Régression logistique (LR)
Modèle additif généralisé (GAM)
Analyse discriminante linéaire (LDA)

Jérémie Cabessa

Laboratoire DAVID, UVSQ

Classification

- Dans le cadre de l'**apprentissage supervisé**, on distingue deux types de méthodes:
- **Méthodes de régression**

  La variable d'output (réponse) est **quantitative**.
- **Méthodes de classification**

  La variable d'output (réponse) est **qualitative**.

Classification

- Dans le cadre de l'**apprentissage supervisé**, on distingue deux types de méthodes:
- **Méthodes de régression**

  La variable d'output (réponse) est **quantitative**.
- **Méthodes de classification**

  La variable d'output (réponse) est **qualitative**.

Classification

- Dans le cadre de l'**apprentissage supervisé**, on distingue deux types de méthodes:
- **Méthodes de régression**

  La variable d'output (réponse) est **quantitative**.
- **Méthodes de classification**

  La variable d'output (réponse) est **qualitative**.

Classification

Ce chapitre rappelle/présente les méthodes de classification suivantes:

- **K-Nearest Neighbors (KNN)**
- Logistic Regression (LR, régression logistique)
- Generalized Additive Models (GAM)

Classification

Ce chapitre rappelle/présente les méthodes de classification suivantes:

- **K-Nearest Neighbors (KNN)**
- **Logistic Regression (LR, régression logistique)**
- Generalized Additive Models (GAM)

Classification

Ce chapitre rappelle/présente les méthodes de classification suivantes:

- **K-Nearest Neighbors (KNN)**
- **Logistic Regression (LR, régression logistique)**
- **Generalized Additive Models (GAM)**

Régression logistique

- Soient $\boldsymbol{X} = (X_1, \ldots, X_p)$ des variables explicatives et Y une variable réponse qualitative *binaire*.
- On code les réalisations possibles de Y par 0 ou 1.
- On aimerait modéliser la probabilité que $Y = 1$ étant données les réalisations des variables $X_1, \ldots, X_p$, i.e.,:

$$\Pr(Y = 1 \mid \boldsymbol{X}) = \Pr(Y = 1 \mid X_1, \ldots, X_p)$$

- Si on sait modéliser $\Pr(Y = 1 \mid \boldsymbol{X})$, alors on sait également modéliser $\Pr(Y = 0 \mid \boldsymbol{X}) = 1 - \Pr(Y = 1 \mid \boldsymbol{X})$.

Régression logistique

- Soient $\boldsymbol{X} = (X_1, \ldots, X_p)$ des variables explicatives et Y une variable réponse qualitative *binaire*.
- On code les réalisations possibles de Y par 0 ou 1.
- On aimerait modéliser la probabilité que $Y = 1$ étant données les réalisations des variables $X_1, \ldots, X_p$, i.e.,:

$$\Pr(Y = 1 \mid \boldsymbol{X}) = \Pr(Y = 1 \mid X_1, \ldots, X_p)$$

- Si on sait modéliser $\Pr(Y = 1 \mid \boldsymbol{X})$, alors on sait également modéliser $\Pr(Y = 0 \mid \boldsymbol{X}) = 1 - \Pr(Y = 1 \mid \boldsymbol{X})$.

Régression logistique

- Soient $\boldsymbol{X} = (X_1, \ldots, X_p)$ des variables explicatives et Y une variable réponse qualitative *binaire*.
- On code les réalisations possibles de Y par 0 ou 1.
- On aimerait modéliser la probabilité que $Y = 1$ étant données les réalisations des variables $X_1, \ldots, X_p$, i.e.,:

$$\Pr(Y = 1 \mid \boldsymbol{X}) = \Pr(Y = 1 \mid X_1, \ldots, X_p)$$

- Si on sait modéliser $\Pr(Y = 1 \mid \boldsymbol{X})$, alors on sait également modéliser $\Pr(Y = 0 \mid \boldsymbol{X}) = 1 - \Pr(Y = 1 \mid \boldsymbol{X})$.

Régression logistique

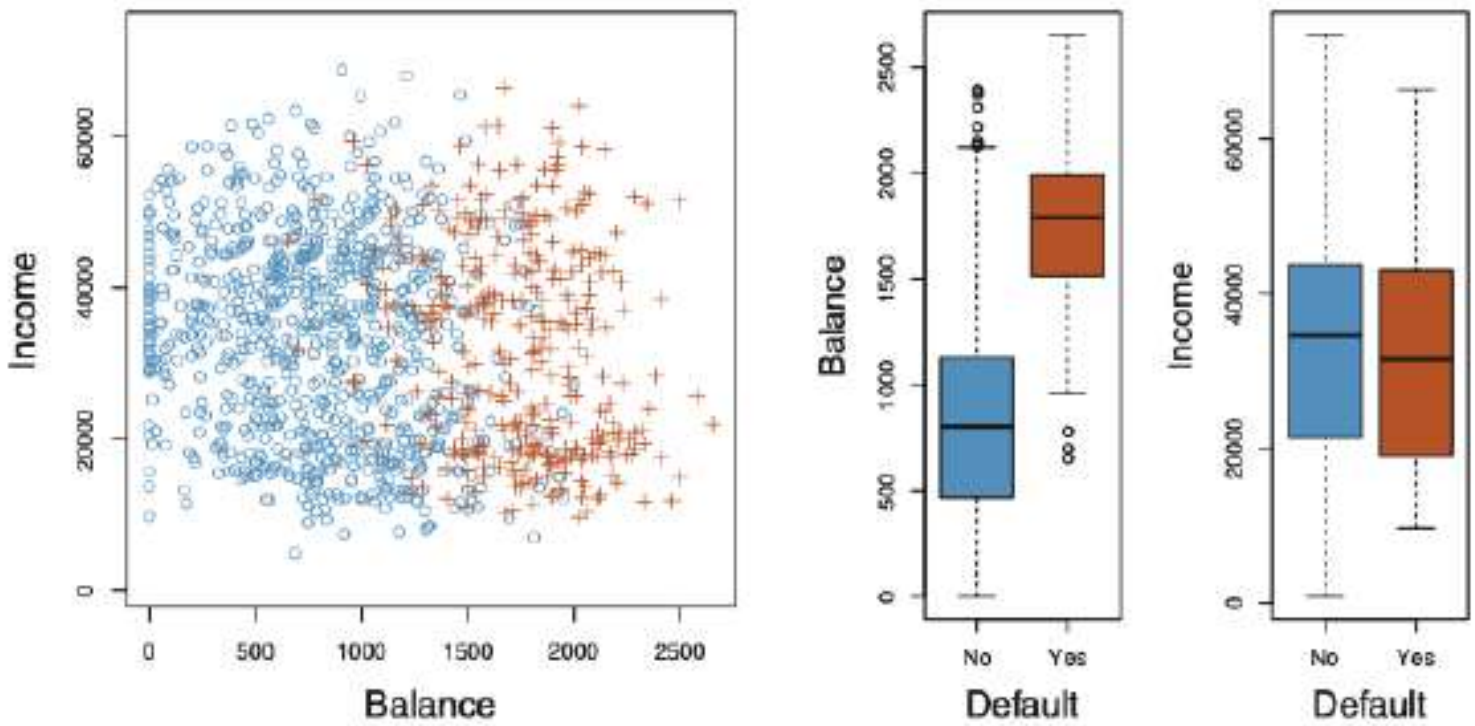
- Soient $\boldsymbol{X} = (X_1, \ldots, X_p)$ des variables explicatives et Y une variable réponse qualitative *binaire*.
- On code les réalisations possibles de Y par 0 ou 1.
- On aimerait modéliser la probabilité que $Y = 1$ étant données les réalisations des variables $X_1, \ldots, X_p$, i.e.,:

$$\Pr(Y = 1 \mid \boldsymbol{X}) = \Pr(Y = 1 \mid X_1, \ldots, X_p)$$

- Si on sait modéliser $\Pr(Y = 1 \mid \boldsymbol{X})$, alors on sait également modéliser $\Pr(Y = 0 \mid \boldsymbol{X}) = 1 - \Pr(Y = 1 \mid \boldsymbol{X})$.

Régression logistique

- Pour diverses raisons, les régressions de types linéaires ne sont pas appropriées...



Régression logistique

- Pour diverses raisons, les régressions de types linéaires ne sont pas appropriées...

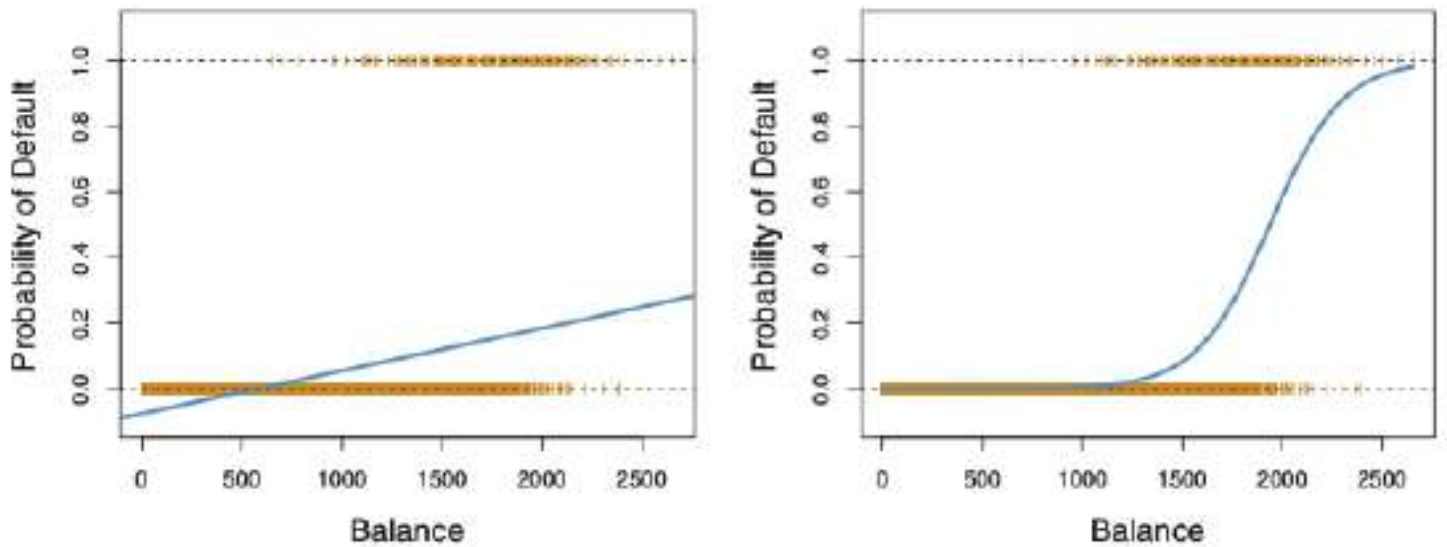


FIGURE 4.2. *Classification using the* `Default` *data.* Left: *Estimated probability of* `default` *using linear regression. Some estimated probabilities are negative! The orange ticks indicate the 0/1 values coded for* `default` *(*`No` *or* `Yes`*).* Right: *Predicted probabilities of* `default` *using logistic regression. All probabilities lie between* 0 *and* 1.

Régression logistique

- On aimerait que $\Pr(Y = 1 \mid \boldsymbol{X}) \in [0, 1]$, puisque c'est une probabilité.
- On suppose alors que (la vraie probabilité) $\Pr(Y = 1 \mid \boldsymbol{X})$ est donnée par la **fonction logistique** suivante:

$$\Pr(Y = 1 \mid \boldsymbol{X}) = \frac{e^{\beta_0 + \beta_1 X_1 + \cdots + \beta_p X_p}}{1 + e^{\beta_0 + \beta_1 X_1 + \cdots + \beta_p X_p}}$$

- **Remarques:**

  $\beta_0 + \beta_1 X_1 + \cdots + \beta_p X_p \to +\infty$ implique $\Pr(Y = 1 \mid \boldsymbol{X}) \to 1$

  $\beta_0 + \beta_1 X_1 + \cdots + \beta_p X_p \to -\infty$ implique $\Pr(Y = 1 \mid \boldsymbol{X}) \to 0$

  Si on connait $\Pr(Y = 1 \mid \boldsymbol{X})$ alors on peut immédiatement déduire $\Pr(Y = 0 \mid \boldsymbol{X}) = 1 - \Pr(Y = 1 \mid \boldsymbol{X})$

Régression logistique

- On aimerait que $\Pr(Y = 1 \mid \boldsymbol{X}) \in [0, 1]$, puisque c'est une probabilité.
- On suppose alors que (la vraie probabilité) $\Pr(Y = 1 \mid \boldsymbol{X})$ est donnée par la **fonction logistique** suivante:

$$\Pr(Y = 1 \mid \boldsymbol{X}) = \frac{e^{\beta_0 + \beta_1 X_1 + \cdots + \beta_p X_p}}{1 + e^{\beta_0 + \beta_1 X_1 + \cdots + \beta_p X_p}}$$

- Remarques:

  $\beta_0 + \beta_1 X_1 + \cdots + \beta_p X_p \to +\infty$ implique $\Pr(Y = 1 \mid \boldsymbol{X}) \to 1$

  $\beta_0 + \beta_1 X_1 + \cdots + \beta_p X_p \to -\infty$ implique $\Pr(Y = 1 \mid \boldsymbol{X}) \to 0$

  Si on connait $\Pr(Y = 1 \mid \boldsymbol{X})$ alors on peut immédiatement déduire $\Pr(Y = 0 \mid \boldsymbol{X}) = 1 - \Pr(Y = 1 \mid \boldsymbol{X})$

Régression logistique

- On aimerait que $\Pr(Y = 1 \mid \boldsymbol{X}) \in [0, 1]$, puisque c'est une probabilité.
- On suppose alors que (la vraie probabilité) $\Pr(Y = 1 \mid \boldsymbol{X})$ est donnée par la **fonction logistique** suivante:

$$\Pr(Y = 1 \mid \boldsymbol{X}) = \frac{e^{\beta_0 + \beta_1 X_1 + \cdots + \beta_p X_p}}{1 + e^{\beta_0 + \beta_1 X_1 + \cdots + \beta_p X_p}}$$

- **Remarques:**

  $\beta_0 + \beta_1 X_1 + \cdots + \beta_p X_p \to +\infty$ implique $\Pr(Y = 1 \mid \boldsymbol{X}) \to 1$

  $\beta_0 + \beta_1 X_1 + \cdots + \beta_p X_p \to -\infty$ implique $\Pr(Y = 1 \mid \boldsymbol{X}) \to 0$

  Si on connait $\Pr(Y = 1 \mid \boldsymbol{X})$ alors on peut immédiatement déduire $\Pr(Y = 0 \mid \boldsymbol{X}) = 1 - \Pr(Y = 1 \mid \boldsymbol{X})$

Régression logistique

- On aimerait que $\Pr(Y = 1 \mid \boldsymbol{X}) \in [0, 1]$, puisque c'est une probabilité.
- On suppose alors que (la vraie probabilité) $\Pr(Y = 1 \mid \boldsymbol{X})$ est donnée par la **fonction logistique** suivante:

$$\Pr(Y = 1 \mid \boldsymbol{X}) = \frac{e^{\beta_0 + \beta_1 X_1 + \cdots + \beta_p X_p}}{1 + e^{\beta_0 + \beta_1 X_1 + \cdots + \beta_p X_p}}$$

- **Remarques:**

  $\beta_0 + \beta_1 X_1 + \cdots + \beta_p X_p \to +\infty$ implique $\Pr(Y = 1 \mid \boldsymbol{X}) \to 1$

  $\beta_0 + \beta_1 X_1 + \cdots + \beta_p X_p \to -\infty$ implique $\Pr(Y = 1 \mid \boldsymbol{X}) \to 0$

  Si on connait $\Pr(Y = 1 \mid \boldsymbol{X})$ alors on peut immédiatement déduire $\Pr(Y = 0 \mid \boldsymbol{X}) = 1 - \Pr(Y = 1 \mid \boldsymbol{X})$

Régression logistique

- Note hypothèse sur la forme de $\Pr(Y = 1 \mid \boldsymbol{X})$

$$\Pr(Y = 1 \mid \boldsymbol{X}) = \frac{e^{\beta_0+\beta_1 X_1+\cdots+\beta_p X_p}}{1 + e^{\beta_0+\beta_1 X_1+\cdots+\beta_p X_p}}$$

implique que **la fonction logit** est de la forme linéaire suivante:

$$\log\left(\frac{\Pr(Y = 1 \mid \boldsymbol{X})}{1 - \Pr(Y = 1 \mid \boldsymbol{X})}\right) = \beta_0 + \beta_1 X_1 + \cdots + \beta_p X_p$$

Régression logistique

- Étant donné un training set $S_{\text{train}} = \{(\boldsymbol{x_1}, y_1), \ldots, (\boldsymbol{x_N}, y_N)\}$, on aimerait estimer les paramètres $\boldsymbol{\beta} = (\beta_0, \beta_1, \ldots, \beta_p)$ de la fonction logit de manière pertinente...
- On aimerait obtenir des estimateurs $\hat{\boldsymbol{\beta}} = (\hat{\beta}_0, \hat{\beta}_1, \ldots, \hat{\beta}_p)$ tels que, pour tout $(\boldsymbol{x_i}, y_i) \in S_{\text{train}}$, on a:

$$y_i = 1 \Rightarrow \hat{\Pr}(Y = 1 \mid \boldsymbol{X} = \boldsymbol{x_i}) > 0.5$$
$$y_i = 0 \Rightarrow \hat{\Pr}(Y = 0 \mid \boldsymbol{X} = \boldsymbol{x_i}) = 1 - \hat{\Pr}(Y = 1 \mid \boldsymbol{X} = \boldsymbol{x_i}) \leq 0.5.$$

où $\hat{\Pr}(Y = 1 \mid \boldsymbol{X} = \boldsymbol{x_i}) := \frac{e^{\hat{\beta}_0 + \sum_{k=1}^{p} \hat{\beta}_k x_{ik}}}{1 + e^{\hat{\beta}_0 + \sum_{k=1}^{p} \hat{\beta}_k x_{ik}}}$ est l'estimateur de $\Pr(Y = 1 \mid \boldsymbol{X} = \boldsymbol{x_i})$ donné par les $\hat{\beta}_0, \hat{\beta}_1, \ldots, \hat{\beta}_p$.

Régression logistique

- Étant donné un training set $S_{\text{train}} = \{(\boldsymbol{x_1}, y_1), \ldots, (\boldsymbol{x_N}, y_N)\}$, on aimerait estimer les paramètres $\boldsymbol{\beta} = (\beta_0, \beta_1, \ldots, \beta_p)$ de la fonction logit de manière pertinente...
- On aimerait obtenir des estimateurs $\hat{\boldsymbol{\beta}} = (\hat{\beta}_0, \hat{\beta}_1, \ldots, \hat{\beta}_p)$ tels que, pour tout $(\boldsymbol{x_i}, y_i) \in S_{\text{train}}$, on a:

$$y_i = 1 \;\Rightarrow\; \hat{\Pr}(Y = 1 \mid \boldsymbol{X} = \boldsymbol{x_i}) > 0.5$$
$$y_i = 0 \;\Rightarrow\; \hat{\Pr}(Y = 0 \mid \boldsymbol{X} = \boldsymbol{x_i}) = 1 - \hat{\Pr}(Y = 1 \mid \boldsymbol{X} = \boldsymbol{x_i}) \leq 0.5.$$

où $\hat{\Pr}(Y = 1 \mid \boldsymbol{X} = \boldsymbol{x_i}) := \frac{e^{\hat{\beta}_0 + \sum_{k=1}^{p} \hat{\beta}_k x_{ik}}}{1 + e^{\hat{\beta}_0 + \sum_{k=1}^{p} \hat{\beta}_k x_{ik}}}$ est l'estimateur de $\Pr(Y = 1 \mid \boldsymbol{X} = \boldsymbol{x_i})$ donné par les $\hat{\beta}_0, \hat{\beta}_1, \ldots, \hat{\beta}_p$.

Régression logistique

- Pour cela, on choisit les paramètres $\hat{\beta}_0, \hat{\beta}_1, \ldots, \hat{\beta}_p$ qui maximisent la **fonction de vraisemblance (likelihood)**, i.e.:

$$\hat{\boldsymbol{\beta}} = \arg\max_{\boldsymbol{\beta}} L(\boldsymbol{\beta}) \quad \text{où}$$

$$L(\boldsymbol{\beta}) = L(\beta_0, \beta_1, \ldots, \beta_p) :=$$

$$\prod_{\{i:y_i=1\}} \Pr(Y=1 \mid \boldsymbol{X}=\boldsymbol{x}_i) \prod_{\{j:y_j=0\}} \Pr(Y=0 \mid \boldsymbol{X}=\boldsymbol{x}_j) =$$

$$\prod_{\{i:y_i=1\}} \Pr(Y=1 \mid \boldsymbol{X}=\boldsymbol{x}_i) \prod_{\{j:y_j=0\}} (1-\Pr(Y=1 \mid \boldsymbol{X}=\boldsymbol{x}_j)) =$$

$$\prod_{\{i:y_i=1\}} \frac{e^{\beta_0+\sum_{k=1}^p \beta_k x_{ik}}}{1+e^{\beta_0+\sum_{k=1}^p \beta_k x_{ik}}} \prod_{\{j:y_j=0\}} \left(1-\frac{e^{\beta_0+\sum_{k=1}^p \beta_k x_{jk}}}{1+e^{\beta_0+\sum_{k=1}^p \beta_k x_{jk}}}\right) =$$

$$\prod_{\{i:y_i=1\}} \frac{e^{\boldsymbol{\beta}^T \boldsymbol{x}_i}}{1+e^{\boldsymbol{\beta}^T \boldsymbol{x}_i}} \prod_{\{j:y_j=0\}} \left(\frac{1}{1+e^{\boldsymbol{\beta}^T \boldsymbol{x}_j}}\right) \quad \text{où } \boldsymbol{x}_i = (1, \boldsymbol{x}_i) \text{ (abus de notation)}$$

Régression logistique

- Pour cela, on choisit les paramètres $\hat{\beta}_0, \hat{\beta}_1, \ldots, \hat{\beta}_p$ qui maximisent la **fonction de vraisemblance (likelihood)**, i.e.:

$$\hat{\boldsymbol{\beta}} = \arg\max_{\boldsymbol{\beta}} L(\boldsymbol{\beta}) \quad \text{où}$$

$$L(\boldsymbol{\beta}) = L(\beta_0, \beta_1, \ldots, \beta_p) :=$$

$$\prod_{\{i:y_i=1\}} \Pr(Y=1 \mid \boldsymbol{X}=\boldsymbol{x_i}) \prod_{\{j:y_j=0\}} \Pr(Y=0 \mid \boldsymbol{X}=\boldsymbol{x_j}) =$$

$$\prod_{\{i:y_i=1\}} \Pr(Y=1 \mid \boldsymbol{X}=\boldsymbol{x_i}) \prod_{\{j:y_j=0\}} (1-\Pr(Y=1 \mid \boldsymbol{X}=\boldsymbol{x_j})) =$$

$$\prod_{\{i:y_i=1\}} \frac{e^{\beta_0+\sum_{k=1}^p \beta_k x_{ik}}}{1+e^{\beta_0+\sum_{k=1}^p \beta_k x_{ik}}} \prod_{\{j:y_j=0\}} \left(1-\frac{e^{\beta_0+\sum_{k=1}^p \beta_k x_{jk}}}{1+e^{\beta_0+\sum_{k=1}^p \beta_k x_{jk}}}\right) =$$

$$\prod_{\{i:y_i=1\}} \frac{e^{\boldsymbol{\beta}^T \boldsymbol{x_i}}}{1+e^{\boldsymbol{\beta}^T \boldsymbol{x_i}}} \prod_{\{j:y_j=0\}} \left(\frac{1}{1+e^{\boldsymbol{\beta}^T \boldsymbol{x_j}}}\right) \quad \text{où } \boldsymbol{x_i} = (1, \boldsymbol{x_i}) \text{ (abus de notation)}$$

Régression logistique

- Pour cela, on choisit les paramètres $\hat{\beta}_0, \hat{\beta}_1, \ldots, \hat{\beta}_p$ qui maximisent la **fonction de vraisemblance (likelihood)**, i.e.:

$$\hat{\boldsymbol{\beta}} = \arg\max_{\boldsymbol{\beta}} L(\boldsymbol{\beta}) \quad \text{où}$$

$$L(\boldsymbol{\beta}) = L(\beta_0, \beta_1, \ldots, \beta_p) :=$$

$$\prod_{\{i:y_i=1\}} \Pr(Y=1 \mid \boldsymbol{X}=\boldsymbol{x_i}) \prod_{\{j:y_j=0\}} \Pr(Y=0 \mid \boldsymbol{X}=\boldsymbol{x_j}) =$$

$$\prod_{\{i:y_i=1\}} \Pr(Y=1 \mid \boldsymbol{X}=\boldsymbol{x_i}) \prod_{\{j:y_j=0\}} (1-\Pr(Y=1 \mid \boldsymbol{X}=\boldsymbol{x_j})) =$$

$$\prod_{\{i:y_i=1\}} \frac{e^{\beta_0+\sum_{k=1}^p \beta_k x_{ik}}}{1+e^{\beta_0+\sum_{k=1}^p \beta_k x_{ik}}} \prod_{\{j:y_j=0\}} \left(1-\frac{e^{\beta_0+\sum_{k=1}^p \beta_k x_{jk}}}{1+e^{\beta_0+\sum_{k=1}^p \beta_k x_{jk}}}\right) =$$

$$\prod_{\{i:y_i=1\}} \frac{e^{\boldsymbol{\beta}^T \boldsymbol{x_i}}}{1+e^{\boldsymbol{\beta}^T \boldsymbol{x_i}}} \prod_{\{j:y_j=0\}} \left(\frac{1}{1+e^{\boldsymbol{\beta}^T \boldsymbol{x_j}}}\right) \quad \text{où } \boldsymbol{x_i} = (1, \boldsymbol{x_i}) \text{ (abus de notation)}$$

Régression logistique

- Pour cela, on choisit les paramètres $\hat{\beta}_0, \hat{\beta}_1, \ldots, \hat{\beta}_p$ qui maximisent la **fonction de vraisemblance (likelihood)**, i.e.:

$$\hat{\boldsymbol{\beta}} = \arg\max_{\boldsymbol{\beta}} L(\boldsymbol{\beta}) \quad \text{où}$$

$$L(\boldsymbol{\beta}) = L(\beta_0, \beta_1, \ldots, \beta_p) :=$$

$$\prod_{\{i:y_i=1\}} \Pr(Y = 1 \mid \boldsymbol{X} = \boldsymbol{x_i}) \prod_{\{j:y_j=0\}} \Pr(Y = 0 \mid \boldsymbol{X} = \boldsymbol{x_j}) =$$

$$\prod_{\{i:y_i=1\}} \Pr(Y = 1 \mid \boldsymbol{X} = \boldsymbol{x}_i) \prod_{\{j:y_j=0\}} (1 - \Pr(Y = 1 \mid \boldsymbol{X} = \boldsymbol{x_j})) =$$

$$\prod_{\{i:y_i=1\}} \frac{e^{\beta_0 + \sum_{k=1}^p \beta_k x_{ik}}}{1 + e^{\beta_0 + \sum_{k=1}^p \beta_k x_{ik}}} \prod_{\{j:y_j=0\}} \left(1 - \frac{e^{\beta_0 + \sum_{k=1}^p \beta_k x_{jk}}}{1 + e^{\beta_0 + \sum_{k=1}^p \beta_k x_{jk}}}\right) =$$

$$\prod_{\{i:y_i=1\}} \frac{e^{\beta^T x_i}}{1 + e^{\beta^T x_i}} \prod_{\{j:y_j=0\}} \left(\frac{1}{1 + e^{\beta^T x_j}}\right) \quad \text{où } x_i = (1, x_i) \text{ (abus de notation)}$$

Régression logistique

- Pour cela, on choisit les paramètres $\hat{\beta}_0, \hat{\beta}_1, \ldots, \hat{\beta}_p$ qui maximisent la **fonction de vraisemblance (likelihood)**, i.e.:

$$\hat{\boldsymbol{\beta}} = \arg\max_{\boldsymbol{\beta}} L(\boldsymbol{\beta}) \quad \text{où}$$

$$L(\boldsymbol{\beta}) = L(\beta_0, \beta_1, \ldots, \beta_p) :=$$

$$\prod_{\{i:y_i=1\}} \Pr(Y = 1 \mid \boldsymbol{X} = \boldsymbol{x_i}) \prod_{\{j:y_j=0\}} \Pr(Y = 0 \mid \boldsymbol{X} = \boldsymbol{x_j}) =$$

$$\prod_{\{i:y_i=1\}} \Pr(Y = 1 \mid \boldsymbol{X} = \boldsymbol{x_i}) \prod_{\{j:y_j=0\}} \left(1 - \Pr(Y = 1 \mid \boldsymbol{X} = \boldsymbol{x_j})\right) =$$

$$\prod_{\{i:y_i=1\}} \frac{e^{\beta_0 + \sum_{k=1}^p \beta_k x_{ik}}}{1 + e^{\beta_0 + \sum_{k=1}^p \beta_k x_{ik}}} \prod_{\{j:y_j=0\}} \left(1 - \frac{e^{\beta_0 + \sum_{k=1}^p \beta_k x_{jk}}}{1 + e^{\beta_0 + \sum_{k=1}^p \beta_k x_{jk}}}\right) =$$

$$\prod_{\{i:y_i=1\}} \frac{e^{\boldsymbol{\beta}^T \boldsymbol{x}_i}}{1 + e^{\boldsymbol{\beta}^T \boldsymbol{x}_i}} \prod_{\{j:y_j=0\}} \left(\frac{1}{1 + e^{\boldsymbol{\beta}^T \boldsymbol{x}_j}}\right) \quad \text{où } \boldsymbol{x}_i = (1, \boldsymbol{x}_i) \text{ (abus de notation)}$$

Régression logistique

- Pour cela, on choisit les paramètres $\hat{\beta}_0, \hat{\beta}_1, \ldots, \hat{\beta}_p$ qui maximisent la **fonction de vraisemblance (likelihood)**, i.e.:

$$\hat{\boldsymbol{\beta}} = \arg\max_{\boldsymbol{\beta}} L(\boldsymbol{\beta}) \quad \text{où}$$

$$L(\boldsymbol{\beta}) = L(\beta_0, \beta_1, \ldots, \beta_p) :=$$

$$\prod_{\{i:y_i=1\}} \Pr(Y = 1 \mid \boldsymbol{X} = \boldsymbol{x_i}) \prod_{\{j:y_j=0\}} \Pr(Y = 0 \mid \boldsymbol{X} = \boldsymbol{x_j}) =$$

$$\prod_{\{i:y_i=1\}} \Pr(Y = 1 \mid \boldsymbol{X} = \boldsymbol{x_i}) \prod_{\{j:y_j=0\}} \left(1 - \Pr(Y = 1 \mid \boldsymbol{X} = \boldsymbol{x_j})\right) =$$

$$\prod_{\{i:y_i=1\}} \frac{e^{\beta_0 + \sum_{k=1}^p \beta_k x_{ik}}}{1 + e^{\beta_0 + \sum_{k=1}^p \beta_k x_{ik}}} \prod_{\{j:y_j=0\}} \left(1 - \frac{e^{\beta_0 + \sum_{k=1}^p \beta_k x_{jk}}}{1 + e^{\beta_0 + \sum_{k=1}^p \beta_k x_{jk}}}\right) =$$

$$\prod_{\{i:y_i=1\}} \frac{e^{\boldsymbol{\beta}^T \boldsymbol{x}_i}}{1 + e^{\boldsymbol{\beta}^T \boldsymbol{x}_i}} \prod_{\{j:y_j=0\}} \left(\frac{1}{1 + e^{\boldsymbol{\beta}^T \boldsymbol{x}_j}}\right) \quad \text{où } \boldsymbol{x}_i = (1, \boldsymbol{x}_i) \text{ (abus de notation)}$$

Régression logistique

- Pour cela, on choisit les paramètres $\hat{\beta}_0, \hat{\beta}_1, \ldots, \hat{\beta}_p$ qui maximisent la **fonction de vraisemblance (likelihood)**, i.e.:

$$\hat{\boldsymbol{\beta}} = \arg\max_{\boldsymbol{\beta}} L(\boldsymbol{\beta}) \quad \text{où}$$

$$L(\boldsymbol{\beta}) = L(\beta_0, \beta_1, \ldots, \beta_p) :=$$

$$\prod_{\{i:y_i=1\}} \Pr(Y = 1 \mid \boldsymbol{X} = \boldsymbol{x_i}) \prod_{\{j:y_j=0\}} \Pr(Y = 0 \mid \boldsymbol{X} = \boldsymbol{x_j}) =$$

$$\prod_{\{i:y_i=1\}} \Pr(Y = 1 \mid \boldsymbol{X} = \boldsymbol{x_i}) \prod_{\{j:y_j=0\}} \left(1 - \Pr(Y = 1 \mid \boldsymbol{X} = \boldsymbol{x_j})\right) =$$

$$\prod_{\{i:y_i=1\}} \frac{e^{\beta_0 + \sum_{k=1}^p \beta_k x_{ik}}}{1 + e^{\beta_0 + \sum_{k=1}^p \beta_k x_{ik}}} \prod_{\{j:y_j=0\}} \left(1 - \frac{e^{\beta_0 + \sum_{k=1}^p \beta_k x_{jk}}}{1 + e^{\beta_0 + \sum_{k=1}^p \beta_k x_{jk}}}\right) =$$

$$\prod_{\{i:y_i=1\}} \frac{e^{\boldsymbol{\beta}^T \boldsymbol{x_i}}}{1 + e^{\boldsymbol{\beta}^T \boldsymbol{x_i}}} \prod_{\{j:y_j=0\}} \left(\frac{1}{1 + e^{\boldsymbol{\beta}^T \boldsymbol{x_j}}}\right) \quad \text{où } \boldsymbol{x_i} = (1, \boldsymbol{x_i}) \text{ (abus de notation)}$$

Régression logistique

- Dans la formule de $L(\boldsymbol{\beta})$, plus les probabilités

$$\Pr(Y = 1 \mid \boldsymbol{X} = \boldsymbol{x_i}) \quad \text{et} \quad \Pr(Y = 0 \mid \boldsymbol{X} = \boldsymbol{x_j})$$

  sont proches de 1 (i.e. sont corrects), plus la valeur de $L(\boldsymbol{\beta})$ est grande ($\rightarrow 1$).

- D'où l'idée de chercher les estimateurs $\hat{\boldsymbol{\beta}} = (\hat{\beta}_0, \hat{\beta}_1, \ldots, \hat{\beta}_p)$ qui maximisent $L(\boldsymbol{\beta})$.

- En pratique, les paramètres $\hat{\boldsymbol{\beta}} = (\hat{\beta}_0, \hat{\beta}_1, \ldots, \hat{\beta}_p)$ qui constituent la solution de ce problème de maximisation sont calculés par une méthode de gradient itérative...

Régression logistique

- Dans la formule de $L(\boldsymbol{\beta})$, plus les probabilités

$$\Pr(Y = 1 \mid \boldsymbol{X} = \boldsymbol{x_i}) \quad \text{et} \quad \Pr(Y = 0 \mid \boldsymbol{X} = \boldsymbol{x_j})$$

  sont proches de 1 (i.e. sont corrects), plus la valeur de $L(\boldsymbol{\beta})$ est grande ($\to 1$).

- D'où l'idée de chercher les estimateurs $\hat{\boldsymbol{\beta}} = (\hat{\beta}_0, \hat{\beta}_1, \ldots, \hat{\beta}_p)$ qui maximisent $L(\boldsymbol{\beta})$.

- En pratique, les paramètres $\hat{\boldsymbol{\beta}} = (\hat{\beta}_0, \hat{\beta}_1, \ldots, \hat{\beta}_p)$ qui constituent la solution de ce problème de maximisation sont calculés par une méthode de gradient itérative...

Régression logistique

- Dans la formule de $L(\boldsymbol{\beta})$, plus les probabilités

$$\Pr(Y = 1 \mid \boldsymbol{X} = \boldsymbol{x_i}) \quad \text{et} \quad \Pr(Y = 0 \mid \boldsymbol{X} = \boldsymbol{x_j})$$

  sont proches de 1 (i.e. sont corrects), plus la valeur de $L(\boldsymbol{\beta})$ est grande ($\to 1$).

- D'où l'idée de chercher les estimateurs $\hat{\boldsymbol{\beta}} = (\hat{\beta}_0, \hat{\beta}_1, \ldots, \hat{\beta}_p)$ qui maximisent $L(\boldsymbol{\beta})$.

- En pratique, les paramètres $\hat{\boldsymbol{\beta}} = (\hat{\beta}_0, \hat{\beta}_1, \ldots, \hat{\beta}_p)$ qui constituent la solution de ce problème de maximisation sont calculés par une méthode de gradient itérative...

Régression logistique

- Une fois les paramètres $\hat{\boldsymbol{\beta}} = (\hat{\beta}_0, \hat{\beta}_1, \ldots, \hat{\beta}_p)$ calculés, on peut faire des prédictions de manière très simple.
- Soit $\boldsymbol{x} = (x_1, \ldots, x_p)$ un point. La prédiction $\hat{y}$ associée à x est donnée par:

$$\hat{y} := \begin{cases} 1, \text{ si } \hat{\Pr}(Y = 1 \mid \boldsymbol{X} = \boldsymbol{x}) = \frac{e^{\hat{\boldsymbol{\beta}}^T \boldsymbol{x}}}{1 + e^{\hat{\boldsymbol{\beta}}^T \boldsymbol{x}}} > 0.5 \\ 0, \text{ si } \hat{\Pr}(Y = 1 \mid \boldsymbol{X} = \boldsymbol{x}) = \frac{e^{\hat{\boldsymbol{\beta}}^T \boldsymbol{x}}}{1 + e^{\hat{\boldsymbol{\beta}}^T \boldsymbol{x}}} \leq 0.5 \end{cases}$$

Régression logistique

- Une fois les paramètres $\hat{\boldsymbol{\beta}} = (\hat{\beta}_0, \hat{\beta}_1, \ldots, \hat{\beta}_p)$ calculés, on peut faire des prédictions de manière très simple.
- Soit $\boldsymbol{x} = (x_1, \ldots, x_p)$ un point. La prédiction $\hat{y}$ associée à x est donnée par:

$$\hat{y} := \begin{cases} 1, \text{ si } \hat{\Pr}(Y = 1 \mid \boldsymbol{X} = \boldsymbol{x}) = \dfrac{e^{\hat{\boldsymbol{\beta}}^T \boldsymbol{x}}}{1+e^{\hat{\boldsymbol{\beta}}^T \boldsymbol{x}}} > 0.5 \\ 0, \text{ si } \hat{\Pr}(Y = 1 \mid \boldsymbol{X} = \boldsymbol{x}) = \dfrac{e^{\hat{\boldsymbol{\beta}}^T \boldsymbol{x}}}{1+e^{\hat{\boldsymbol{\beta}}^T \boldsymbol{x}}} \leq 0.5 \end{cases}$$

Régression logistique

- Le processus peut se généraliser à un contexte multi-classes quelconque. Supposons que Y possède $k \geq 2$ valeurs possibles (k classes): $c_1, \ldots, c_k$.
- On code Y par une variable $\bar{\boldsymbol{Y}} = (Y_1, \ldots, Y_k)$ telle que $Y_i = 1$ ssi $Y = c_i$ (1-hot encoding).
- On estime les paramètres $\hat{\boldsymbol{\beta}} = (\hat{\beta}_0, \hat{\beta}_1, \ldots, \hat{\beta}_p)$ de manière similaire, ce qui permet l'estimation $\hat{\Pr}(\bar{\boldsymbol{Y}} = \bar{\boldsymbol{y}} \mid \boldsymbol{X} = \boldsymbol{x})$.
- La prédiction $\hat{y}$ associée à $\boldsymbol{x}$ est alors donnée par (on note $\mathbf{1}_i$ le vecteur de dim k avec un 1 en position i et des 0 partout ailleurs):

$$\hat{y} = c_i \text{ si et seulement si}$$
$$\hat{\Pr}(\bar{\boldsymbol{Y}} = \mathbf{1}_i \mid X = \boldsymbol{x}) > \hat{\Pr}(\bar{\boldsymbol{Y}} = \mathbf{1}_j \mid X = \boldsymbol{x}) \text{ pour tout } j \neq i.$$

Régression logistique

- Le processus peut se généraliser à un contexte multi-classes quelconque. Supposons que Y possède $k \geq 2$ valeurs possibles (k classes): $c_1, \ldots, c_k$.
- On code Y par une variable $\bar{\boldsymbol{Y}} = (Y_1, \ldots, Y_k)$ telle que $Y_i = 1$ ssi $Y = c_i$ (1-hot encoding).
- On estime les paramètres $\hat{\boldsymbol{\beta}} = (\hat{\beta}_0, \hat{\beta}_1, \ldots, \hat{\beta}_p)$ de manière similaire, ce qui permet l'estimation $\hat{\Pr}(\bar{\boldsymbol{Y}} = \bar{\boldsymbol{y}} \mid \boldsymbol{X} = \boldsymbol{x})$.
- La prédiction $\hat{y}$ associée à $\boldsymbol{x}$ est alors donnée par (on note $\mathbf{1}_i$ le vecteur de dim k avec un 1 en position i et des 0 partout ailleurs):

$$\hat{y} = c_i \text{ si et seulement si}$$
$$\hat{\Pr}(\bar{\boldsymbol{Y}} = \mathbf{1}_i \mid X = \boldsymbol{x}) > \hat{\Pr}(\bar{\boldsymbol{Y}} = \mathbf{1}_j \mid X = \boldsymbol{x}) \text{ pour tout } j \neq i.$$

Régression logistique

- Le processus peut se généraliser à un contexte multi-classes quelconque. Supposons que Y possède $k \geq 2$ valeurs possibles (k classes): $c_1, \ldots, c_k$.
- On code Y par une variable $\bar{\boldsymbol{Y}} = (Y_1, \ldots, Y_k)$ telle que $Y_i = 1$ ssi $Y = c_i$ (1-hot encoding).
- On estime les paramètres $\hat{\boldsymbol{\beta}} = (\hat{\beta}_0, \hat{\beta}_1, \ldots, \hat{\beta}_p)$ de manière similaire, ce qui permet l'estimation $\hat{\Pr}(\bar{\boldsymbol{Y}} = \bar{\boldsymbol{y}} \mid \boldsymbol{X} = \boldsymbol{x})$.
- La prédiction $\hat{y}$ associée à $\boldsymbol{x}$ est alors donnée par (on note $\mathbf{1}_i$ le vecteur de dim k avec un 1 en position i et des 0 partout ailleurs):

$$\hat{y} = c_i \text{ si et seulement si}$$
$$\hat{\Pr}(\bar{\boldsymbol{Y}} = \mathbf{1}_i \mid X = \boldsymbol{x}) > \hat{\Pr}(\bar{\boldsymbol{Y}} = \mathbf{1}_j \mid X = \boldsymbol{x}) \text{ pour tout } j \neq i.$$

Régression logistique

- Le processus peut se généraliser à un contexte multi-classes quelconque. Supposons que Y possède $k \geq 2$ valeurs possibles (k classes): $c_1, \ldots, c_k$.
- On code Y par une variable $\bar{\boldsymbol{Y}} = (Y_1, \ldots, Y_k)$ telle que $Y_i = 1$ ssi $Y = c_i$ (1-hot encoding).
- On estime les paramètres $\hat{\boldsymbol{\beta}} = (\hat{\beta}_0, \hat{\beta}_1, \ldots, \hat{\beta}_p)$ de manière similaire, ce qui permet l'estimation $\hat{\Pr}(\bar{\boldsymbol{Y}} = \bar{\boldsymbol{y}} \mid \boldsymbol{X} = \boldsymbol{x})$.
- La prédiction $\hat{y}$ associée à $\boldsymbol{x}$ est alors donnée par (on note $\mathbf{1}_i$ le vecteur de dim k avec un 1 en position i et des 0 partout ailleurs):

$$\hat{y} = c_i \text{ si et seulement si}$$
$$\hat{\Pr}(\bar{\boldsymbol{Y}} = \mathbf{1}_i \mid X = \boldsymbol{x}) > \hat{\Pr}(\bar{\boldsymbol{Y}} = \mathbf{1}_j \mid X = \boldsymbol{x}) \text{ pour tout } j \neq i.$$

Generalized Additive Models (GAM)

- Les **Generalized Additive Models (GAM)** peuvent être adaptés dans le cas de la classification.
- Dans ce cas, on fat l'hypothèse que **la fonction logit** est de la forme linéaire suivante:

$$\log\left(\frac{\Pr(Y=1 \mid \boldsymbol{X})}{1-\Pr(Y=1 \mid \boldsymbol{X})}\right) = \beta_0 + f_1(X_1) + \cdots + f_p(X_p)$$

- où $f_1, \ldots, f_p$ peuvent être différents types de fonctions linéaires ou non-linéaires: *polynomial regressions*, *step functions*, *basis functions*, *regression splines*, *smoothing splines*, *local regressions*... (on ne présentera pas ces méthodes en détail ici)

Generalized Additive Models (GAM)

- Les **Generalized Additive Models (GAM)** peuvent être adaptés dans le cas de la classification.
- Dans ce cas, on fat l'hypothèse que **la fonction logit** est de la forme linéaire suivante:

$$\log\left(\frac{\Pr(Y=1 \mid \boldsymbol{X})}{1-\Pr(Y=1 \mid \boldsymbol{X})}\right) = \beta_0 + f_1(X_1) + \cdots + f_p(X_p)$$

- où $f_1, \ldots, f_p$ peuvent être différents types de fonctions linéaires ou non-linéaires: *polynomial regressions*, *step functions*, *basis functions*, *regression splines*, *smoothing splines*, *local regressions*... (on ne présentera pas ces méthodes en détail ici)

Generalized Additive Models (GAM)

- Les **Generalized Additive Models (GAM)** peuvent être adaptés dans le cas de la classification.
- Dans ce cas, on fat l'hypothèse que **la fonction logit** est de la forme linéaire suivante:

$$\log\left(\frac{\Pr(Y=1 \mid \boldsymbol{X})}{1-\Pr(Y=1 \mid \boldsymbol{X})}\right) = \beta_0 + f_1(X_1) + \cdots + f_p(X_p)$$

- où $f_1, \ldots, f_p$ peuvent être différents types de fonctions linéaires ou non-linéaires: *polynomial regressions*, *step functions*, *basis functions*, *regression splines*, *smoothing splines*, *local regressions*... (on ne présentera pas ces méthodes en détail ici)

Generalized Additive Models (GAM)

Les GAM possèdent les avantages suivants:

- Peuvent capturer des relations non-linéaires f_i entre les prédicteurs X_i et la réponse Y
- Donnent donc souvent de meilleures prédictions.
- Restent interprétables: la fonction f_i représente la contribution de X_i à la réponse Y si toutes les autres variables sont fixes.

Les inconvénients:

- Les modèles restent *additifs*: les relations non-linaires impliquant plusieurs prédicteurs, e.g. $12X_i^2X_j^3$, ne sont donc pas capturées.

Generalized Additive Models (GAM)

Les GAM possèdent les avantages suivants:

- Peuvent capturer des relations non-linéaires f_i entre les prédicteurs X_i et la réponse Y
- Donnent donc souvent de meilleures prédictions.
- Restent interprétables: la fonction f_i représente la contribution de X_i à la réponse Y si toutes les autres variables sont fixes.

Les inconvénients:

- Les modèles restent *additifs*: les relations non-linaires impliquant plusieurs prédicteurs, e.g. $12X_i^2X_j^3$, ne sont donc pas capturées.

Generalized Additive Models (GAM)

Les GAM possèdent les avantages suivants:

- Peuvent capturer des relations non-linéaires f_i entre les prédicteurs X_i et la réponse Y
- Donnent donc souvent de meilleures prédictions.
- Restent interprétables: la fonction f_i représente la contribution de X_i à la réponse Y si toutes les autres variables sont fixes.

Les inconvénients:

- Les modèles restent *additifs*: les relations non-linaires impliquant plusieurs prédicteurs, e.g. $12X_i^2X_j^3$, ne sont donc pas capturées.

Generalized Additive Models (GAM)

Les GAM possèdent les avantages suivants:

- Peuvent capturer des relations non-linéaires f_i entre les prédicteurs X_i et la réponse Y
- Donnent donc souvent de meilleures prédictions.
- Restent interprétables: la fonction f_i représente la contribution de X_i à la réponse Y si toutes les autres variables sont fixes.

Les inconvénients:

- Les modèles restent *additifs*: les relations non-linaires impliquant plusieurs prédicteurs, e.g. $12X_i^2X_j^3$, ne sont donc pas capturées.

Generalized Additive Models (GAM)

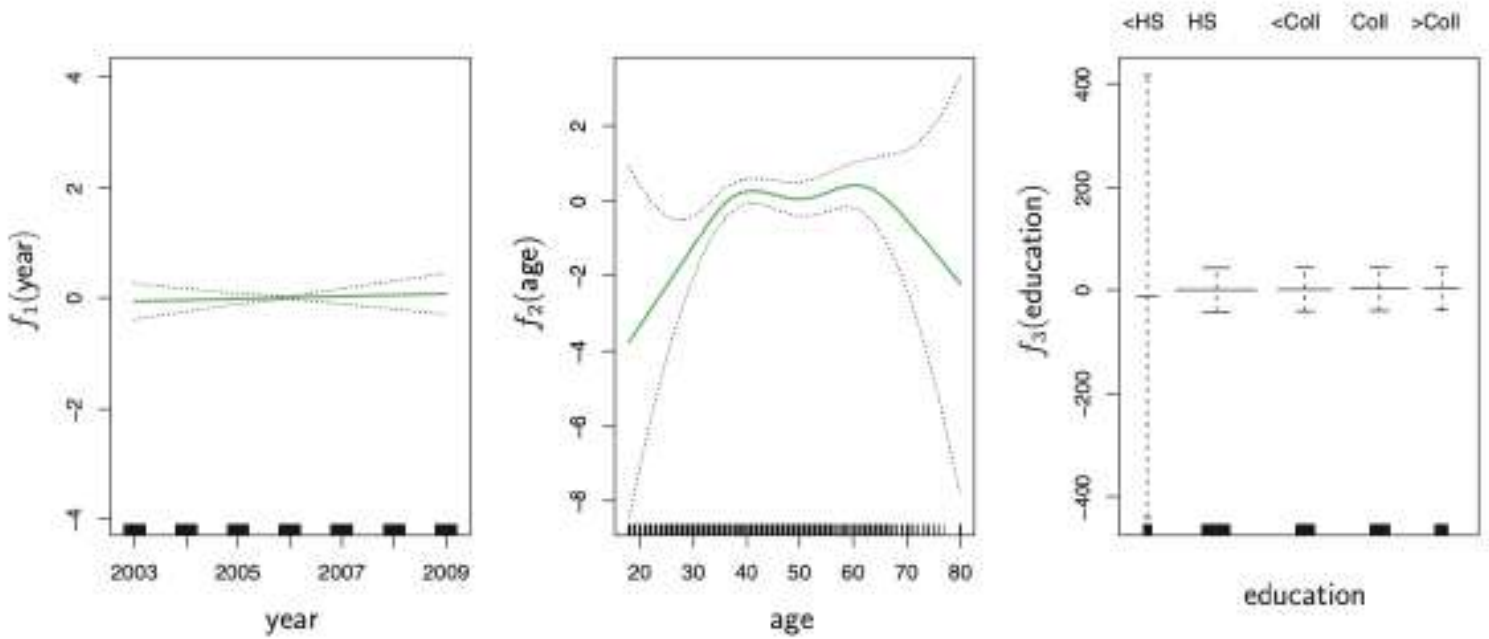


FIGURE 7.13. *For the* `Wage` *data, the logistic regression GAM given in (7.19) is fit to the binary response* `I(wage>250)`*. Each plot displays the fitted function and pointwise standard errors. The first function is linear in* `year`*, the second function a smoothing spline with five degrees of freedom in* `age`*, and the third a step function for* `education`*. There are very wide standard errors for the first level* `<HS` *of* `education`*.*

Bibliographie


James, G., Witten, D., Hastie, T., and Tibshirani, R. (2013).
An Introduction to Statistical Learning: with Applications in R, volume 103 of *Springer Texts in Statistics*.
Springer, New York.