ARF

Régression linéaire
Régression logistique
Descente de gradient

Cours 3
ARF Master DAC

Nicolas Baskiotis
nicolas.baskiotis@lip6.fr
http://webia.lip6.fr/~baskiotisn

équipe MLIA, Laboratoire d'Informatique de Paris 6 (LIP6)
Université Pierre et Marie Curie (UPMC)

S2 (2017-2018)

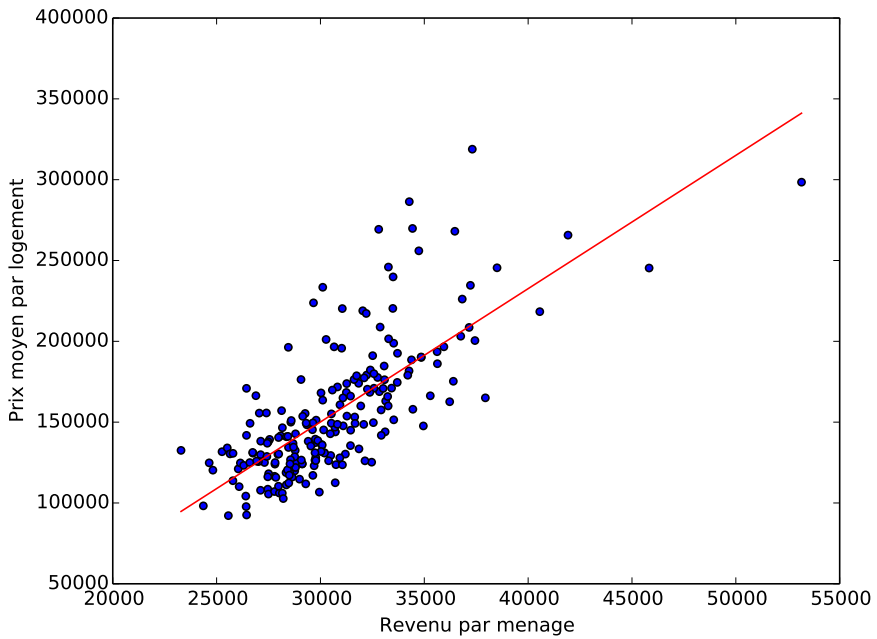
Plan

1. Régression linéaire
2. Régression logistique
3. Descente de gradient
4. Minimisation du Risque Empirique

Introduction

Régression linéaire

- Objectif : prédire une sortie continue réelle y à partir d'un nombre de variables d'entrée
- beaucoup d'applications, très utilisée un peu dans tous les domaines
- très flexible (transformation des entrées)



Formalisation

Objectif

Etant donné un ensemble $\{(\mathbf{x}^i, y^i)\} \in \mathbb{R}^d \times \mathbb{R}$,

- Hypothèse : variation linéaire de la sortie en fonction des entrées

$$\mathbb{E}(y|\mathbf{x}) = w_0 + \sum_{i=1}^{d} w_i x_i$$

$\Rightarrow$ On cherche :

- une fonction $f_{\mathbf{w}}(\mathbf{x}) = w_0 + \sum_{i=1}^{d} w_i x_i$
- qui fait le moins d'erreurs : $f(\mathbf{x}^i)$ doit être proche de y^i
- sous la condition que l'erreur est indépendante de x, de variance σ^2 constante, suit une loi normale.

$\Rightarrow$ $y|x \sim \mathcal{N}(f(x), \sigma^2)$ (lien avec l'apprentissage bayésien)

- Notion d'erreur quadratique : $\ell(f(\mathbf{x}), y) = (f(\mathbf{x}) - y)^2$

Formalisation (2)

Objectif

- Minimiser :

$$\mathbb{E}(\ell(f(\mathbf{x}), y)) = \int_{\mathbf{x},y} (y - f(\mathbf{x}))^2 p(\mathbf{x}, y) dxdy$$

- Soit trouver $\mathbf{w} \in \mathbb{R}^{d+1}$ qui minimise :

$$\sum_{j=1}^{n} \ell(f_{\mathbf{w}}(\mathbf{x}), y) = \sum_{j=1}^{n} (y^j - f(\mathbf{x}^j))^2 = \sum_{j=1}^{n} (y^j - w_0 - \sum_{i=1}^{d} w_i x_i^j)^2$$

Quelques notations et rappels

Convexité

- C ensemble convexe de $\mathbb{R}^n$: $\forall x, y \in C, \forall \lambda \in [0,1], \lambda x + (1-\lambda)y \in C$
- $\sum_i \lambda_i x_i$ est une combinaison convexe ssi $\forall i, \lambda_i \geq 0$ et $\sum_i \lambda_i = 1$
- Enveloppe convexe d'un ensemble fini $\{x_i\}, i = 1 \ldots n$: toutes les combinaisons convexes de l'ensemble
- Fonction $f : X \to \mathbb{R}$ convexe ssi

$$\forall x, x' \in X, \forall \lambda \in [0,1] \; tq \; \lambda x + (1 - \lambda x' \in X)$$

$$\text{alors } f(\lambda x + (1-\lambda)x') \leq \lambda f(x) + (1-\lambda) f(x')$$

- si $\lambda_i \geq 0$ et $\sum_i \lambda_i = 1$, alors $f(\sum_i \lambda_i x_i) \leq \sum_i \lambda_i f(x_i)$ (inégalité de Jensen)

Quelques notations et rappels

Différentiabilité

- Si $f : X \to \mathbb{R}$ est convexe ssi $\forall x, x' \in X, f(x') \geq f(x) + < x' - x, \nabla f(x) >$
- Si f convexe, alors sa matrice hessienne est définie semi-positive : $\nabla^2 f \geq 0$.

Minimum

- Si f atteint son minimum, alors les minimums forment un ensemble convexe.
- Si l'ensemble est strictement convexe, le minimum est un singleton.
- Si f est strictement convexe, son gradient ne s'annule que à son minimum local.

Régression : solution analytique

Formalisation

- Minimiser :

$$\mathbb{E}(\ell(f(\mathbf{x}), y)) = \int_{\mathbf{x},y} (y - f(\mathbf{x}))^2 p(\mathbf{x}, y) dxdy$$

- Soit trouver $\mathbf{w} \in \mathbb{R}^{d+1}$ qui minimise :

$$L(\mathbf{w}) = \sum_{j=1}^{n} \ell(f_{\mathbf{w}}(\mathbf{x}), y) = \sum_{j=1}^{n} (y^j - f(\mathbf{x}^j))^2 = \sum_{j=1}^{n} (y^j - w_0 - \sum_{i=1}^{d} w_i x_i^j)^2$$

- La fonction $L : \mathbb{R}^{d+1} \to \mathbb{R}$ est convexe

$\Rightarrow$ Solution analytique : annuler son gradient !

$\Rightarrow$ Trouver $\mathbf{w}^*$ tq $\nabla_{\mathbf{w}} L(\mathbf{w}^*) = 0$

Dérivée matricielle

Ecriture pratique

- $X = \begin{pmatrix} x^1 \\ x^2 \\ \vdots \\ x^n \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} x_1^1 & x_2^1 & \dots & x_d^1 \\ x_1^1 & x_1^2 & \dots & x_d^2 \\ & & \vdots & \\ x_1^n & x_2^n & \dots & x_d^n \end{pmatrix}, Y = \begin{pmatrix} y^1 \\ y^2 \\ \vdots \\ y^n \end{pmatrix}, W = \begin{pmatrix} w_1 \\ w_2 \\ \vdots \\ w_d \end{pmatrix}$
- $L(\mathbf{w}) = (XW - Y)'(XW - Y)$
- $\nabla_{\mathbf{w}} L = 2X'(XW - Y)$, $\mathbf{w}$ optimal $\Leftrightarrow 2X'(XW - Y) = 0$
- Solution : $(X'X)^{-1}X'Y$
- Et pour w_0 ?

Plan

1. Régression linéaire
2. **Régression logistique**
3. Descente de gradient
4. Minimisation du Risque Empirique

Problématique

Classification binaire

- Deux classes : $Y = \{-1, +1\}$, et un ensemble d'apprentissage $\{(\mathbf{x}^i, y^i) \in \mathbb{R}^d \times Y\}$
- Peut-on utiliser un coût quadratique dans ce cas ?
  Cas 2D :
  - $f_{\mathbf{w}}(x) = 1 \Leftrightarrow w_0 + x_1 w_1 + w_2 w_2 = 1$
  - $f_{\mathbf{w}}(x) = -1 \Leftrightarrow w_0 + x_1 w_1 + w_2 w_2 = -1$

Problématique

Classification binaire

- Deux classes : $Y = \{-1, +1\}$, et un ensemble d'apprentissage $\{(\mathbf{x}^i, y^i) \in \mathbb{R}^d \times Y\}$
- Peut-on utiliser un coût quadratique dans ce cas ?
  Cas 2D :
  - $f_{\mathbf{w}}(x) = 1 \Leftrightarrow w_0 + x_1 w_1 + w_2 w_2 = 1$
  - $f_{\mathbf{w}}(x) = -1 \Leftrightarrow w_0 + x_1 w_1 + w_2 w_2 = -1$
- Et si $f_{\mathbf{w}}(x) >> 1$?

$\Rightarrow$ le coût sera très grand !

- De même si $f_{\mathbf{w}}(x) << -1$

$\Rightarrow$ Le coût n'est pas adapté à la classification !

Adaptation du formalisme

Dans chaque région de l'espace :

- le label $+1$ suit une loi de Bernoulli : $p(y = 1|\mathbf{x}) = \mu(\mathbf{x})$
- le label 0 également : $p(y = 0|\mathbf{x}) = 1 - \mu(\mathbf{x})$

$\Rightarrow$ $p(y|x) = \mu(\mathbf{x})^y(1 - \mu(\mathbf{x}))^{1-y}$

- Comment représenter $\mu(\mathbf{x})$? Fonction linéaire ?

Adaptation du formalisme

Dans chaque région de l'espace :

- le label $+1$ suit une loi de Bernoulli : $p(y = 1|\mathbf{x}) = \mu(\mathbf{x})$
- le label 0 également : $p(y = 0|\mathbf{x}) = 1 - \mu(\mathbf{x})$

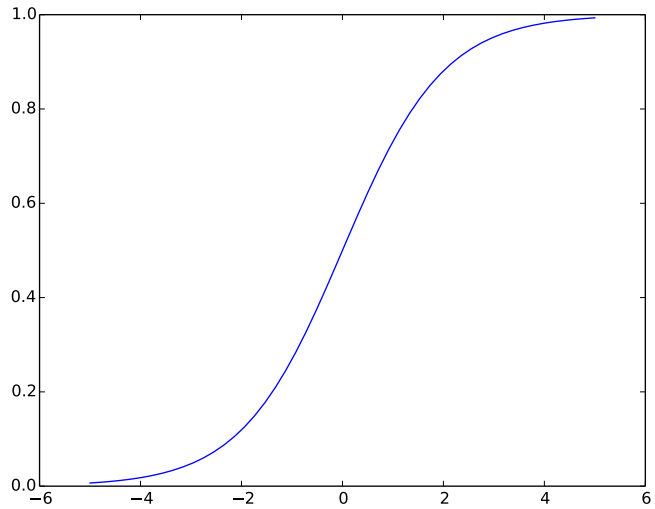
$\Rightarrow$ $p(y|x) = \mu(\mathbf{x})^y(1 - \mu(\mathbf{x}))^{1-y}$

- Comment représenter $\mu(\mathbf{x})$? Fonction linéaire ?

$\Rightarrow$ Problème ! pas entre 0 et 1 !

- Transformation d'une fonction linéaire : la fonction sigmoïde.

$$\mu(\mathbf{x}) = \sigma(f_{\mathbf{w}}(\mathbf{x})) = \frac{1}{1 + e^{-f_{\mathbf{w}}(\mathbf{x})}}$$



Quelques remarques importantes

Que représente $f_{\mathbf{w}}(\mathbf{x})$?

- C'est le log-ratio des probabilités : $f_{\mathbf{w}}(x) = \log\left(\frac{P(+|x)}{P(-|x)}\right) = \log\left(\frac{\mu(x)}{1-\mu(x)}\right)$
- qui est approximée par une fonction linéaire : $\ln \frac{P(+|x)}{P(-|x)} = w_0 + w_1 x_1 + w_2 x_2 \ldots$
- $\mu(\mathbf{x}) = \frac{1}{1+e^{-f_{\mathbf{w}}(\mathbf{x})}}$ et $1 - \mu(\mathbf{x}) = \frac{1}{1+e^{f_{\mathbf{w}}(\mathbf{x})}}$

$\rightarrow$ $P(y|x, \mathbf{w}) = \sigma((2y-1) f_{\mathbf{w}}(\mathbf{x}))$ (Vraissemblance du modèle pour un échantillon $(\mathbf{x}, y)$)

- $\sigma'(x) = \sigma(x)(1 - \sigma(x))$
- Quand est-ce que :
  - $p(+|x) = 0.5$?
  - $p(+|x) < 0.5$?
  - $p(+|x) > 0.5$?

Résolution

Maximum de vraisemblance

On cherche à maximiser :

$$P(y^1, \ldots, y^n | \mathbf{x}^1, \ldots, \mathbf{x}^n) = \prod_{i=1}^n P(y^i | \mathbf{x}^i)$$

$\Leftrightarrow$ maximiser $\log \prod_{i=1}^n P(y^i | \mathbf{x}^i)$

$\Leftrightarrow$ maximiser $\sum_{i=1}^n \log P(y^i | \mathbf{x}^i)$

$\Leftrightarrow$ minimiser $\frac{1}{n} \sum_{i=1}^n \log \frac{1}{P(y^i | \mathbf{x}^i)}$

$\Leftrightarrow$ minimiser $\frac{1}{n} \sum_{i=1}^n \log \frac{1}{\sigma((2y^i - 1) f_{\mathbf{w}}(\mathbf{x}^i))}$

$\Leftrightarrow$ On cherche $\mathbf{w}^* = \text{argmin}_{\mathbf{w}} \ \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n \log \left[1 + \exp\left(-(2y^i - 1) f_{\mathbf{w}}(\mathbf{x}^i)\right)\right]$

Résolution

- Pas de solution analytique.
- Méthode d'optimisation numérique $\rightarrow$ descente de gradient.

Plan

1 Régression linéaire

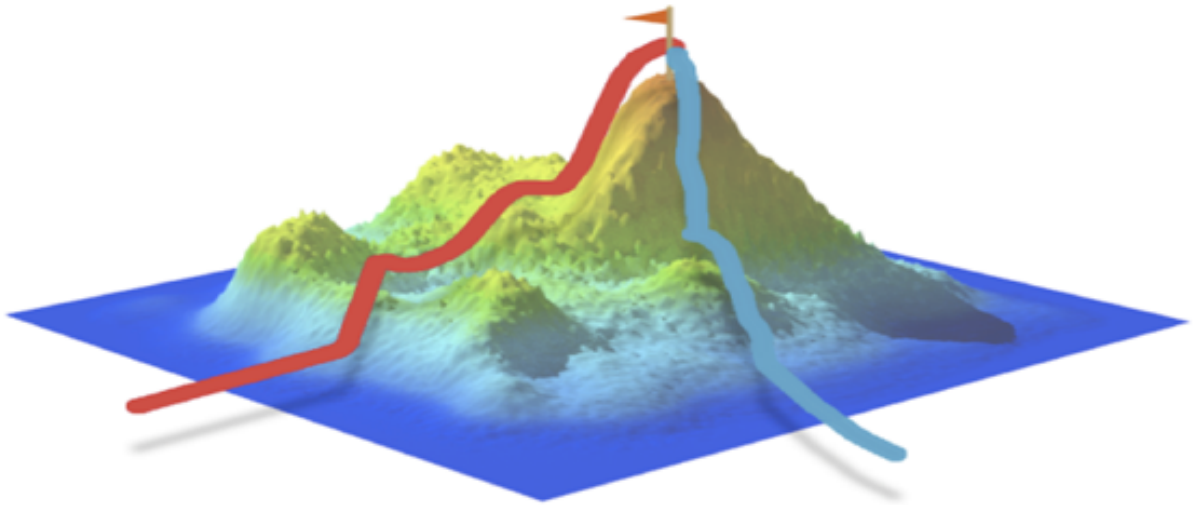
2 Régression logistique

3 **Descente de gradient**

4 Minimisation du Risque Empirique

Principe

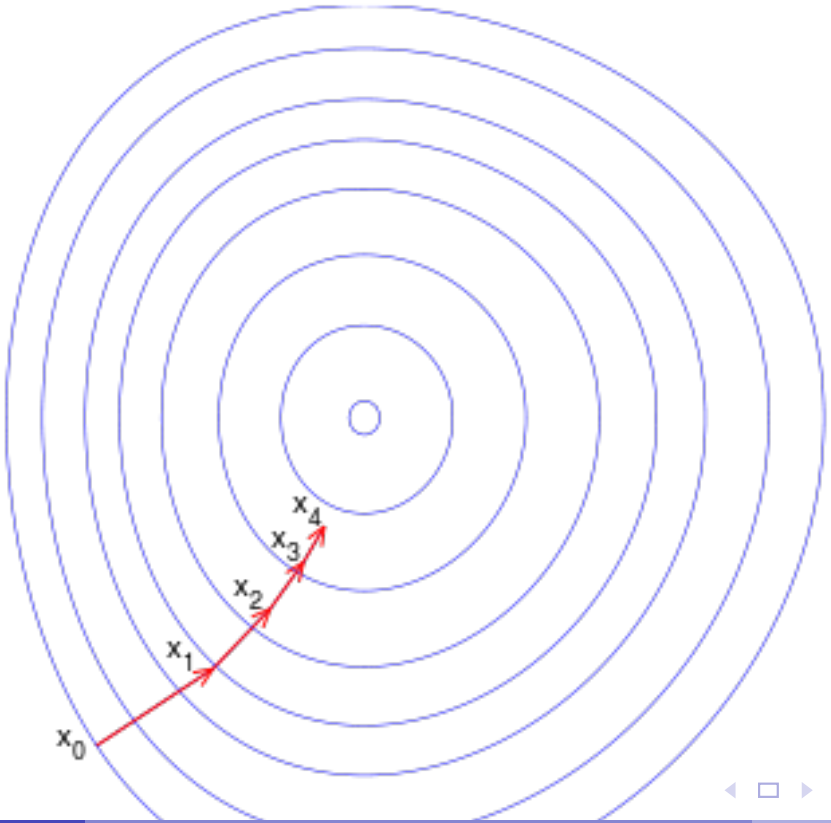
- Algorithme d'optimisation différentiable
- S'applique pour toute fonction différentiable
- Idée simple : améliorer de façon itérative la solution courante



Algorithme du gradient

Algorithme

1. Choisir un point x_0
2. Itérer :
   - Calculer $\nabla f(x_t)$
   - mettre à jour $x_{t+1} \leftarrow x_t - \alpha \nabla f(x_t)$



Pourquoi cela fonctionne ?

Développement de Taylor

- $f(\mathbf{x}) = f(\mathbf{x}_1) + \nabla f(\mathbf{x}_1) \times (\mathbf{x} - \mathbf{x}_1) + O(||\mathbf{x} - \mathbf{x}_1||^2)$
- On cherche à "bouger" dans une direction $\mathbf{u}$ de façon à minimiser f :

$$f(\mathbf{x}_1 + h\mathbf{u}) - f(\mathbf{x}_1) = h\nabla f(\mathbf{x}_1)\mathbf{u} + h^2 O(1)$$

- On doit donc minimiser $\nabla f(\mathbf{x}_1)\mathbf{u}$.
- On choisit le vecteur unité $\mathbf{u} = -\frac{\nabla f(\mathbf{x}_1)}{||\nabla f(\mathbf{x}_1)||}$

Plusieurs variantes :

- Hill climbing dans le cas discret
- Coordinate descent (line search selon les dimensions)
- Conjugate Gradient

Importance du pas de gradient

Algorithme

1. Choisir un point x_0
2. Itérer :
   - Calculer $\nabla f(x_t)$
   - mettre à jour $x_{t+1} \leftarrow x_t - \alpha \nabla f(x_t)$

Remarques

- Que se passe-t-il si :
  - α est choisi trop grand ?
  - trop petit ?
- Est-ce que l'on atteint toujours un minimum global ?
- Application à la régression logistique ?

Plan

1. Régression linéaire
2. Régression logistique
3. Descente de gradient
4. **Minimisation du Risque Empirique**

Formalisation du problème d'apprentissage

En apprentissage supervisé :

- Un ensemble d'apprentissage : $E_app = \{(\mathbf{x}^i, y^i) \in \mathcal{X} \times \mathcal{Y}\}$

Formalisation du problème d'apprentissage

En apprentissage supervisé :

- Un ensemble d'apprentissage : $E_app = \{(\mathbf{x}^i, y^i) \in \mathcal{X} \times \mathcal{Y}\}$
- Un coût : $\ell : \mathcal{Y} \times \mathcal{Y} \to \mathbb{R}^+$

Formalisation du problème d'apprentissage

En apprentissage supervisé :

- Un ensemble d'apprentissage : $E_app = \{(\mathbf{x}^i, y^i) \in \mathcal{X} \times \mathcal{Y}\}$
- Un coût : $\ell : \mathcal{Y} \times \mathcal{Y} \to \mathbb{R}^+$
- Un espace de fonction F : nos classifieurs, généralement paramétré $F = \{f_{\mathbf{w}}\}, \mathbf{w} \in \mathbb{R}^p$

Formalisation du problème d'apprentissage

En apprentissage supervisé :

- Un ensemble d'apprentissage : $E_app = \{(\mathbf{x}^i, y^i) \in \mathcal{X} \times \mathcal{Y}\}$
- Un coût : $\ell : \mathcal{Y} \times \mathcal{Y} \to \mathbb{R}^+$
- Un espace de fonction F : nos classifieurs, généralement paramétré $F = \{f_\mathbf{w}\}, \mathbf{w} \in \mathbb{R}^p$

On cherche :

Une fonction $f : \mathcal{X} \to \mathcal{Y}$ qui minimise l'erreur sur E_app :

$$f^* = argmin \sum_{E_app} \ell(f_\mathbf{w}(\mathbf{x}^i), y^i)$$

Formalisation du problème d'apprentissage

En apprentissage supervisé :

- Un ensemble d'apprentissage : $E_app = \{(\mathbf{x}^i, y^i) \in \mathcal{X} \times \mathcal{Y}\}$
- Un coût : $\ell : \mathcal{Y} \times \mathcal{Y} \to \mathbb{R}^+$
- Un espace de fonction F : nos classifieurs, généralement paramétré $F = \{f_\mathbf{w}\}, \mathbf{w} \in \mathbb{R}^p$

On cherche :

Une fonction $f : \mathcal{X} \to \mathcal{Y}$ qui minimise l'erreur sur E_app :

$$f^* = argmin \sum_{E_app} \ell(f_\mathbf{w}(\mathbf{x}^i), y^i)$$

Problème :

- avec un coût 0-1 ?
- et le sur-apprentissage ?

Risque empirique

Fonctions de coût les plus courantes

- coût quadratique : $(f(x) - y)^2$
- coût linéaire : $max(y.f(x), 0)$
- ou : $max(y.f(x))^2$
- autre variante : $log(1 + exp(-y.f(x)))$
- cross entropie : $\sum_y 1_y log(p(y|\mathbf{x}))$

Risque empirique

$$\mathbb{E}(f) = \mathbb{E}_{\mathcal{X},\mathcal{Y}}(\ell) = \int_{\mathcal{X},\mathcal{Y}} \ell(f(\mathbf{x}), y) dP(\mathbf{x}, y)$$

, approximé par :

$$E_{emp}(f) = \frac{1}{N} \sum_{E_{app}} \ell(f(\mathbf{x}^i), y^i)$$

Problème d'optimisation fonctionelle $\rightarrow$ Problème d'optimisation continue :
$argmin_{f \in F} \mathbb{E}(f) \quad \rightarrow argmin_{\mathbf{w}} E_{emp}(f_{\mathbf{w}})$