre

---

## Machine Learning :

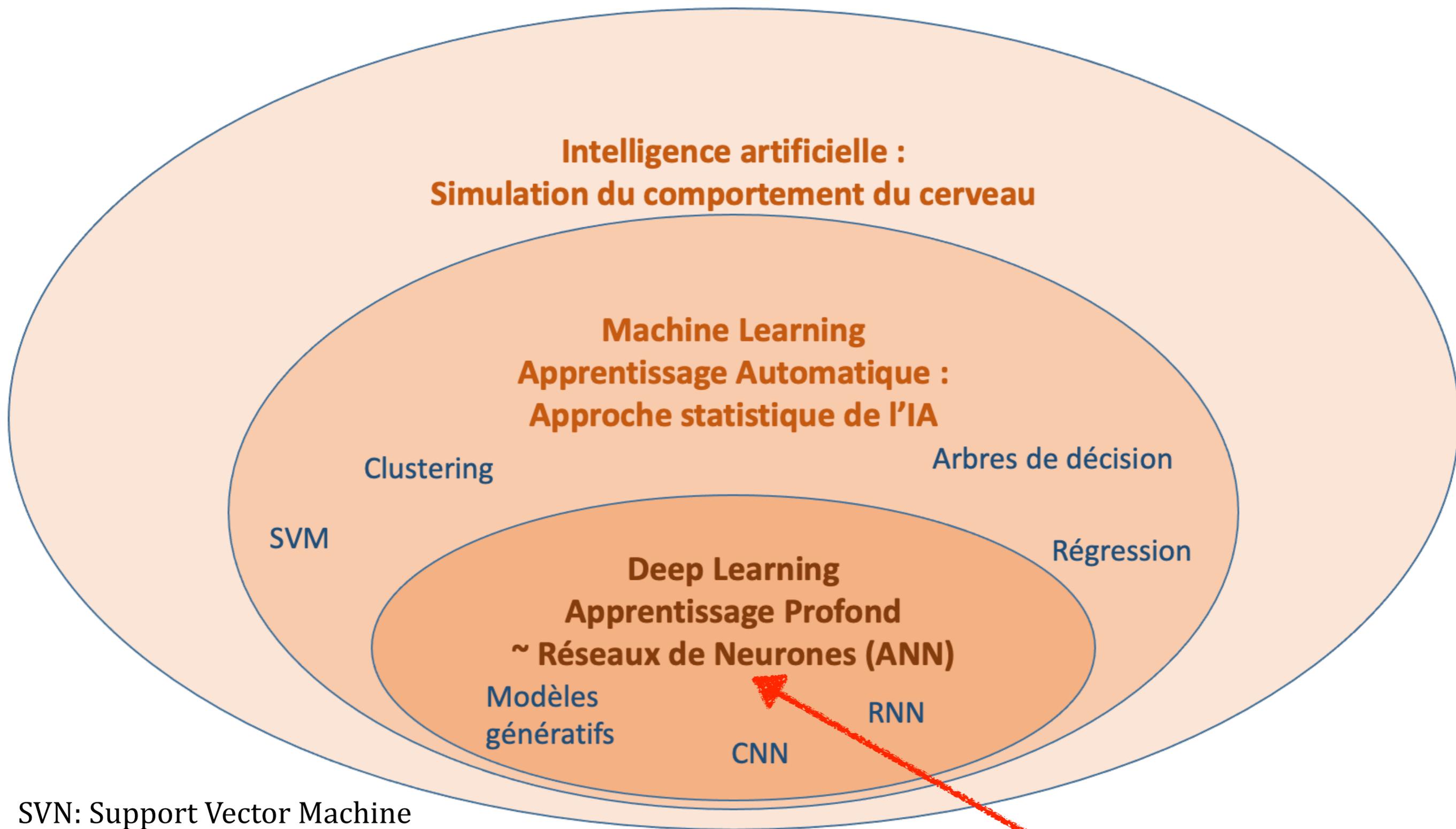
- Concepts fondamentaux de « L'IA »
- Les différentes techniques de Machine Learning :
  - Supervisé
  - Non-supervisé
- Application à la recherche du boson de Higgs

## Deep Learning :

- Brève histoire du réseau de neurones
- Les différentes techniques de Deep Learning :
  - Perceptron multi-couche
  - L'auto-encoder
  - Réseaux à base de graphe
- Application à la reconstruction d'objet en physique des hautes énergies

Aujourd'hui

# Une question de nomenclature



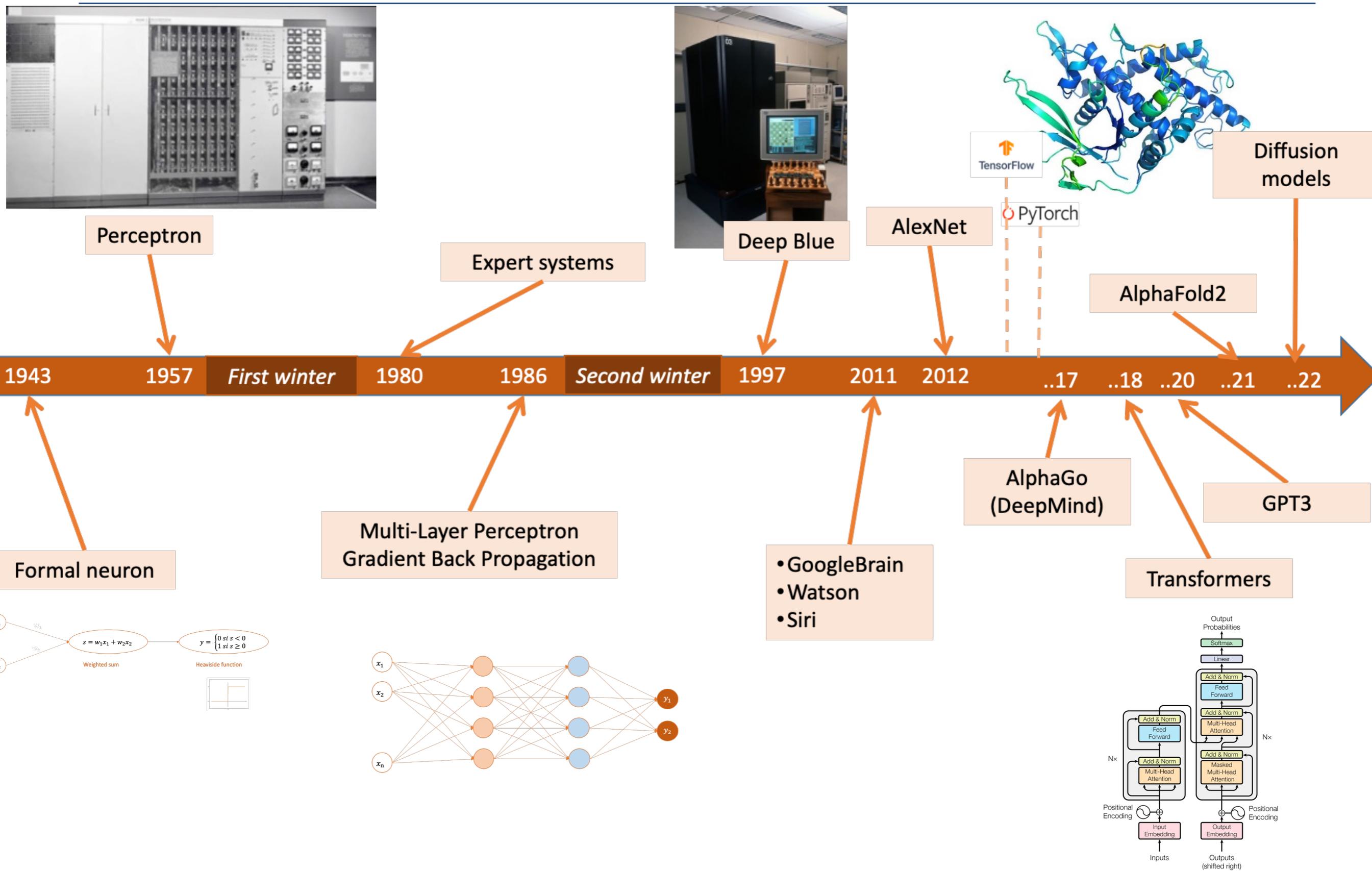
SVM: Support Vector Machine

CNN: Convolution NN

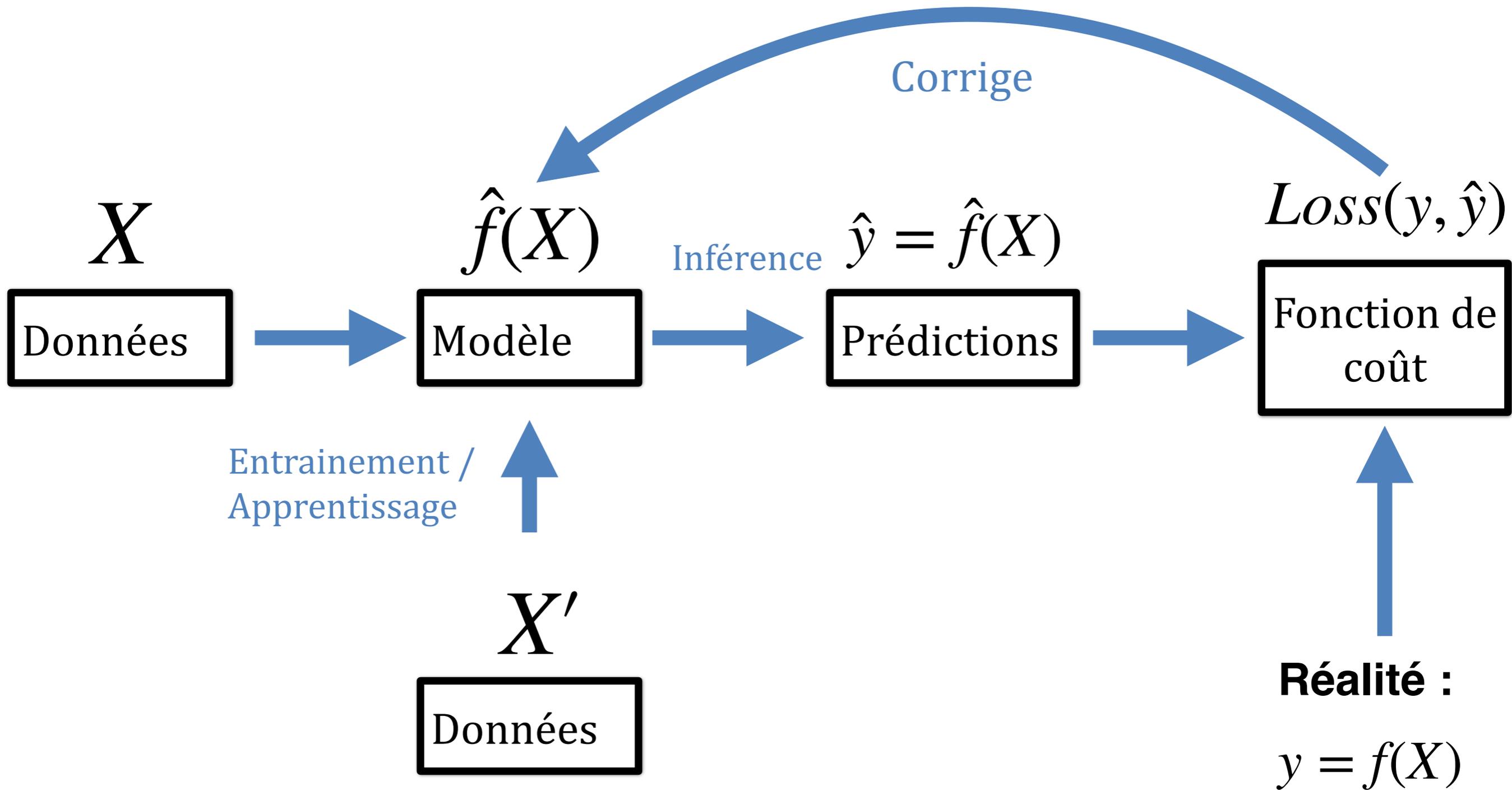
RNN: Recurrent NN

**Aujourd'hui**

# Une brève histoire du Deep Learning

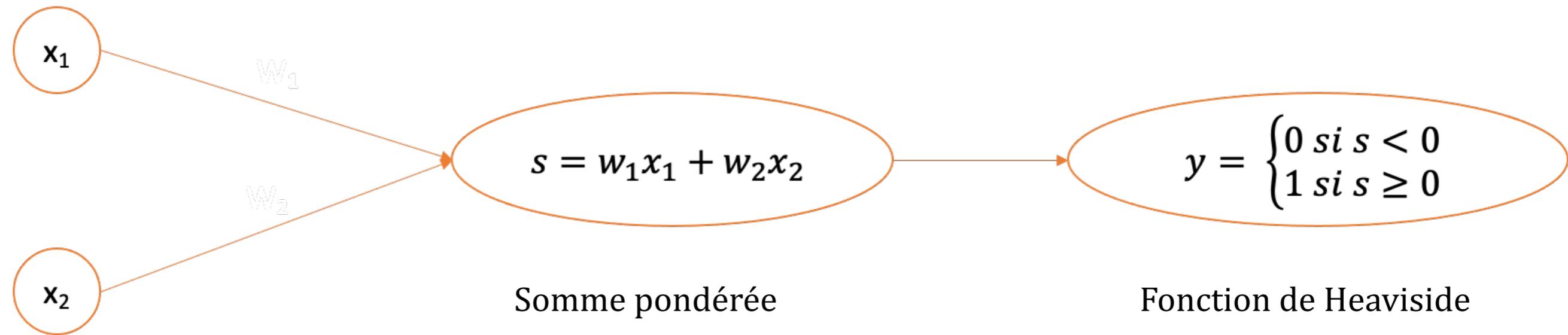


# Entraînement supervisé



# Le neurone formel

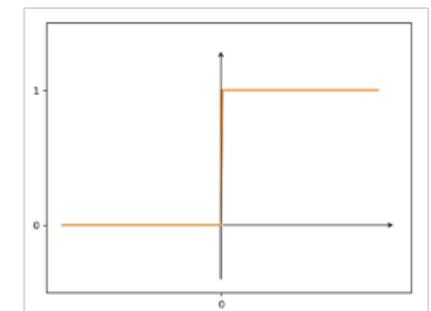
**Idée** : Crée une construction mathématique qui « simule » les **neurones biologiques**



Entrées

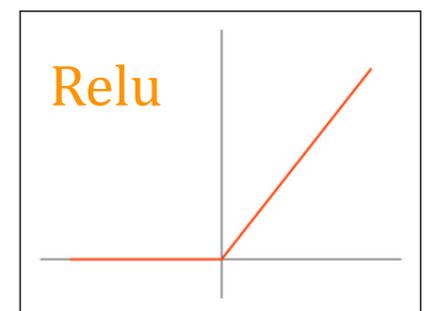
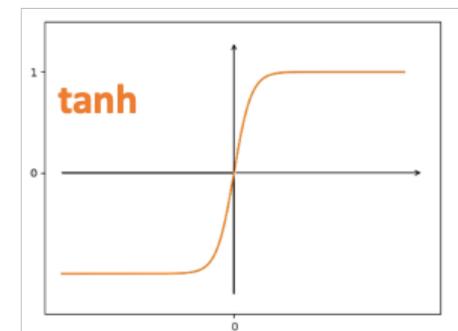
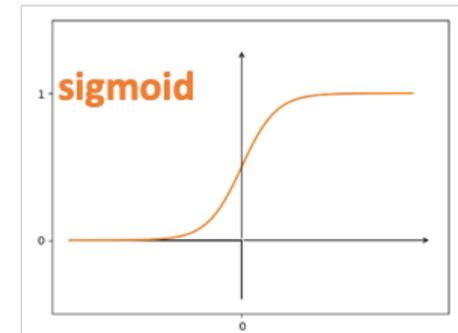
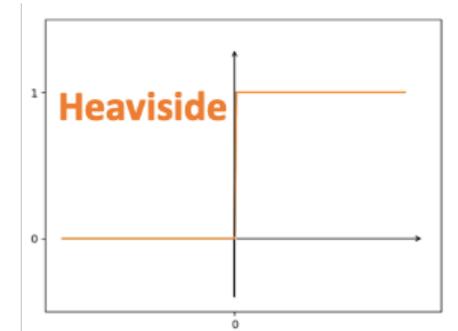
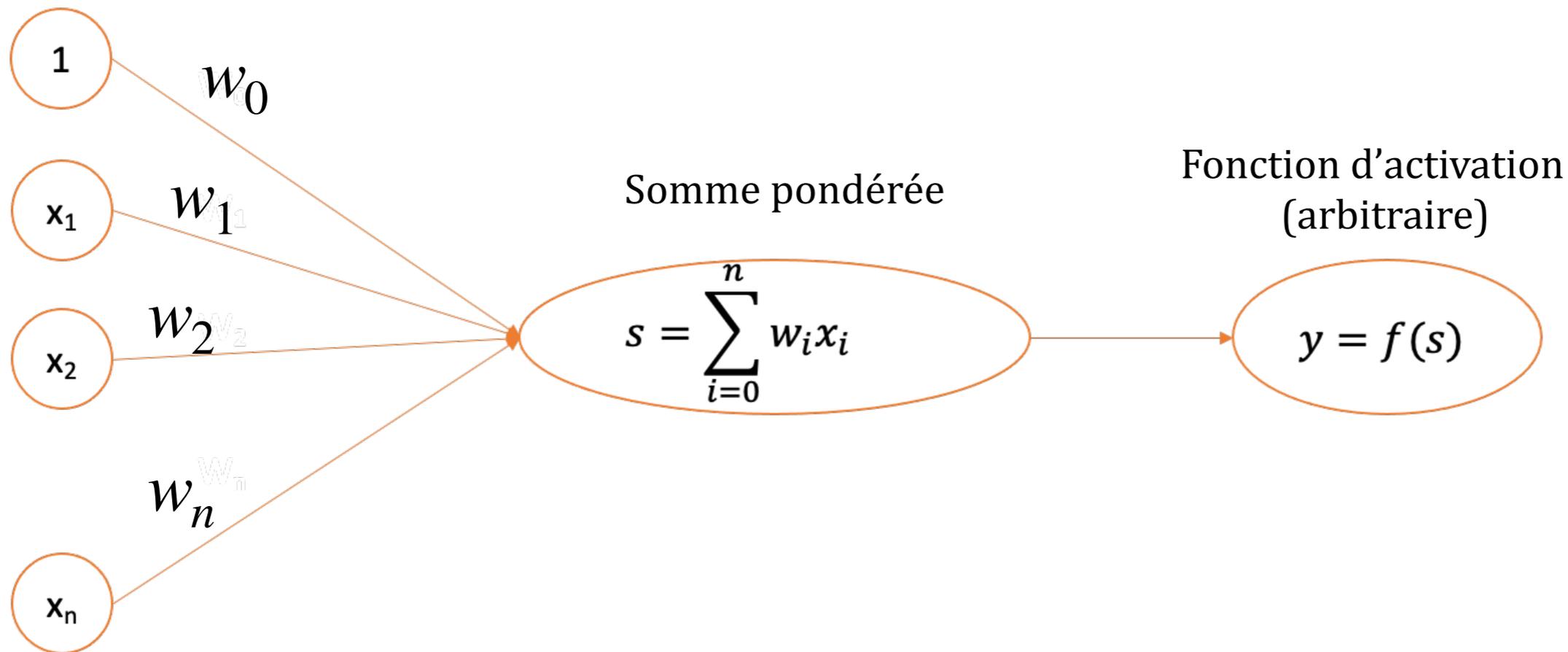
1943 : McCulloch & Pitts

Fonction de Heaviside



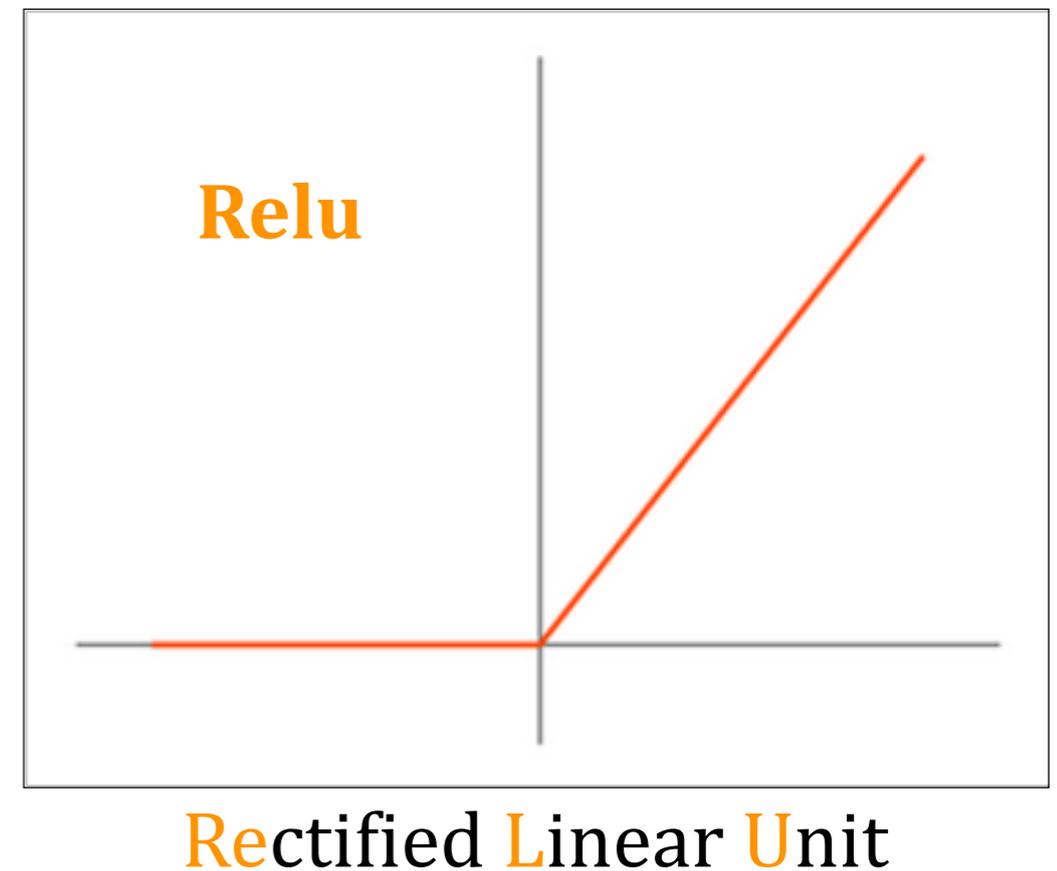
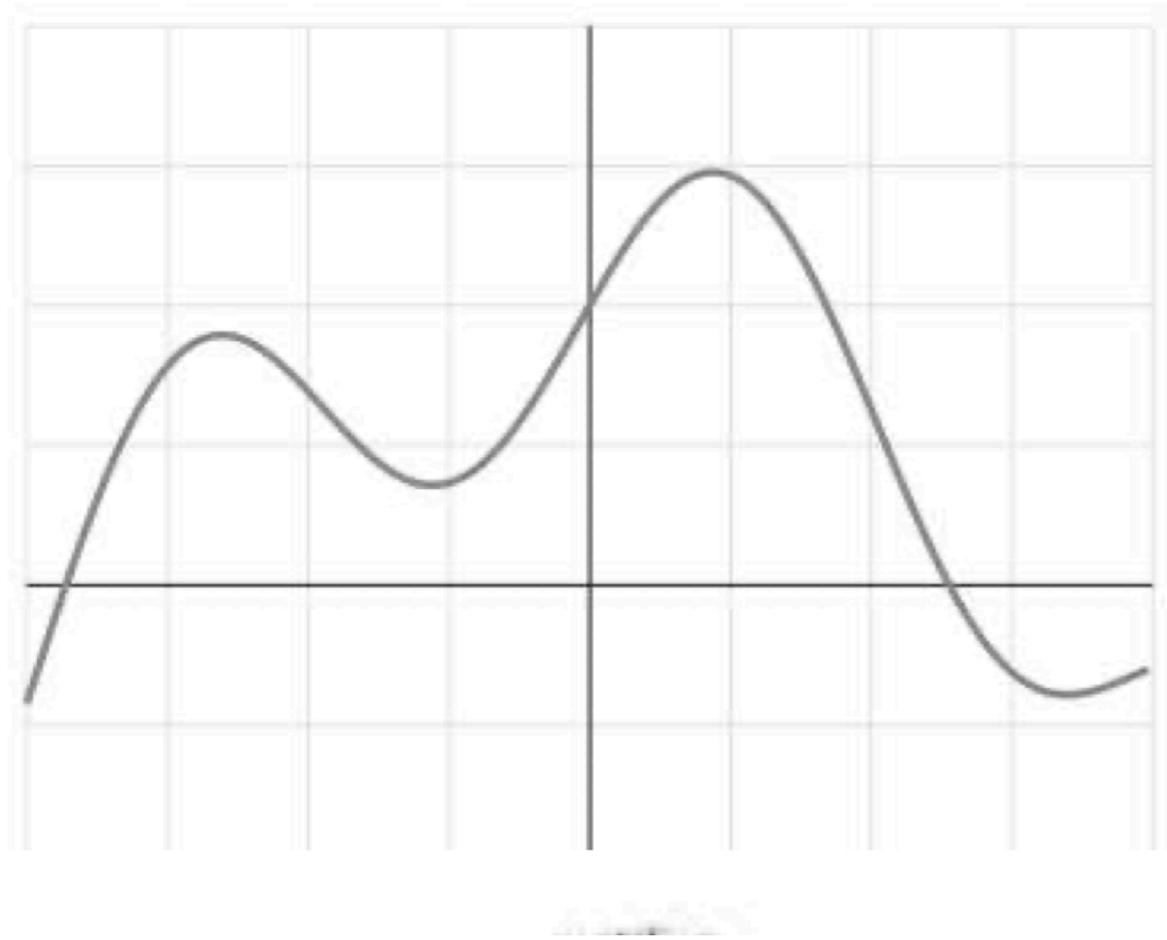
- Retourne uniquement des entrée **booléennes** (0,1)
- Assemblage de neurone : **Turing complets**

# Le neurone formel : généralisation



- Nombre d'entrées arbitraire
- Addition d'une constante par neurone :  $w_0$
- **Fonction d'activation** appliquée au résultat du neurone : différents intervalles de valeur possible

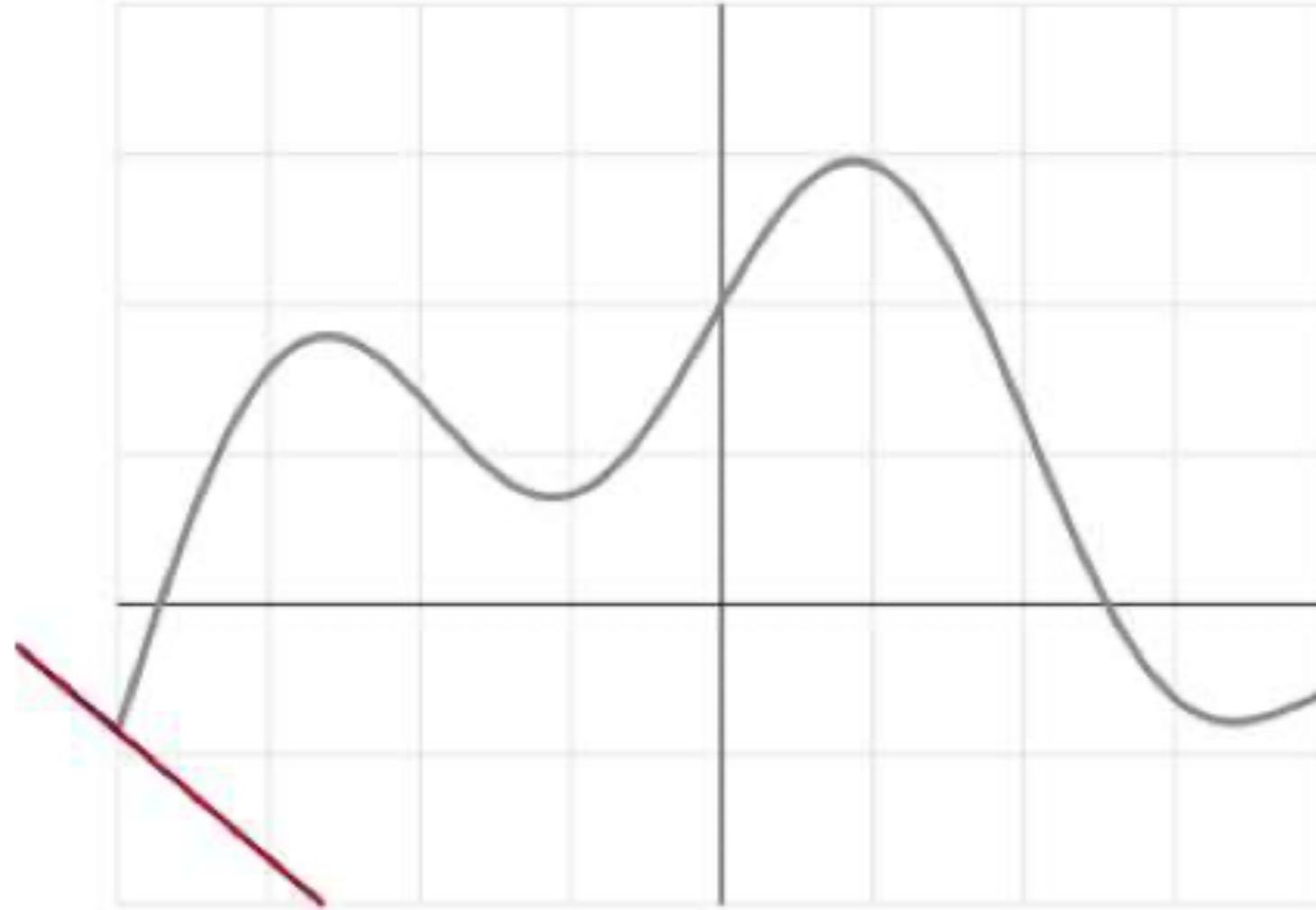
# Le neurone formel : approximateur universel



- Toute fonction mathématique réelle peut être **approximée** comme une **somme de fonction Relu** translaté
- Les réseaux de neurones sont peuvent naturellement remplir ce rôle

# Le neurone formel : approximateur universel

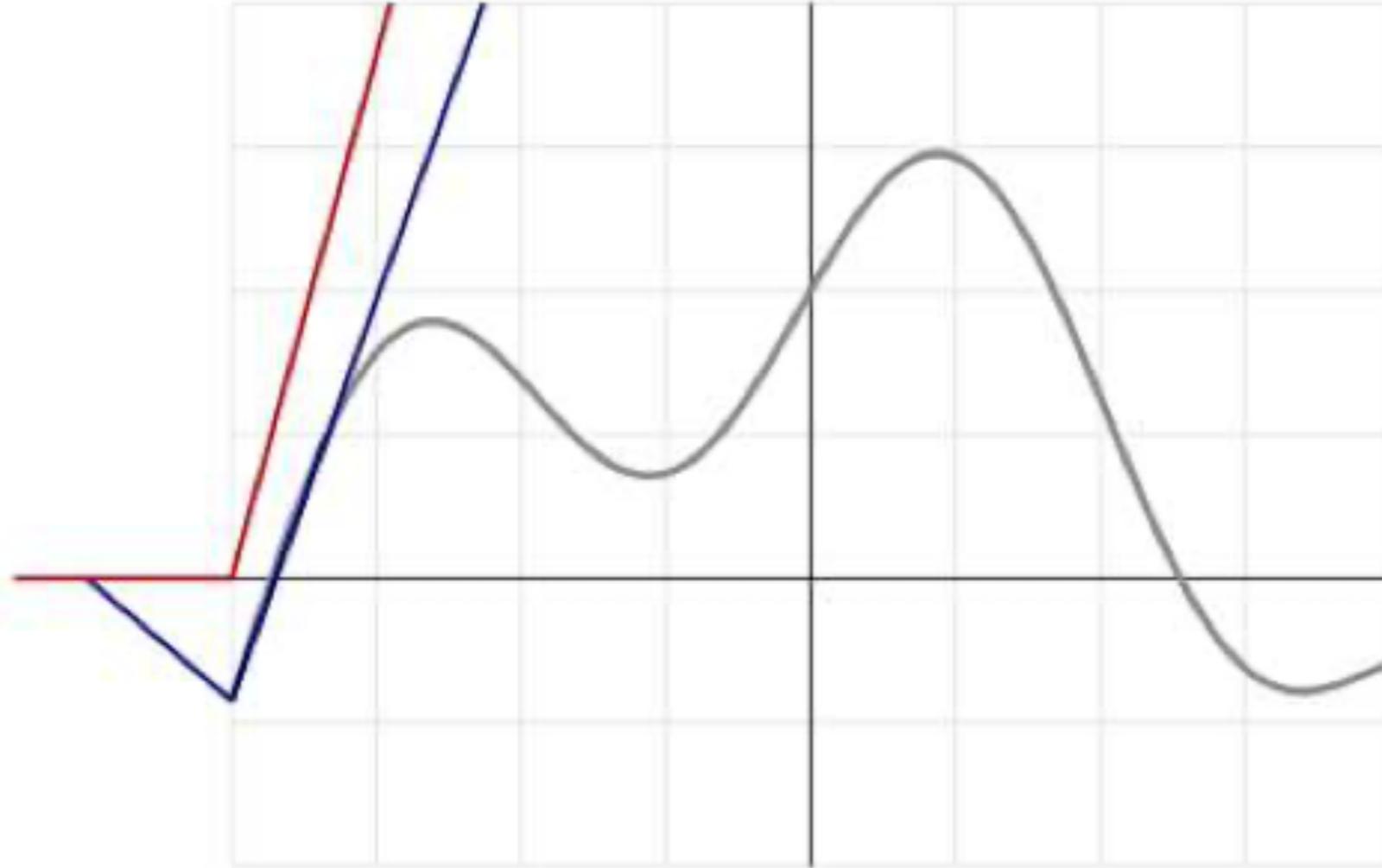
---



- Toute fonction mathématique réelle peut être **approximée** comme une **somme de fonction ReLU** translaté
- Les réseaux de neurones sont peuvent naturellement remplir ce rôle

# Le neurone formel : approximateur universel

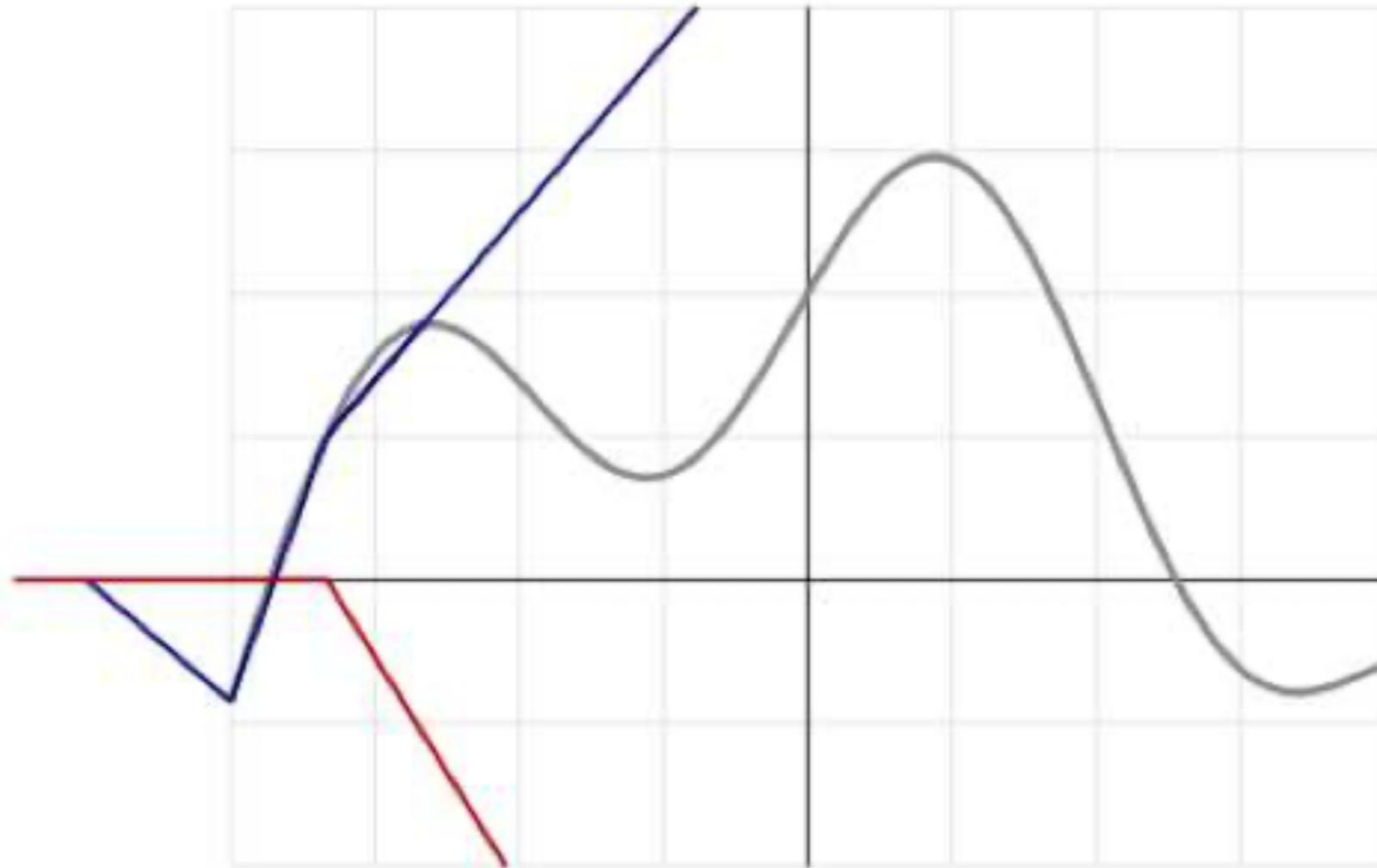
---



- Toute fonction mathématique réelle peut être **approximée** comme une **somme de fonction ReLU** translaté
- Les réseaux de neurones sont peuvent naturellement remplir ce rôle

# Le neurone formel : approximateur universel

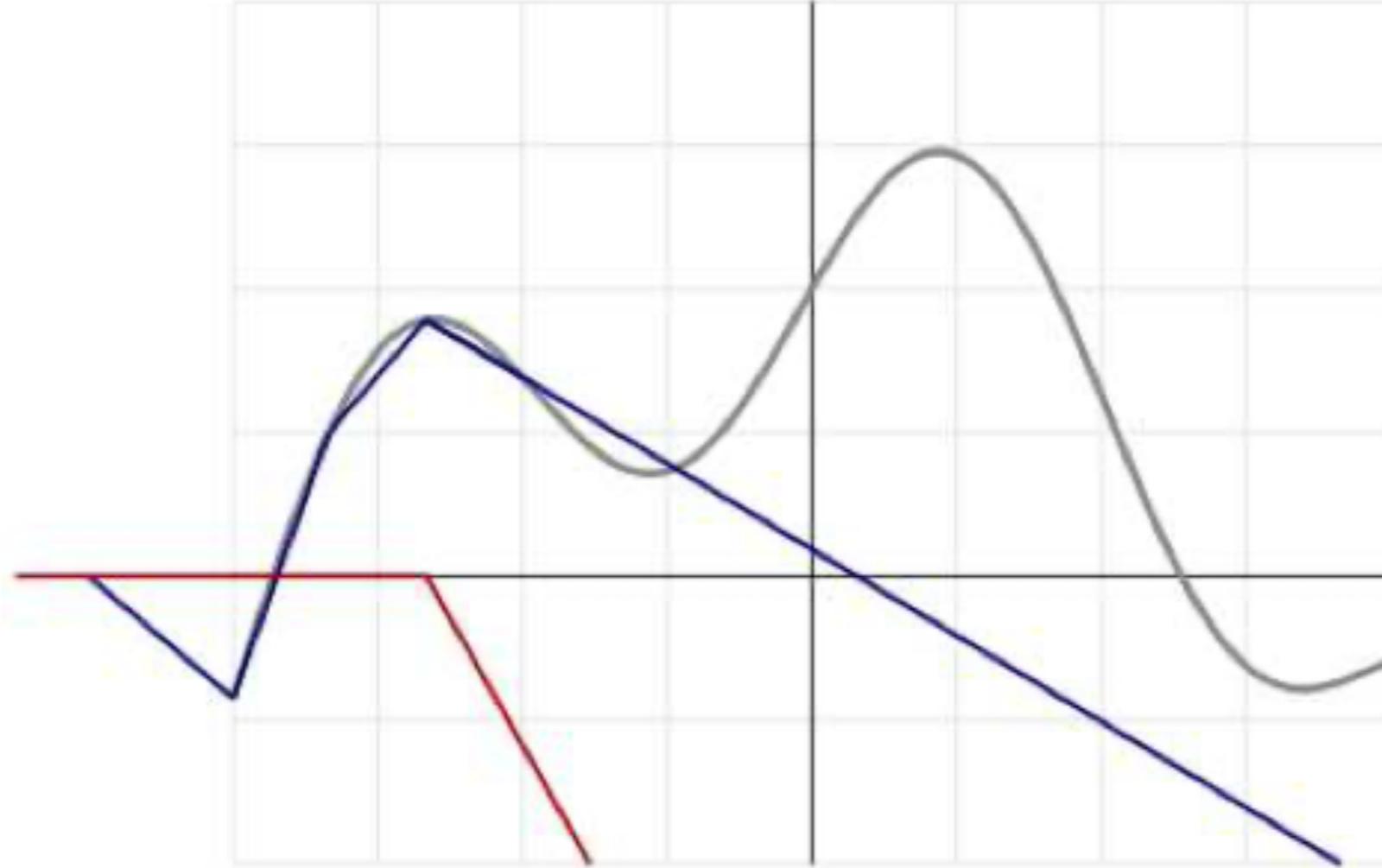
---



- Toute fonction mathématique réelle peut être **approximée** comme une **somme de fonction ReLU** translaté
- Les réseaux de neurones sont peuvent naturellement remplir ce rôle

# Le neurone formel : approximateur universel

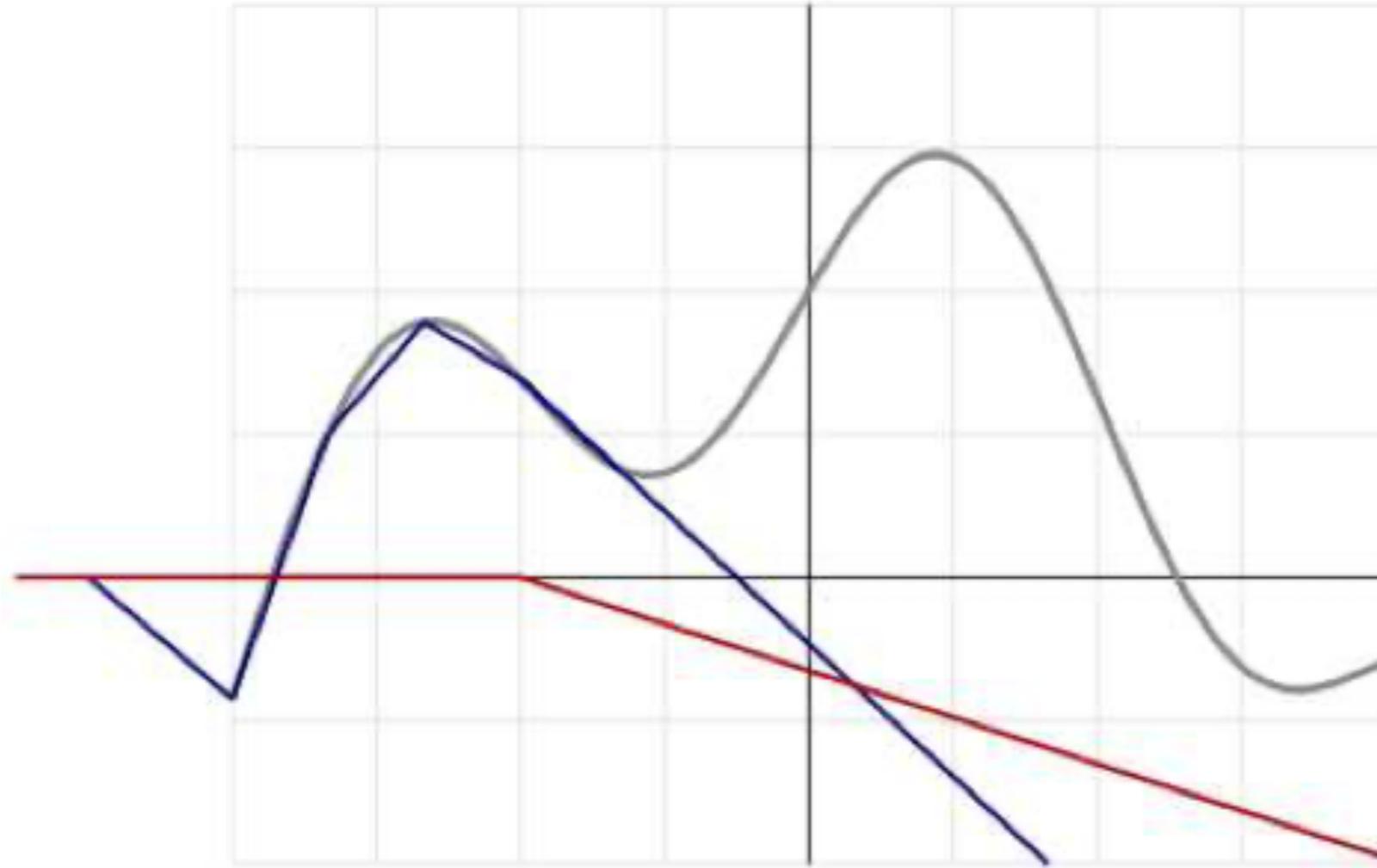
---



- Toute fonction mathématique réelle peut être **approximée** comme une **somme de fonction ReLU** translaté
- Les réseaux de neurones sont peuvent naturellement remplir ce rôle

# Le neurone formel : approximateur universel

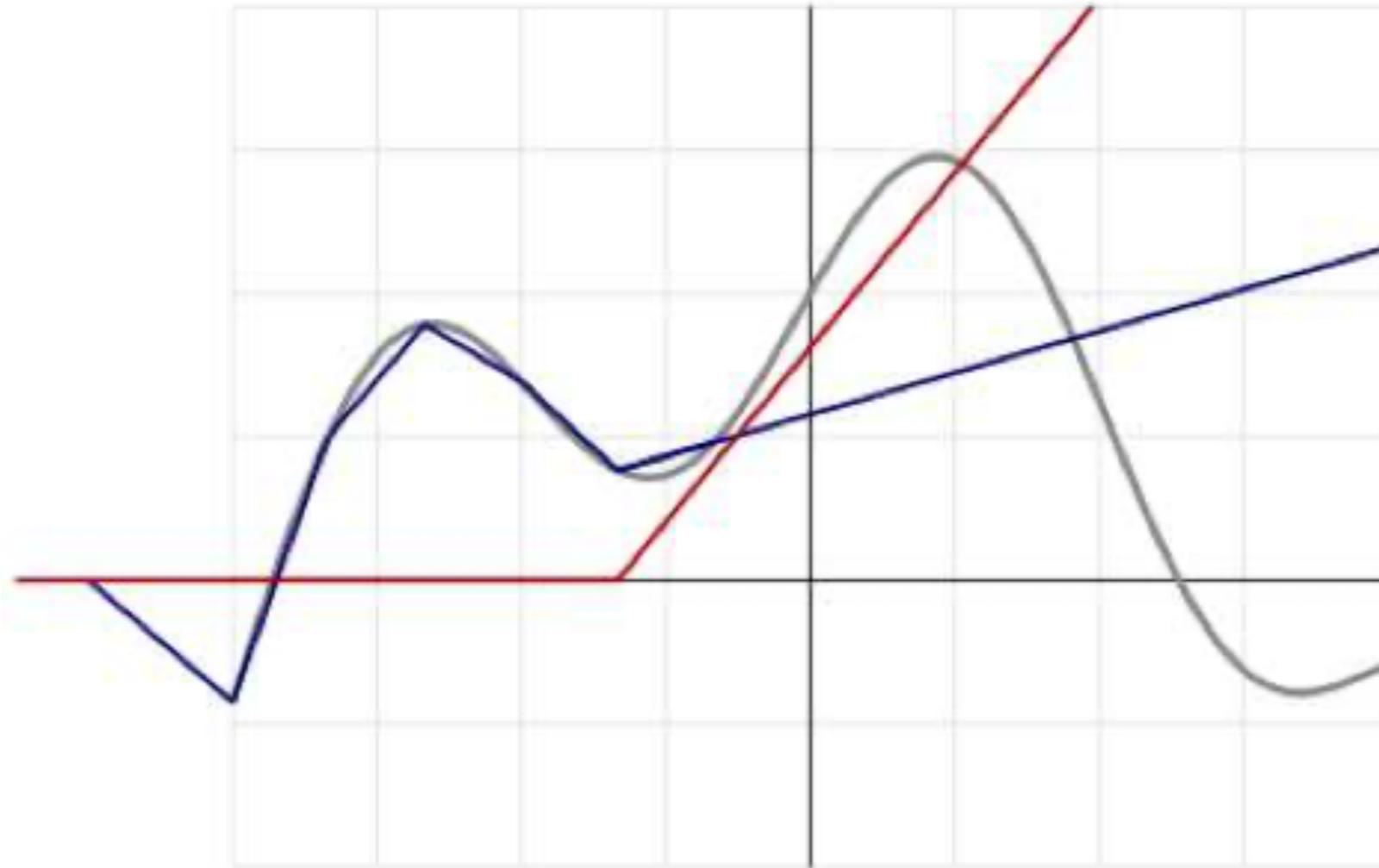
---



- Toute fonction mathématique réelle peut être **approximée** comme une **somme de fonction ReLU** translaté
- Les réseaux de neurones sont peuvent naturellement remplir ce rôle

# Le neurone formel : approximateur universel

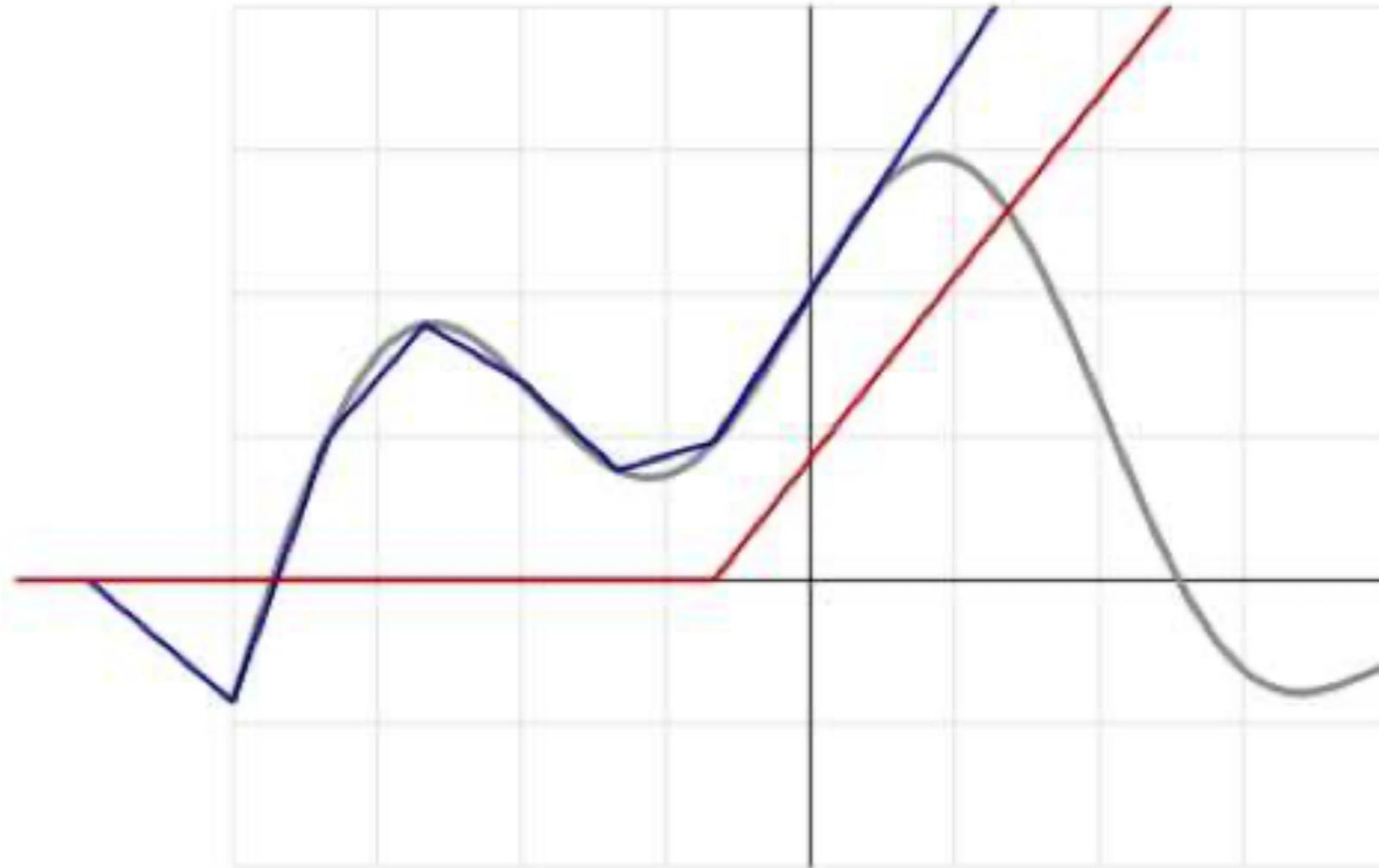
---



- Toute fonction mathématique réelle peut être **approximée** comme une **somme de fonction ReLU** translaté
- Les réseaux de neurones sont peuvent naturellement remplir ce rôle

# Le neurone formel : approximateur universel

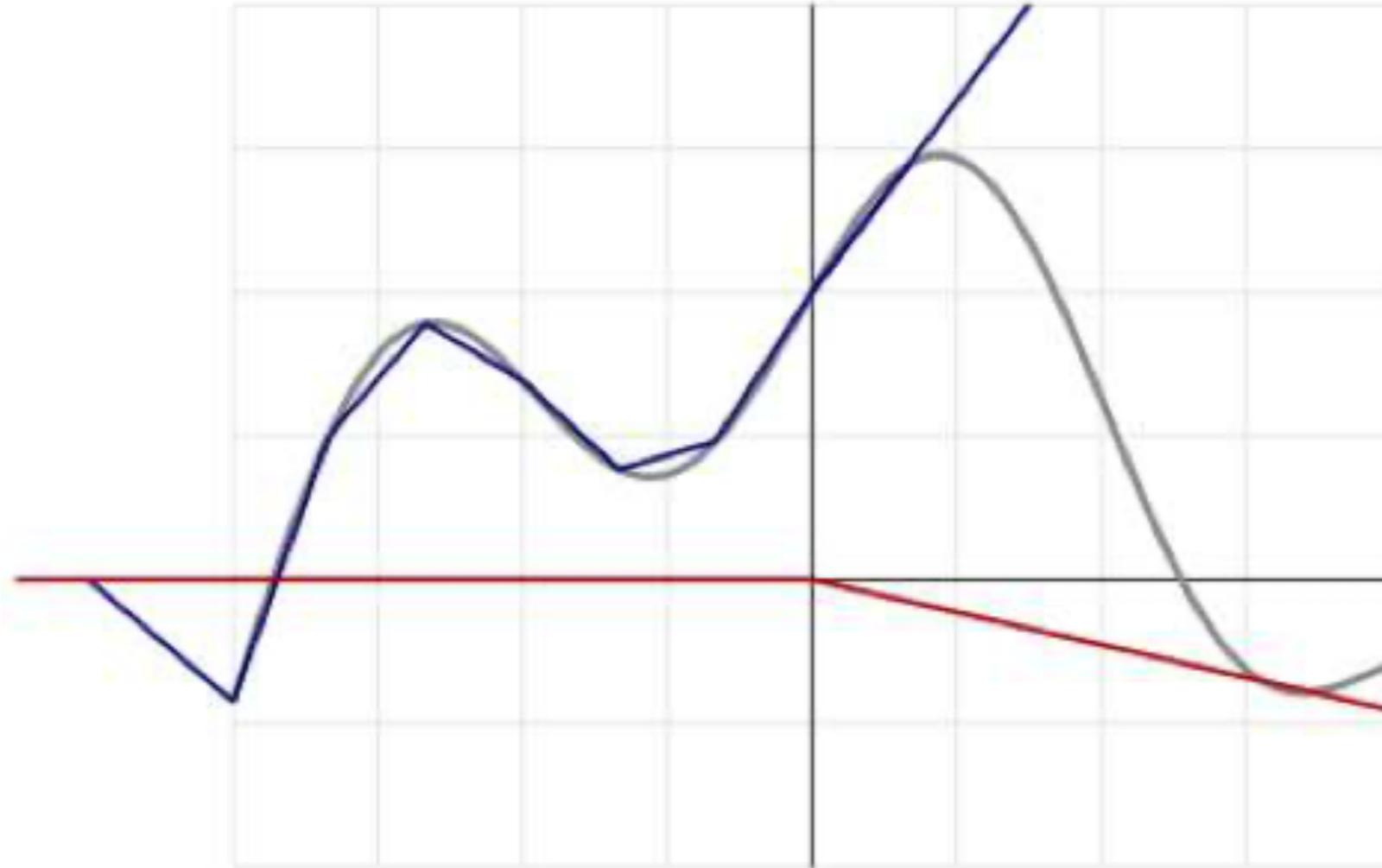
---



- Toute fonction mathématique réelle peut être **approximée** comme une **somme de fonction ReLU** translaté
- Les réseaux de neurones sont peuvent naturellement remplir ce rôle

# Le neurone formel : approximateur universel

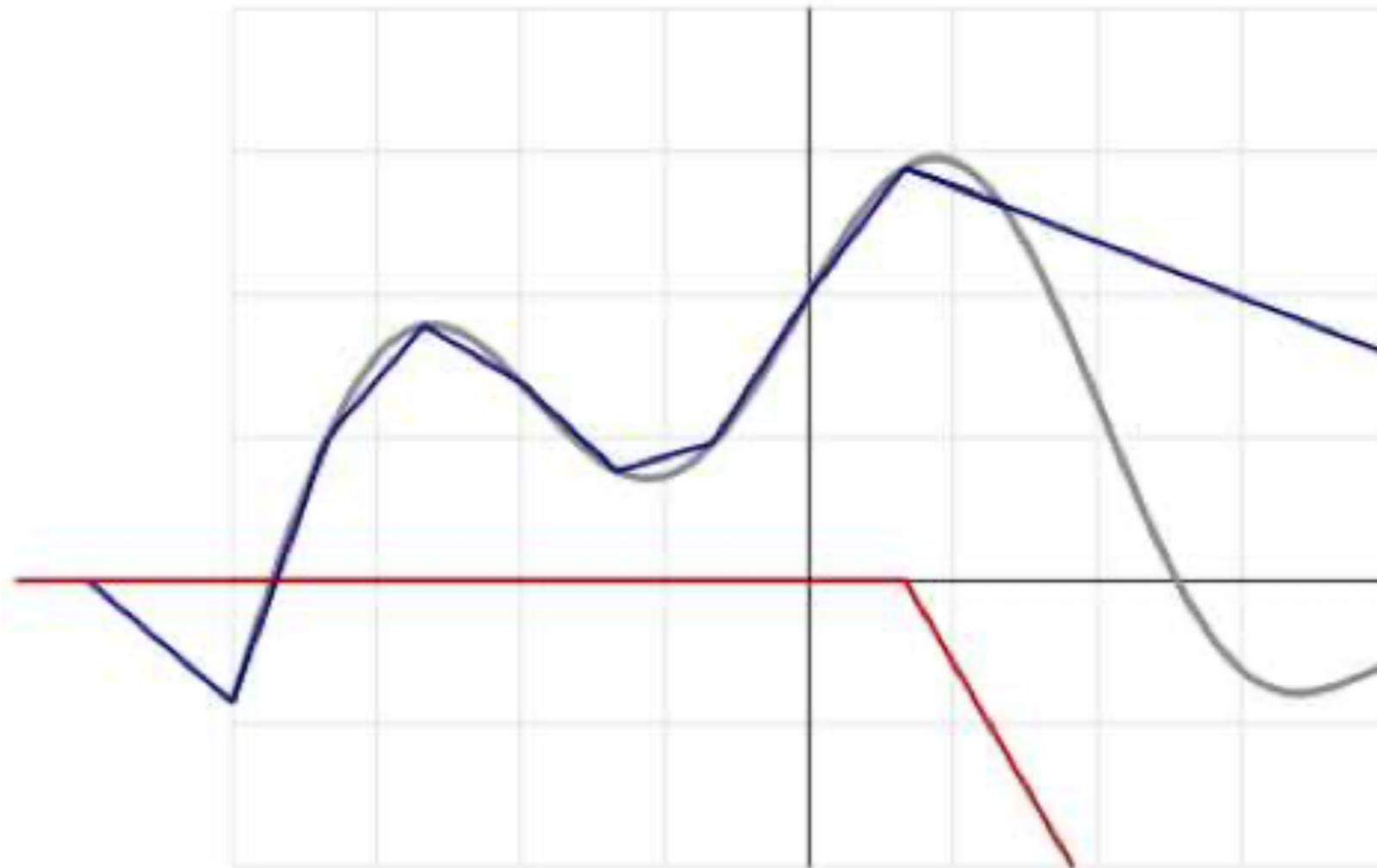
---



- Toute fonction mathématique réelle peut être **approximée** comme une **somme de fonction ReLU** translaté
- Les réseaux de neurones sont peuvent naturellement remplir ce rôle

# Le neurone formel : approximateur universel

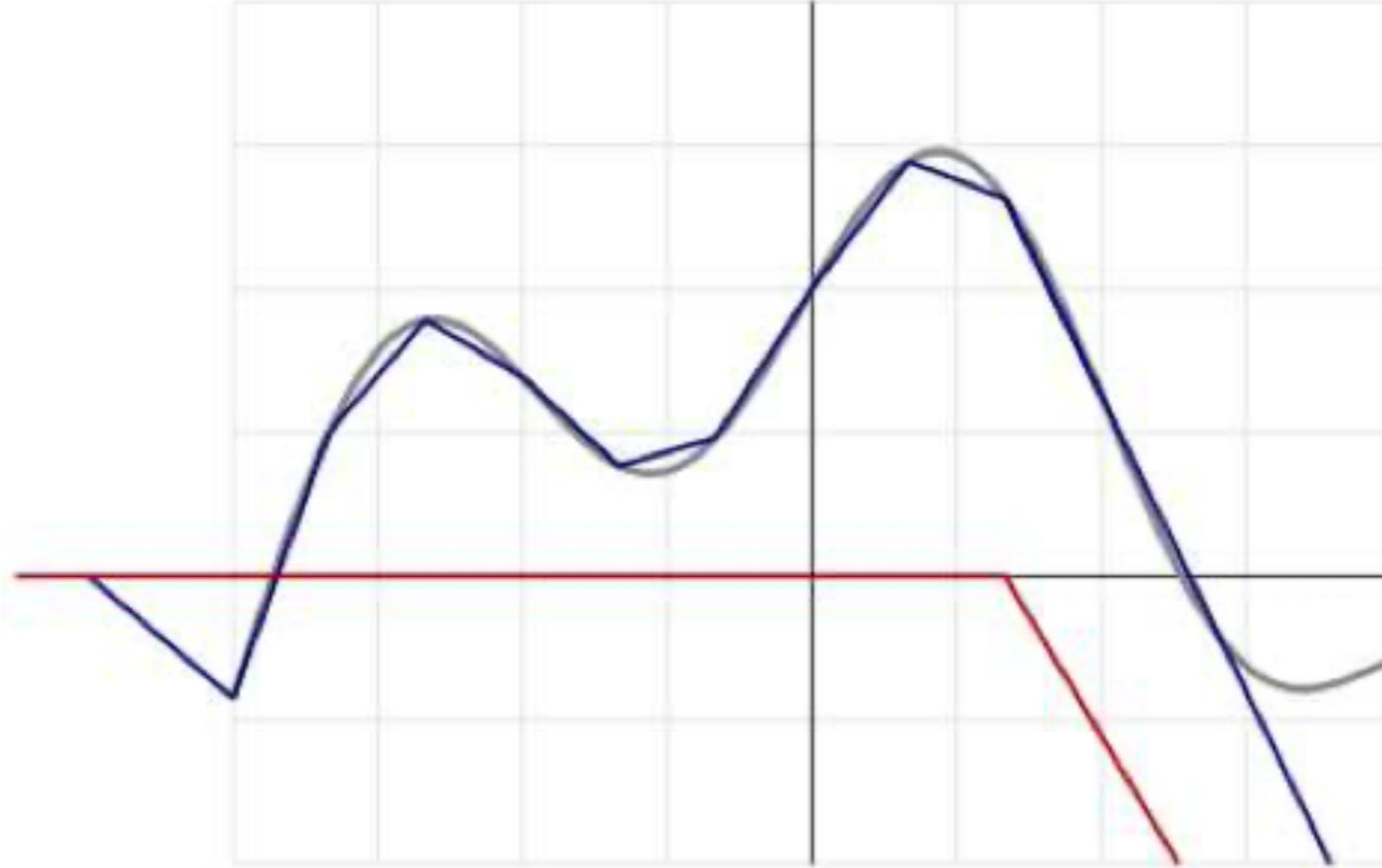
---



- Toute fonction mathématique réelle peut être **approximée** comme une **somme de fonction ReLU** translaté
- Les réseaux de neurones sont peuvent naturellement remplir ce rôle

# Le neurone formel : approximateur universel

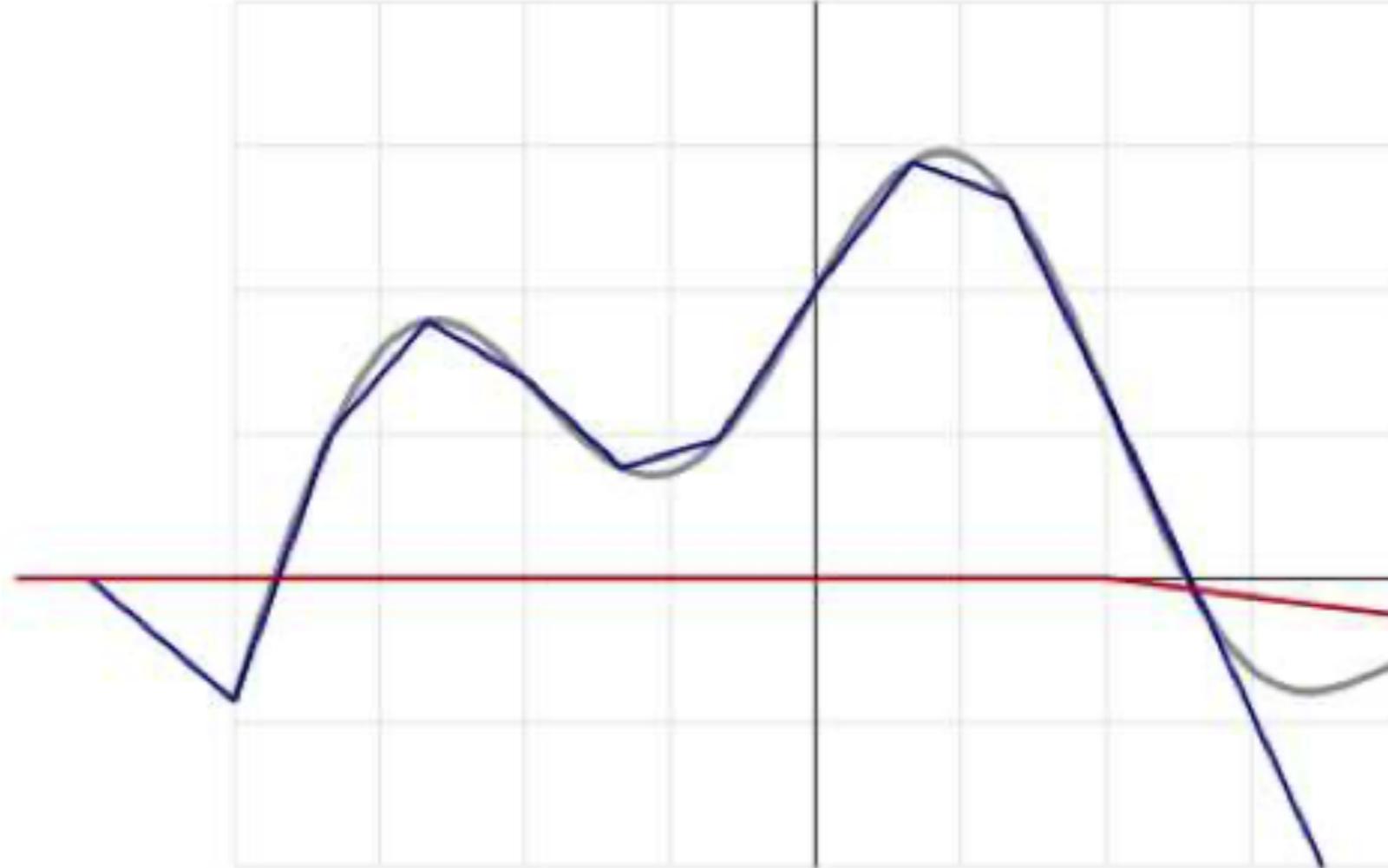
---



- Toute fonction mathématique réelle peut être **approximée** comme une **somme de fonction ReLU** translaté
- Les réseaux de neurones sont peuvent naturellement remplir ce rôle

# Le neurone formel : approximateur universel

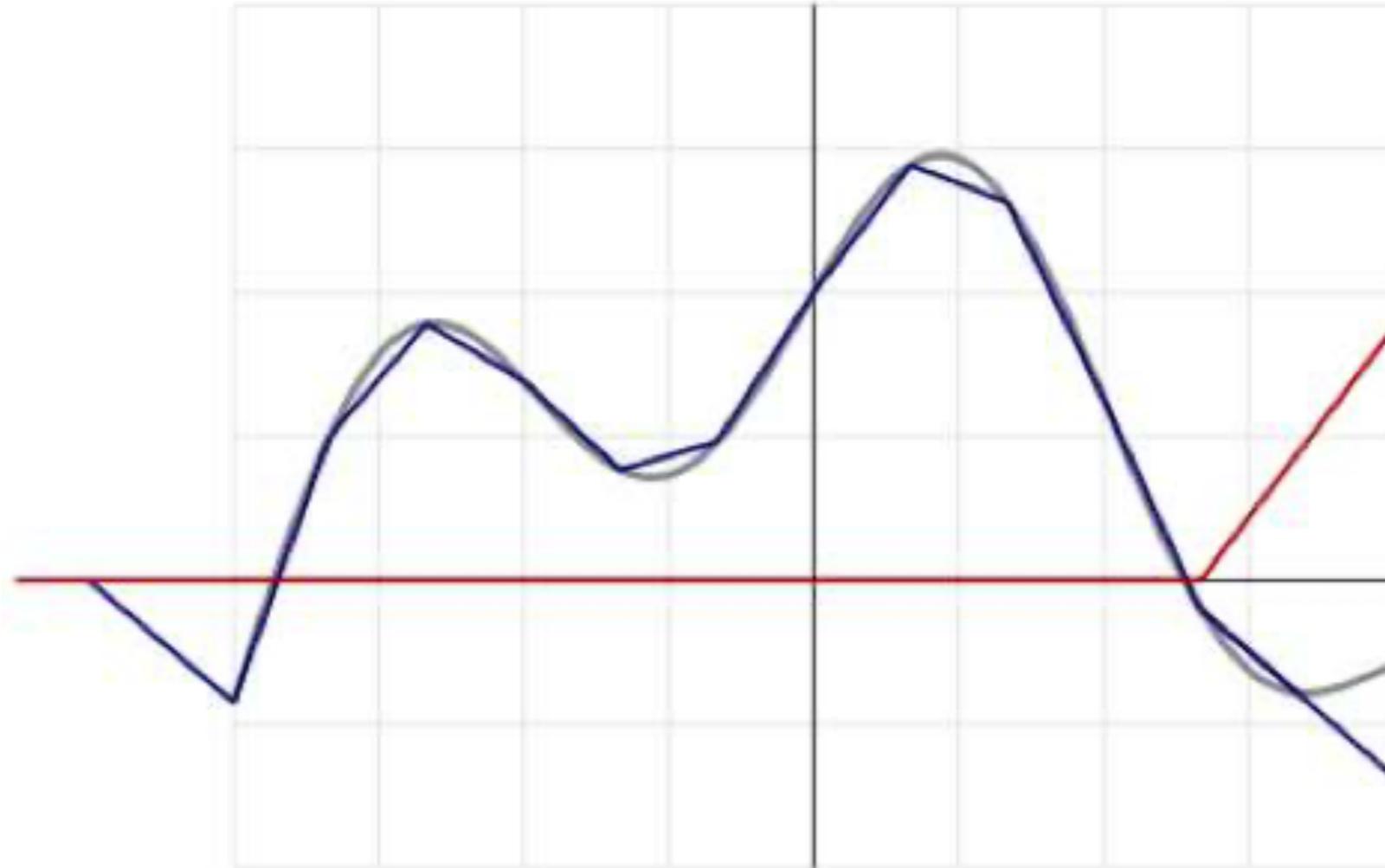
---



- Toute fonction mathématique réelle peut être **approximée** comme une **somme de fonction ReLU** translaté
- Les réseaux de neurones sont peuvent naturellement remplir ce rôle

# Le neurone formel : approximateur universel

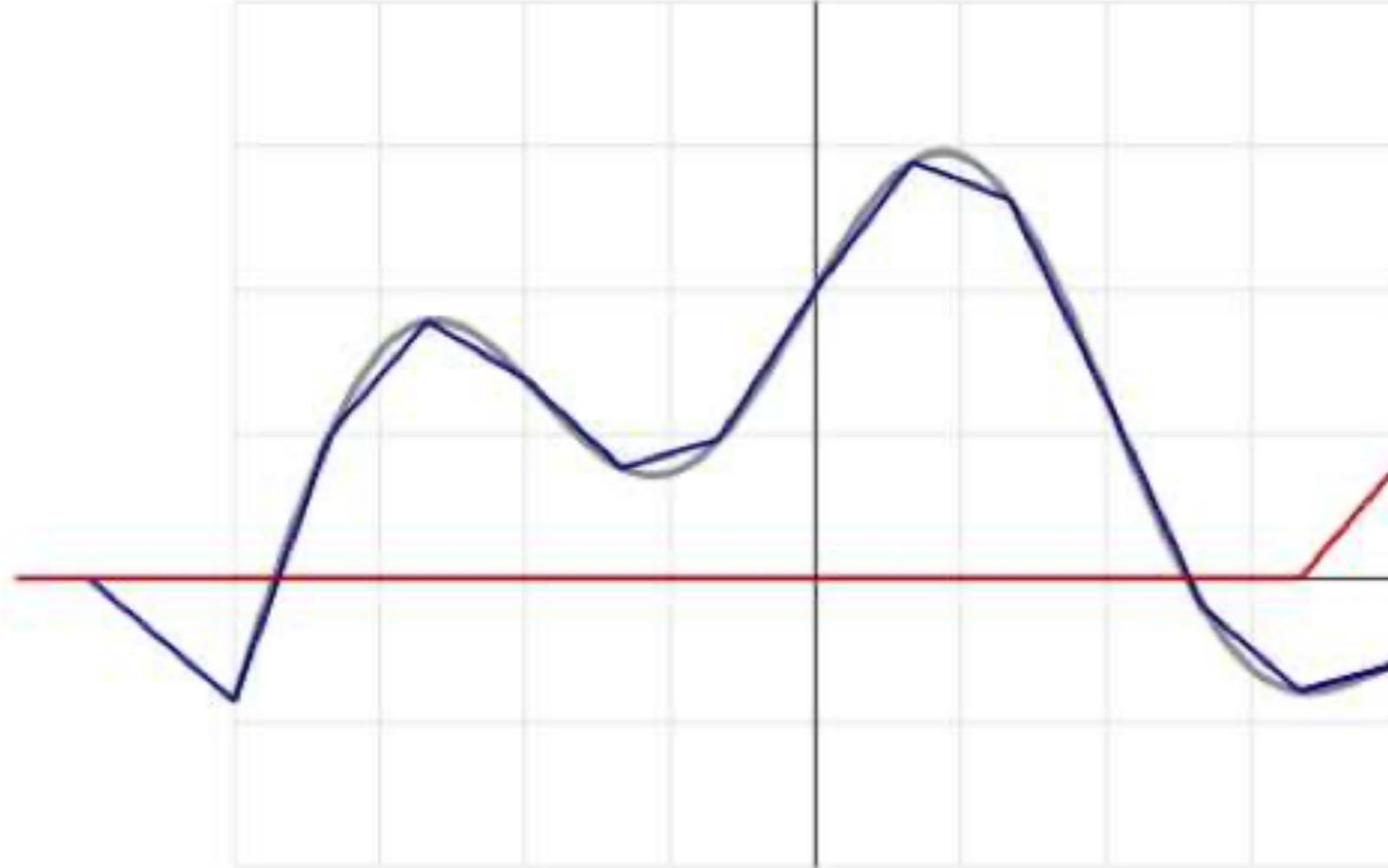
---



- Toute fonction mathématique réelle peut être **approximée** comme une **somme de fonction ReLU** translaté
- Les réseaux de neurones sont peuvent naturellement remplir ce rôle

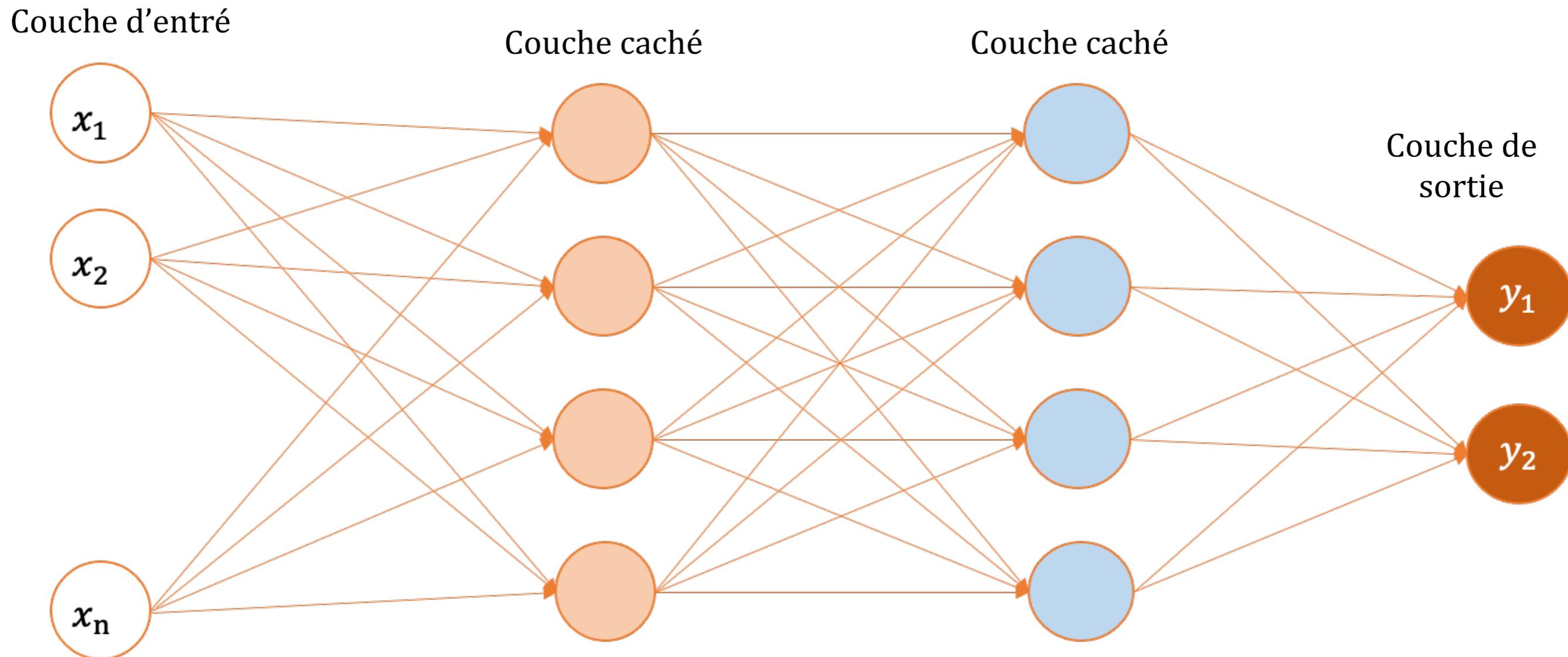
# Le neurone formel : approximateur universel

---



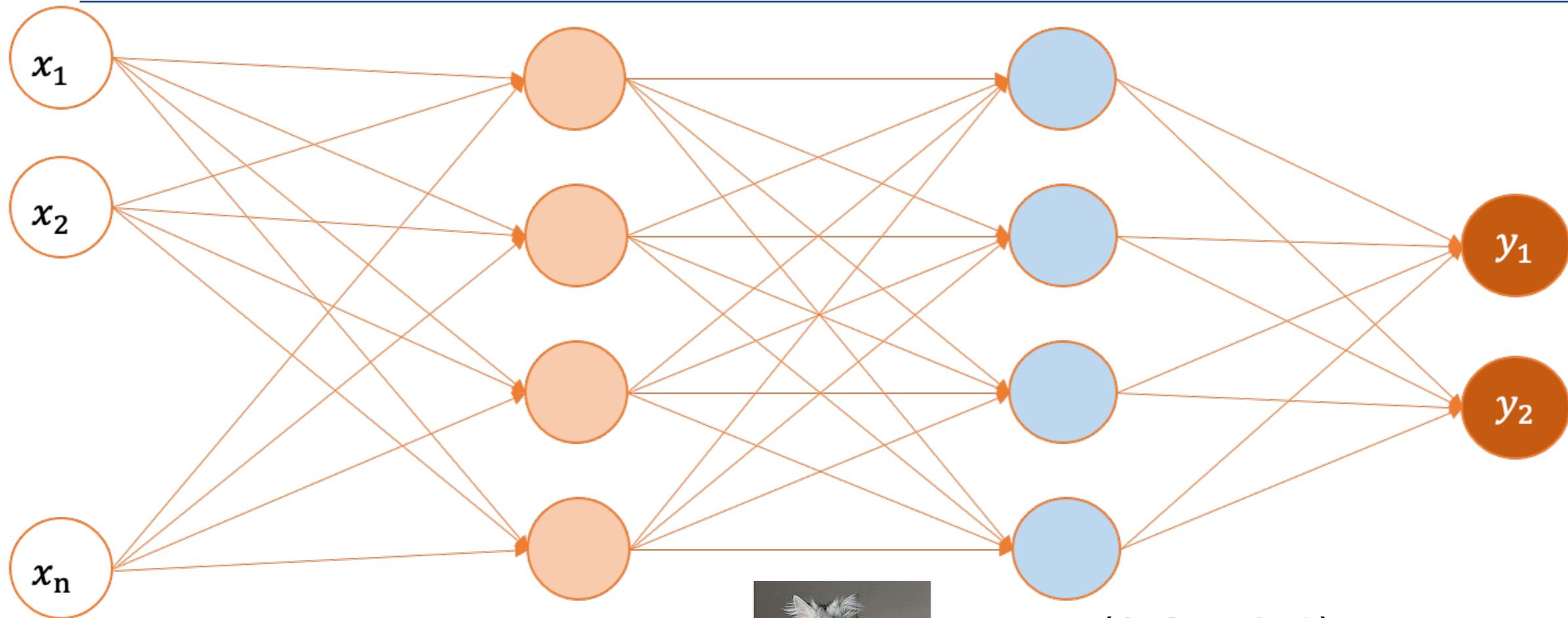
- Toute fonction mathématique réelle peut être **approximée** comme une **somme de fonction ReLU** translaté
- Les réseaux de neurones sont peuvent naturellement remplir ce rôle

# Perceptron multicouche (MLP)

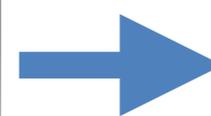


- Neurones assemblés ensemble pour **approximer** une fonction inconnue
- Taille des couches cachées et profondeur (nombre de couches) au choix du développeur

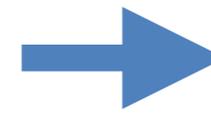
# Perceptron multicouche : exemple



- Example Chat/Chien
- $x_i$  : pixel de mon image
- $y_1$  : 0  $\Rightarrow$  pas chat; 1  $\Rightarrow$  chat
- $y_2$  : 0  $\Rightarrow$  pas chien; 1  $\Rightarrow$  chien

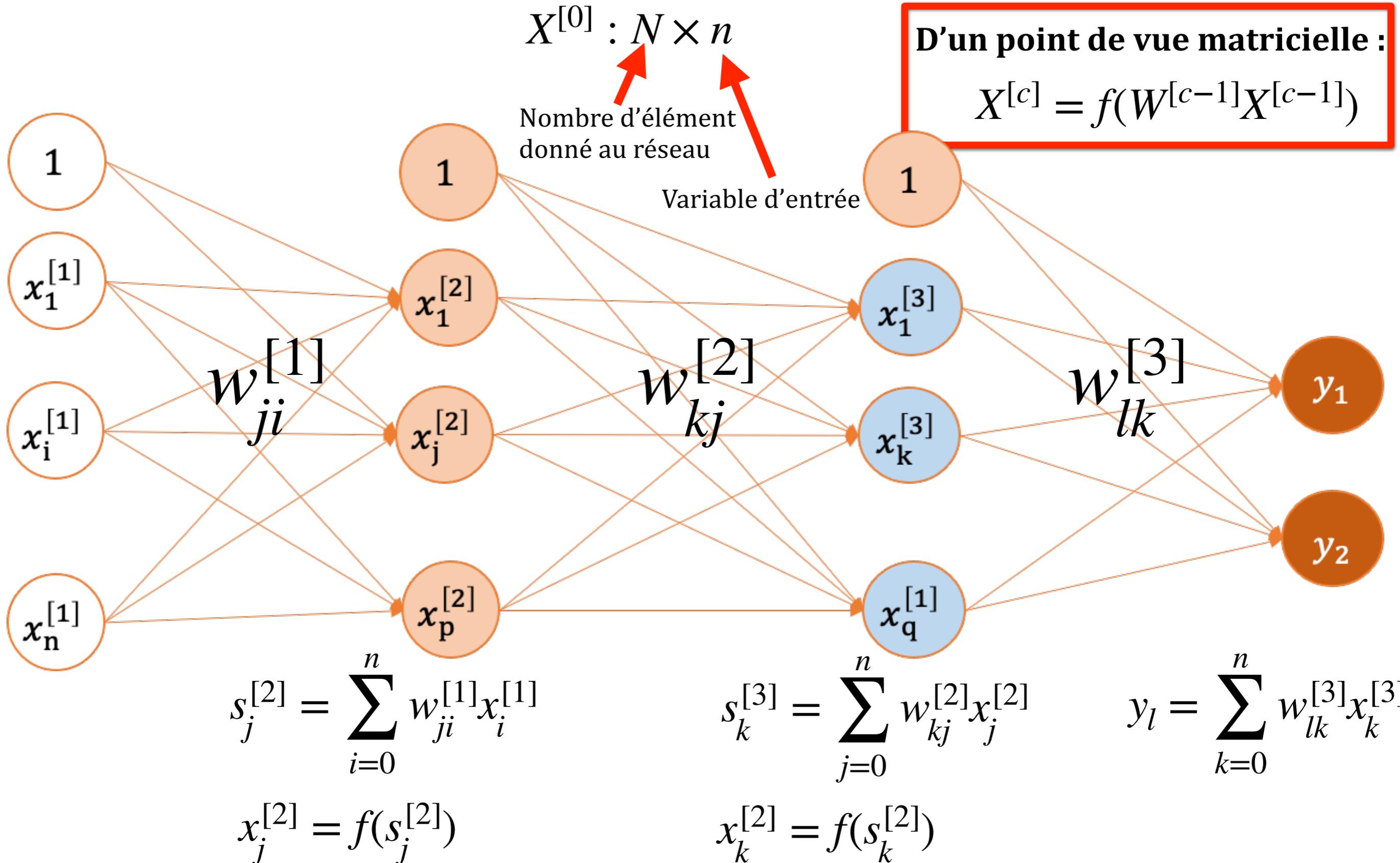


(0.85, 0.1)  
Clairement Chat

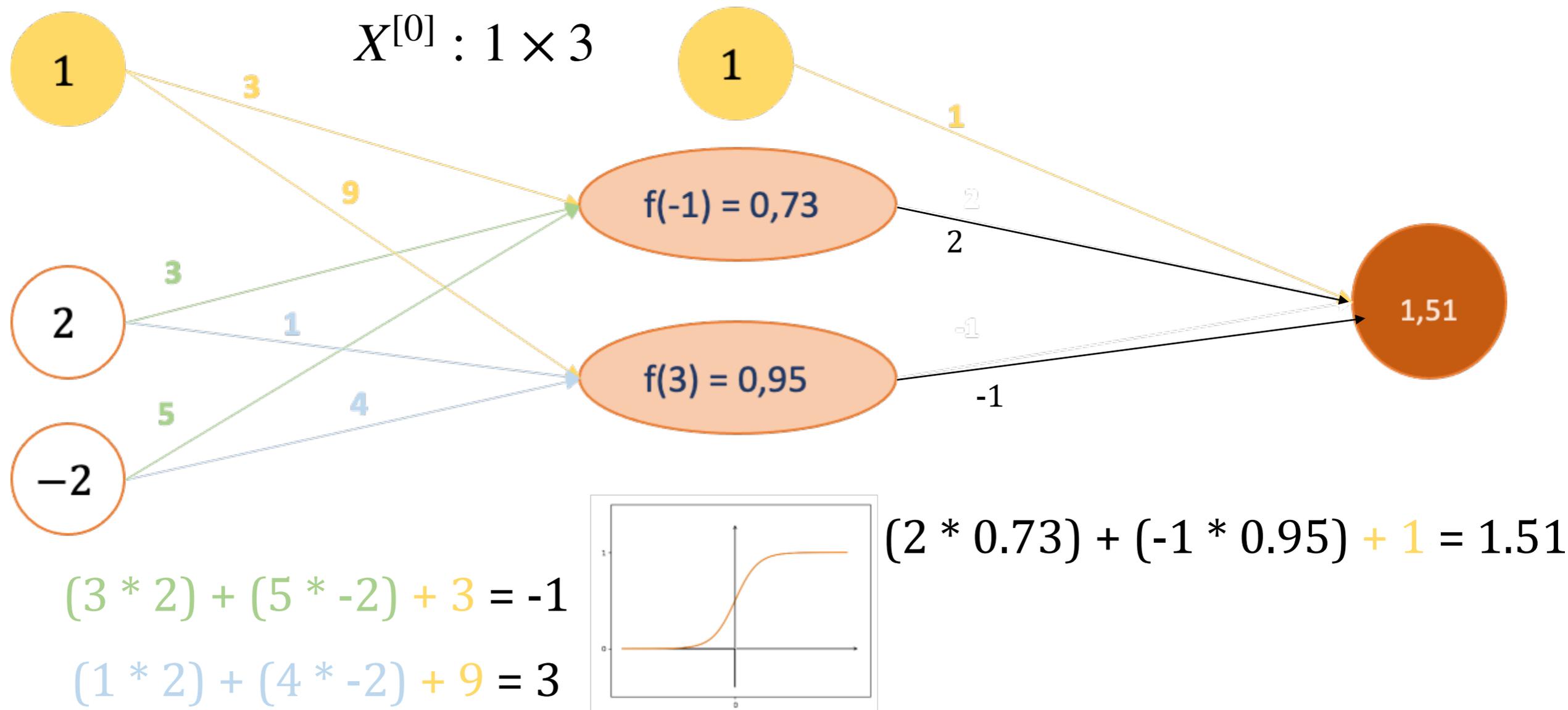


(0.35, 0.78)  
Plutôt chien

# Perceptron multicouche : mathématiquement



# Perceptron multicouche : Example



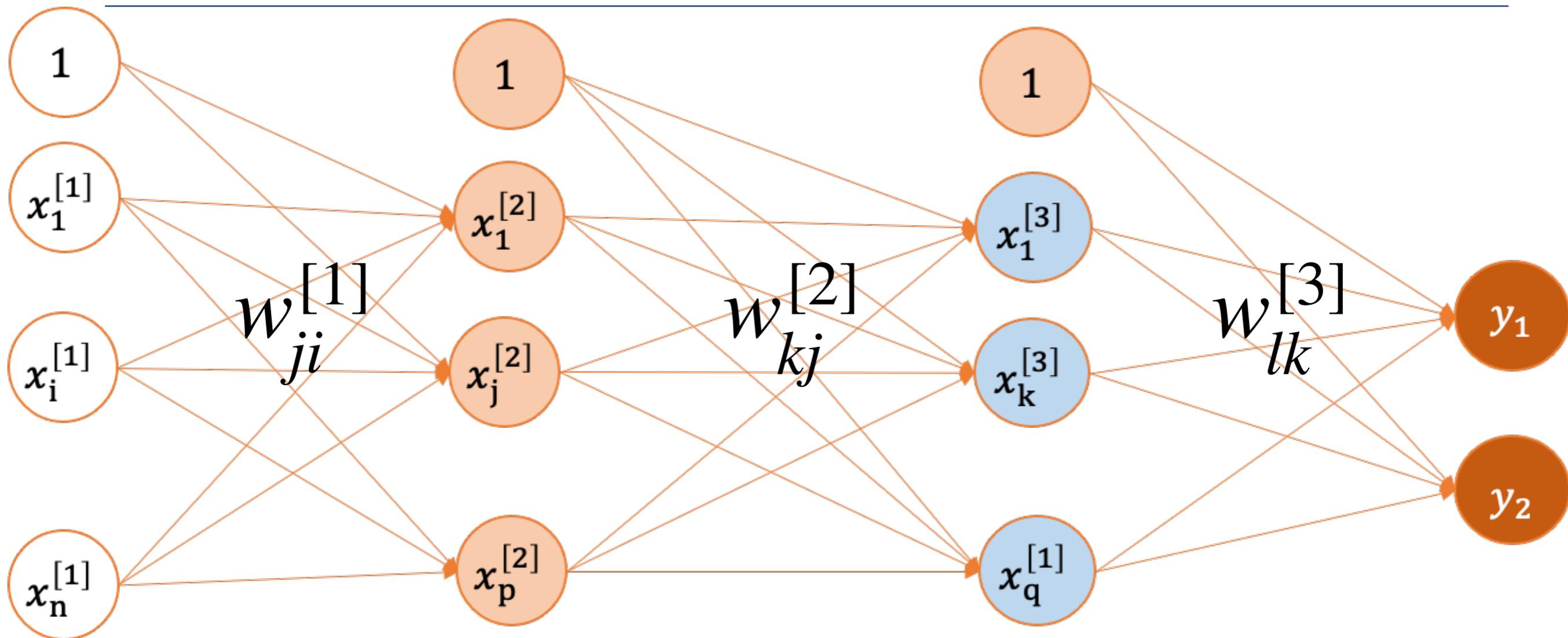
**En notation matriciel :**

$$\begin{pmatrix} 3 & 3 & 5 \\ 9 & 4 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ 2 \\ -2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -1 \\ 3 \end{pmatrix}$$

$$f \begin{pmatrix} -1 \\ 3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0,73 \\ 0,95 \end{pmatrix}$$

$$(1 \quad 2 \quad -1) \begin{pmatrix} 1 \\ 0,73 \\ 0,95 \end{pmatrix} = 1,51$$

# Rétropropagation du gradient



- Nombre de **paramètres** :  $(n + 1) \times p + (p + 1) \times q + (q + 1) \times 2$
- Si  $n = p = q = 10 \Rightarrow 242$  paramètre à optimiser
- Comment effectuer cette **optimisation** de manière efficace ?

# Rétropropagation du gradient

**Fonction de coût** pour évaluer les performances de notre algorithme (**adapté** à l'objectif) :

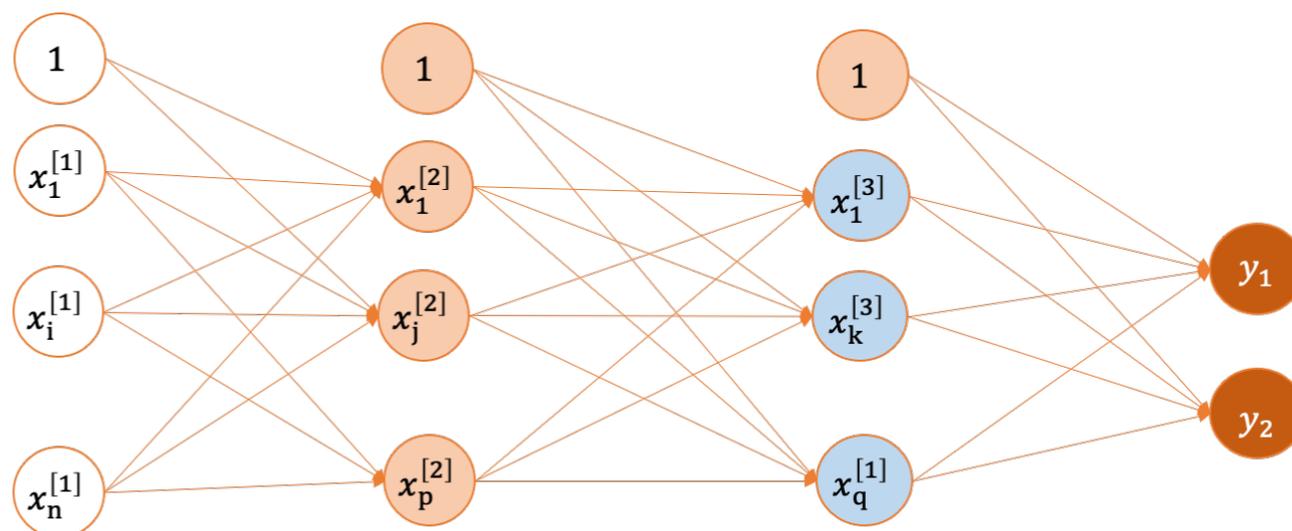
$$Loss(y, \hat{y}) = \frac{1}{2} \sum_{i=0}^N (\hat{y}_i - y_i)^2$$

Algorithme de **rétropropagation** :

- Calcule  $\frac{\partial Loss(y, \hat{y})}{\partial w_{ji}}$

- Mise à jour des poids :  $w_{ji} \leftarrow w_{ji} - \alpha \frac{\partial Loss(y, \hat{y})}{\partial w_{ji}}$

avec  $\alpha$  le **taux d'apprentissage**  
(peut évoluer au cours du temps)



# Rétropropagation du gradient

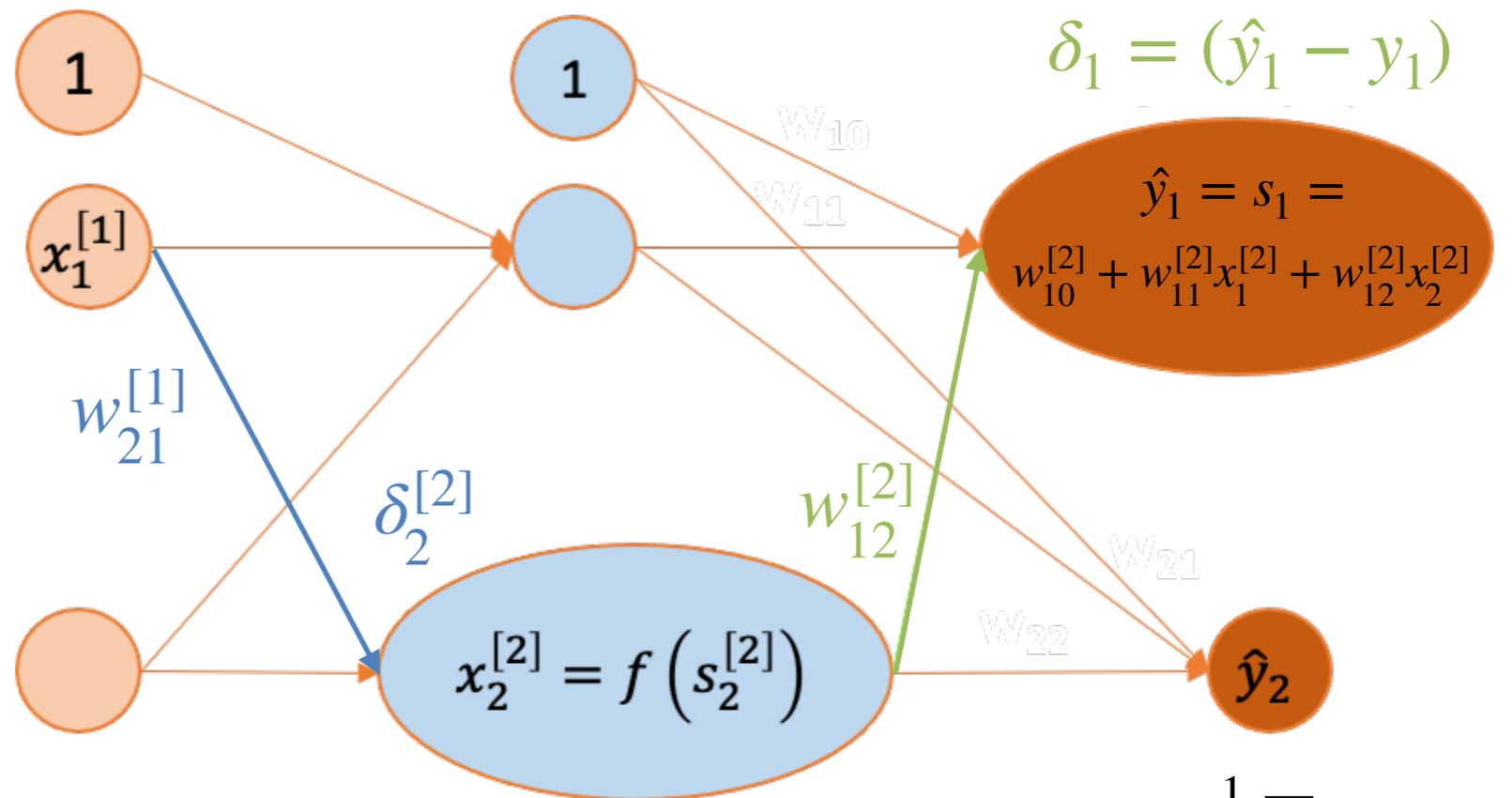
**Dernière (P) couche :**

$$\frac{\partial Loss}{\partial w_{12}^{[2]}} = \frac{\partial Loss}{\partial s_1} \frac{\partial s_1}{\partial w_{12}^{[2]}}$$

$$\delta_1 = (\hat{y}_1 - y_1)$$

$$x_2^{[2]}$$

$$w_{12}^{[2]} = w_{12}^{[2]} - \alpha \delta_1 x_2^{[2]}$$



$$\delta_1 = (\hat{y}_1 - y_1)$$

$$\hat{y}_1 = s_1 = w_{10}^{[2]} + w_{11}^{[2]} x_1^{[2]} + w_{12}^{[2]} x_2^{[2]}$$

Au moins dérivable par morceaux

**Couche P-1 :**

$$\frac{\partial Loss}{\partial w_{21}^{[1]}} = \frac{\partial Loss}{\partial s_2^{[2]}} \frac{\partial s_2^{[2]}}{\partial w_{21}^{[1]}}$$

$$\frac{\partial Loss}{\partial s_2^{[2]}} = \sum_k \delta_k \frac{\partial \delta_k}{\partial s_2^{[2]}}$$

$$\frac{\partial \delta_k}{\partial s_2^{[2]}} = w_{k2}^{[2]} f'(s_2^{[2]}) \quad \frac{\partial Loss}{\partial s_2^{[2]}} = f'(s_2^{[2]}) \sum_k \delta_k w_{k2}^{[2]}$$

$$\frac{\partial Loss}{\partial w_{21}^{[1]}} = x_1^{[1]} f'(s_2^{[2]}) \sum_k \delta_k w_{k2}^{[2]}$$

# Rétropropagation du gradient

---

Si vous vous ennuyez cet été essayez de calculer P-2 !

$$(g \circ f)' = (g' \circ f) \times f'$$

Plus **généralement**, on peut ensuite montrer que :

$$\frac{\partial Loss}{\partial w_{ji}^{[p-1]}} = x_i^{[p-1]} f'(s_j^{[p]}) \sum_k \frac{\partial Loss}{\partial w_{kj}^{[p]}} w_{kj}^{[p]}$$

 **Précédent Gradient !**

Grâce à cette formule on peut facilement calculer **de proche en proche** la dérivée de chaque poids pour mettre à jour le réseau sans difficulté !

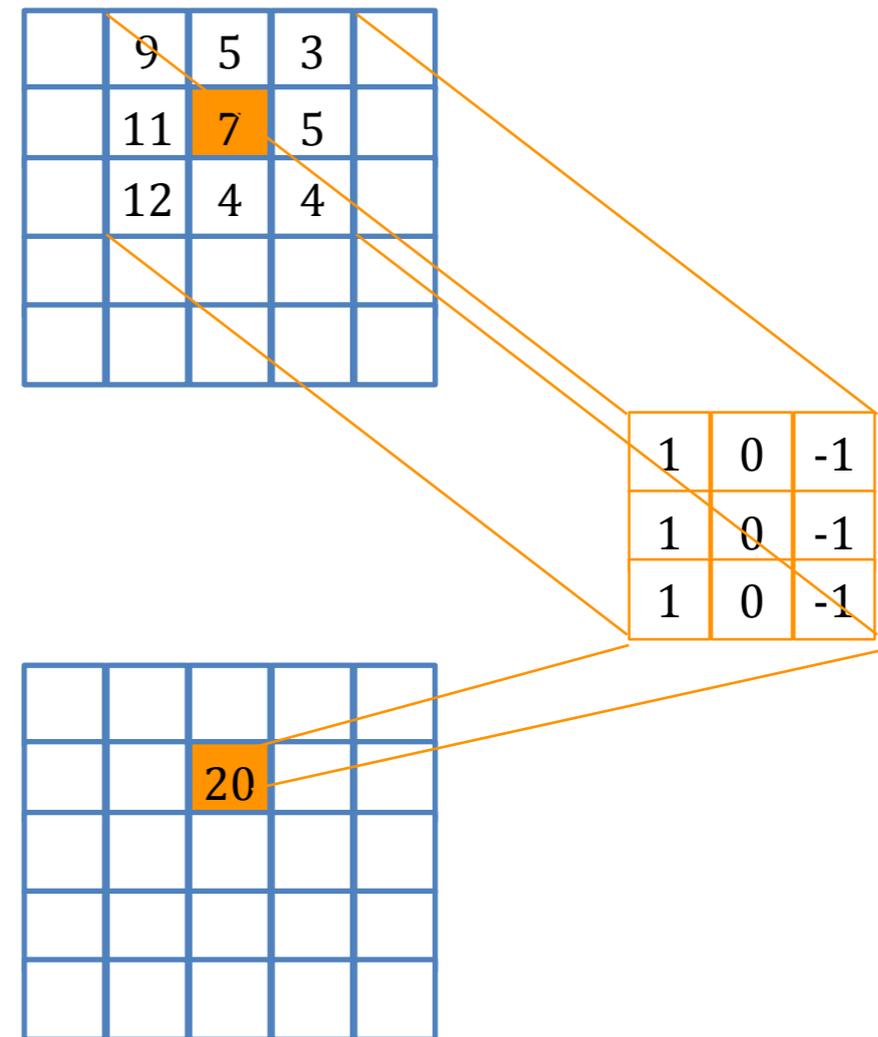
# Les réseaux de convolution (CNN)

## MLP : Peu adapté aux images

- Le nombre paramètre augmente très vite avec la taille de l'entrée
- Pas **d'invariance** par translation/rotation

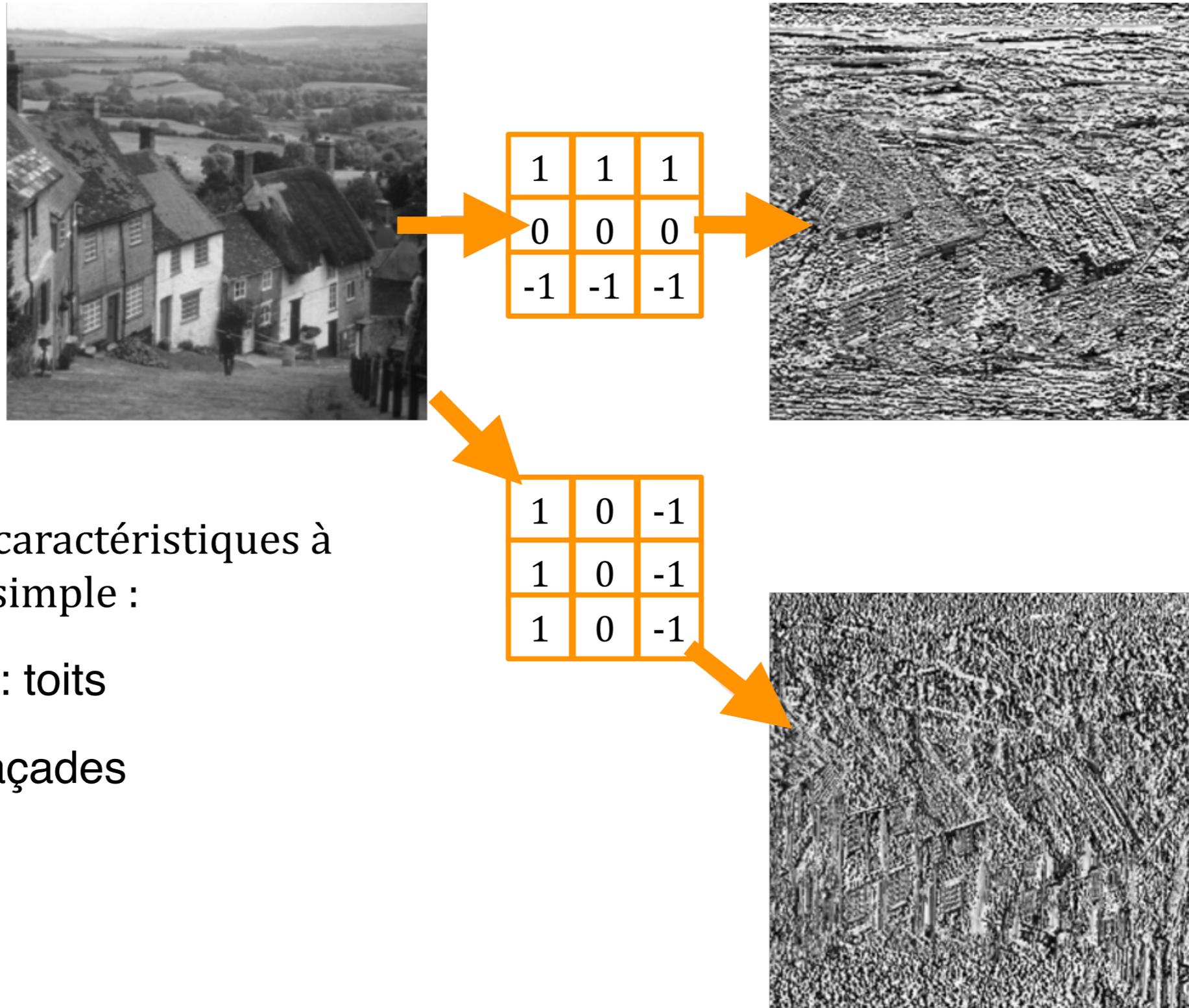
## Utilisation de filtre de convolution :

- Boucle sur tous les pixels et calcule une nouvelle valeur basée sur les voisins
- Les **poids** du filtre sont **optimisés** à l'entraînement
- La taille du filtre est au choix du développeur
- Essaie de capturer les **traits caractéristiques** de l'image
- Peut remplacer les MLP dans un grand nombre de réseaux



# Les réseaux de convolution

## Illustration de l'effet des filtres :



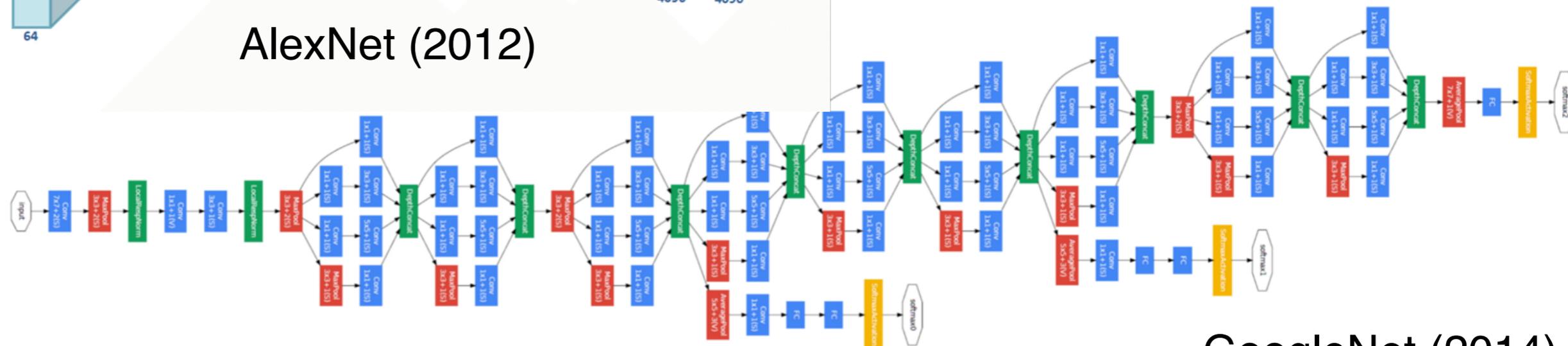
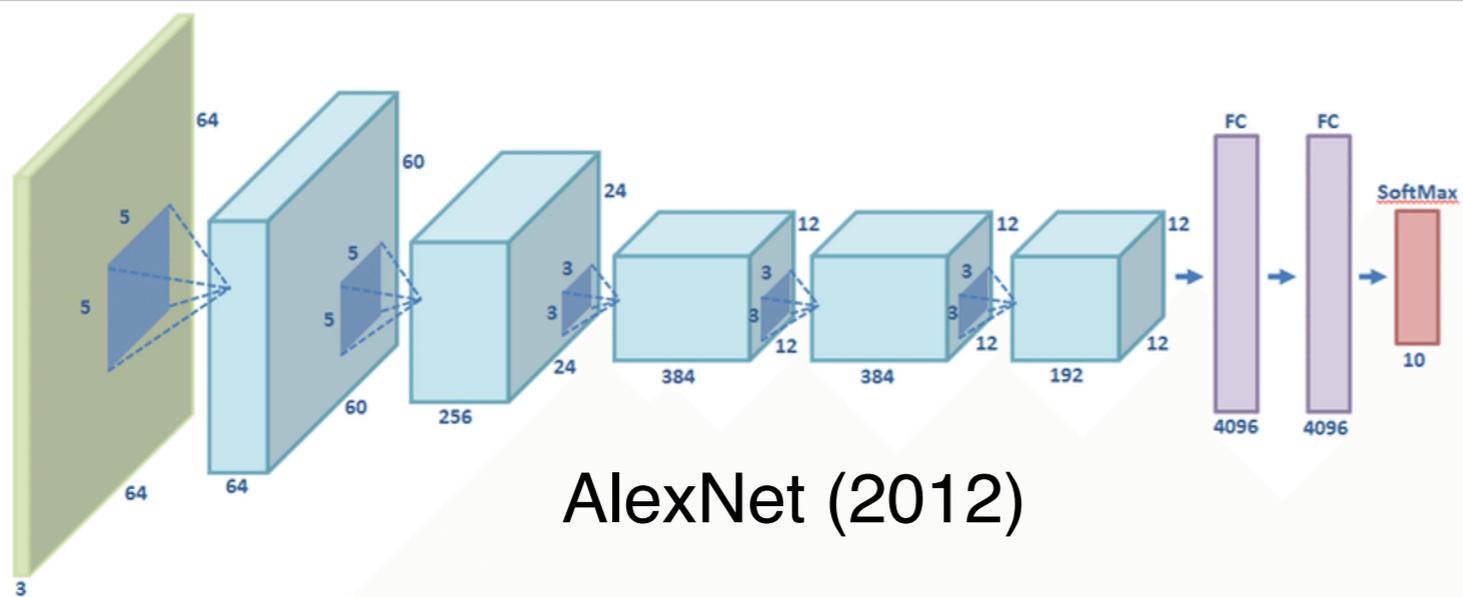
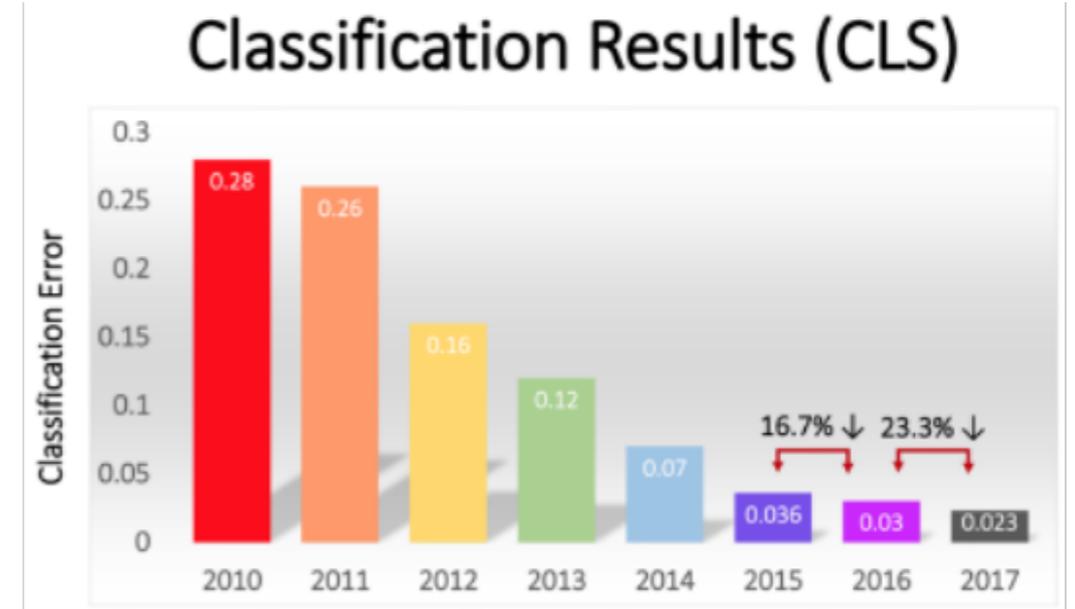
Extraction des caractéristiques à partir de filtre simple :

- Horizontale : toits
- Verticale : façades

# AlexNet, 2012

ImageNet Visual Recognition Challenge :

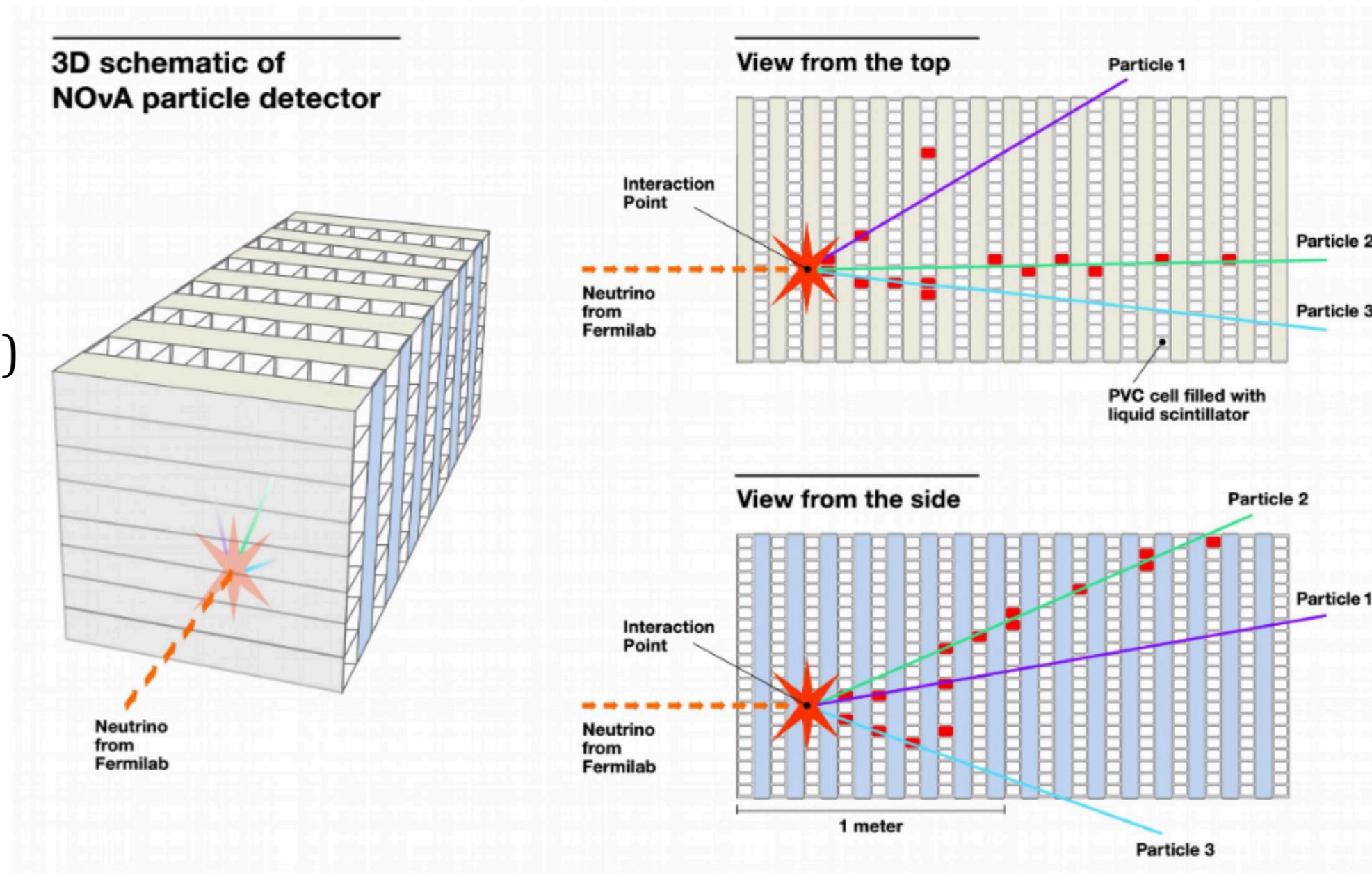
- $\sim 10^6$  images et  $\sim 1000$  catégories
- 2 avancées majeures :
  - AlexNet (2012)
  - GoogleNet (2014)



# Classification des événements dans l'expérience Nova

## Nova :

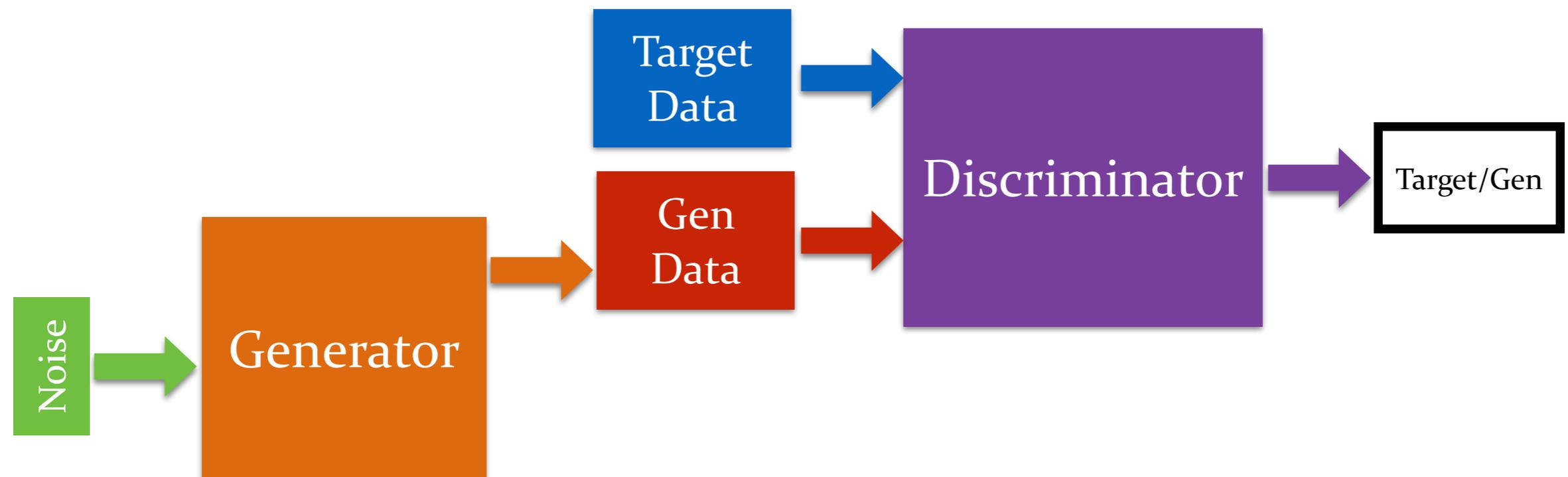
- Détecteur de neutrinos
- Basé à **Fermilab** (US)
- Étudie l'oscillation des **neutrinos**
- Mesure la désintégration de neutrino dans son détecteur





# Les Réseaux Antagonistes Génératifs (GAN)

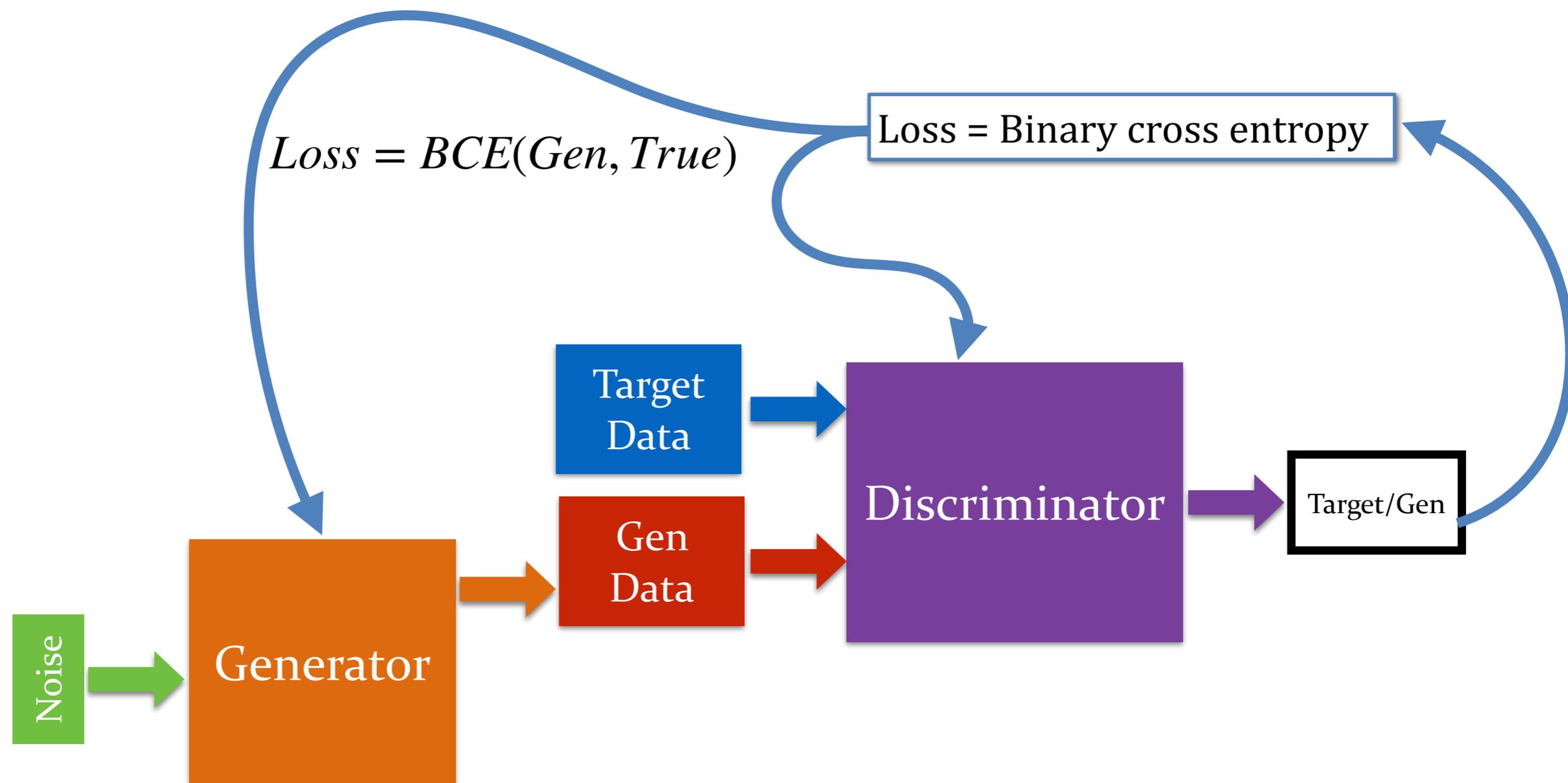
- Technique **générative** : crée des données/images à partir de bruit
- Utilise deux réseaux de neurones :
  - **Générateur** : génère des données à partir de bruit
  - **Discriminateur** : sépare le bruit des données cibles



# Les Réseaux Antagonistes Génératifs (GAN)

Même fonction de coût pour le discriminateur et le générateur :

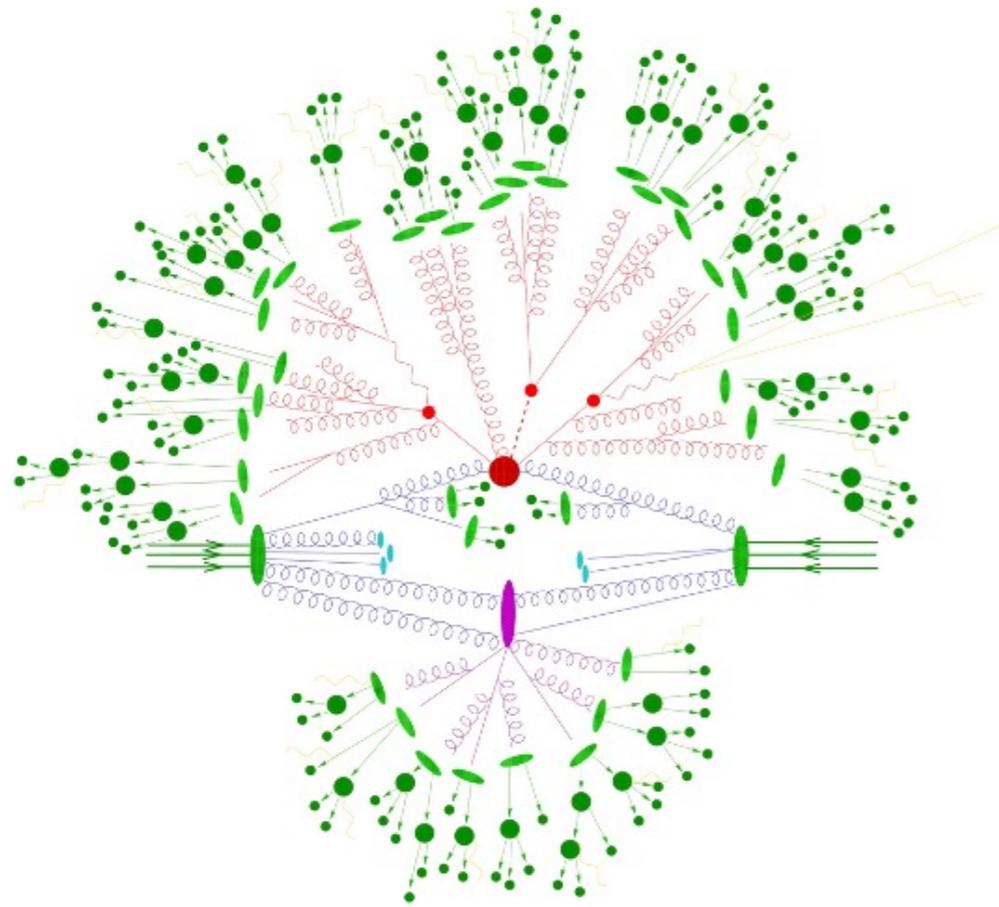
- Le discriminateur essaie de **séparer** les vraies entrées des entrées simulées
- Le générateur essaie de **tromper** le discriminateur



# Les Réseaux Antagonistes Génératifs (GAN)



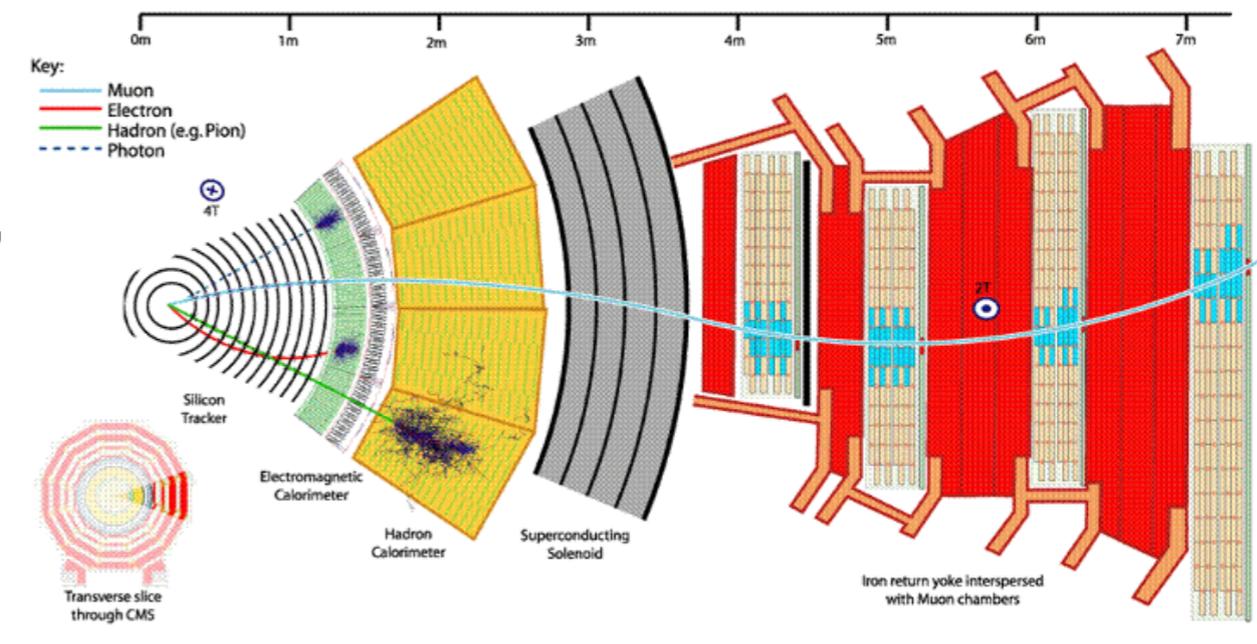
# Simulation des événements dans ATLAS/CMS



## Simulateurs :

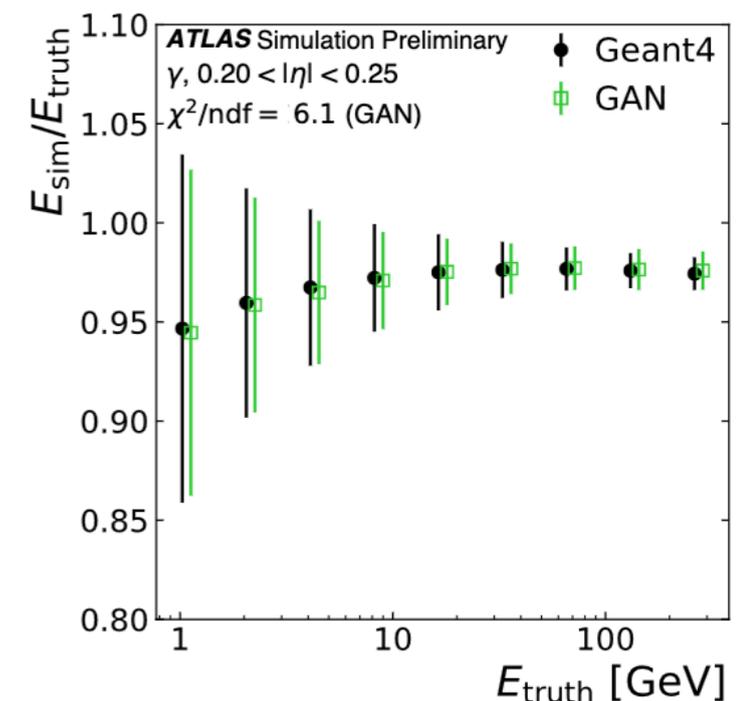
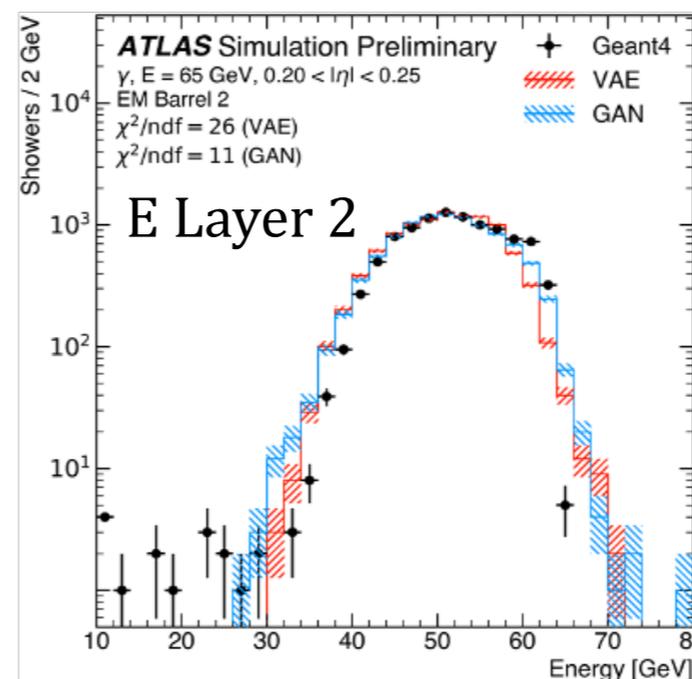
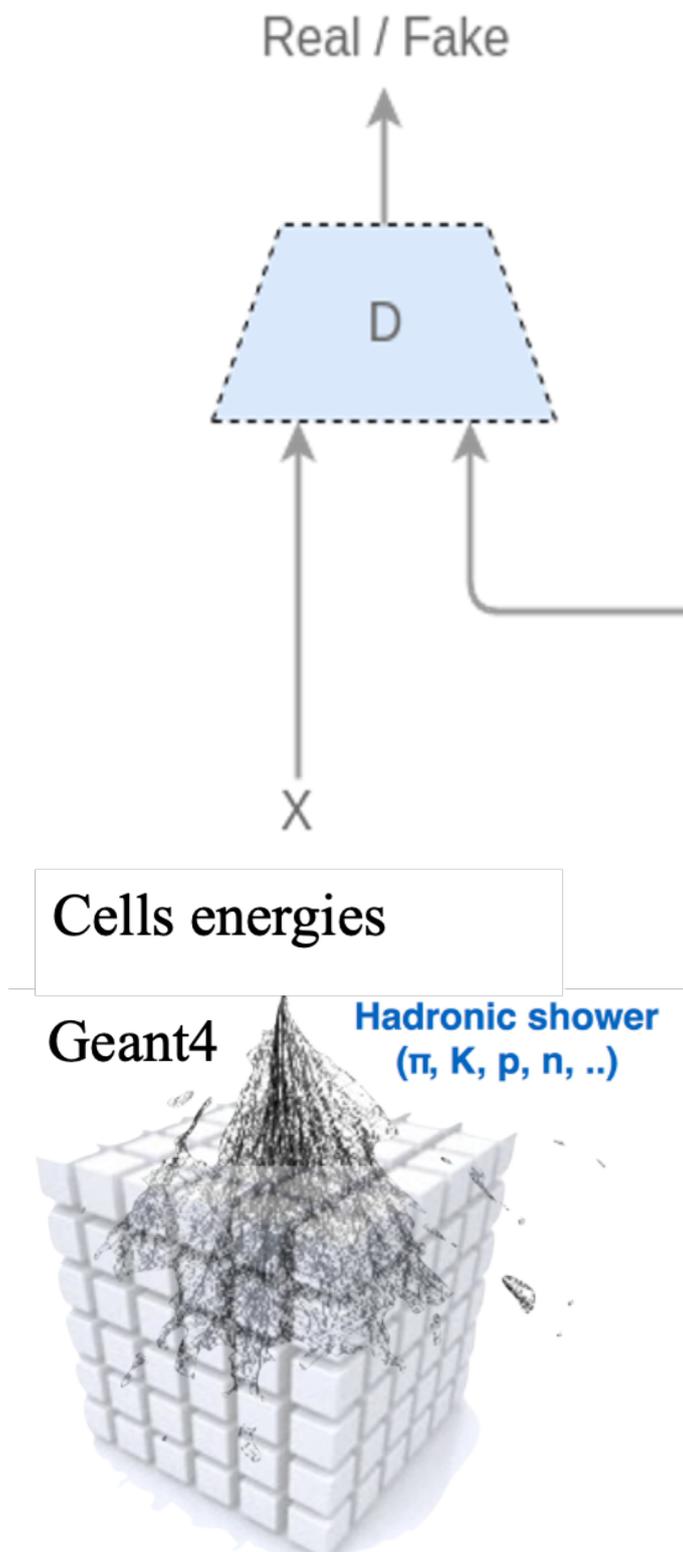
- Combine une connaissance précise de la physique pour prendre en compte l'interaction particules/matière (**Geant4**)
- Simulation **extrêmement précise** de nos détecteurs

- Demande beaucoup de **ressources** :
  - Humaine (optimisation de la simulation, étalonnage...)
  - CPU (50% de nos ressources de calcul vont dans la simulation)



# Simulation de calorimètre à l'aide de GAN

- **Calorimètre** : détecte l'énergie des particules
- **Cascades** de particules à l'intérieur
- Simulation du dépôt d'énergie de ces cascades avec un **GAN**
- Résultat réaliste obtenu **100x** plus rapidement

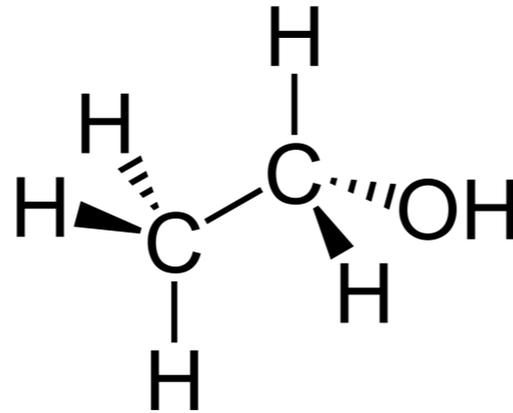


[Deep generative models for fast shower simulation in ATLAS](#)

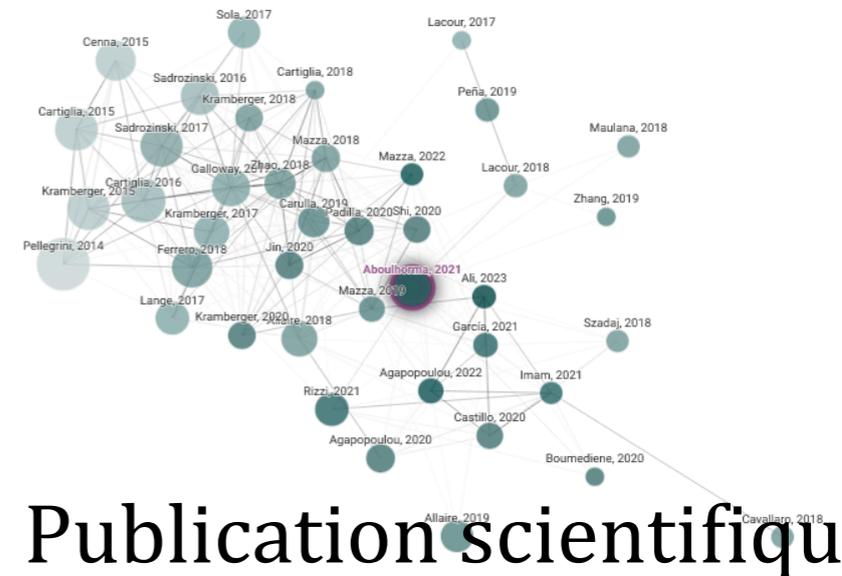
# Graph Neural Network

Objectif : adapter la **structure** de notre réseau à la structure de nos données.

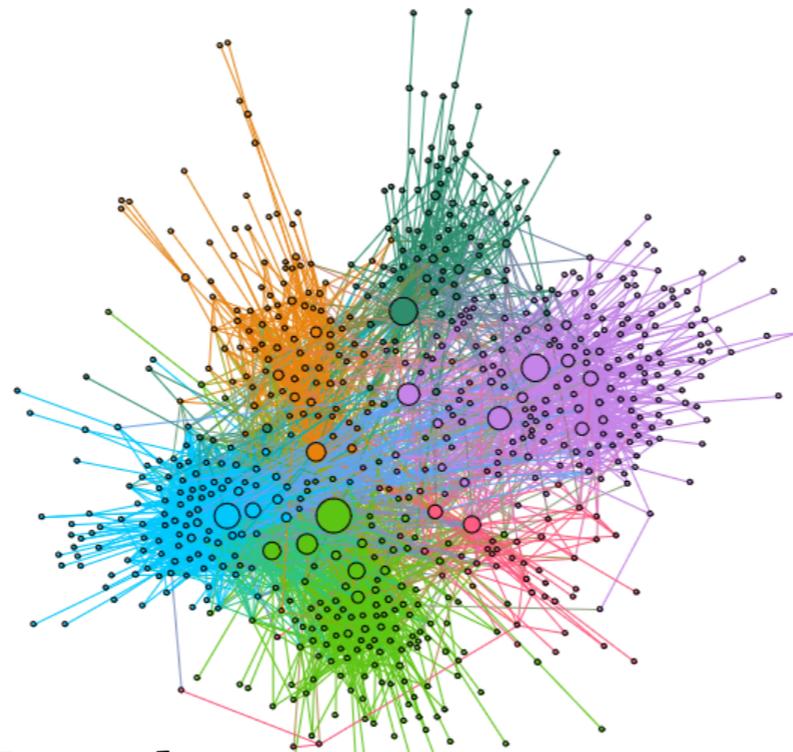
Grand nombre  
de structures  
représentable  
par des **graphes**



Molécule



Publication scientifique



Email communication

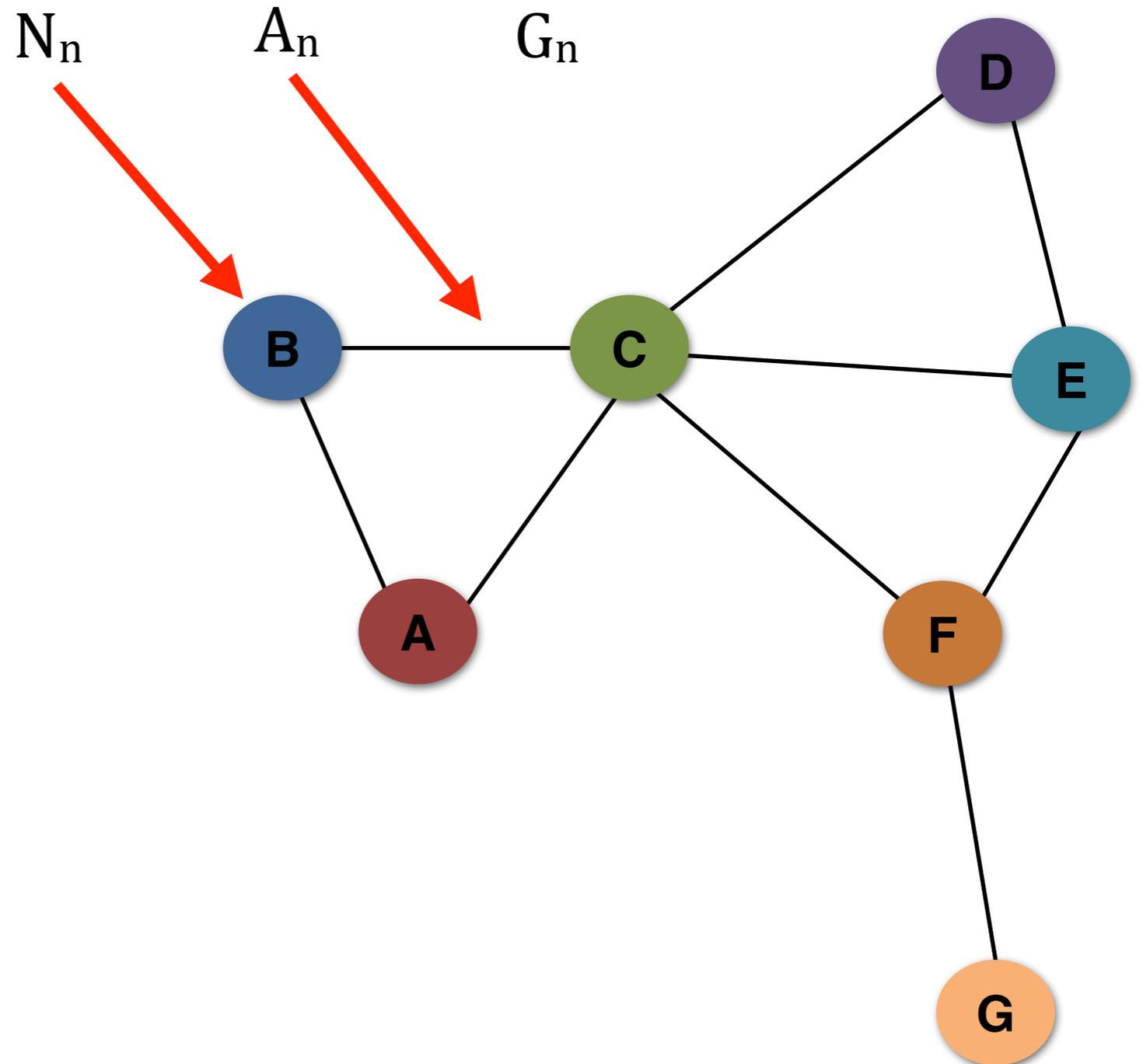


Relation sociale

# Graph Neural Network

---

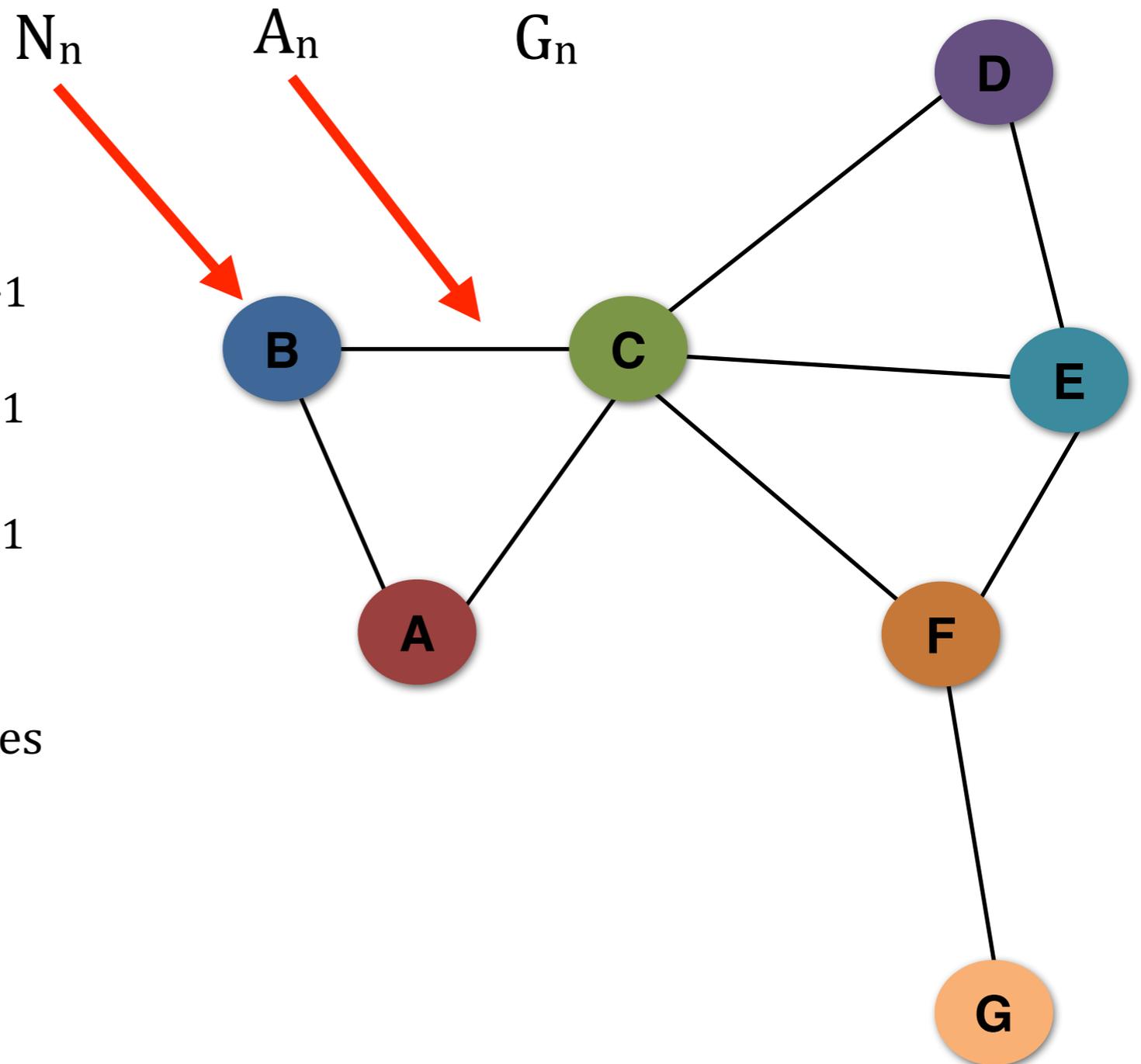
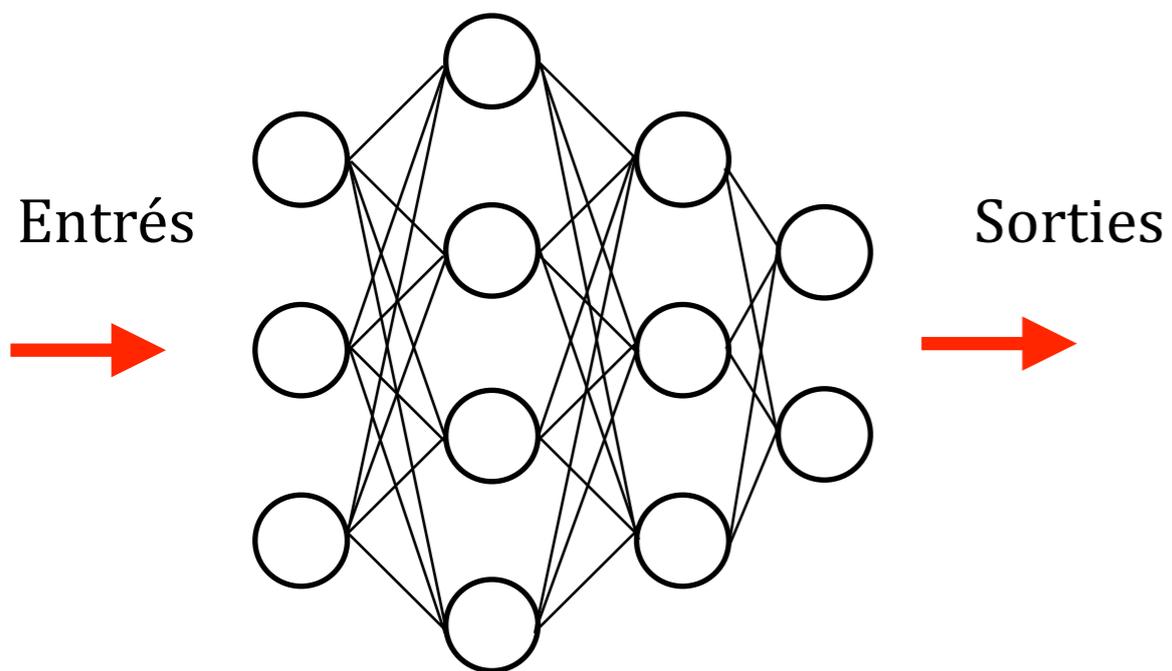
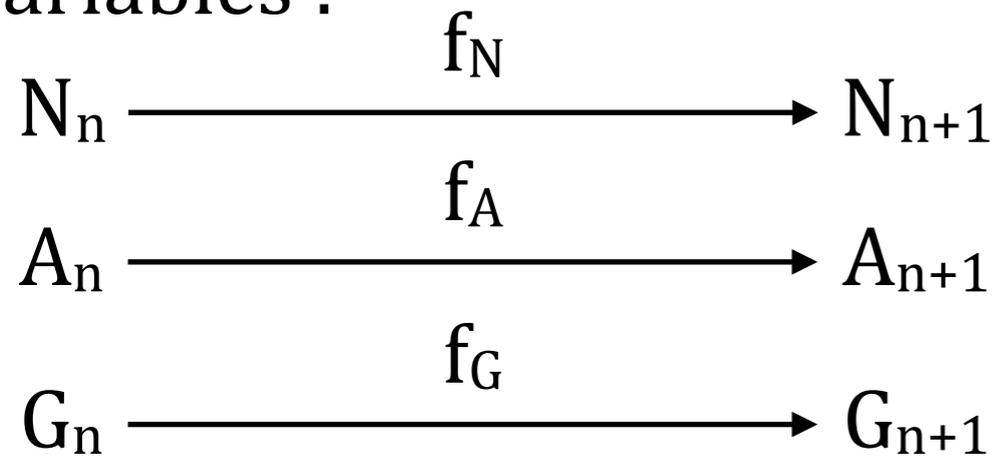
Graphe : 3 type d'info : **Noeuds**, **arêtes** et **globale**



# Graph Neural Network

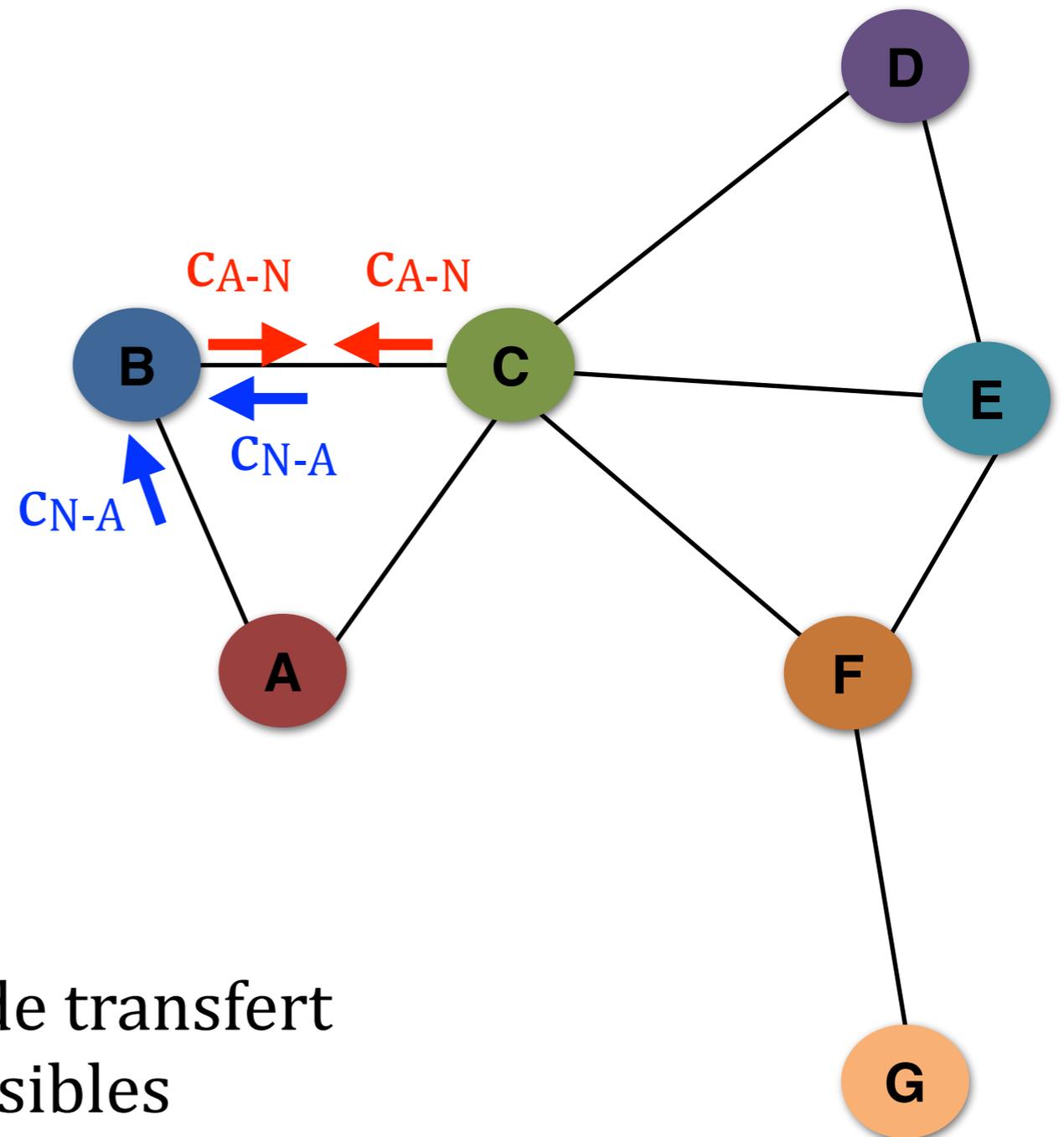
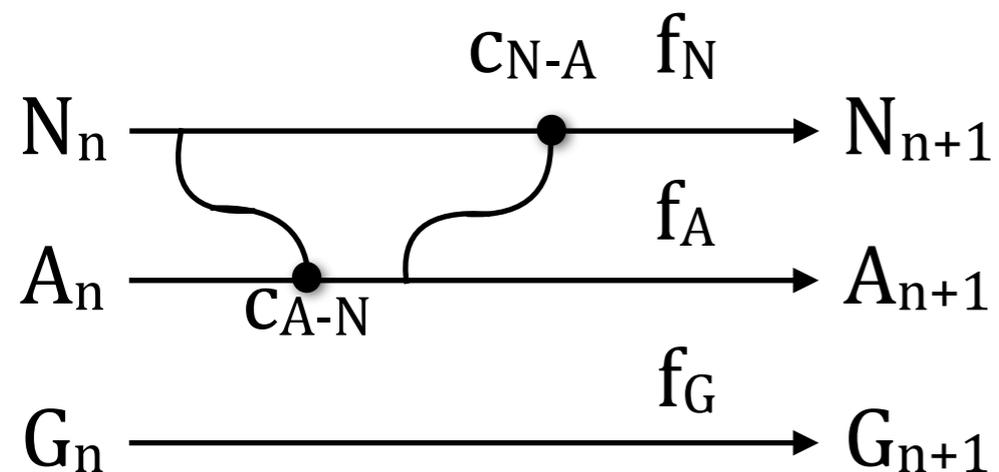
Graphe : 3 type d'info : **Noeuds**, **arêtes** et **globale**

Application d'un NN à ces variables :



# Graph Neural Network : Message Passing

Transfert d'information entre les éléments du graph avec une **fonction d'agrégation** :



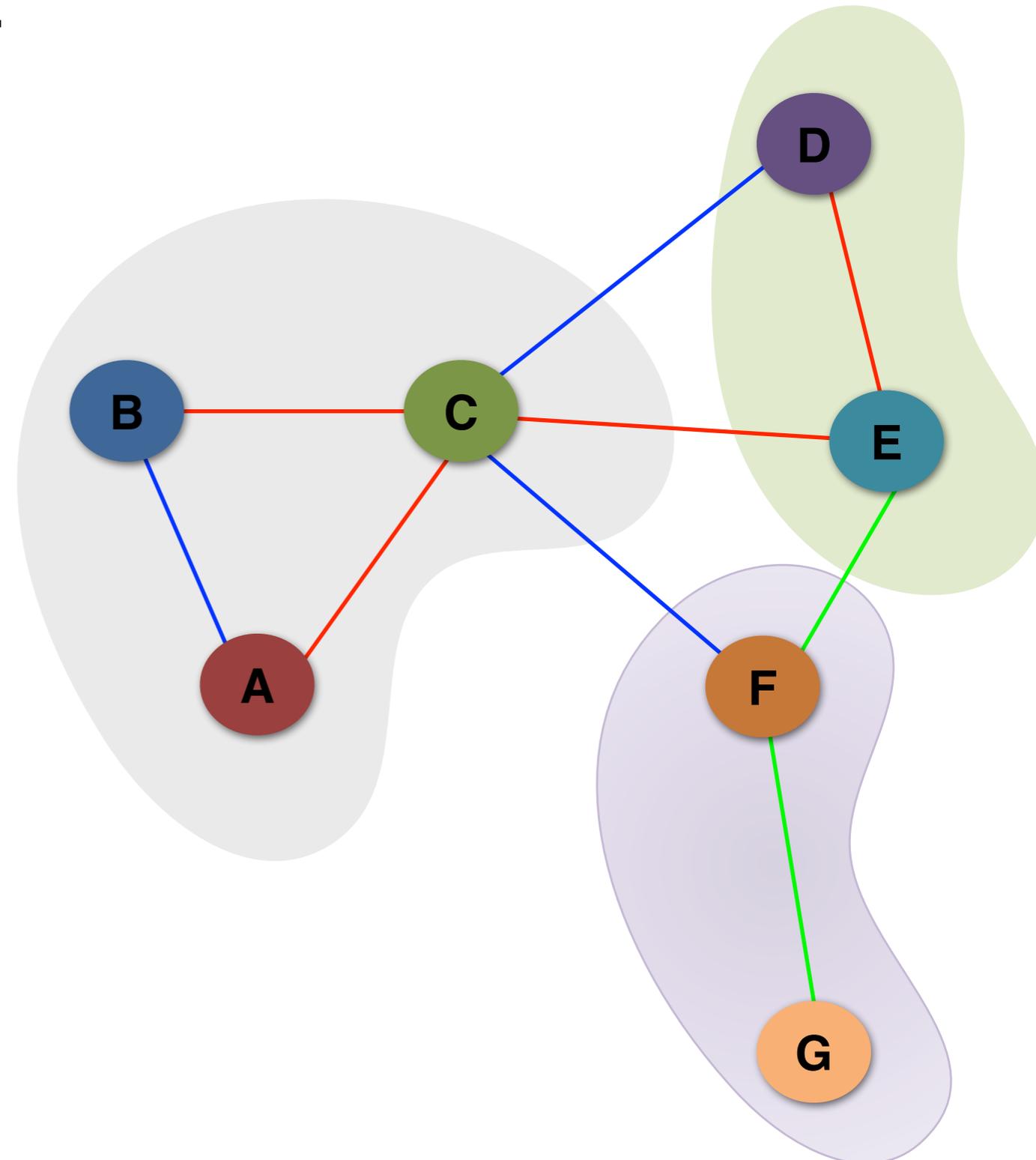
Différentes méthodes de transfert d'information sont possibles

# Graph Neural Network : Classification

Utilisation d'un dernier NN pour la classification des Noeuds, des arêtes ou du graph

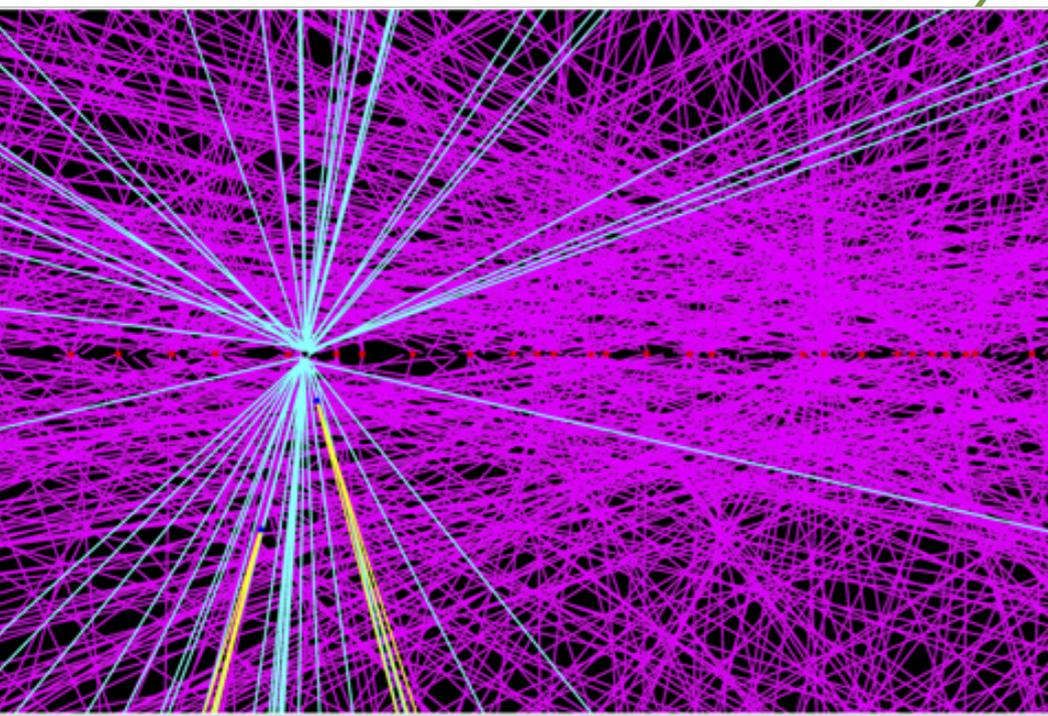
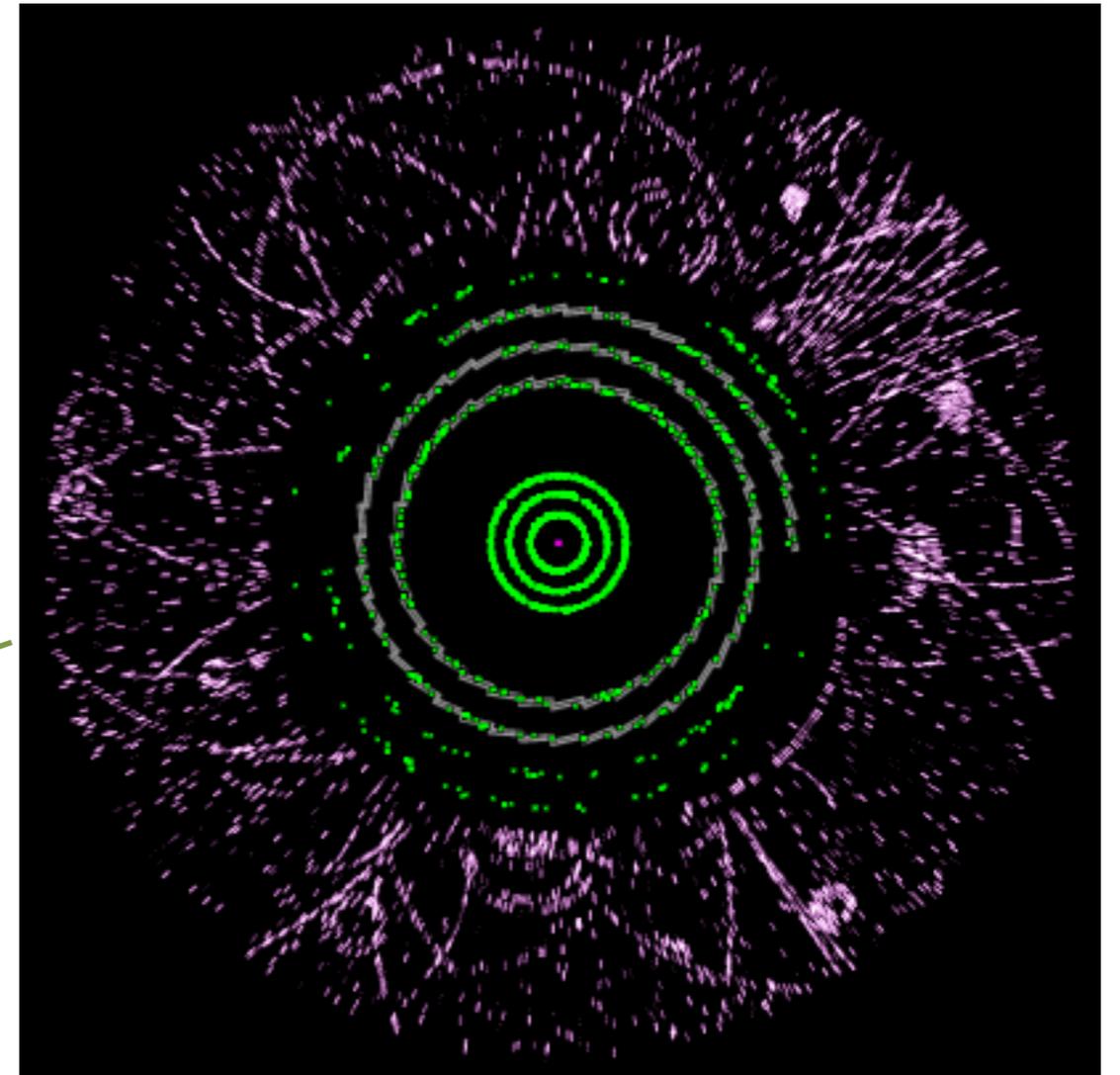
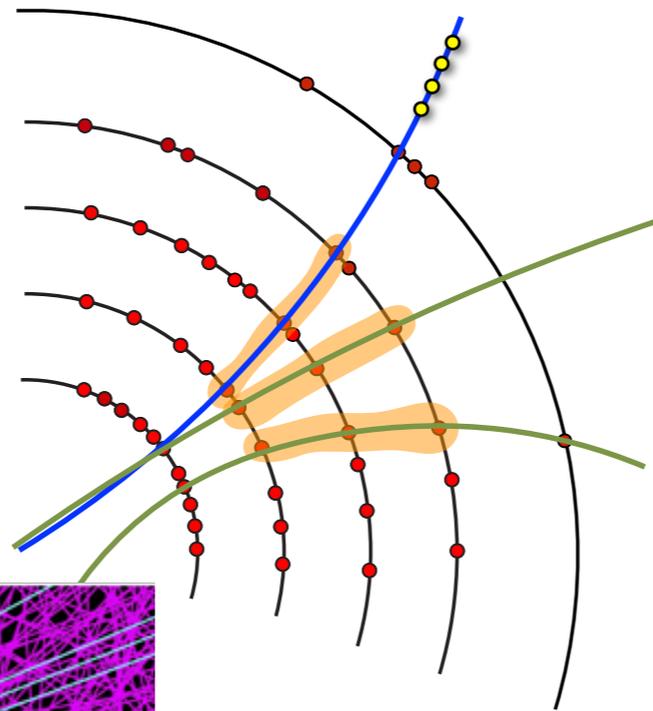
Exemples (*publications*) :

- Noeuds : Quelle catégorie de noeuds ?  
*(laboratoires)*
- Arêtes : Quel lien entre noeuds ?  
*(relations professionnelles)*
- Graph : Quel type de graph/structure ?  
*(stratégie de publication)*



# Trajectographie des particules chargées

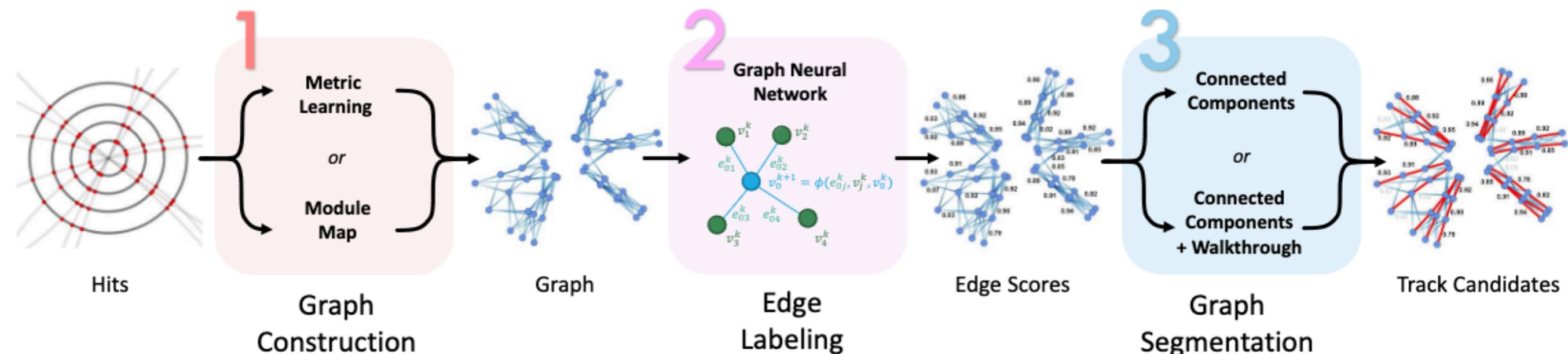
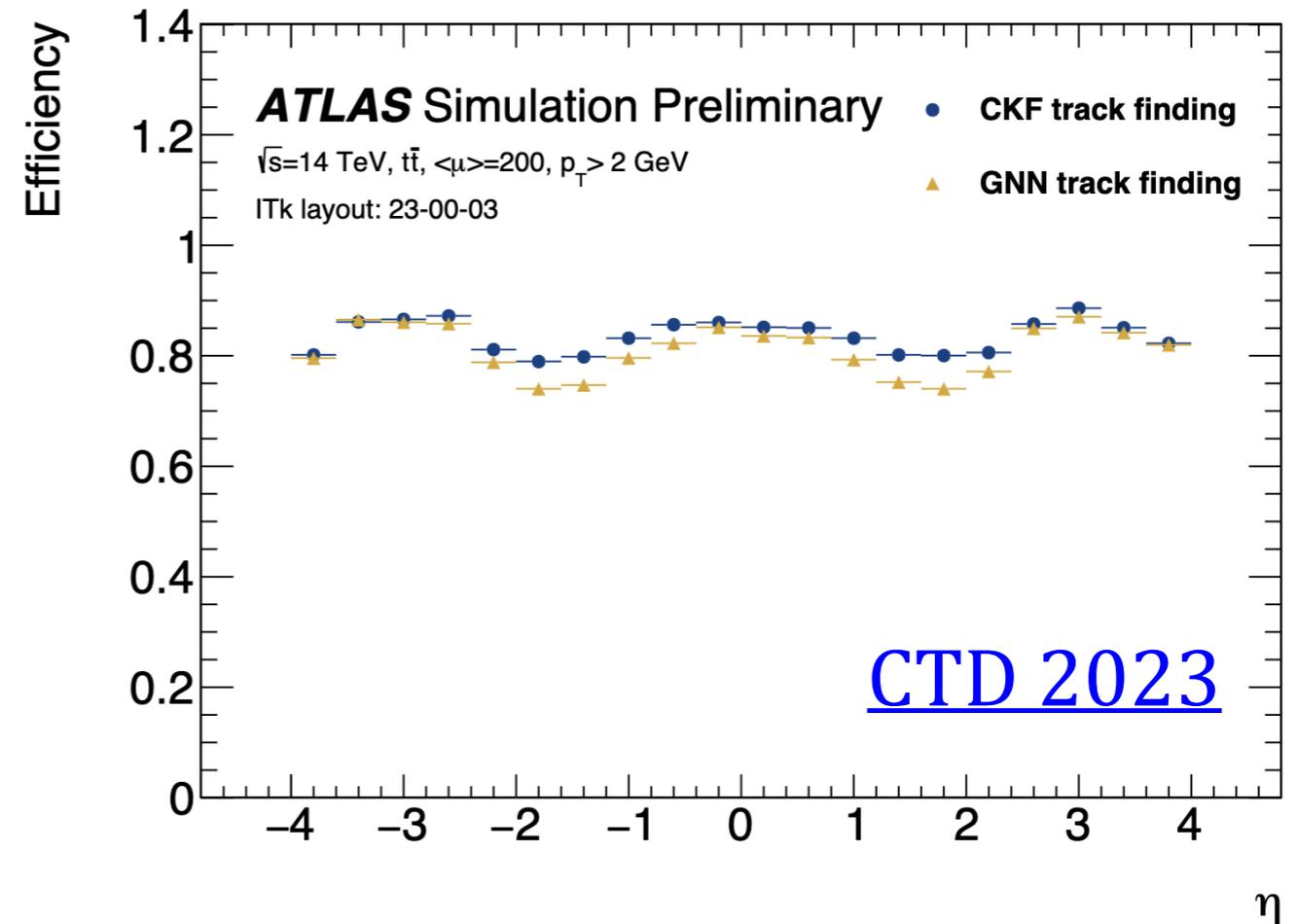
- Particules chargées : **dépôt d'énergie** dans le détecteur (coups)
- **Trajectographie** : connecter ensemble ces coups pour reconstruire une trajectoire



- Très complexe : beaucoup de **combinatoire** ( $\sim 100\ 000$  coups par collision)
- Algorithme très complexe : **Filtres de Kalman**
- Très fort coût CPU

# GNN4ITk : Trajectographie avec un GNN

- Appliqué au futur **trajectographe** d'ATLAS (ITk)
- **Coups = Noeuds**
- Connexion entre coups = arrêtes
- **Classification** d'arête : bonnes arêtes  $\rightarrow$  trajectoire d'une particule
- Performance compatible avec les algorithmes classique



[Physics Performance of the ATLAS GNN4ITk Track Reconstruction Chain](#)

# Conclusion

---

- Deep learning = Machine learning avec des réseaux de neurones
- Capable d'apprendre très efficacement de nos données
- Très grande variété d'algorithmes de machine learning ➡ adapter nos algorithmes à nos problèmes
- De plus en plus omniprésente en physique pour les tâches de reconstruction d'objets, de simulation...

---

# Pour aller plus loin

# Réseau récurrent

Objectif : apprentissage à partir de séquence ou de série temporelle  
Domaine : Traitement du signal, compréhension du langage...

Exemple de séquence :

Traduction  
Automatique

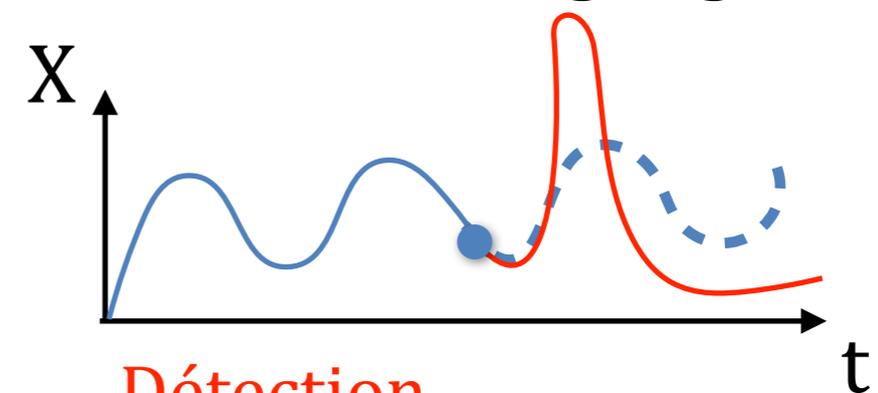
Le film était très bien même si il était un peu long.

The film was very good even if it was a little long.

Texte



Classification  
d'opinion



Détection  
d'anomalie

Analyse de vidéo



Course à pied

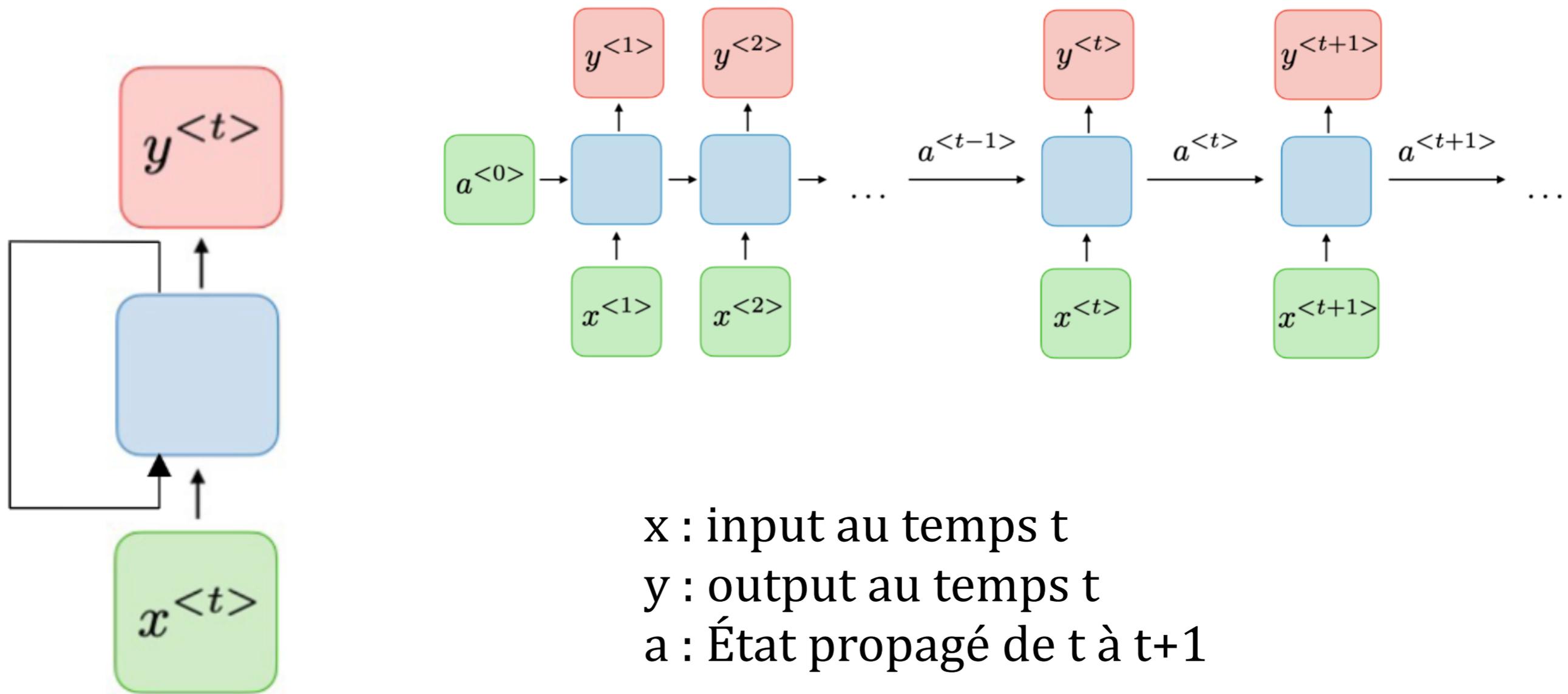


Reconnaissance de la  
parole

Texte

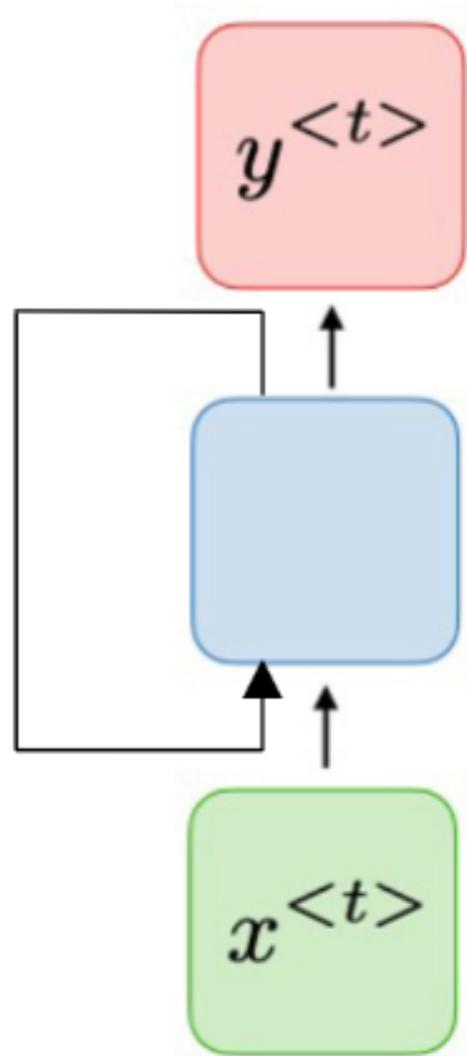
# Réseau récurrent

Les réseaux de neurone récurrent (recurent neural network) sont des réseaux qui utilisent la sortie de l'inférence N pour l'inférence N+1

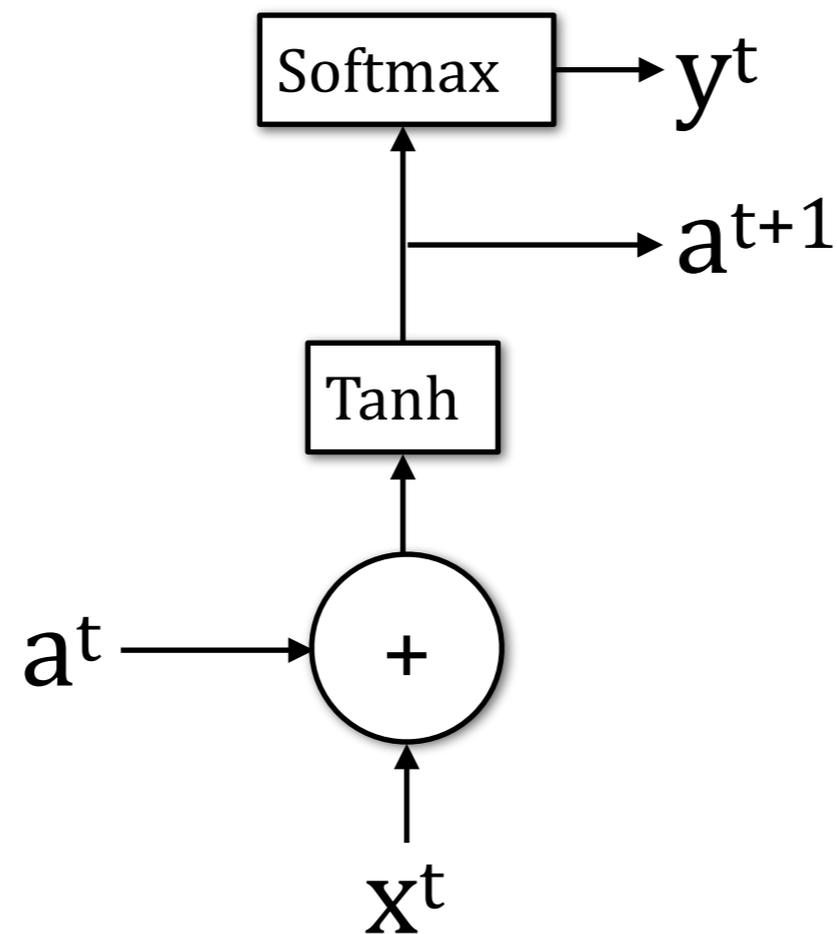


# Réseau récurrent : Cell

Différentes architectures de RNN existe au niveau des cellules ●



Cas simple :



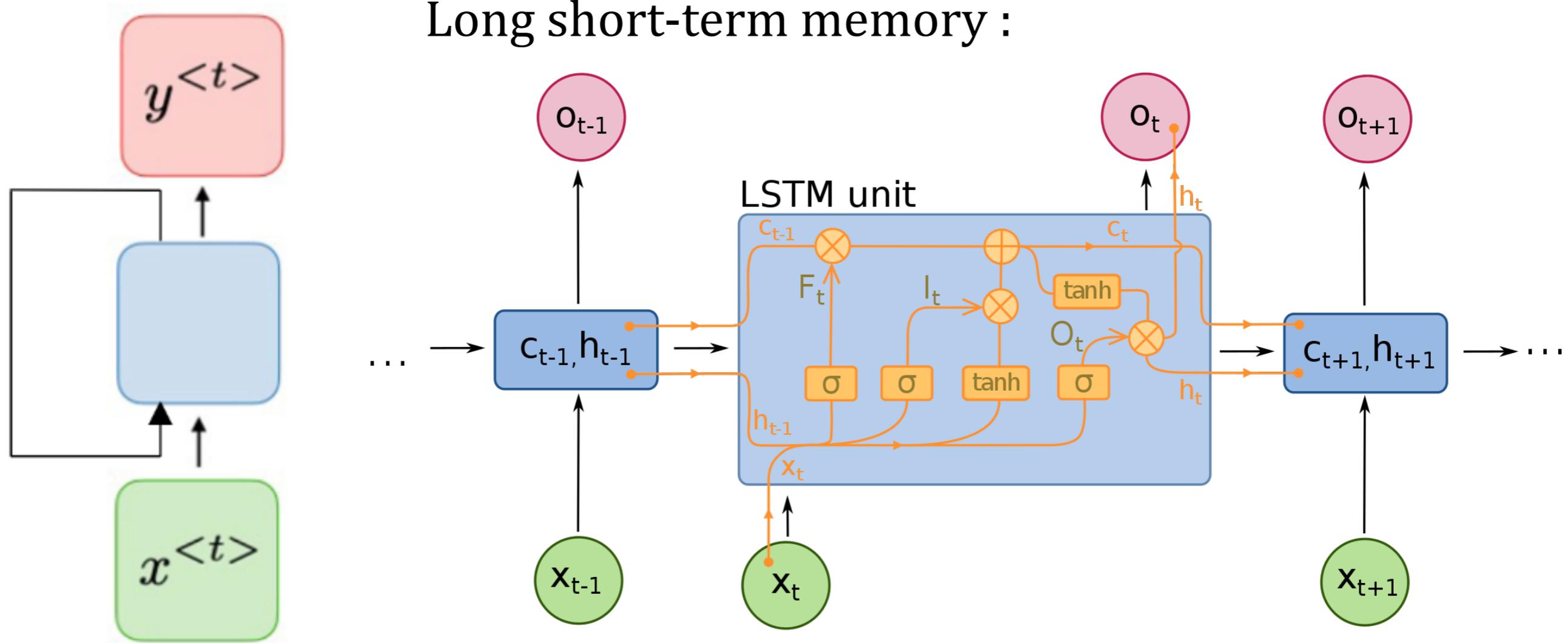
PB : évanouissement/  
explosion du gradient

Propagation de gradient  
sur le long terme  
-> multiplication de  
gradient  
-> tend vers 0 ou l'infini

# Réseau récurrent : Cell

Différentes architectures de RNN existe au niveau des cellules ●

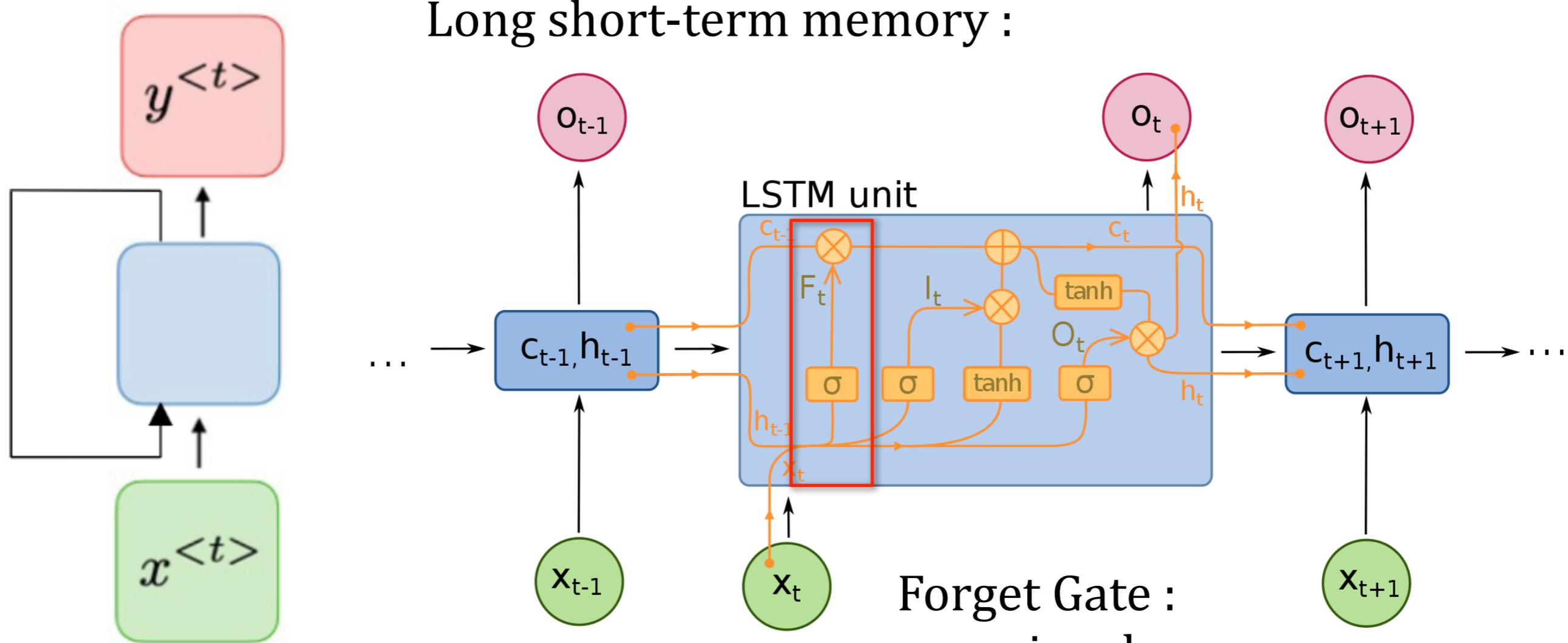
Long short-term memory :



# Réseau récurrent : Cell

Différentes architectures de RNN existe au niveau des cellules ●

Long short-term memory :

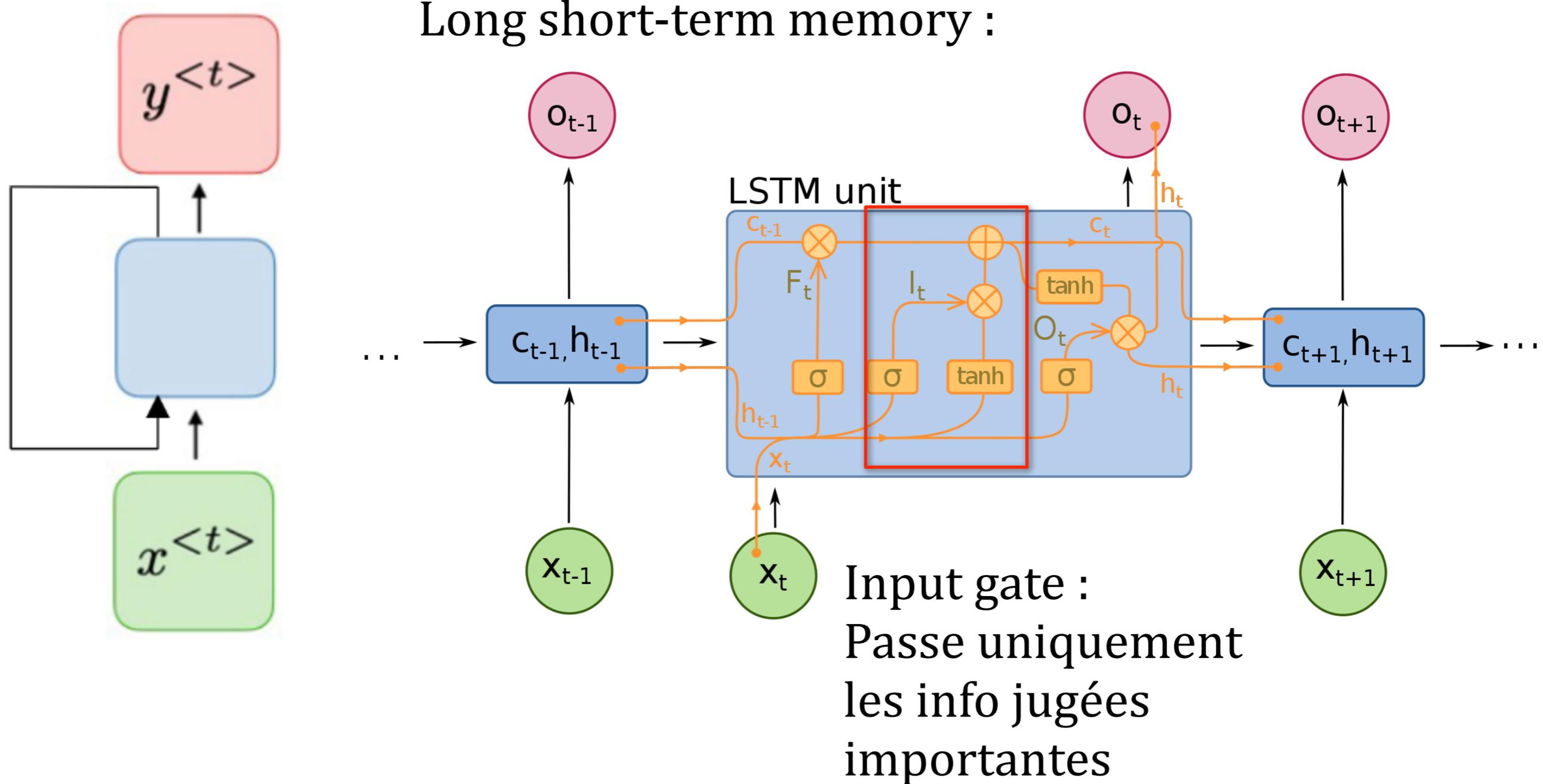


Forget Gate :  
supprime les  
informations non  
importantes

# Réseau récurrent : Cell

Différentes architectures de RNN existe au niveau des cellules ●

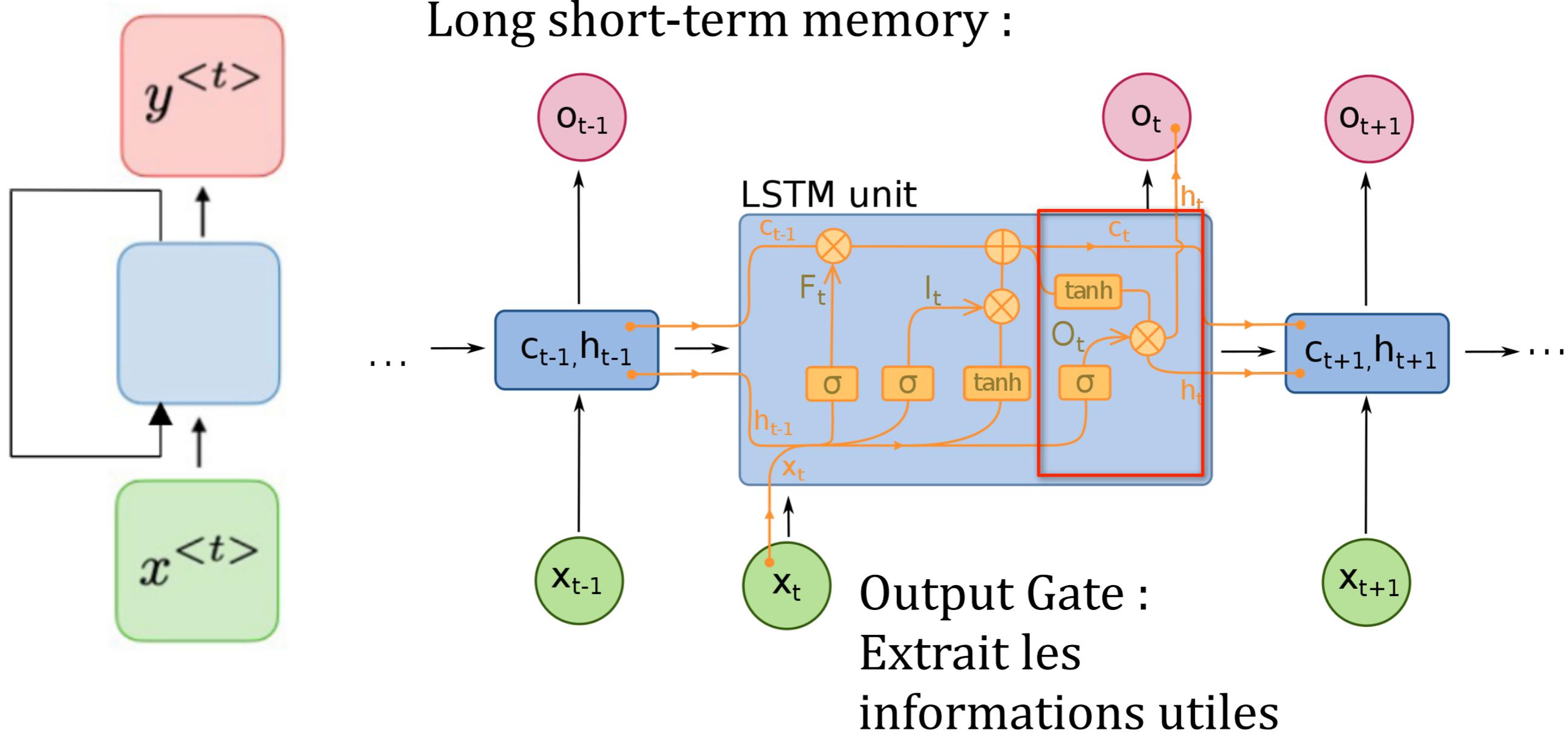
Long short-term memory :



# Réseau récurrent : Cell

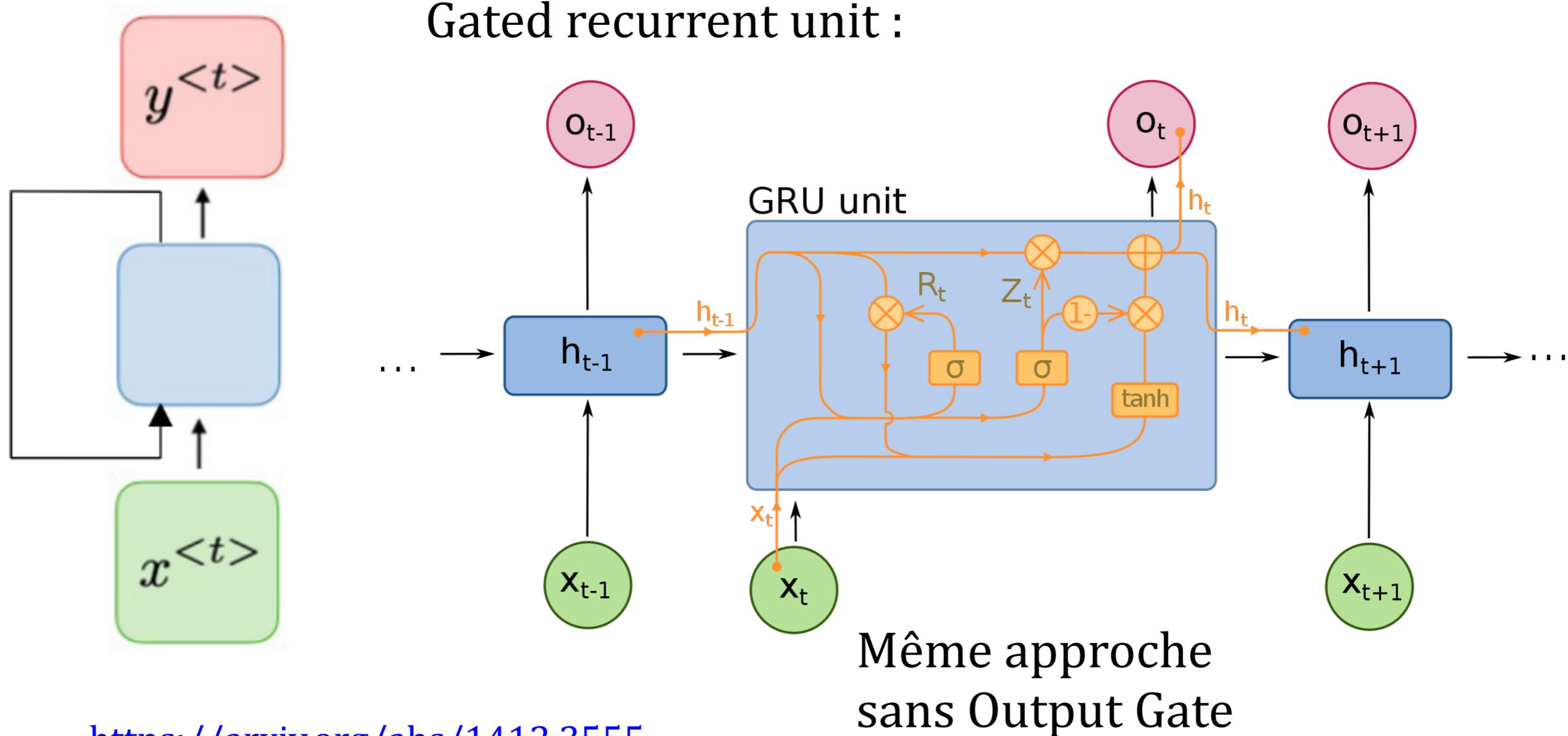
Différentes architectures de RNN existe au niveau des cellules ●

Long short-term memory :



# Réseau récurrent : Cell

Différentes architectures de RNN existe au niveau des cellules ●



<https://arxiv.org/abs/1412.3555>

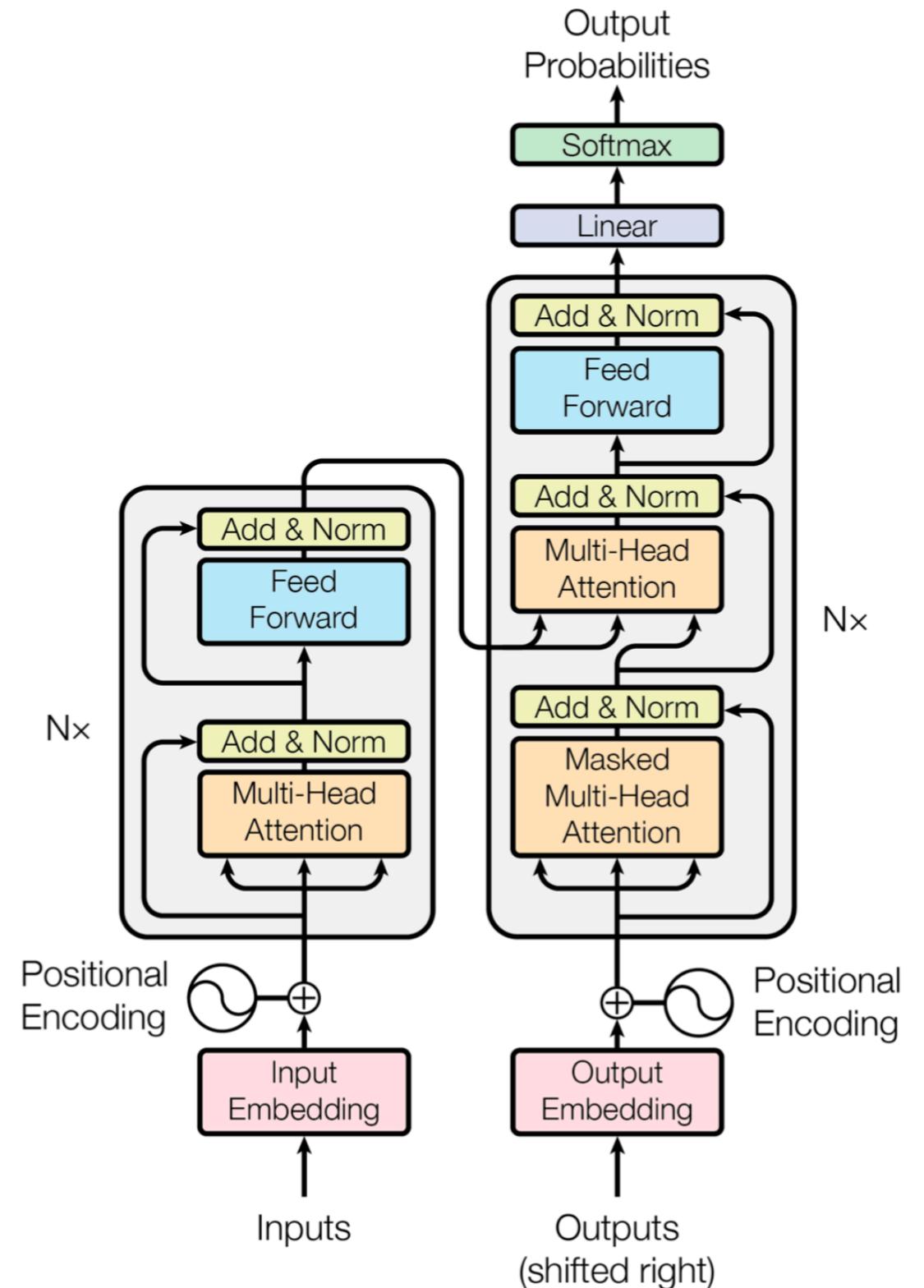
# Transformer

---

- Difficulté de memoire dans les RNN -> les réseaux oublient l'information initiale
- Solution : Transformer (<https://arxiv.org/abs/1706.03762>)
- Réseaux utilisant un mécanisme d'attention pour garder en mémoires les informations
- ENORME succès : application à la plupart de domaines capable de classification, d'analyse et de génération
- Base de tout les Large Language Model (LLM) dont chatGPT

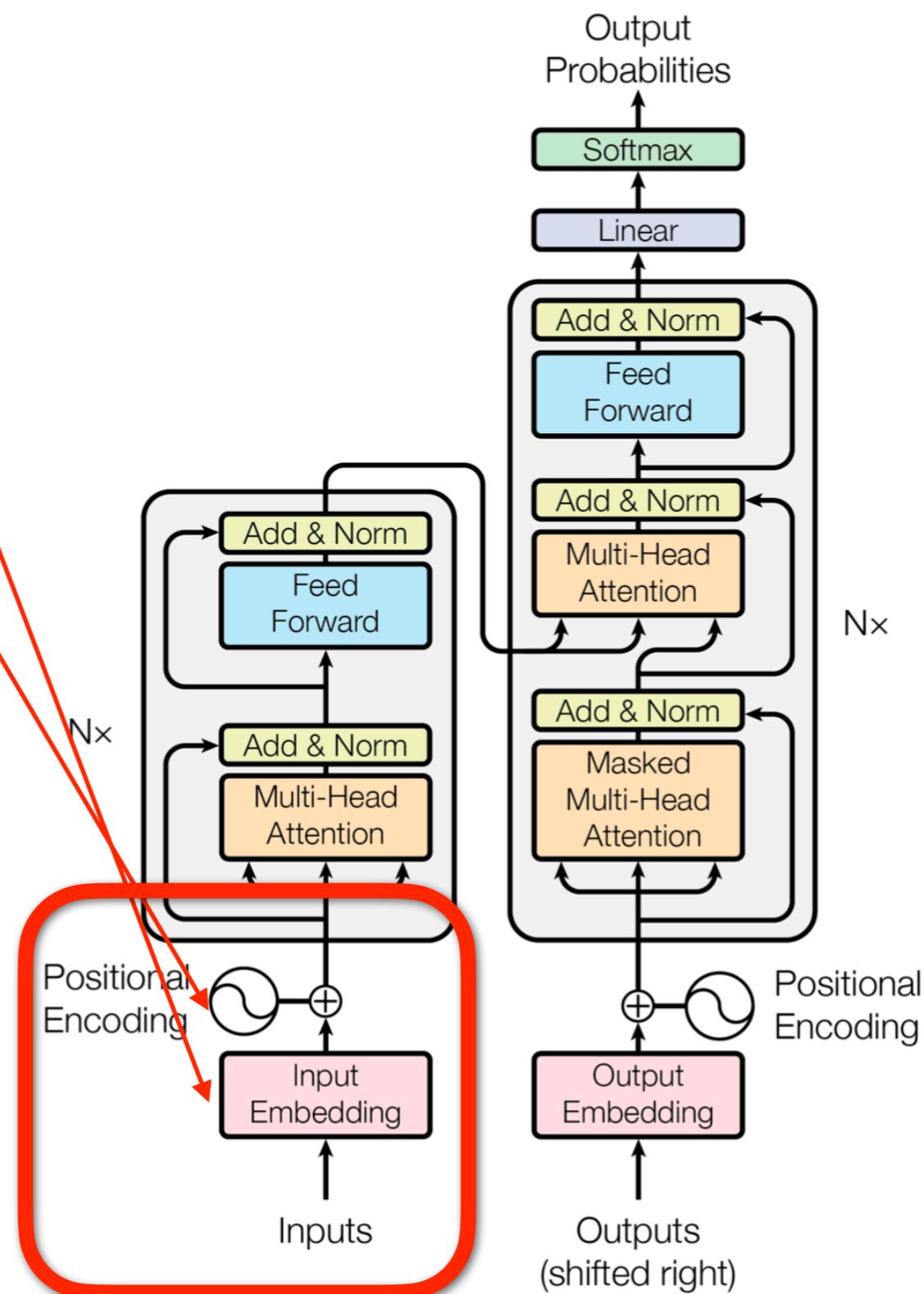
# Transformer

- Mécanisme d'attention : apprend les liens entre les différents éléments
- Encoding : apprend les liens entre les différents éléments de l'input
- Decoding : combine ce qui a déjà été produit avec le résultat de l'encoding pour produire un nouvel output



# Transformer : Embedding

- Transforme chaque élément de l'input en vecteur taille  $d$  :  
 $X_1, X_2, \dots, X_N$
- Dans le cadre du langage la position dans la phrase doit aussi être encodé -> modification du vecteur



# Transformer : Attention

- Objectif : apprendre les liens qui existent entre les inputs
- Transforme les input en 3 vecteurs de taille  $d_k$  par multiplication matricielle :

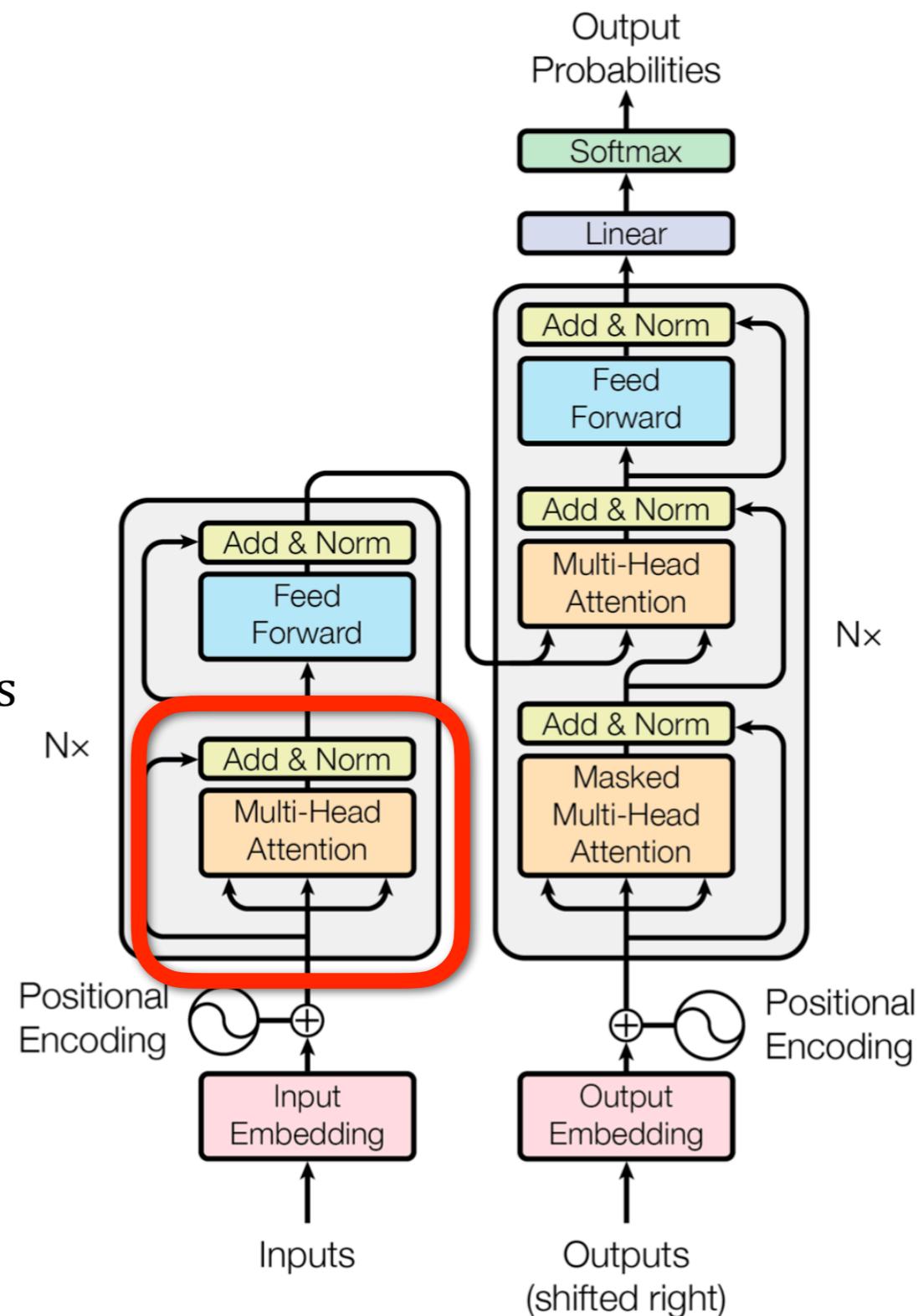
Embedding :  $x_i$

Queries :  $q_i = x_i \times W^Q$

Keys :  $k_i = x_i \times W^K$

Values :  $v_i = x_i \times W^V$

Paramètres appris



# Transformer : Attention

Exemple pour  $q_2$  :

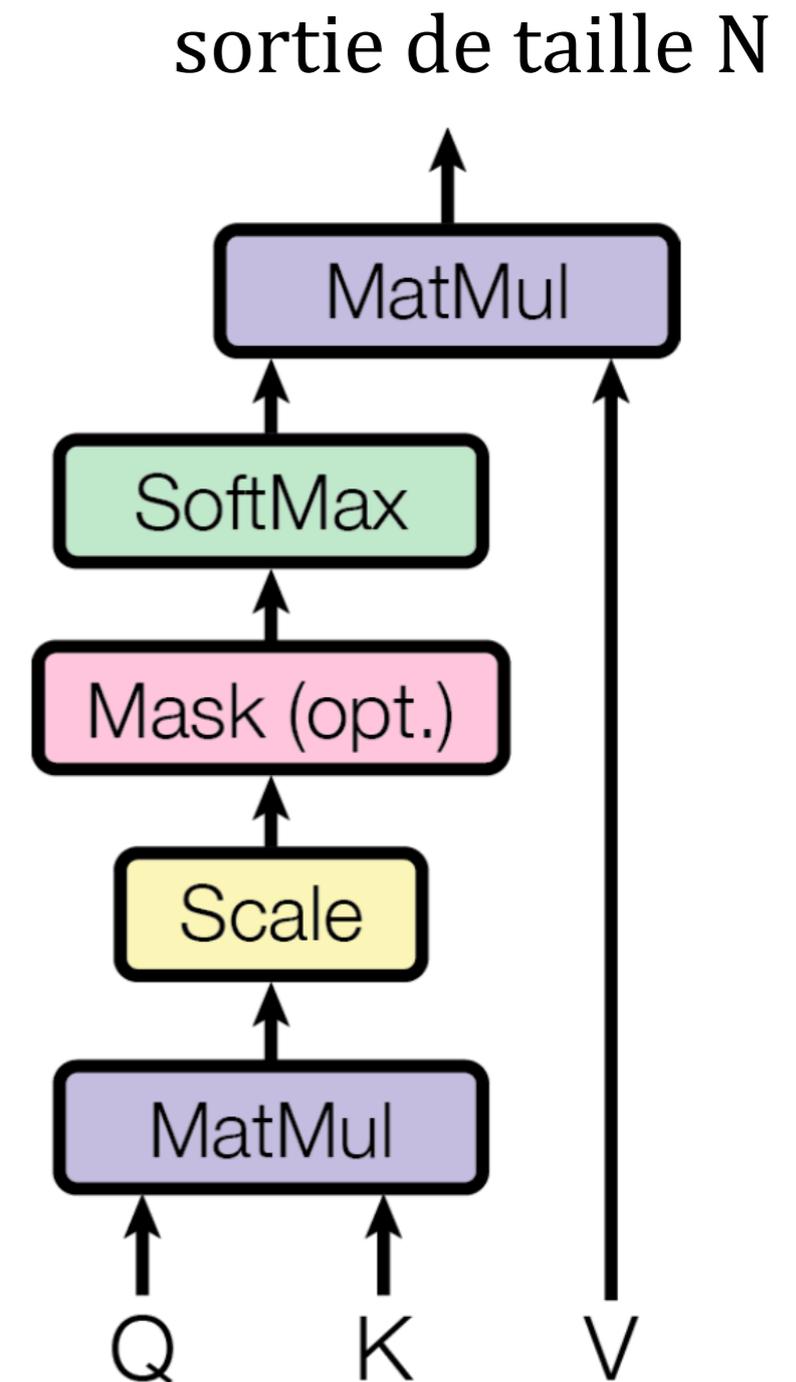
$$\begin{aligned} \text{score1} &= q_2 \times k_1 \\ \text{score1} &= \text{score1} / \sqrt{d} \\ \text{score1} &= \text{SoftMax}(\text{score1}) = 0.9 \\ \text{score1} &= \text{score1} \cdot v_1 \end{aligned}$$

Fort lien

$$\begin{aligned} \text{score2} &= q_2 \times k_2 \\ \text{score2} &= \text{score2} / \sqrt{d} \\ \text{score2} &= \text{SoftMax}(\text{score2}) = 0.1 \\ \text{score2} &= \text{score2} \cdot v_2 \end{aligned}$$

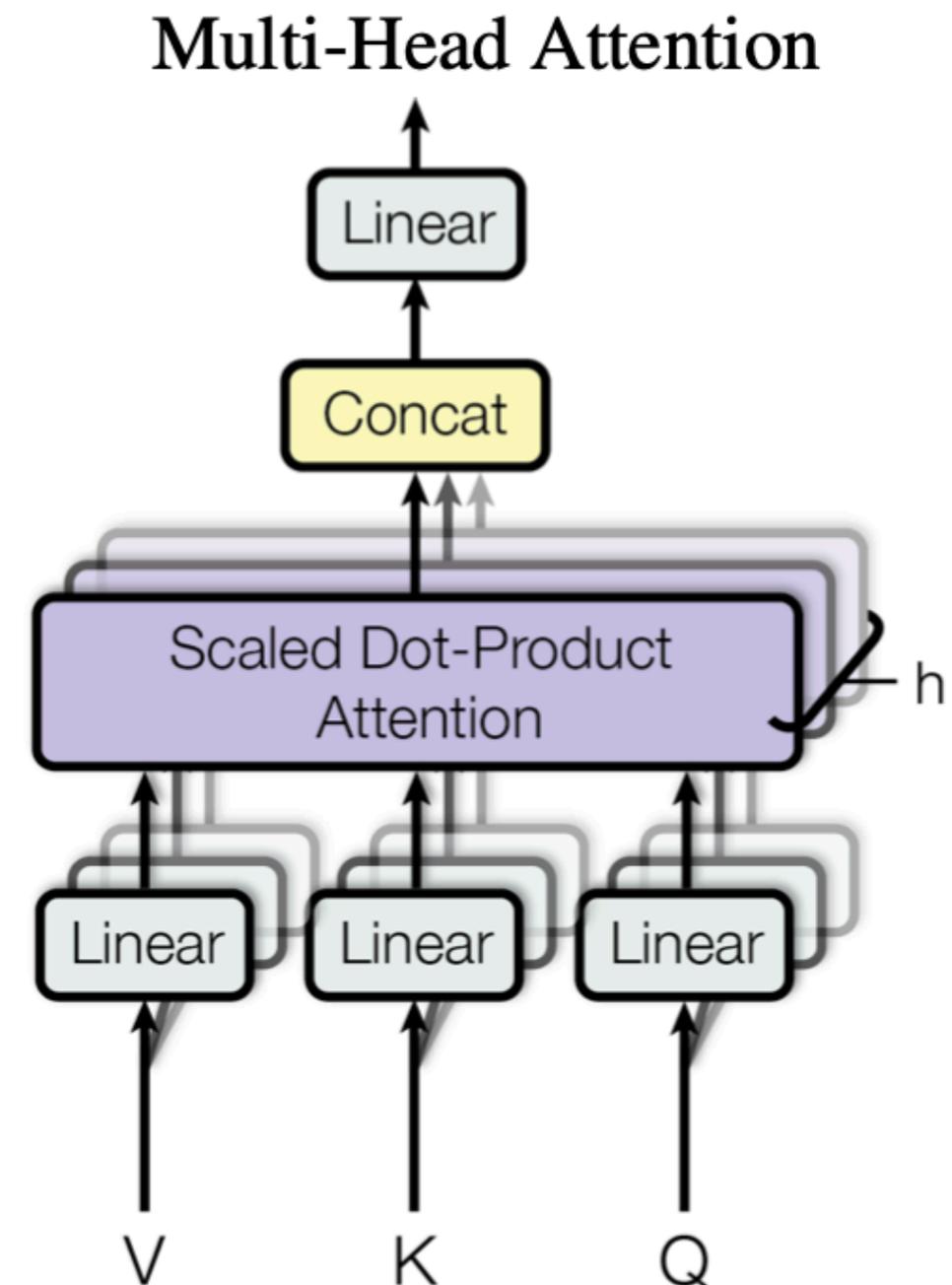
Faible lien

$$z_2 = \sum_{l=1}^N \text{score}_l$$



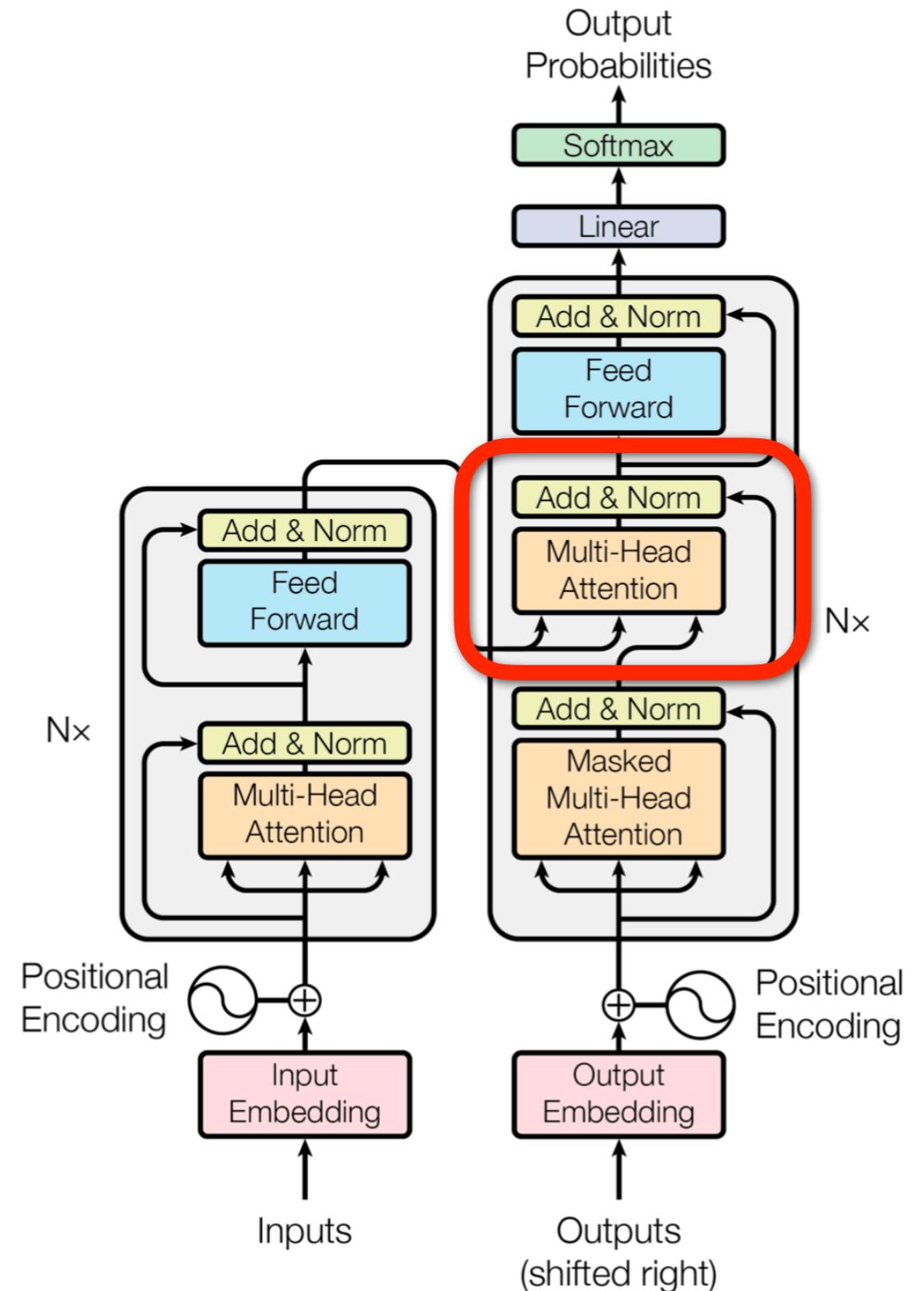
# Transformer : Attention

- Opération effectuée  $h$  fois en parallèle tel que :  $d = h \times d_k$
- Plus efficace et rapide
- Résultat combiné a-posteriori



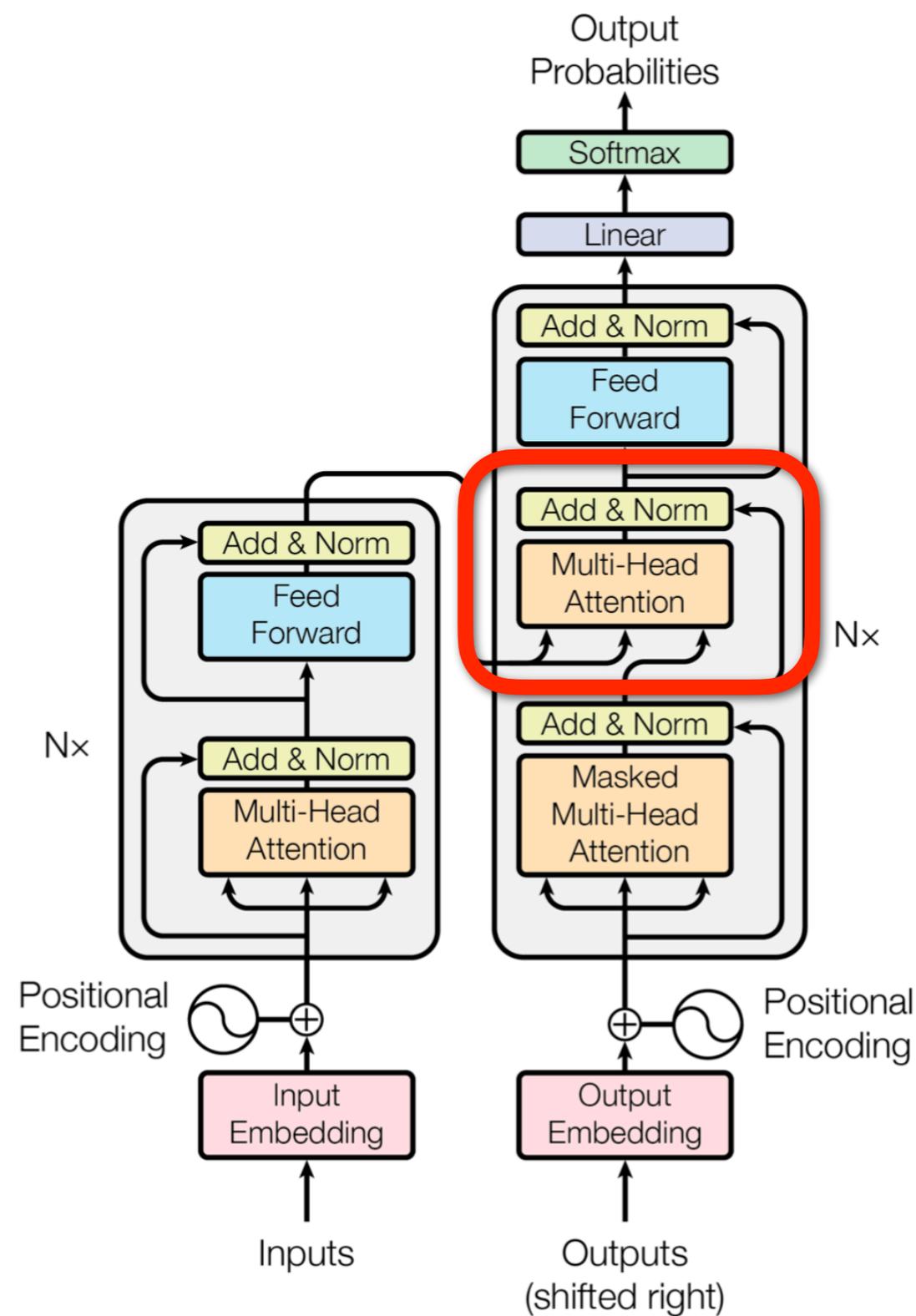
# Transformer : Décodeur

- Après l'attention passage dans un NN
- Dans le décodeur les queries  $q'$  des output précédent sont comparé aux keys et values de l'encodeur
- L'opération ce répète jusqu'a ce que l'output corresponde au caractère de fin d'opération



# Transformer : Exemple

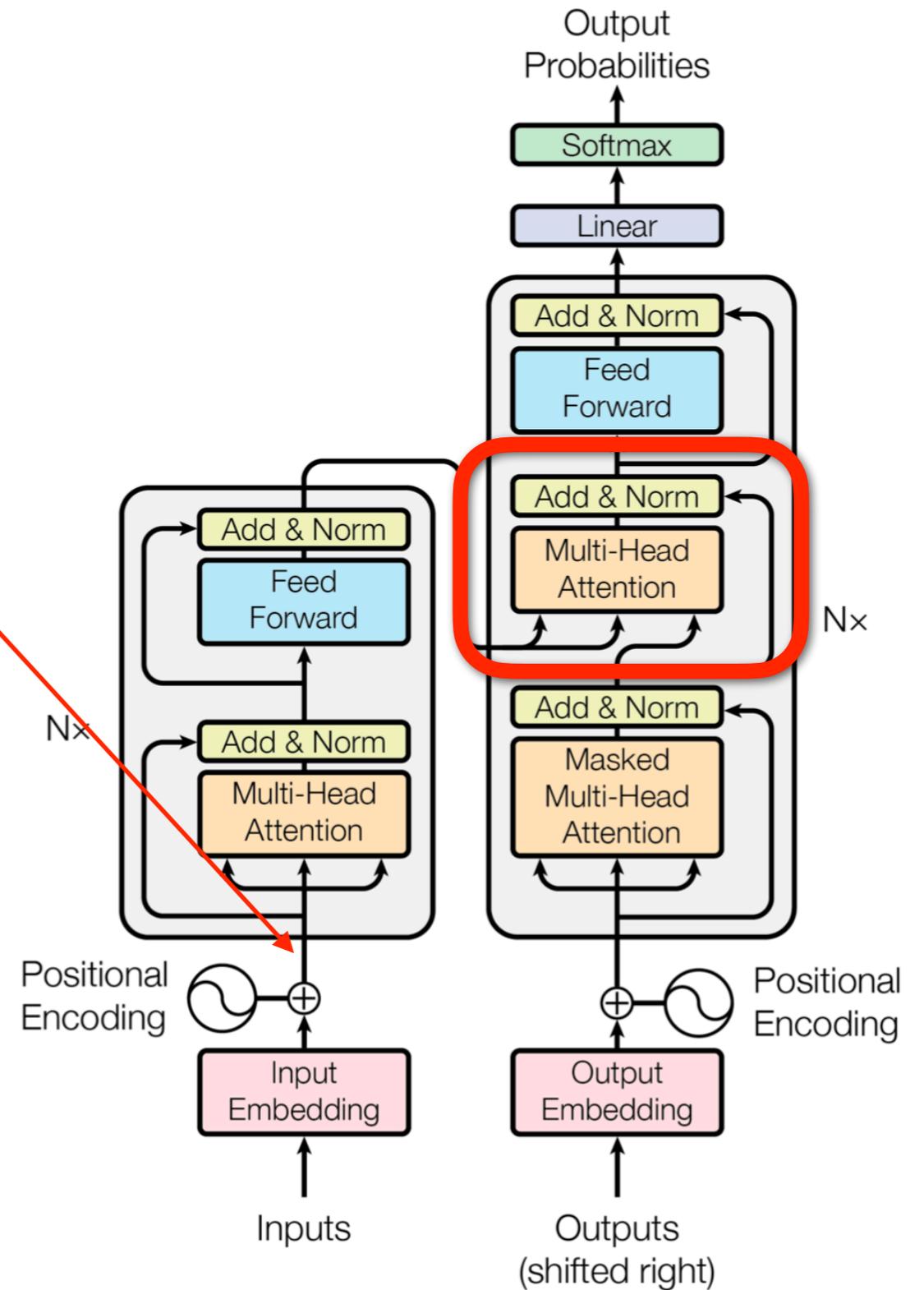
Traduction : « Je mange un kiwi »



# Transformer : Exemple

Traduction : « Je mange un kiwi »

Embedding :  $[x_1, x_2, x_3, x_4]$

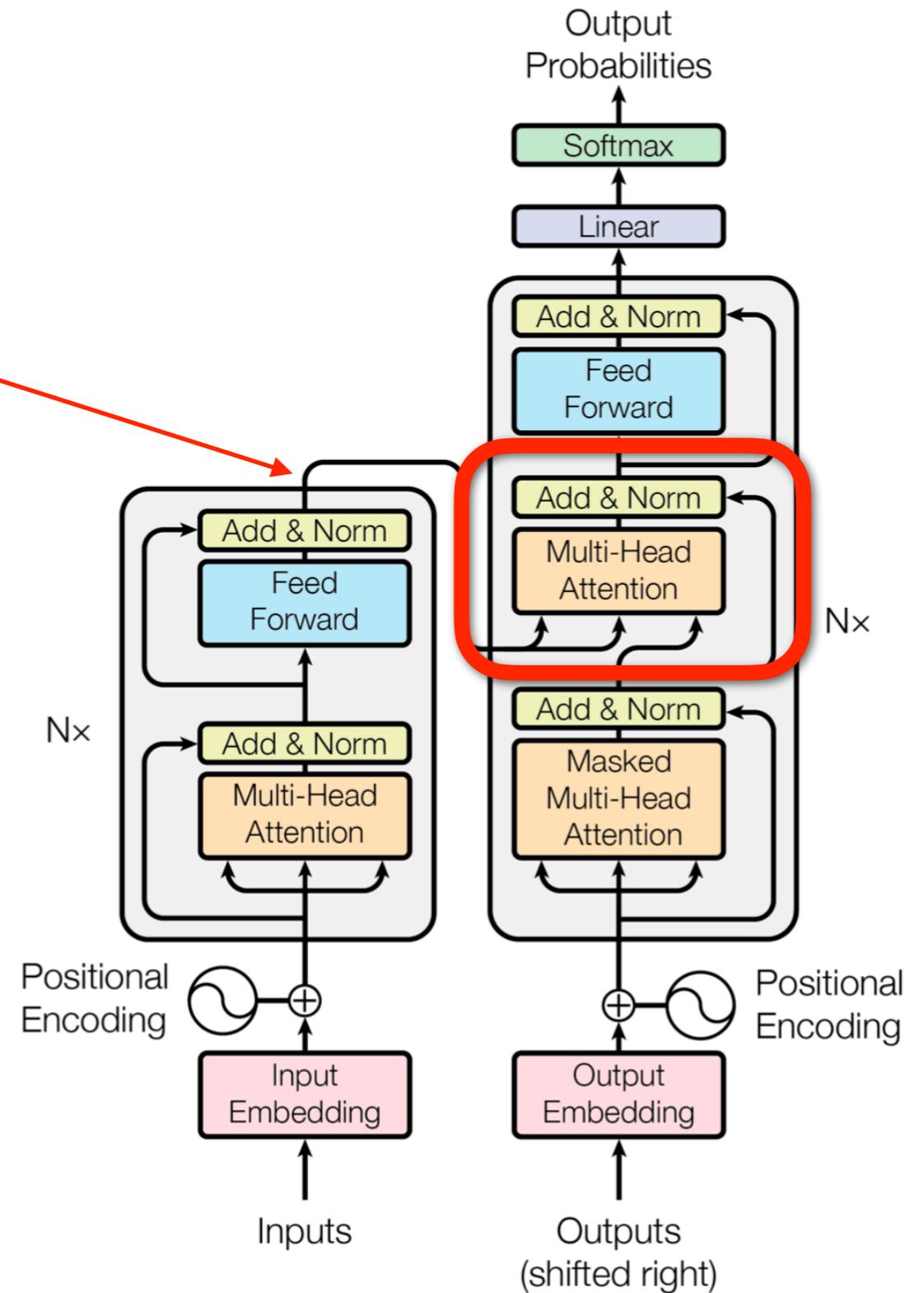


# Transformer : Exemple

Traduction : « Je mange un kiwi »

Embedding :  $[x_1, x_2, x_3, x_4]$

N boucle d'encodage :  $[z_1, z_2, z_3, z_4]$



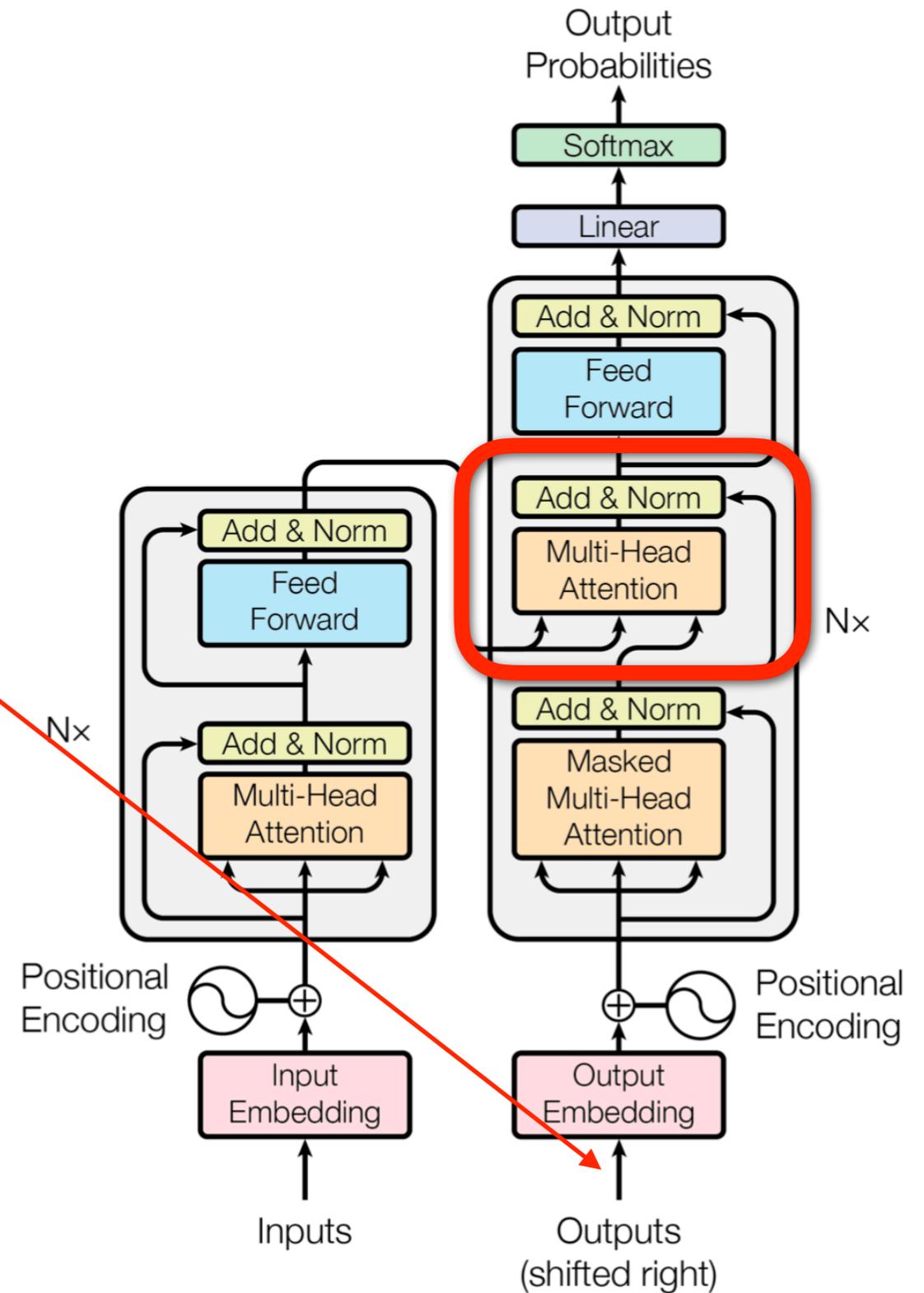
# Transformer : Exemple

Traduction : « Je mange un kiwi »

Embedding :  $[x_1, x_2, x_3, x_4]$

N boucle d'encodage :  $[z_1, z_2, z_3, z_4]$

Décodage : Output =  $\emptyset \rightarrow o_0$



# Transformer : Exemple

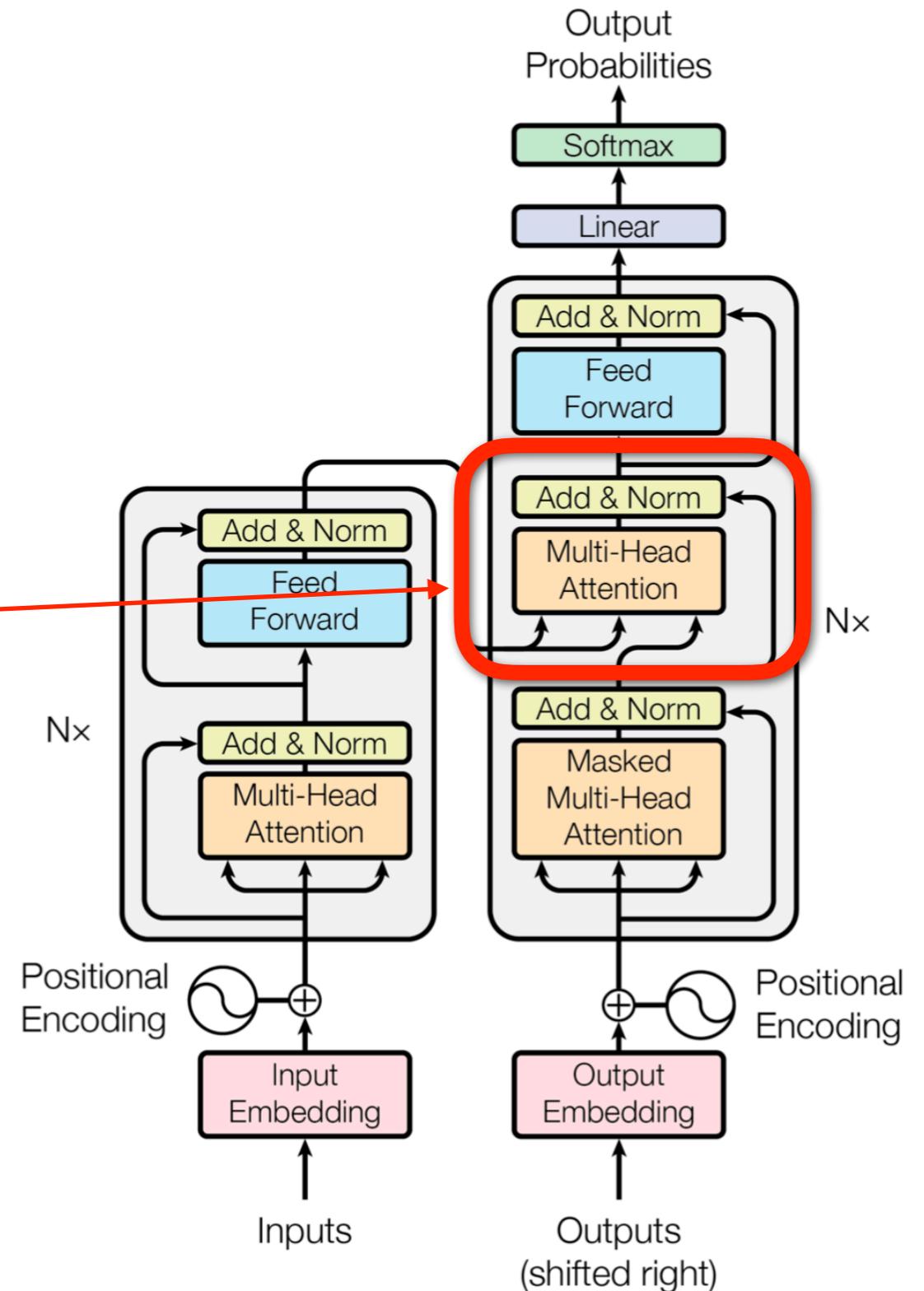
Traduction : « Je mange un kiwi »

Embedding :  $[x_1, x_2, x_3, x_4]$

N boucle d'encodage :  $[z_1, z_2, z_3, z_4]$

Décodage : Output =  $\emptyset \rightarrow o_0$

Décodage : combine  $[z_1, z_2, z_3, z_4]$   
et les  $o_i$



# Transformer : Exemple

Traduction : « Je mange un kiwi »

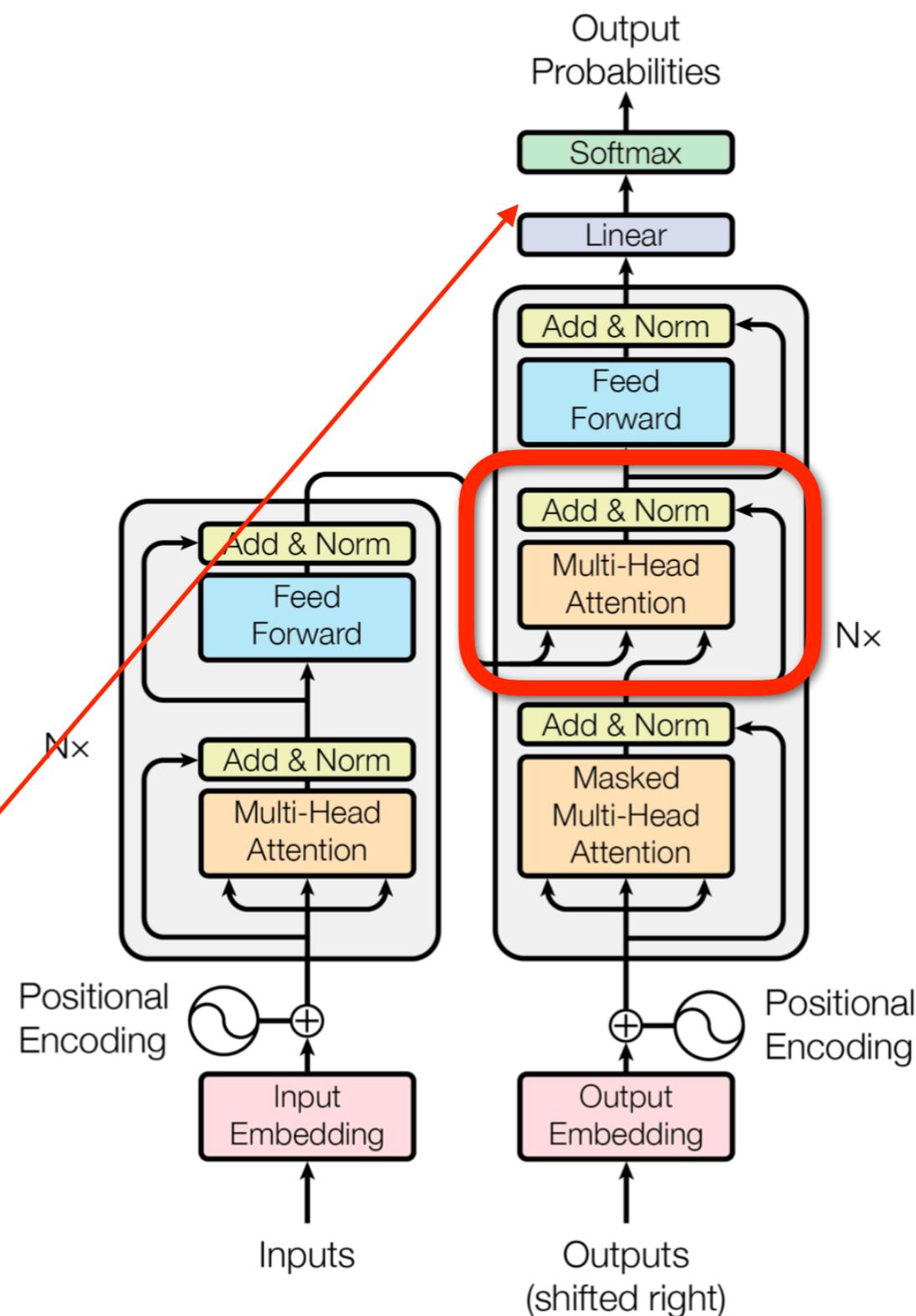
Embedding :  $[x_1, x_2, x_3, x_4]$

N boucle d'encodage :  $[z_1, z_2, z_3, z_4]$

Décodage : Output =  $\emptyset \rightarrow o_0$

Décodage : combine  $[z_1, z_2, z_3, z_4]$   
et les  $o_i$

Output :  $o'_1$  probabilité des différents  
mots  $\rightarrow$  Sélectionne le max :  $o_1 = 1$



# Transformer : Exemple

Traduction : « Je mange un kiwi »

Embedding :  $[x_1, x_2, x_3, x_4]$

N boucle d'encodage :  $[z_1, z_2, z_3, z_4]$

Décodage : Output =  $\emptyset \rightarrow o_0$

Décodage : combine  $[z_1, z_2, z_3, z_4]$   
et les  $o_i$

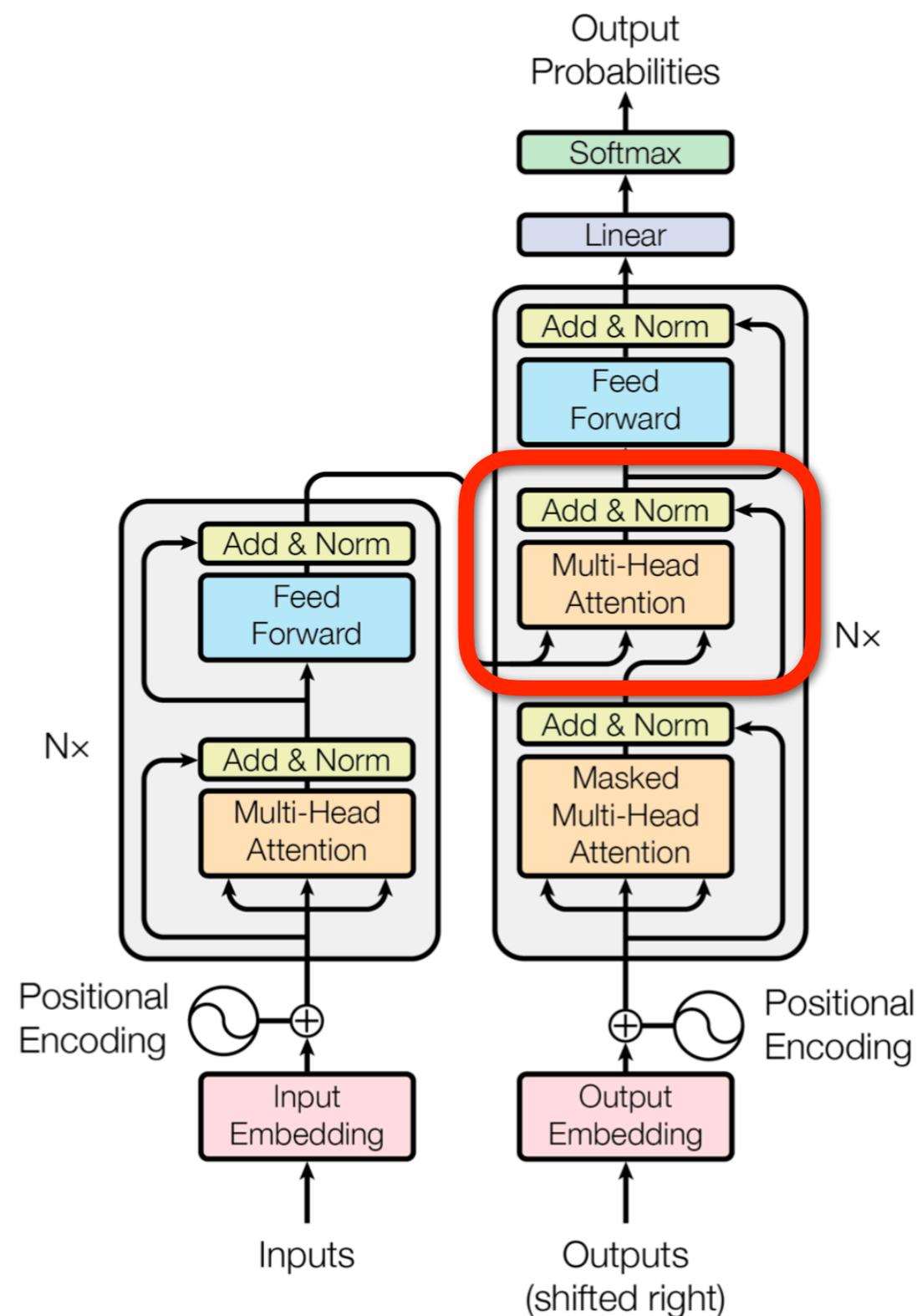
Output :  $o'_1$  probabilité des différents  
mots  $\rightarrow$  Sélectionne le max :  $o_1 = I$

Continue le décodage :

$> o_2 = am$                        $[o_1, o_2, o_3] \rightarrow o_4 = a$

$[o_1, o_2] \rightarrow o_3 = eating$        $[o_1, o_2, o_3, o_4] \rightarrow o_5 = kiwi$

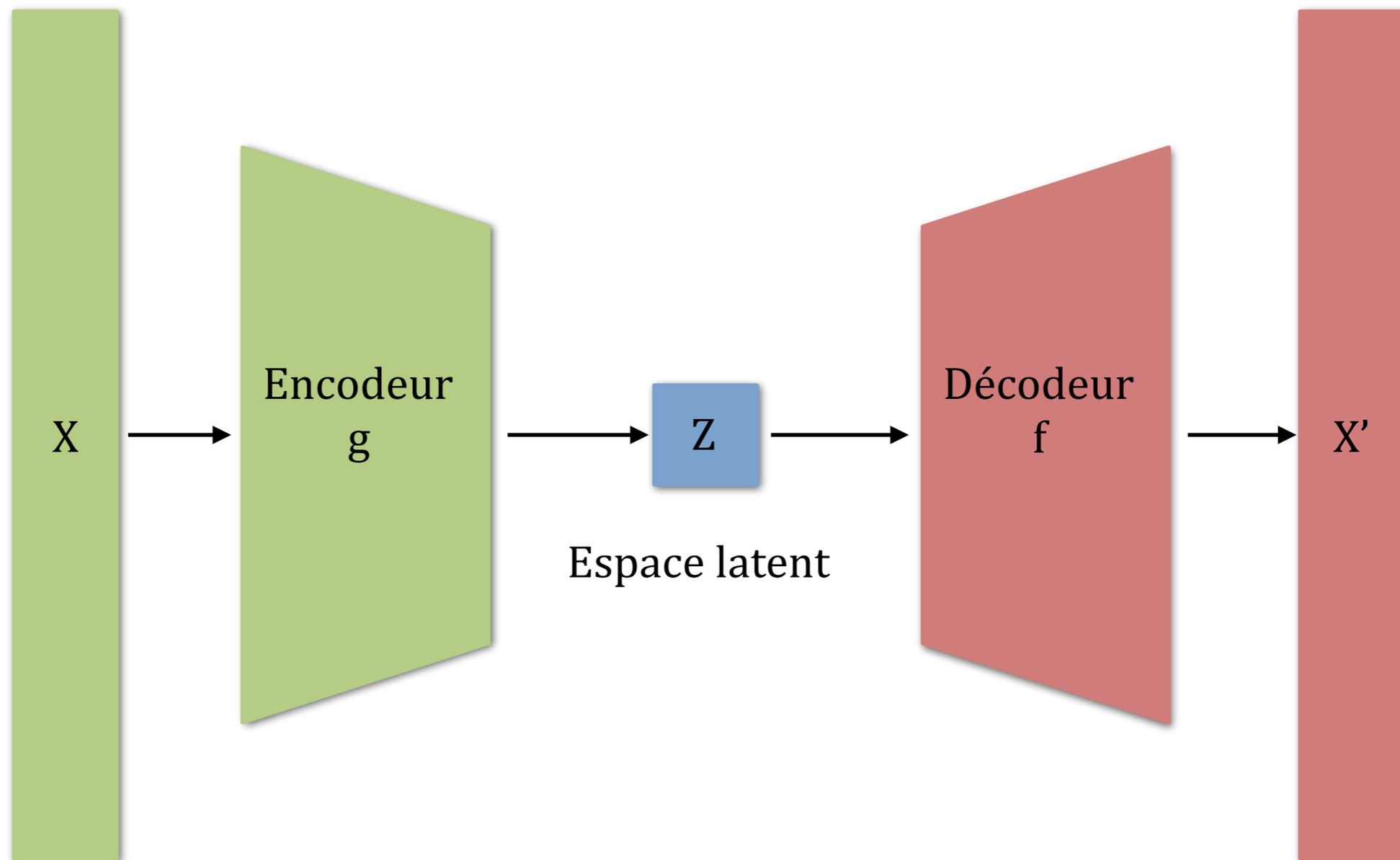
$[o_1, o_2, o_3, o_4, o_5] \rightarrow o_6 = \langle eos \rangle$



# Auto Encoders

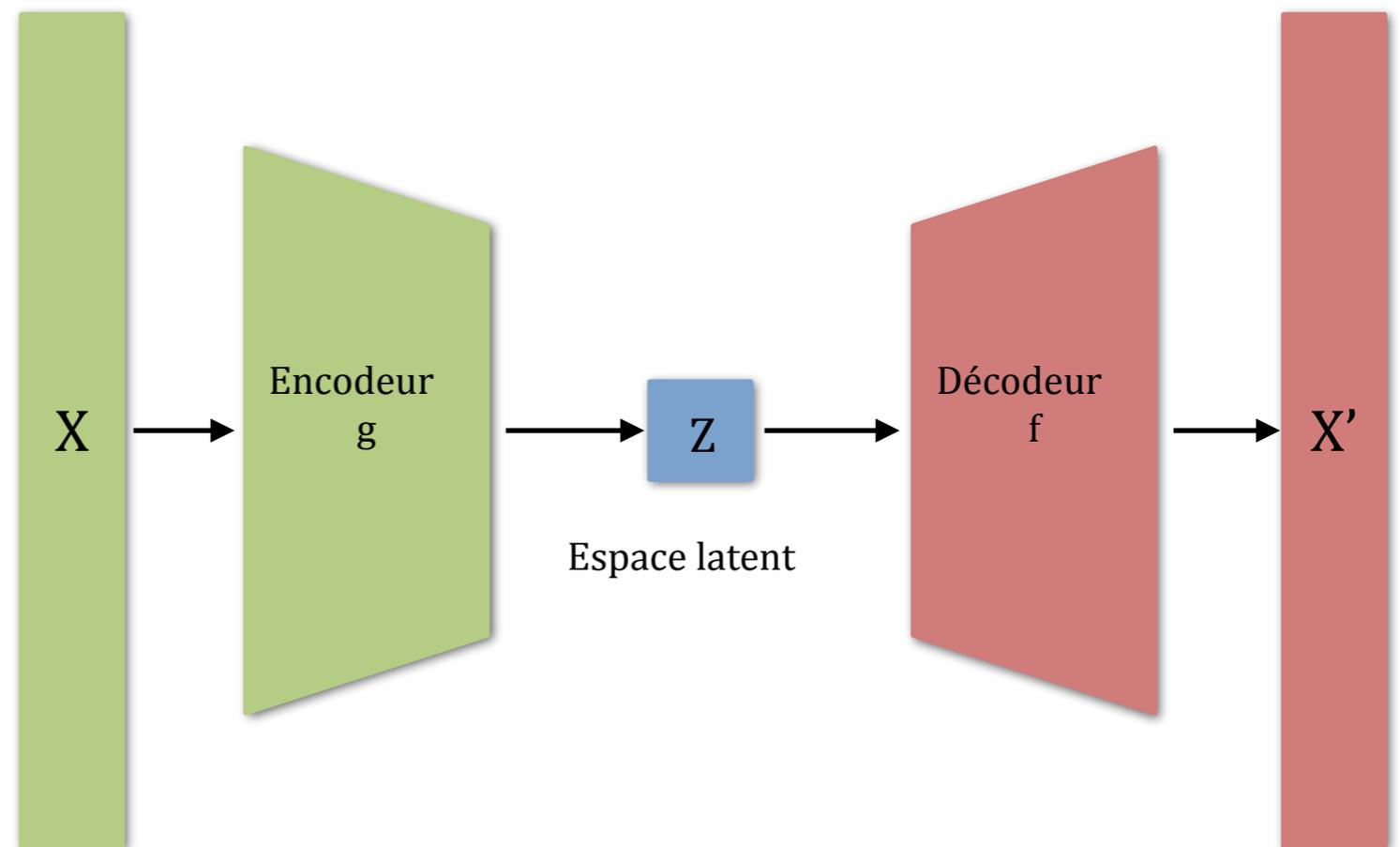
---

Application : Débruitage, réduction de dimension, détection d'anomalie



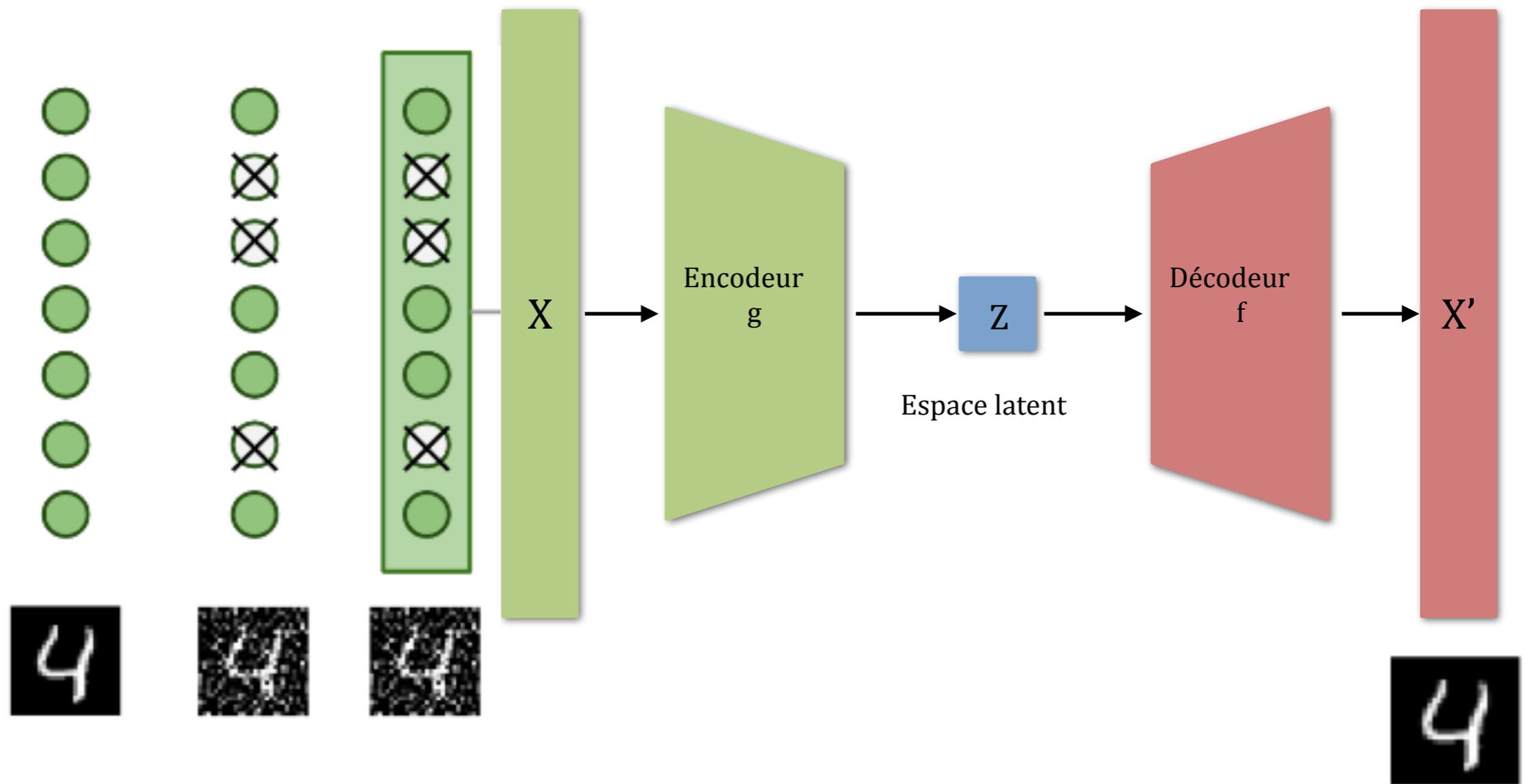
# Auto Encoders

- Encodeur : réduit la taille de l'entrée en un petit espace latent
- Décodeur : reconstruit l'entrée à partir de l'espace latent
- Fonction de coût minimise la différence entre  $X'$  et  $X$



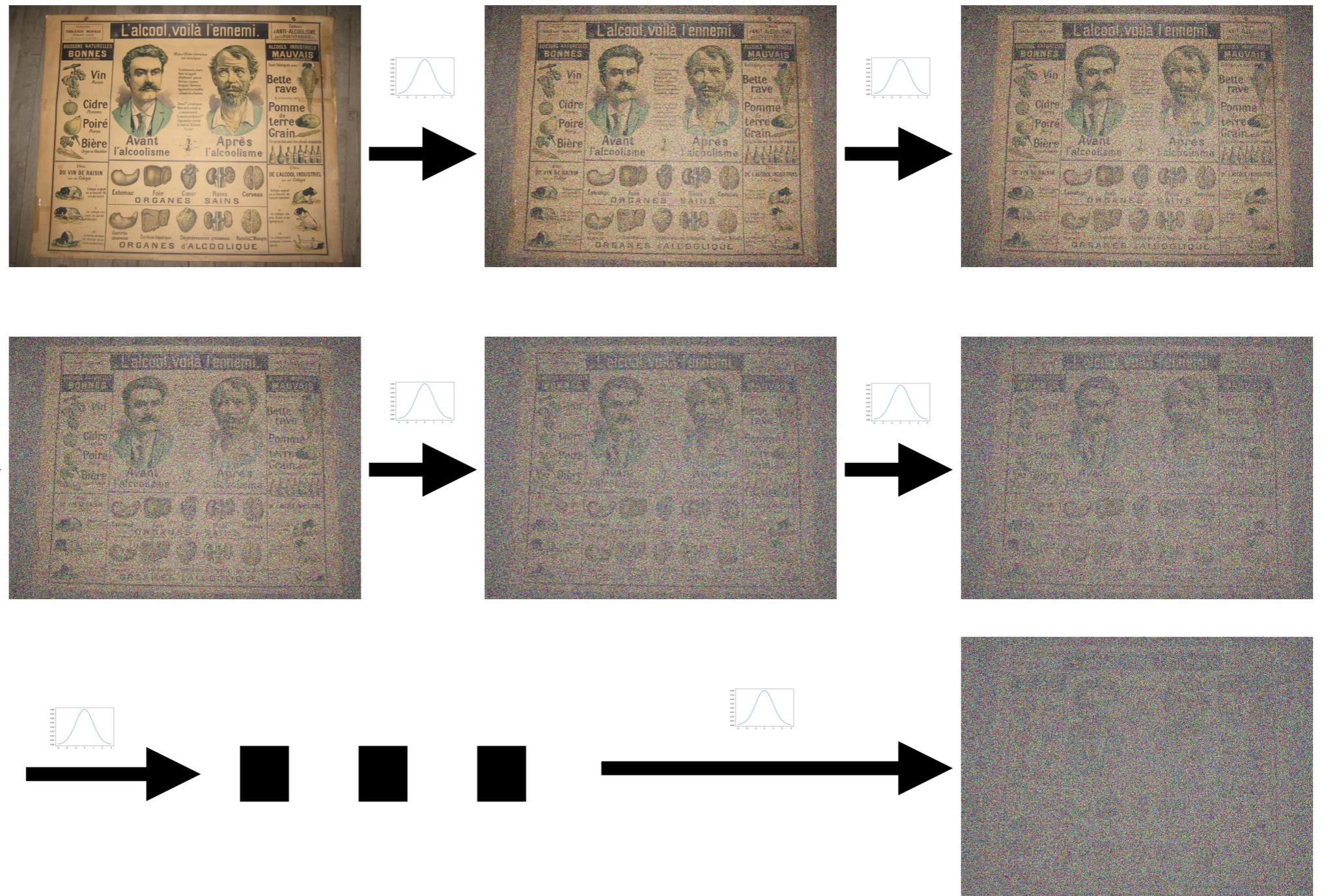
# Auto Encoders : debruitage

Même espace latent avec des entré bruité



# Diffusion models

Approche similaire au AE mais appliqué à la génération

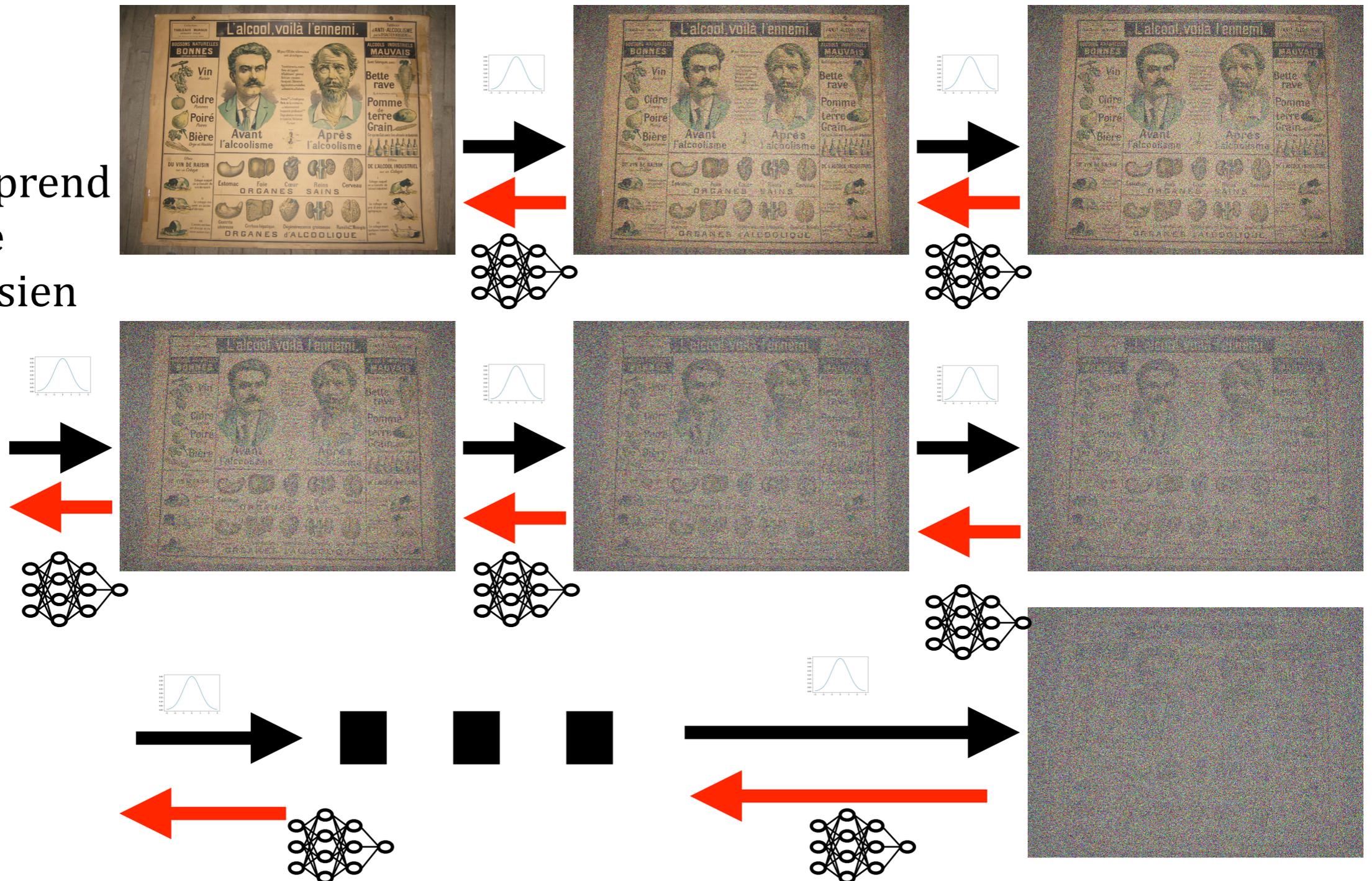


Ajout successif  
de petit bruit  
gaussien

# Diffusion models

Approche similaire au AE mais appliqué à la génération

NN qui apprend à retirer le bruit gaussien



# Diffusion models

Peut partir du bruit pour reconstruire des images

Possibilité d'ajouter des condition à la reconstruction

