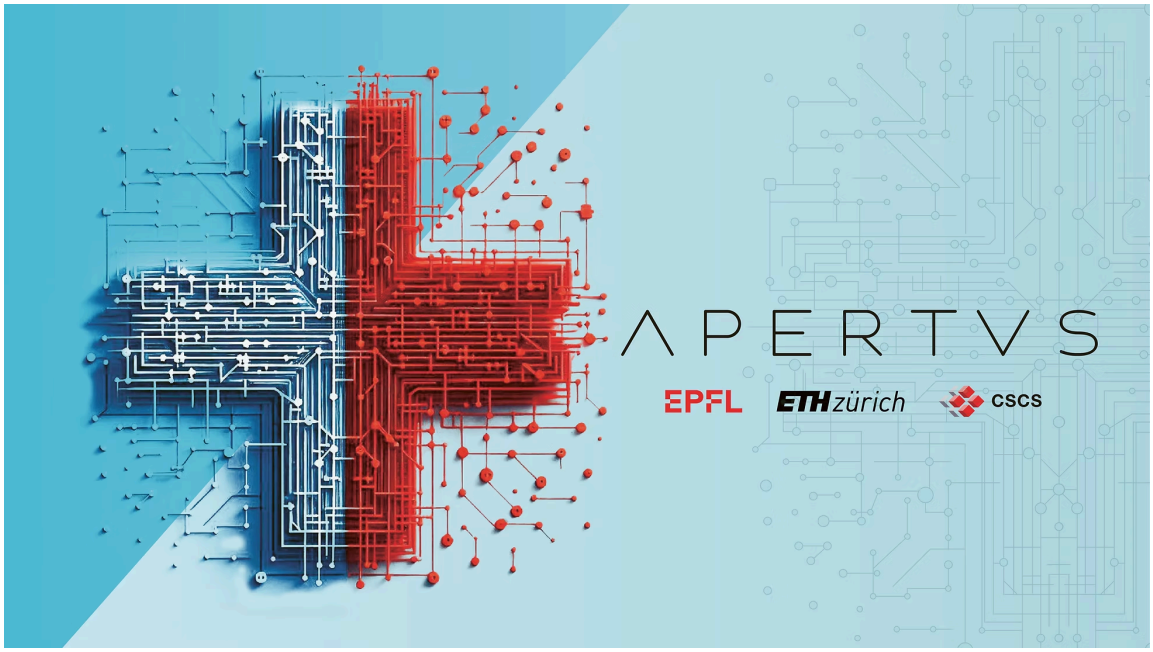
Validation croisée et ajustement des hyperparamètres

CSI 4506 - Automne 2025

Marcel Turcotte
Version: sept. 21, 2025 15h46

Préambule

Message du jour



Apertus : un modèle linguistique entièrement ouvert, transparent et multilingue, ETH Zürich, Communiqué de presse, 2025-09-02.

> L'EPFL, l'ETH Zurich et le Centre suisse de supercalcul (CSCS) ont publié le 2 septembre Apertus : le premier modèle de langage complet, ouvert et multilingue de Suisse. Ils posent ainsi un jalon pour une IA générative transparente et diversifiée.

- www.swiss-ai.org/apertus
- Téléchargements disponibles sur Hugging Face
- Accès public

Le Canada devrait-il entreprendre un tel projet ambitieux ?

Le Canada est reconnu pour sa recherche exceptionnelle en intelligence artificielle, soutenue par plusieurs institutions et chercheurs de renom. Parmi les exemples notables :

- L'Institut Vector à Toronto, qui abrite des chercheurs éminents comme Geoffrey Hinton, récipiendaire du prix Turing 2018 pour ses travaux pionniers en apprentissage profond et du prix Nobel de physique 2024.
- Mila à Montréal, dirigé par Yoshua Bengio, un autre lauréat du prix Turing 2018 reconnu pour ses contributions à l'apprentissage profond.
- L'Alberta Machine Intelligence Institute (Amii), où Richard S. Sutton est une figure clé et a reçu le prix Turing 2024 pour ses travaux influents en apprentissage par renforcement.

Ces institutions et individus soulignent le leadership et l'engagement continu du Canada dans l'avancement de la recherche en intelligence artificielle.

L'Alliance de recherche numérique du Canada, soutenue par un engagement de 2 milliards de dollars du gouvernement du Canada en 2024, fournit une infrastructure de pointe pour la recherche avancée. Notamment, la ressource de calcul haute performance, Nibi, a été lancée le 31 juillet 2025. Elle comprend 134 400 cœurs de CPU et 288 GPU NVIDIA H100, augmentant considérablement la capacité de calcul. Pour plus de spécifications techniques, veuillez vous référer à la documentation technique.

Objectifs d'apprentissage

1. **Comprendre l'objectif de la division des données :**
   - Décrire les rôles des ensembles d'entraînement, de validation et de test dans l'évaluation des modèles.
   - Expliquer pourquoi et comment les ensembles de données sont divisés pour un apprentissage et une évaluation efficaces des modèles.
2. **Expliquer les techniques de validation croisée :**
   - Définir la validation croisée et son importance dans l'évaluation des modèles.
   - Illustrer le processus de validation croisée k-fold et ses avantages par rapport à une seule division entraînement-test.
   - Discuter des concepts de sur-apprentissage et de sous-apprentissage dans le contexte de la validation croisée.
3. **Ajustement des hyperparamètres :**
   - Expliquer la différence entre les paramètres de modèle et les hyperparamètres.
   - Décrire les méthodes de réglage des hyperparamètres, y compris la recherche en grille et la recherche aléatoire.
   - Implémenter l'ajustement des hyperparamètres à l'aide de `GridSearchCV` dans scikit-learn.

4. **Évaluer la performance du modèle :**
    - Interpréter les résultats de la validation croisée et comprendre des métriques telles que la moyenne et l'écart-type des scores.
    - Discuter de la manière dont la validation croisée aide à évaluer la généralisation du modèle et à réduire la variabilité.
5. **Flux de travail de l'ingénierie en apprentissage automatique :**
    - Décrire les étapes impliquées dans la préparation des données pour les modèles d'apprentissage automatique.
    - Utiliser les pipelines scikit-learn pour un prétraitement efficace des données et un entraînement des modèles.
    - Insister sur l'importance des transformations de données cohérentes entre les environnements d'entraînement et de production.
6. **Évaluation critique des modèles d'apprentissage automatique :**
    - Évaluer les limites et les défis liés à l'ajustement des hyperparamètres et à la sélection de modèles.
    - Reconnaître les pièges potentiels dans le prétraitement des données, tels qu'une gestion incorrecte des valeurs manquantes ou un encodage incohérent.
    - Plaider en faveur de tests et validations approfondis pour garantir la fiabilité et la généralisabilité du modèle.
7. **Intégration des connaissances dans des applications pratiques :**
    - Appliquer les concepts appris à des ensembles de données réels (par exemple, ensembles de données OpenML tels que 'diabetes' et 'adult').
    - Interpréter et analyser les résultats des évaluations de modèles et des expériences.
    - Développer une compréhension complète du pipeline d'apprentissage automatique de bout en bout.

Introduction

Ensemble de données - openml

> ** www.openml.org**
>
> OpenML est une plateforme ouverte pour partager des ensembles de données, des algorithmes et des expériences - pour apprendre à mieux apprendre, ensemble.

In [2]:
```
import numpy as np
np.random.seed(42)

from sklearn.datasets import fetch_openml
```

```
diabetes = fetch_openml(name='diabetes', version=1)
print(diabetes.DESCR)
```

L'ensemble de données utilisé aujourd'hui est le PIMA, qui contient 768 exemples et 8 attributs numériques. La nature numérique de ces attributs facilite notre analyse. De plus, puisque les données proviennent d'un article publié, elles reflètent probablement une collecte de données soignée, ce qui pourrait conduire à des résultats robustes, étant donné que les auteurs auraient eu besoin de données de haute qualité pour étayer leur publication.

Ensemble de données - `return_X_y`

`fetch_openml` renvoie un `Bunch`, un `DataFrame` ou `X` et `y`

In [3]:
```
X, y = fetch_openml(name='diabetes', version=1, return_X_y=True)
```

...

Déséquilibre modéré (rapport inférieur à 3 ou 4)

In [4]:
```
print(y.value_counts())
```

```
class
tested_negative    500
tested_positive    268
Name: count, dtype: int64
```

...

Conversion des étiquettes cibles en 0 et 1

In [5]:
```
y = y.map({'tested_negative': 0, 'tested_positive': 1})
```

Évaluation croisée

Ensemble d'entraînement et ensemble de test

Parfois appelée *holdout method*.

- **Recommandation:** Allouer **80%** de votre ensemble de données pour **l'entraînement** et réserver les **20% restants** pour les tests.
- **Ensemble d'entraînement:** Sous-ensemble de données utilisé pour **entraîner** votre modèle.

- **Ensemble de test:** Sous-ensemble **indépendant** utilisé exclusivement lors de l'étape finale pour évaluer les performances du modèle.

Ratios courants d'entraînement et de test

1. **Division 80:20:**
   - **Ensemble d'entraînement:** 80% des données
   - **Ensemble de test:** 20% des données
   - Ce partage est un choix par défaut largement utilisé qui permet un équilibre entre avoir suffisamment de données pour entraîner le modèle et suffisamment de données pour évaluer ses performances.
2. **Division 90:10:**
   - **Ensemble d'entraînement:** 90% des données
   - **Ensemble de test:** 10% des données
   - Ce partage peut être utilisé lorsque l'ensemble de données est très grand, garantissant une quantité substantielle de données pour l'entraînement tout en conservant un ensemble de test de taille décente.

Considérations pour choisir le ratio

1. **Taille de l'ensemble de données:**
   - Pour les grands ensembles de données, une plus petite proportion peut être réservée aux tests (par exemple, 90:10), car même 10% d'un grand ensemble de données peut fournir une évaluation robuste.
2. **Complexité du modèle:**
   - Les modèles complexes avec de nombreux paramètres peuvent nécessiter davantage de données d'entraînement pour éviter le sur-apprentissage, suggérant un ensemble d'entraînement plus grand.
3. **Ensemble de validation:**
   - Voir la discussion ci-dessous.
4. **Ensembles de données déséquilibrés:**
   - Pour les ensembles de données déséquilibrés, il est essentiel de veiller à ce que les ensembles d'entraînement et de test représentent adéquatement la répartition des classes. **L'échantillonnage stratifié peut être utilisé pour maintenir les proportions de classes dans les deux ensembles.**

Ensemble d'entraînement et ensemble de test

Erreur d'entraînement :

- En général, elle a tendance à être **faible**
- Obtenue en optimisant les algorithmes d'apprentissage pour minimiser l'erreur à travers l'ajustement des paramètres (par exemple, les poids)

Ensemble d'entraînement et ensemble de test

Erreur de généralisation : L'erreur observée lorsque le modèle est évalué sur des données nouvelles, non vues.

Ensemble d'entraînement et ensemble de test

Sous-apprentissage :

- **Erreur d'entraînement élevée**
- Le modèle est trop simple pour capturer les motifs sous-jacents
- Mauvaise performance à la fois sur les données d'entraînement et les nouvelles données

Sur-apprentissage :

- Faible erreur d'entraînement, mais **erreur de généralisation élevée**
- Le modèle capture le bruit ou des motifs non pertinents
- Mauvaise performance sur les nouvelles données non vues

Définition

La validation croisée (*cross-validation*) est une méthode utilisée pour évaluer et améliorer les performances des modèles d'apprentissage automatique.

Elle consiste à partitionner l'ensemble de données en plusieurs sous-ensembles, **en entraînant le modèle sur certains sous-ensembles** tout en **le validant sur les autres**.

Validation croisée en k parties (k-fold)

1. **Diviser** l'ensemble de données en k **parties de taille égale** (plis).
2. **Entraînement et validation :**
   - À chaque itération, **un pli est utilisé comme ensemble de validation**, les k**-1 plis restants sont utilisés comme ensemble d'entraînement**.
3. **Évaluation:** Les performances du modèle sont évaluées à chaque itération, ce qui donne k mesures de performance.
4. **Agrégation:** Les statistiques sont calculées à partir des k mesures de performance.

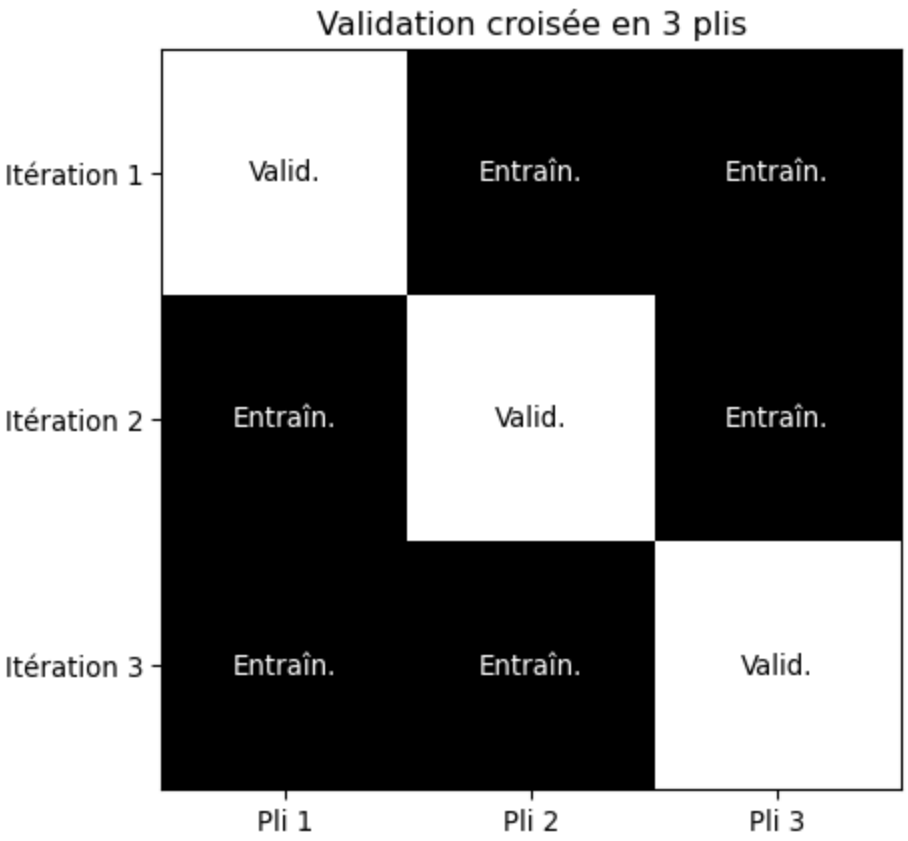
Les choix courants pour la valeur de k sont 3, 5, 7 et 10.

En science, pour estimer la valeur d'une constante, il est courant de répéter l'expérience plusieurs fois afin de calculer la moyenne et l'écart type des mesures obtenues. Une variance élevée soulève des questions sur la fiabilité de l'expérience. De manière analogue, **la validation croisée en k parties** génère k évaluations distinctes. Cette

méthode permet non seulement d'obtenir une estimation plus précise des performances du modèle, mais aussi d'évaluer sa robustesse face à la variabilité des données.

Validation croisée en 3 plis

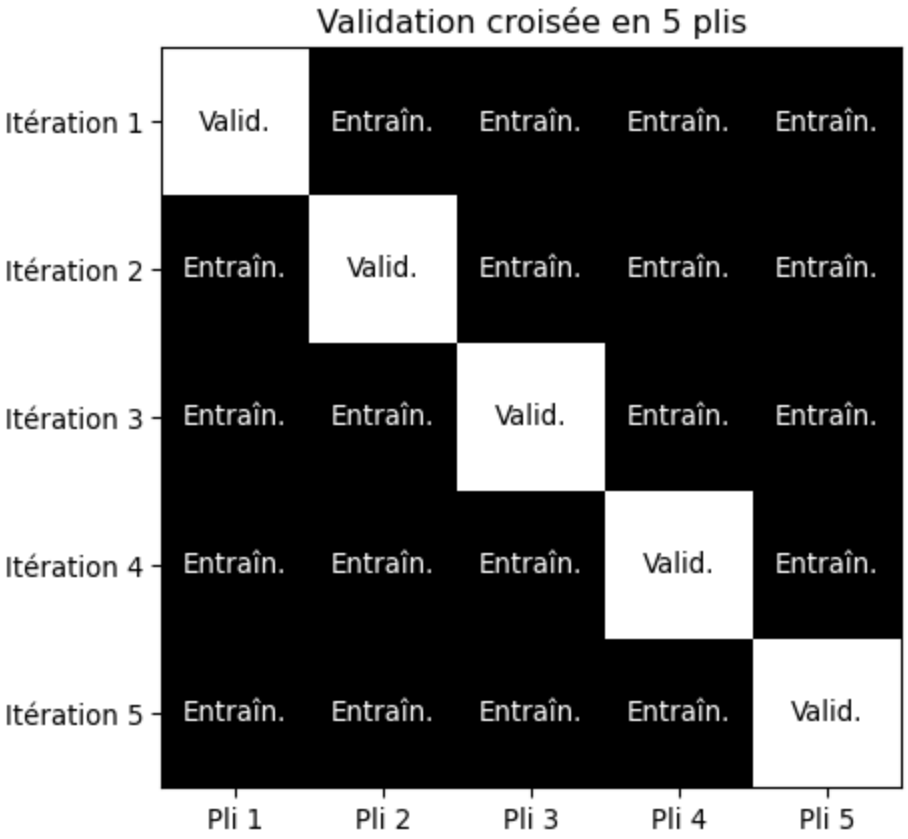
In [7]:



À chaque itération, $2/3$ de l'ensemble de données est utilisé pour l'entraînement et $1/3$ pour la validation.

Validation croisée en 5 plis

In [8]:



À chaque itération, $4/5$ de l'ensemble de données est utilisé pour l'entraînement et $1/5$ pour la validation.

Évaluation de modèle plus fiable

- Estimation plus **fiable** des performances du modèle par rapport à une seule division entraînement-test.
- **Réduit la variabilité** associée à une seule division, conduisant à une **évaluation plus stable et moins biaisée**.
- Pour de grandes valeurs de k, considérez la **moyenne**, **variance**, et **intervalle de confiance**.

Meilleure généralisation

- Aide à évaluer comment le modèle **généralise** à un ensemble de données indépendant.
- Garantit que les performances du modèle ne sont ni trop **optimistes** ni trop **pessimistes** en moyennant les résultats sur plusieurs plis.

Utilisation efficace des données

- **Particulièrement bénéfique pour les petits ensembles de données**, la validation croisée garantit que chaque point de données est utilisé à la fois pour l'entraînement et la validation.
- Cela **maximise l'utilisation des données disponibles**, conduisant à un entraînement de modèle plus précis et fiable.

Certaines exemples sont plus informatifs pour les algorithmes d'apprentissage, notamment ceux situés près de la frontière de décision.

Ajustement des hyperparamètres

- Couramment utilisé pendant **l'ajustement des hyperparamètres**, permettant de **sélectionner les meilleurs paramètres du modèle** en fonction de leurs performances sur plusieurs plis.
- Cela aide à identifier la configuration **optimale** qui équilibre **biais** et **variance**.

Défis

- **Coût computationnel**: Nécessite plusieurs entraînements de modèles.
  - **Leave-One-Out** (LOO): Cas extrême où $k = N$.
- **Déséquilibre des classes**: Les plis peuvent ne pas représenter correctement les classes minoritaires.
  - Utilisez la **validation croisée stratifiée** pour maintenir les proportions de classes.
- **Complexité**: Implémentation sujette à des erreurs, en particulier pour la **validation croisée imbriquée**, les **bootstrap** ou l'intégration dans des pipelines plus complexes.

La validation croisée leave-one-out (LOO-CV) peut conduire à une évaluation de performance trop optimiste, particulièrement dans certains contextes.

Voici pourquoi :

1. **Haute variance** : Dans la LOO-CV, chaque itération utilise presque toutes les données pour l'entraînement, ne laissant qu'une seule instance pour le test. Cela peut entraîner une haute variance de l'erreur de test à travers les itérations, car le modèle est entraîné sur presque l'ensemble du jeu de données. Étant donné que chaque ensemble d'entraînement est très similaire au jeu de données complet, cela peut conduire à des estimations trop optimistes de l'erreur de généralisation, surtout lorsque le jeu de données est petit ou que le modèle a une variance élevée (par exemple, les arbres de décision ou les k-plus proches voisins).

2. **Surapprentissage** : Comme la LOO-CV utilise presque l'intégralité du jeu de données pour l'entraînement à chaque itération, les modèles complexes (surtout

ceux sujets au surapprentissage) peuvent s'ajuster très étroitement aux données, ce qui peut résulter en une erreur d'entraînement faible mais en une erreur de test trompeusement faible dans certains cas.

3. **Évaluation limitée de la généralisation** : La LOO-CV peut ne pas fournir une estimation fiable de la capacité de généralisation du modèle à des données complètement nouvelles, car la différence entre l'ensemble d'entraînement et le jeu de données complet est minimale, ce qui réduit l'écart entre les performances d'entraînement et de test.

En pratique, cela peut rendre l'évaluation plus optimiste qu'elle ne le serait avec des méthodes plus robustes comme la validation croisée k-fold, où les ensembles de test sont plus grands et où le modèle a moins d'opportunités de surapprendre les données d'entraînement.

Stratifié (en validation croisée) : une stratégie d'échantillonnage où chaque pli préserve la distribution des classes du jeu de données complet, garantissant que chaque classe est représentée proportionnellement dans les ensembles d'entraînement et de validation.

`cross_val_score`

In [9]:
```
from sklearn import tree

clf = tree.DecisionTreeClassifier()

from sklearn.model_selection import cross_val_score

clf_scores = cross_val_score(clf, X, y, cv=5)

print("\nScores:", clf_scores)
print(f"\nMoyenne: {clf_scores.mean():.2f}")
print(f"\nÉcart-type: {clf_scores.std():.2f}")
```

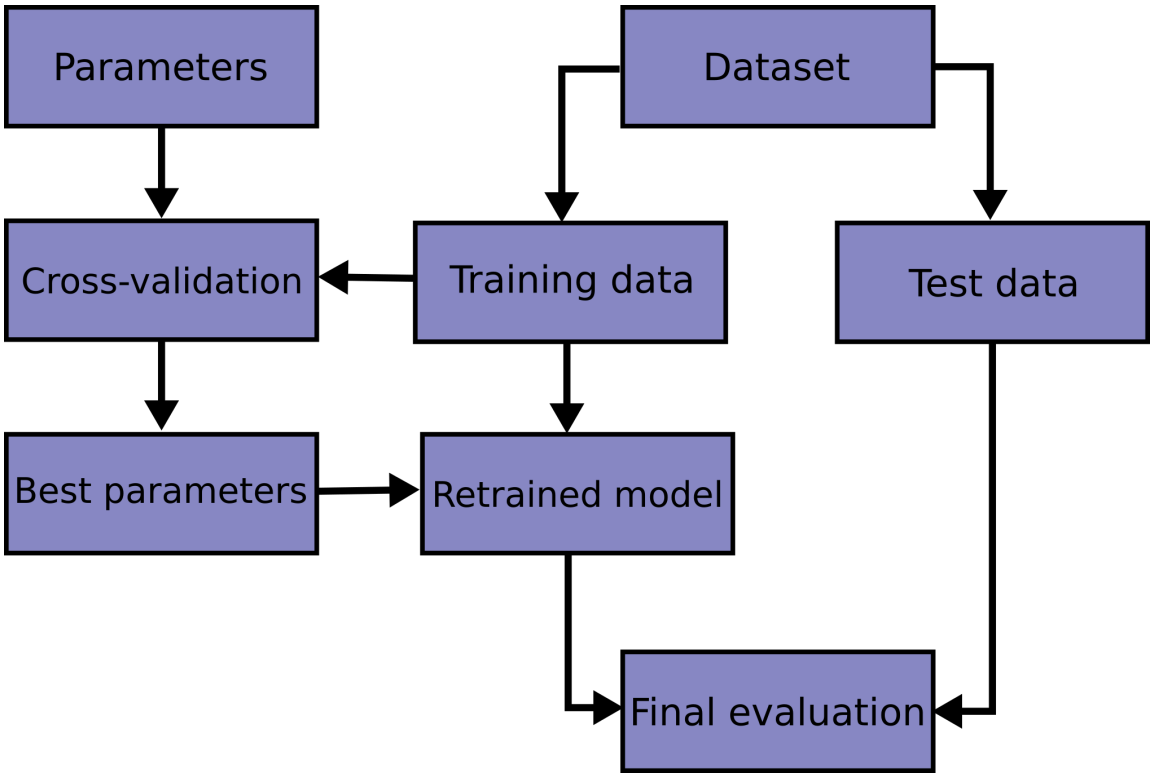
```
Scores: [0.71428571 0.66883117 0.71428571 0.79738562 0.73202614]

Moyenne: 0.73

Écart-type: 0.04
```

sklearn.model_selection.cross_val_score, voir aussi cross_validate.

Comme discuté précédemment, une limitation significative des arbres de décision est leur tendance à **sur-apprendre**, ce qui conduit à une forte variance lorsqu'ils sont appliqués à de nouveaux ensembles de données. Ce problème est visible dans la variabilité des performances observée, avec une précision allant de 67% à 79%, ce qui est indésirable pour obtenir une généralisation robuste du modèle.

Ajustement des hyperparamètres

Flux de travail (*Workflow*)



Attribution: Cross-validation: evaluating estimator performance

L'image ci-dessus introduit implicitement trois catégories de sous-ensembles de données : **entraînement**, **validation**, et **test**.

Implémentation du flux de travail

In [10]:
```
from sklearn.datasets import fetch_openml

X, y = fetch_openml(name='diabetes', version=1, return_X_y=True)

y = y.map({'tested_negative': 0, 'tested_positive': 1})

from sklearn.model_selection import train_test_split

X_train, X_test, y_train, y_test = train_test_split(X, y, test_size=0.1)
```

Afin de simplifier ces notes de cours, nous n'avons appliqué aucune étape de prétraitement.

Définition

Un **hyperparamètre** est une configuration **externe au modèle** qui est **définie avant le processus d'apprentissage** et qui régit le processus d'apprentissage, influençant les performances et la complexité du modèle.

Les **poids d'un modèle**, qui sont appris par l'algorithme d'apprentissage, sont souvent appelés **paramètres du modèle**. Pour éviter toute confusion, les paramètres définis par l'utilisateur, tels que le taux d'apprentissage α, sont appelés **hyperparamètres**. Contrairement aux paramètres de modèle, les hyperparamètres ne sont **pas** appris par l'algorithme d'apprentissage.

Hyperparamètres - Arbre de décision

- `criterion` : `gini`, `entropy`, `log_loss`, mesure la qualité d'une scission.
- `max_depth` : limite le **nombre de niveaux** dans l'arbre pour éviter le sur-apprentissage.

Voir: DecisionTreeClassifier

Hyperparamètres - Régression logistique

- `penalty` : `l1` ou `l2`, aide à éviter le sur-apprentissage.
- `solver` : `liblinear`, `newton-cg`, `lbfgs`, `sag`, `saga`.
- `max_iter` : nombre maximal d'itérations pour que les solveurs convergent.
- `tol` : critère d'arrêt, les petites valeurs signifient une plus grande précision.

Voir: LogisticRegression et SGDClassifier.

Hyperparamètres - KNN

- `n_neighbors` : nombre de voisins à utiliser pour les requêtes de k-voisins.
- `weights` : `uniform` ou `distance`, poids égal ou basé sur la distance.

Voir: KNeighborsClassifier

Expérience : `max_depth`

In [11]:
```
for value in [3, 5, 7, None]:

  clf = tree.DecisionTreeClassifier(max_depth=value)

  clf_scores = cross_val_score(clf, X_train, y_train, cv=10)

  print("\nmax_depth = ", value)
```

```
  print(f"Moyenne: {clf_scores.mean():.2f}")
  print(f"Écart-type: {clf_scores.std():.2f}")
```

```
max_depth =  3
Moyenne: 0.74
Écart-type: 0.04

max_depth =  5
Moyenne: 0.76
Écart-type: 0.04

max_depth =  7
Moyenne: 0.73
Écart-type: 0.04

max_depth =  None
Moyenne: 0.71
Écart-type: 0.05
```

Expérience : `criterion`

In [12]:
```
for value in ["gini", "entropy", "log_loss"]:

  clf = tree.DecisionTreeClassifier(max_depth=5, criterion=value)

  clf_scores = cross_val_score(clf, X_train, y_train, cv=10)

  print("\ncriterion = ", value)
  print(f"Moyenne: {clf_scores.mean():.2f}")
  print(f"Écart-type: {clf_scores.std():.2f}")
```

```
criterion =  gini
Moyenne: 0.76
Écart-type: 0.04

criterion =  entropy
Moyenne: 0.75
Écart-type: 0.05

criterion =  log_loss
Moyenne: 0.75
Écart-type: 0.05
```

Pour ce problème et cet ensemble de données spécifiques, le paramètre `criterion` a un impact limité sur le processus d'apprentissage.

Expérience : `n_neighbors`

In [13]:
```
from sklearn.neighbors import KNeighborsClassifier

for value in range(1, 11):

  clf = KNeighborsClassifier(n_neighbors=value)
```

```
  clf_scores = cross_val_score(clf, X_train, y_train, cv=10)

  print("\nn_neighbors = ", value)
  print(f"Moyenne: {clf_scores.mean():.2f}")
  print(f"Écart-type: {clf_scores.std():.2f}")
```

```
n_neighbors =  1
Moyenne: 0.67
Écart-type: 0.05

n_neighbors =  2
Moyenne: 0.71
Écart-type: 0.03

n_neighbors =  3
Moyenne: 0.69
Écart-type: 0.05

n_neighbors =  4
Moyenne: 0.73
Écart-type: 0.03

n_neighbors =  5
Moyenne: 0.72
Écart-type: 0.03

n_neighbors =  6
Moyenne: 0.73
Écart-type: 0.05

n_neighbors =  7
Moyenne: 0.74
Écart-type: 0.04

n_neighbors =  8
Moyenne: 0.75
Écart-type: 0.04

n_neighbors =  9
Moyenne: 0.73
Écart-type: 0.05

n_neighbors =  10
Moyenne: 0.73
Écart-type: 0.04
```

Expérience : `weights`

In [14]:
```
from sklearn.neighbors import KNeighborsClassifier

for value in ["uniform", "distance"]:

  clf = KNeighborsClassifier(n_neighbors=5, weights=value)
```

```
  clf_scores = cross_val_score(clf, X_train, y_train, cv=10)

  print("\nweights = ", value)
  print(f"Moyenne: {clf_scores.mean():.2f}")
  print(f"Écart-type: {clf_scores.std():.2f}")
```

```
weights =  uniform
Moyenne: 0.72
Écart-type: 0.03

weights =  distance
Moyenne: 0.73
Écart-type: 0.04
```

Pour ce problème et cet ensemble de données spécifiques, le paramètre `weights` a un impact limité sur le processus d'apprentissage.

À ce stade, vous pourriez émettre l'hypothèse que certaines combinaisons d'hyperparamètres pourraient être plus optimales que d'autres.

Recherche en grille (*grid search*)

- **De nombreux hyperparamètres** nécessitent un ajustement
  - Principal **désavantage** des algorithmes d'apprentissage automatique
- L'**exploration manuelle** des combinaisons est fastidieuse
- La **recherche en grille** est plus systématique
  1. **Énumérer toutes** les combinaisons possibles d'hyperparamètres
  2. Entraîner sur l'ensemble d'entraînement, évaluer sur l'ensemble de validation

Initialement, essayez des puissances de 2 ou de 10. Ensuite, **affinez** avec une recherche en grille autour des valeurs optimales si le temps le permet.

L'**ensemble d'entraînement** mentionné ici est **différent** de celui mentionné précédemment. À chaque itération du processus de validation croisée en k plis, un **ensemble d'entraînement** et un **ensemble de validation** uniques sont créés.

Dans certains contextes, le **choix du modèle** lui-même peut être considéré comme un hyperparamètre. Par exemple, lors de la sélection de modèles au sein d'un pipeline d'apprentissage automatique, différents algorithmes (par exemple, arbres de décision, machines à vecteurs de support, réseaux neuronaux) peuvent être traités comme des hyperparamètres. Cela permet de sélectionner le modèle offrant les meilleures performances via des processus automatisés comme la recherche en grille ou la recherche aléatoire, en parallèle du réglage d'autres hyperparamètres.

Ainsi, bien que traditionnellement les hyperparamètres fassent référence aux paramètres à l'intérieur d'un modèle spécifique, le choix du modèle peut également être intégré dans des cadres d'optimisation d'hyperparamètres.

GridSearchCV

In [15]:
```
from sklearn.model_selection import GridSearchCV

param_grid = [
  {'max_depth': range(1, 10),
   'criterion': ["gini", "entropy", "log_loss"]}
]

clf = tree.DecisionTreeClassifier()

grid_search = GridSearchCV(clf, param_grid, cv=5)

grid_search.fit(X_train, y_train)

(grid_search.best_params_, grid_search.best_score_)
```

```
({'criterion': 'gini', 'max_depth': 5}, np.float64(0.7481910124074653))
```

GridSearchCV

In [16]:
```
param_grid = [
  {'n_neighbors': range(1, 16),
   'weights': ["uniform", "distance"]}
]

clf = KNeighborsClassifier()

grid_search = GridSearchCV(clf, param_grid, cv=5)

grid_search.fit(X_train, y_train)

(grid_search.best_params_, grid_search.best_score_)
```

```
({'n_neighbors': 14, 'weights': 'uniform'}, np.float64(0.7554165363361485))
```

La variable `param_grid` contient un dictionnaire spécifiant les noms des paramètres à ajuster, ainsi que les valeurs respectives à tester.

Dans cet exemple, les paramètres `n_neighbors` et `weights` sont ajustés. Cependant, d'autres paramètres pourraient être inclus si nécessaire.

GridSearchCV

In [18]:
```
from sklearn.linear_model import LogisticRegression

# 2 * 5 * 5 * 3 = 150 tests!

param_grid = [
  {'penalty': ["l1", "l2", None],
   'solver' : ['liblinear', 'newton-cg', 'lbfgs', 'sag', 'saga'],
   'max_iter' : [100, 200, 400, 800, 1600],
   'tol' : [0.01, 0.001, 0.0001]}
]

clf = LogisticRegression()

grid_search = GridSearchCV(clf, param_grid, cv=5)

grid_search.fit(X_train, y_train)

(grid_search.best_params_, grid_search.best_score_)
```

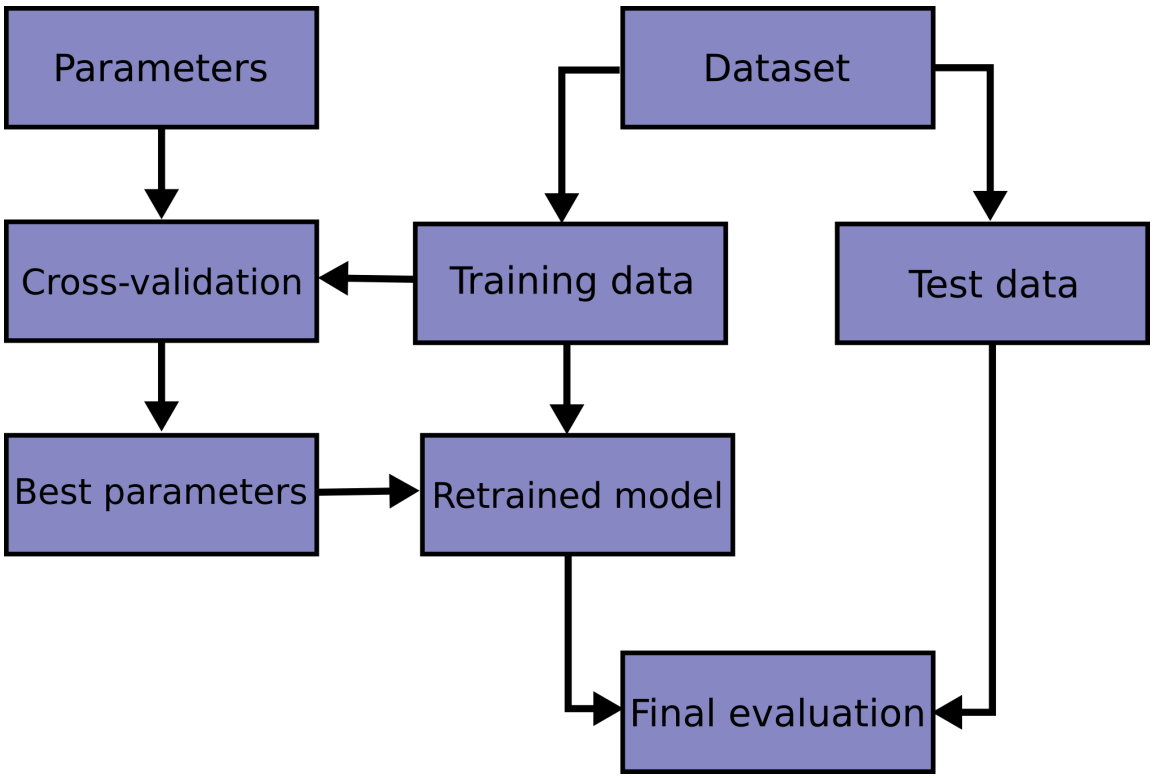
```
({'max_iter': 100, 'penalty': 'l2', 'solver': 'newton-cg', 'tol': 0.001},
 np.float64(0.7756646856427901))
```

Recherche aléatoire

- **Grand nombre de combinaisons** (beaucoup d'hyperparamètres, beaucoup de valeurs)
- Utiliser **RandomizedSearchCV** :
  - Fournir une **liste de valeurs** ou une **distribution de probabilités** pour les hyperparamètres
  - Spécifier le **nombre d'itérations** (combinaisons à essayer)
  - Temps d'exécution **prévisible**

Voir : Comparing randomized search and grid search for hyperparameter estimation.

Flux de travail



Attribution: Cross-validation: evaluating estimator performance

Comme l'illustre cet exemple, en plus d'évaluer diverses valeurs d'hyperparamètres, plusieurs modèles peuvent également être testés.

Enfin, nous procédons aux tests

In [19]:
```
clf = LogisticRegression(max_iter=100, penalty='l2', solver='newton-cg', tol

clf.fit(X_train, y_train)

y_pred = clf.predict(X_test)

from sklearn.metrics import classification_report

print(classification_report(y_test, y_pred))
```

```
              precision    recall  f1-score   support

           0       0.83      0.83      0.83        52
           1       0.64      0.64      0.64        25

    accuracy                           0.77        77
   macro avg       0.73      0.73      0.73        77
weighted avg       0.77      0.77      0.77        77
```

Il semble que nous soyons confrontés à un **problème de déséquilibre des classes**, qui aurait dû être identifié plus tôt dans notre flux de travail!

Prologue

Résumé

- **Validation croisée et ajustement des hyperparamètres** : Clé pour prévenir le surapprentissage et optimiser les performances.

Prochain cours

- Ingénierie de l'apprentissage automatique.

Références

Russell, Stuart, et Peter Norvig. 2020. *Artificial Intelligence: A Modern Approach*. 4e éd. Pearson. http://aima.cs.berkeley.edu/.

Marcel **Turcotte**

Marcel.Turcotte@uOttawa.ca

École de **science informatique** et de génie électrique (**SI**GE)

Université d'Ottawa