

DEMAU: Decompose, Explore, Model & Analyse Uncertainties

Arthur Hoarau*, Vincent Lemaire**

*Université de technologie de Compiègne, CNRS, Heudiasyc, France

**Orange innovation, Lannion, France

Résumé. Les récentes recherches en apprentissage automatique ont donné lieu à une littérature croissante sur la quantification et la décomposition d’incertitude en apprentissage automatique. Ces informations peuvent être très utiles lors des interactions avec l’apprenant, comme en apprentissage actif ou en apprentissage adaptatif, et en particulier en échantillonnage par incertitude. Pour permettre une représentation simple de ces incertitudes totales, épistémiques (réductibles) et aléatoires (irréductibles), nous proposons DEMAU, un outil open-source éducatif, exploratoire et analytique permettant de visualiser et d’explorer plusieurs types d’incertitude pour les modèles de classification en apprentissage automatique.

1 Introduction

Pour des scénarios pratiques, le besoin de visualiser l’incertitude se manifeste dans divers domaines de l’apprentissage automatique, notamment lors des interactions avec l’apprenant, telles qu’en apprentissage actif ou en apprentissage adaptatif, et en particulier en échantillonnage par incertitude (Settles, 2009; Aggarwal et al., 2014; Hacoheh et al., 2022). Cela offre des perspectives sur la fiabilité des prédictions et la confiance associée aux sorties du modèle. Le plus souvent, l’incertitude dans les modèles probabilistes est représentée en utilisant l’entropie de Shannon (Shannon, 1948). Cependant, les outils pour la représentation d’incertitude se sont considérablement étendus. Les chercheurs ont proposé de décomposer l’incertitude en composants réductibles (épistémiques) et irréductibles (aléatoires) (Hora, 1996; Hüllermeier et Waegeman, 2021; Kendall et Gal, 2017; Senge et al., 2014; Charpentier et al., 2020). De plus, divers cadres pour le raisonnement avec l’incertitude ont émergé (Abdar et al., 2021; Huang et al., 2023), incluant les probabilités, les *Credal Sets*, les possibilités et les fonctions de croyance (Dempster, 1967; Shafer, 1976).

La pluralité des formes d’incertitude et leur complexité d’interprétation nécessitent des outils de visualisation efficaces. Des bibliothèques très populaires comme *modAL* (Danka et Horvath, 2018) permettent de mettre en place un apprentissage actif efficace et d’autres, plus récentes, comme *scikit-activeml* (Kottke et al., 2021) offrent même une visualisation de l’incertitude des modèles. Cependant, cette incertitude est limitée et souvent restreinte à une entropie de Shannon ou à une mesure de moindre confiance. Visualiser les incertitudes peut fournir aux chercheurs et aux praticiens des aperçus plus profonds sur la performance des modèles et les

DEMAU: Decompose, Explore, Model & Analyse Uncertainties

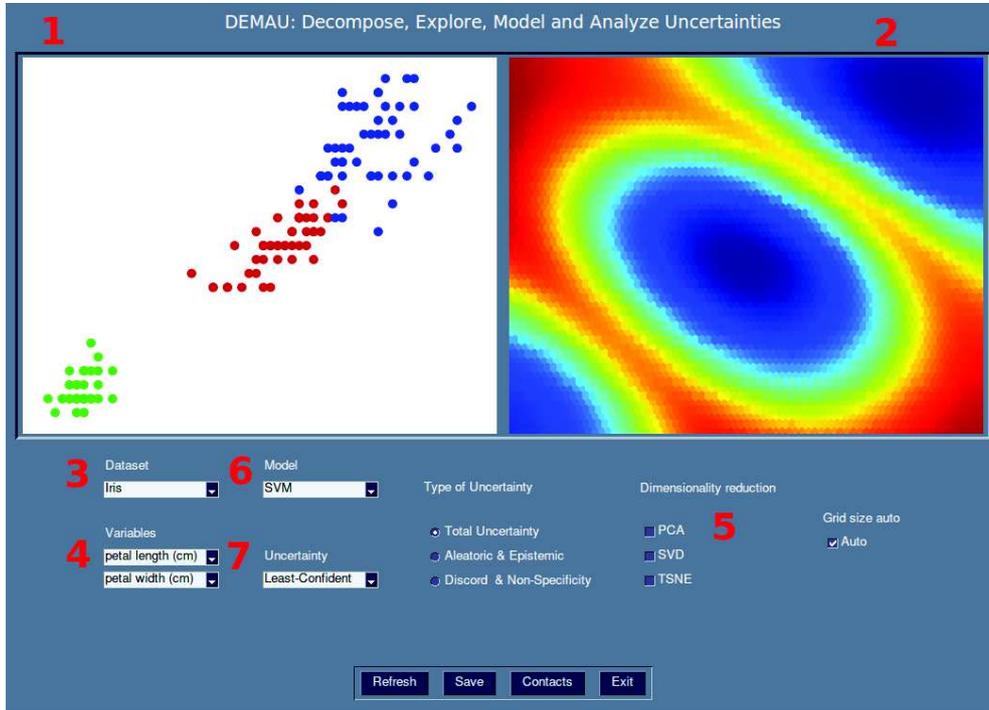


FIGURE 1 – DEMAU interface

processus décisionnels. L'interface proposée facilite l'exploration et l'interprétation de l'incertitude pour des modèles d'apprentissage automatique, permettant aux utilisateurs de comprendre les nuances de la représentation de l'incertitude à travers différents cadres théoriques.

C'est pourquoi nous proposons DEMAU, un outil open-source, éducatif, exploratoire et analytique permettant de visualiser et d'explorer plusieurs types d'incertitude pour des modèles de classification en apprentissage automatique, y compris les techniques récentes pour le calcul des incertitudes épistémiques et aléatoires, tout en laissant la possibilité à l'utilisateur de personnaliser le jeu de données, le modèle ou même la méthode de quantification d'incertitude selon ses besoins. L'outil est principalement développé à des fins de recherche et d'enseignement, et peut ne pas être adapté à un usage industriel. Il peut être utilisé pour explorer de nouveaux jeux de données, analyser ou développer des métriques de quantification d'incertitude, ou même pour visualiser et décomposer l'incertitude d'un modèle en apprentissage automatique. Il peut également être utilisé pour faciliter la compréhension des nouveaux venus dans le domaine de la quantification de l'incertitude, tels que des doctorants ou masters recherche.

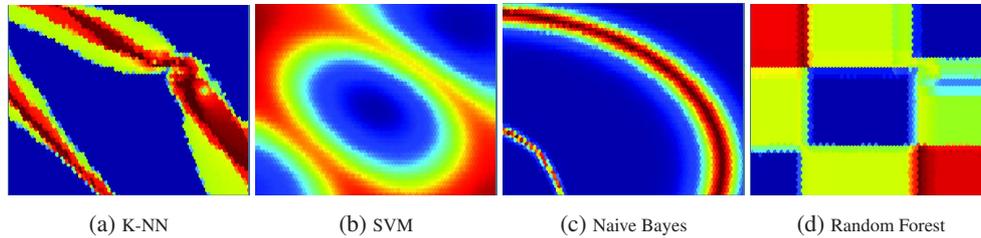


FIGURE 2 – Incertitude pour différents modèles.

2 DEMAU pour explorer et décomposer les incertitudes

2.1 Aperçu

L'interface est présentée sur la Figure 1, avec deux fenêtres principales comprenant le jeu de données actuellement étudié (dans la fenêtre (1)) ainsi que les zones d'incertitude (dans la fenêtre (2)) avec un dégradé allant du rouge au bleu. Plus la zone est rouge, plus l'incertitude du modèle est élevée, tandis qu'une zone bleue indique une grande certitude dans la prédiction. Avec le menu déroulant (3), l'utilisateur peut sélectionner l'un des jeux de données préchargés ou utiliser le sien (voir section 2.5). Dans le double menu déroulant (4), deux variables du jeu de données peuvent être sélectionnées pour une représentation en deux dimensions, en plus des techniques de réduction, selon les cases à cocher (5). DEMAU propose également différents modèles d'apprentissage automatique dans le menu déroulant (6) (voir section 2.2) et plusieurs incertitudes peuvent être calculées via le menu déroulant (7) (voir section 2.3 et 2.4). De plus, il est facilement possible d'ajouter ses propres jeux de données, modèles et méthodes de quantification d'incertitude (voir section 2.5).

2.2 Quantifier l'incertitude de modèles d'apprentissage automatique

DEMAU permet simplement de représenter les zones d'incertitude de plusieurs modèles. La Figure 2 montre différentes zones d'incertitude pour plusieurs modèles d'apprentissage automatique, selon le jeu de données Iris de Fisher, présenté dans la Figure 1. Les modèles intégrés sont les K-plus proches voisins (2a), les SVM (2b), le Naïve Bayes Classifier (2c) et une forêt aléatoire (2d), mais l'utilisateur est libre d'utiliser son propre modèle (comme présenté en section 2.5.). Pour un même jeu de données, les zones d'incertitude du modèle peuvent grandement varier en fonction de son architecture. La Figure (2a) montre les zones d'incertitude d'un modèle qui s'appuie uniquement sur quelques voisins de l'observation à prédire alors que la Figure (2d) montre des séparations plus verticales et horizontales, ayant pour cause l'agrégation d'arbres de décision dans ce modèle. Un réseau de neurones artificiels aurait par exemple des frontières d'incertitude hautement non linéaires, contrairement à la Figure (2d). En prenant l'exemple de l'apprentissage actif avec une stratégie d'échantillonnage par incertitude, c'est dans ces zones rouges que le modèle irait requêter de nouvelles observations pour essayer d'augmenter ses propres performances en réduisant l'incertitude dans sa prédiction.

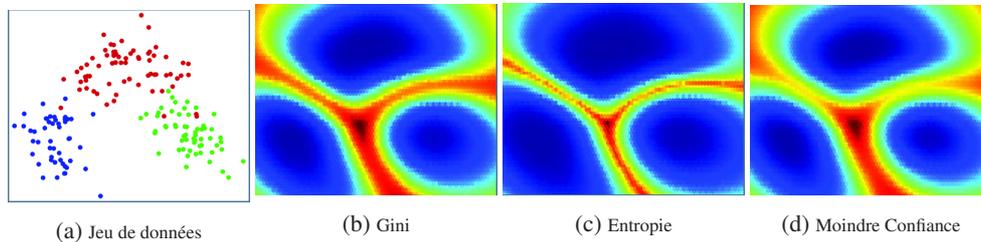


FIGURE 3 – Différentes quantification d'incertitude.

2.3 Utilisation de différentes méthodes de quantification

Il existe de nombreuses méthodes pour quantifier l'incertitude du modèle et DEMAU propose nativement plusieurs de ces outils. La Figure 3 montre différentes méthodes de calcul d'incertitude du modèle, avec le critère de Gini (3b), l'entropie de Shannon (3c) et une mesure de moindre confiance (3d). Ici c'est le modèle des SVM qui est utilisé sur le jeu de données *Wine* pour l'exemple, tout autre modèle associé à l'une de ces mesures donnerait des résultats différents. Et, bien que ces mesures semblent représenter des zones similaires, elles sont bien différentes et peuvent varier significativement sur certains jeux de données. Toute autre mesure peut également être simplement ajoutée pour obtenir des résultats différents.

Ces mesures peuvent en effet représenter l'incertitude d'un modèle, mais elles ne sont pas capables d'opérer une séparation plus fine des différents types d'incertitude, et une telle représentation n'est plus suffisante pour couvrir les méthodes les plus récentes de l'état de l'art en quantification d'incertitude. C'est pourquoi DEMAU propose une décomposition plus riche de cette incertitude, présentée dans la section suivante.

2.4 Décomposition d'incertitude

Les méthodes récentes d'estimation de l'incertitude du modèle reposent sur la décomposition entre incertitudes réductibles et irréductibles. Plusieurs approches sont possibles pour estimer de telles composantes, comme des méthodes d'ensemble (Mobiny et al., 2021), des approches floues (Zadeh, 1965) ou possibilistes (Zadeh, 1978), des probabilités de second ordre (Kendall et Gal, 2017), des méthodes par densité (Nguyen et al., 2022), des *credal set* (Hüllermeier et al., 2022) ou encore des fonctions de croyance (Hoarau et al., 2024). La Figure 4 montre les zones d'incertitude correspondant à trois différentes méthodes. Les calculs intégrés permettent de représenter une estimation de l'incertitude aléatoire (4b), de l'incertitude épistémique (4c), de la non-spécificité (4d) et de la discordance du modèle. Il est à noter que les références bibliographiques associées à chaque méthode sont directement affichées dans l'interface. Ici, ce sont les K-plus proches voisins qui sont utilisés sur un jeu de données *toy* pour illustrer ces fonctionnalités de DEMAU.

Pour comprendre la pertinence d'affiner la représentation de l'incertitude en la décomposant, l'exemple des incertitudes épistémique et aléatoire (respectivement en Figure (4c) et (4b)) peut s'avérer justifié. Ici, il est clair que la décomposition du modèle en deux incertitudes fait sens. Avec d'un côté la zone d'incertitude aléatoire (irréductible) où la région du jeu de données est déjà dense et où il serait inutile de rajouter de la connaissance (des nouvelles ob-

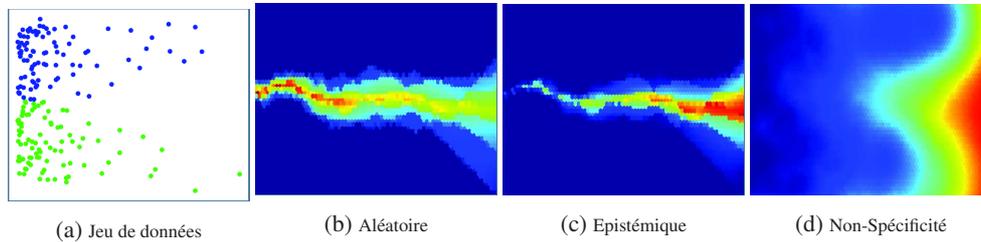


FIGURE 4 – Décomposition d'incertitude.

servations). Et de l'autre côté la zone d'incertitude épistémique (réductible) où il y a clairement un manque d'observations et où l'ajout de connaissance peut induire une diminution de l'incertitude du modèle. C'est cette deuxième zone qui sera par exemple exploitée en échantillonnage par incertitude épistémique.

2.5 Modularité

Tout l'intérêt de DEMAU est de rendre possible la visualisation des incertitudes de modèles d'apprentissage automatique grâce aux méthodes de l'état de l'art. Celles-ci étant nombreuses, variées et en constante augmentation, il est possible de les ajouter, bien que certaines de ces méthodes soient déjà implémentées.

De nouveaux jeux de données peuvent être ajoutés simplement en déposant un fichier CSV dans le dossier *datasets* mis à disposition. Il n'est pas nécessaire de recharger l'application pour que ces nouveaux jeux de données soient visibles, il suffit d'appuyer sur le bouton *Refresh*. Les modèles d'apprentissage automatique peuvent être ajoutés dans le fichier *models* également mis à disposition et les méthodes de quantification d'incertitude dans le fichier *uncertainties*. Une fonction intégrée permet également de réduire la taille de la grille pour un calcul plus rapide sur des jeux de données très volumineux, des configurations légères ou des stratégies gourmandes. Cette fonctionnalité devient accessible en décochant la case *Grid size auto* présente en bas à droite de la Figure 1.

3 Conclusion

En offrant une interface conviviale, DEMAU permet aux chercheurs et praticiens d'obtenir des informations plus approfondies sur les incertitudes associées à leurs modèles, améliorant ainsi les processus de prise de décision et l'évaluation des performances des modèles. Ces informations peuvent être très utiles lors des interactions avec l'apprenant, notamment en apprentissage actif ou adaptatif, et particulièrement en échantillonnage par incertitude. La conception modulaire de DEMAU permet une personnalisation et une extension faciles, simplifiant ainsi son utilisation pour diverses applications et jeux de données. En résumé, DEMAU se présente comme un outil pour faire progresser la recherche et l'enseignement dans la quantification et décomposition de l'incertitude, tout en promouvant la transparence et la reproductibilité des expériences en apprentissage automatique.

DEMAU: Decompose, Explore, Model & Analyse Uncertainties

Accès : DEMAU est un logiciel Python open-source à des fins éducatives, exploratoires et analytiques, permettant de visualiser et d'explorer plusieurs types d'incertitude pour des modèles de classification en apprentissage automatique. Lien vers le projet :

<https://github.com/ArthurHoa/DEMAU>

Une vidéo de présentation de DEMAU est disponible à :

<https://youtu.be/2xHwqlJJTm4>

Références

- Abdar, M., F. Pourpanah, S. Hussain, D. Rezazadegan, L. Liu, M. Ghavamzadeh, P. Fieguth, X. Cao, A. Khosravi, U. R. Acharya, V. Makarenikov, et S. Nahavandi (2021). A review of uncertainty quantification in deep learning : Techniques, applications and challenges. *Information Fusion* 76, 243–297.
- Aggarwal, C., X. Kong, Q. Gu, J. Han, et P. Yu (2014). *Active Learning : A Survey, Data Classification : Algorithms and Applications*. CRC Press.
- Charpentier, B., D. Zügner, et S. Günnemann (2020). Posterior network : Uncertainty estimation without ood samples via density-based pseudo-counts. In H. Larochelle, M. Ranzato, R. Hadsell, M. Balcan, et H. Lin (Eds.), *Advances in Neural Information Processing Systems*, Volume 33, pp. 1356–1367. Curran Associates, Inc.
- Danka, T. et P. Horvath (2018). modal : A modular active learning framework for python.
- Dempster, A. P. (1967). Upper and Lower Probabilities Induced by a Multivalued Mapping. *The Annals of Mathematical Statistics* 38(2), 325 – 339.
- Hacohen, G., A. Dekel, et D. Weinshall (2022). Active learning on a budget : Opposite strategies suit high and low budgets. In K. Chaudhuri, S. Jegelka, L. Song, C. Szepesvári, G. Niu, et S. Sabato (Eds.), *International Conference on Machine Learning, 2022, Baltimore, Maryland, USA*, Volume 162 of *Proceedings of Machine Learning Research*, pp. 8175–8195. PMLR.
- Hoarau, A., V. Lemaire, Y. Le Gall, J.-C. Dubois, et A. Martin (2024). Evidential uncertainty sampling strategies for active learning. *Machine Learning* 113(9), 6453–6474.
- Hora, S. C. (1996). Aleatory and epistemic uncertainty in probability elicitation with an example from hazardous waste management. *Reliability Engineering & System Safety* 54(2), 217–223. Treatment of Aleatory and Epistemic Uncertainty.
- Huang, L., S. Ruan, Y. Xing, et M. Feng (2023). A review of uncertainty quantification in medical image analysis : probabilistic and non-probabilistic methods.
- Hüllermeier, E., S. Destercke, et M. H. Shaker (2022). Quantification of credal uncertainty in machine learning : A critical analysis and empirical comparison. In J. Cussens et K. Zhang (Eds.), *Proceedings of the Thirty-Eighth Conference on Uncertainty in Artificial Intelligence*, Volume 180 of *Proceedings of Machine Learning Research*, pp. 548–557. PMLR.
- Hüllermeier, E. et W. Waegeman (2021). Aleatoric and epistemic uncertainty in machine learning : An introduction to concepts and methods. *Machine Learning* 110.
- Kendall, A. et Y. Gal (2017). What uncertainties do we need in bayesian deep learning for computer vision? In *NIPS*.

- Kottke, D., M. Herde, T. P. Minh, A. Benz, P. Mergard, A. Roghman, C. Sandrock, et B. Sick (2021). scikit-activeml : A Library and Toolbox for Active Learning Algorithms. *Preprints*.
- Mobiny, A., P. Yuan, S. Moulik, N. Garg, C. wu, et H. Nguyen (2021). Dropconnect is effective in modeling uncertainty of bayesian deep networks. *Scientific Reports 11*.
- Nguyen, V.-L., M. H. Shaker, et E. Hüllermeier (2022). How to measure uncertainty in uncertainty sampling for active learning. *Machine Learning 111*, 89–122.
- Senge, R., S. Bösner, K. Dembczynski, J. Haasenritter, O. Hirsch, N. Donner-Banzhoff, et E. Hüllermeier (2014). Reliable classification : Learning classifiers that distinguish aleatoric and epistemic uncertainty. *Inf. Sci. 255*, 16–29.
- Settles, B. (2009). Active learning literature survey. Computer Sciences Technical Report 1648, University of Wisconsin–Madison.
- Shafer, G. (1976). *A Mathematical Theory of Evidence*. Princeton University Press.
- Shannon, C. E. (1948). A mathematical theory of communication. *Bell System Technical Journal 27*(3), 379–423.
- Zadeh, L. (1965). Fuzzy sets. *Information and Control 8*(3), 338–353.
- Zadeh, L. (1978). Fuzzy sets as a basis for a theory of possibility. *Fuzzy Sets and Systems 1*(1), 3–28.

Summary

Recent research in machine learning has given rise to a flourishing literature on the quantification and decomposition of model uncertainty. This information can be very useful during interactions with the learner, such as in active learning or adaptive learning, and especially in uncertainty sampling. To allow a simple representation of these total, epistemic (reducible) and aleatoric (irreducible) uncertainties, we offer DEMAU, an open-source educational, exploratory and analytical tool allowing to visualize and explore several types of uncertainty for classification models in machine learning.