Jérémie Cabessa Laboratoire DAVID, UVSQ

- ▶ 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

types de méthodes:

CLASSIFICATION

- Dans le cadre de l'apprentissage supervisé, on distingue deux
- 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.

- ► K-Nearest Neighbors (KNN)
- Logistic Regression (LR, régression logistique)
- Generalized Additive Models (GAM)
- ► Linear Discriminant Analysis (LDA)
- Quadratic Discriminant Analysis (QDA)

- ► K-Nearest Neighbors (KNN)
- Logistic Regression (LR, régression logistique)
- Generalized Additive Models (GAM)
- ► Linear Discriminant Analysis (LDA)
- Quadratic Discriminant Analysis (QDA)

- ► K-Nearest Neighbors (KNN)
- Logistic Regression (LR, régression logistique)
- Generalized Additive Models (GAM)
- ► Linear Discriminant Analysis (LDA)
- Quadratic Discriminant Analysis (QDA)

- ► K-Nearest Neighbors (KNN)
- ► Logistic Regression (LR, régression logistique)
- Generalized Additive Models (GAM)
- Linear Discriminant Analysis (LDA)
- Quadratic Discriminant Analysis (QDA)

Classification

CLASSIFICATION

- K-Nearest Neighbors (KNN)
- Logistic Regression (LR, régression logistique)
- Generalized Additive Models (GAM)
- ▶ Linear Discriminant Analysis (LDA)
- Quadratic Discriminant Analysis (QDA)

K-NN

•000000

$$S_{\text{train}} = \{(\boldsymbol{x_1}, y_1), \dots, (\boldsymbol{x_N}, y_N)\}.$$

- Pour toute (nouvelle) observation x, on aimerait prédire sa classe y.
- L'algorithme K plus proches voisins procède ainsi



K-NN

•000000

$$S_{\text{train}} = \{(x_1, y_1), \dots, (x_N, y_N)\}.$$

- \triangleright Pour toute (nouvelle) observation x, on aimerait prédire sa classe y.



$$S_{\text{train}} = \{(x_1, y_1), \dots, (x_N, y_N)\}.$$

- Pour toute (nouvelle) observation x, on aimerait prédire sa classe y.
- L'algorithme K plus proches voisins procède ainsi:
 - ightharpoonup On fixe le nombre de voisins $k \in \mathbb{N}$
 - Pour toute observation x, on prend ses k plus proches voisins $(x_{i_1}, y_{i_1}), \ldots, (x_{i_k}, y_{i_k})$:
 - On prédit pour x la classe y qui apparaît le plus fréquemment dans ses k plus proches voisins.

$$S_{\text{train}} = \{(x_1, y_1), \dots, (x_N, y_N)\}.$$

- Pour toute (nouvelle) observation x, on aimerait prédire sa classe y.
- L'algorithme K plus proches voisins procède ainsi:
 - ▶ On fixe le nombre de voisins $k \in \mathbb{N}$.
 - Pour toute observation x, on prend ses k plus proches voisins $(x_{i_1}, y_{i_1}), \ldots, (x_{i_k}, y_{i_k})$:
 - ightharpoonup On prédit pour x la classe y qui apparaît le plus fréquemment dans ses k plus proches voisins.

K-NN

$$S_{\text{train}} = \{(x_1, y_1), \dots, (x_N, y_N)\}.$$

- \triangleright Pour toute (nouvelle) observation x, on aimerait prédire sa classe y.
- L'algorithme K plus proches voisins procède ainsi:
 - \triangleright On fixe le nombre de voisins $k \in \mathbb{N}$.
 - Pour toute observation x, on prend ses k plus proches voisins $(x_{i_1}, y_{i_1}), \ldots, (x_{i_k}, y_{i_k})$:

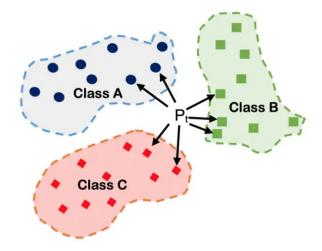
K-NN

$$S_{\text{train}} = \{(x_1, y_1), \dots, (x_N, y_N)\}.$$

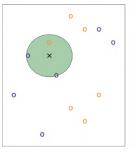
- Pour toute (nouvelle) observation x, on aimerait prédire sa classe y.
- L'algorithme K plus proches voisins procède ainsi:
 - ▶ On fixe le nombre de voisins $k \in \mathbb{N}$.
 - Pour toute observation x, on prend ses k plus proches voisins $(x_{i_1}, y_{i_1}), \ldots, (x_{i_k}, y_{i_k})$:
 - On prédit pour x la classe y qui apparaît le plus fréquemment dans ses k plus proches voisins.

K-NN

000000



K-NN 0•00000



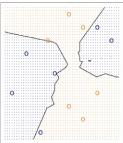


FIGURE 2.14. The KNN approach, using K=3, is illustrated in a simple situation with six blue observations and six orange observations. Left: a test observation at which a predicted class label is desired is shown as a black cross. The three closest points to the test observation are identified, and it is predicted that the test observation belongs to the most commonly-occurring class, in this case blue. Right: The KNN decision boundary for this example is shown in black. The blue grid indicates the region in which a test observation will be assigned to the blue class, and the orange grid indicates the region in which it will be assigned to the orange class.

- ightharpoonup Plus K est petit, plus la frontière de décision est non-linaire:
 - → petit biais mais grande variance (bias-variance trade-off)
- ightharpoonup Plus K est grand, plus la frontière de décision est linaire:
 - ightarrow petite variance mais grand biais (bias-variance trade-off)

K-NN

0000000

- ▶ Plus *K* est petit, plus la frontière de décision est non-linaire:
 - → petit biais mais grande variance (bias-variance trade-off)
- Plus K est grand, plus la frontière de décision est linaire:
 - → petite variance mais grand biais (bias-variance trade-off)

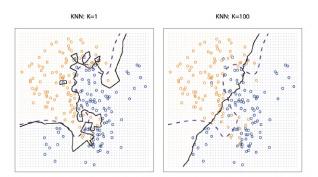


FIGURE 2.16. A comparison of the KNN decision boundaries (solid black curves) obtained using K=1 and K=100 on the data from Figure 2.13. With K=1, the decision boundary is overly flexible, while with K=100 it is not sufficiently flexible. The Bayes decision boundary is shown as a purple dashed line.

K-NN

0000000

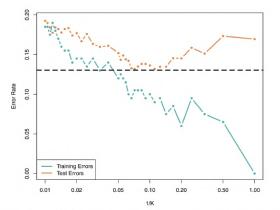


FIGURE 2.17. The KNN training error rate (blue, 200 observations) and test error rate (orange, 5,000 observations) on the data from Figure 2.13, as the level of flexibility (assessed using 1/K) increases, or equivalently as the number of neighbors K decreases. The black dashed line indicates the Bayes error rate. The jumpiness of the curves is due to the small size of the training data set.

- Soient $X = (X_1, ..., X_p)$ des variables explicatives et Y une variable réponse qualitative (C classes différentes).
- ightharpoonup On codes les réalisations de Y par $1, 2, \ldots, C$.
- Pour toute classe $c=1,\ldots,C$, on aimerait modéliser les probabilités que Y=c étant données une réalisation des variables $\boldsymbol{X}=X_1,\ldots,X_p$:

$$\Pr(Y = c \mid \boldsymbol{X})$$

Pour toute observation $x = (x_1, ..., x_p)$, on prédit la classe \hat{c} associée à la plus grande probabilité:

$$\hat{c} = \arg\max_{c \in \{1, \dots, C\}} \Pr(Y = c \mid \boldsymbol{X} = \boldsymbol{x})$$

- Soient $X = (X_1, ..., X_p)$ des variables explicatives et Y une variable réponse qualitative (C classes différentes).
- ightharpoonup On codes les réalisations de Y par $1, 2, \ldots, C$.
- Pour toute classe $c=1,\ldots,C$, on aimerait modéliser les probabilités que Y=c étant données une réalisation des variables $\boldsymbol{X}=X_1,\ldots,X_p$:

$$\Pr(Y = c \mid \boldsymbol{X})$$

Pour toute observation $x = (x_1, ..., x_p)$, on prédit la classe \hat{c} associée à la plus grande probabilité:

$$\hat{c} = \arg\max_{c \in \{1, \dots, C\}} \Pr(Y = c \mid \boldsymbol{X} = \boldsymbol{x})$$

K-NN

- Soient $X = (X_1, ..., X_p)$ des variables explicatives et Y une variable réponse qualitative (C classes différentes).
- ightharpoonup On codes les réalisations de Y par $1, 2, \ldots, C$.
- Pour toute classe $c=1,\ldots,C$, on aimerait modéliser les probabilités que Y=c étant données une réalisation des variables $\boldsymbol{X}=X_1,\ldots,X_p$:

$$\Pr(Y = c \mid \boldsymbol{X})$$

Pour toute observation $x = (x_1, ..., x_p)$, on prédit la classe \hat{c} associée à la plus grande probabilité:

$$\hat{c} = \arg\max_{c \in \{1, \dots, C\}} \Pr(Y = c \mid \boldsymbol{X} = \boldsymbol{x})$$

K-NN

0000000

- Soient $X = (X_1, \dots, X_p)$ des variables explicatives et Y une variable réponse qualitative (C classes différentes).
- \triangleright On codes les réalisations de Y par $1, 2, \ldots, C$.
- Pour toute classe $c=1,\ldots,C$, on aimerait modéliser les probabilités que Y=c étant données une réalisation des variables $X = X_1, \ldots, X_n$:

$$\Pr(Y = c \mid \boldsymbol{X})$$

Pour toute observation $x = (x_1, \dots, x_p)$, on prédit la classe \hat{c} associée à la plus grande probabilité:

$$\hat{c} = \arg\max_{c \in \{1, \dots, C\}} \Pr(Y = c \mid \boldsymbol{X} = \boldsymbol{x})$$

- Soit un training set $S_{\text{train}} = \{(\boldsymbol{x_1}, y_1), \dots, (\boldsymbol{x_N}, y_N)\}.$

$$\hat{P}r(Y = c \mid \boldsymbol{X} = \boldsymbol{x}) = \frac{1}{K} \sum_{\boldsymbol{x}_i \in \mathcal{N}_{\boldsymbol{x}}^K} I(y_i = c)$$

$$\hat{c} = \arg\max_{c \in \{1, \dots, C\}} \hat{\Pr}(Y = c \mid \boldsymbol{X} = \boldsymbol{x})$$

- ▶ Soit un training set $S_{\text{train}} = \{(x_1, y_1), \dots, (x_N, y_N)\}.$
- L'algorithme K-Nearest Neighbors procède ainsi: pour toute (nouvelle) observation $\boldsymbol{x}=(x_1,\ldots,x_p)$, on estime la probabilité que Y=c sachant que $\boldsymbol{X}=\boldsymbol{x}$ par:

$$\hat{\Pr}(Y = c \mid \boldsymbol{X} = \boldsymbol{x}) = \frac{1}{K} \sum_{\boldsymbol{x}_i \in \mathcal{N}_{\boldsymbol{x}}^K} I(y_i = c)$$

où \mathcal{N}_{x}^{K} désigne les K plus proches voisins de x et I(.) la fonction indicatrice (vaut 1 si $y_{i}=c$ et 0 sinon).

Pour x, on prédit la classe \hat{c} donnée par

$$\hat{c} = \arg\max_{c \in \{1,\dots,C\}} \hat{\Pr}(Y = c \mid \boldsymbol{X} = \boldsymbol{x})$$

- Soit un training set $S_{\text{train}} = \{(\boldsymbol{x_1}, y_1), \dots, (\boldsymbol{x_N}, y_N)\}.$
- L'algorithme K-Nearest Neighbors procède ainsi: pour toute (nouvelle) observation $\boldsymbol{x}=(x_1,\ldots,x_p)$, on estime la probabilité que Y=c sachant que $\boldsymbol{X}=\boldsymbol{x}$ par:

$$\hat{P}r(Y = c \mid \boldsymbol{X} = \boldsymbol{x}) = \frac{1}{K} \sum_{\boldsymbol{x}_i \in \mathcal{N}_{\boldsymbol{x}}^K} I(y_i = c)$$

où \mathcal{N}_{x}^{K} désigne les K plus proches voisins de x et I(.) la fonction indicatrice (vaut 1 si $y_i = c$ et 0 sinon).

Pour x, on prédit la classe \hat{c} donnée par:

$$\hat{c} = \arg \max_{c \in \{1, \dots, C\}} \hat{\Pr}(Y = c \mid \boldsymbol{X} = \boldsymbol{x})$$

```
Algorithm 1: knn(dataset, k, x<sub>new</sub>)
```

```
 \begin{split} & \textbf{dist\_and\_targets} = [] \\ & \textbf{for } x_i, y_i \text{ } \textit{in } \textbf{dataset } \textbf{do} \\ & & d_i = \textbf{distance}(x_i, x_{new}) \\ & & \textbf{dist\_and\_targets}. \textbf{append}([d_i, y_i]) \\ & \textbf{end} \\ & \textbf{dist\_and\_targets} = \textbf{sort\_by\_first\_component}(\textbf{dist\_and\_targets}) \\ & y = \texttt{most\_frequent\_target}(\textbf{dist\_and\_targets}[0:k]) \\ & \textbf{return } y \end{aligned}
```

```
 \begin{split} & \textbf{Algorithm 1: knn}(\texttt{dataset}, \ k. \ x_{\texttt{new}}) \\ & \textbf{dist\_and\_targets} = [] \\ & \textbf{for } x_i, y_i \text{ in } \texttt{dataset } \textbf{do} \\ & & d_i = \texttt{distance}(x_i, x_{\texttt{new}}) \\ & & \texttt{dist\_and\_targets.append}([d_i, y_i]) \\ & \textbf{end} \\ & \textbf{dist\_and\_targets} = \texttt{sort\_by\_first\_component}(\texttt{dist\_and\_targets}) \\ & y = \texttt{most\_frequent\_target}(\texttt{dist\_and\_targets}[0:k]) \end{aligned}
```

```
\begin{split} & \text{Algorithm 1: knn(dataset, k, x_{new})} \\ & \text{dist\_and\_targets} = [] \\ & \text{for } x_i, y_i \text{ } \textit{in} \text{ dataset do} \\ & & d_i = \text{distance}(x_i, x_{new}) \\ & & \text{dist\_and\_targets.append}([d_i, y_i]) \\ & \text{end} \\ & \text{dist\_and\_targets} = \text{sort\_by\_first\_component}(\text{dist\_and\_targets}) \\ & y = \text{most\_frequent\_target}(\text{dist\_and\_targets}[0:k]) \end{split}
```

```
\begin{split} & \textbf{Algorithm 1: knn(dataset, k, x_{new})} \\ & \textbf{dist\_and\_targets} = [] \\ & \textbf{for } x_i, y_i \text{ } \textit{in } \textbf{dataset } \textbf{do} \\ & & | d_i = \texttt{distance}(x_i, x_{new}) \\ & & | \textbf{dist\_and\_targets.append}([d_i, y_i]) \\ & \textbf{end} \\ & \textbf{dist\_and\_targets} = \texttt{sort\_by\_first\_component}(\texttt{dist\_and\_targets}) \\ & y = \texttt{most\_frequent\_target}(\texttt{dist\_and\_targets}[0:k]) \\ & \textbf{return } y \end{split}
```

K-NN

000000

K-NN

000000

K-NN

- ▶ Soient $X = (X_1, ..., X_p)$ des variables explicatives et Y une variable réponse qualitative *binaire*.
- ightharpoonup 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.,:

$$\Pr(Y = 1 \mid X) = \Pr(Y = 1 \mid X_1, \dots, X_p)$$

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

- ▶ Soient $X = (X_1, ..., X_p)$ 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.,:

$$\Pr(Y = 1 \mid X) = \Pr(Y = 1 \mid X_1, \dots, X_p)$$

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

- ▶ Soient $X = (X_1, ..., X_p)$ des variables explicatives et Y une variable réponse qualitative *binaire*.
- ightharpoonup 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.,:

$$\Pr(Y = 1 \mid X) = \Pr(Y = 1 \mid X_1, \dots, X_p)$$

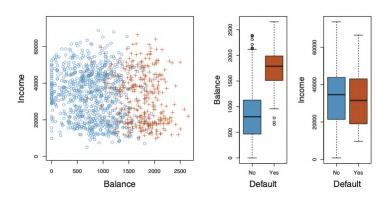
Si on sait modéliser $\Pr(Y=1\mid \boldsymbol{X})$, alors on sait également modéliser $\Pr(Y=0\mid \boldsymbol{X})=1-\Pr(Y=1\mid \boldsymbol{X}).$

- ▶ Soient $X = (X_1, ..., X_p)$ des variables explicatives et Y une variable réponse qualitative *binaire*.
- ightharpoonup 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.,:

$$\Pr(Y = 1 \mid X) = \Pr(Y = 1 \mid X_1, \dots, X_p)$$

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

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



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

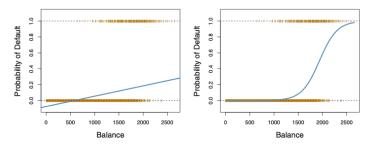


FIGURE 4.2. Classification using the Default data. Left: Estimated probability of default using linear regression. Some estimated probabilities are negative! The orange ticks indicate the 0/1 values coded for default (No or Yes). Right: Predicted probabilities of default using logistic regression. All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

- On aimerait que $\Pr(Y = 1 \mid \boldsymbol{X}) \in [0, 1]$, puisque c'est une probabilité.

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

$$eta_0 + eta_1 X_1 + \dots + eta_p X_p o + \infty$$
 implique $\Pr(Y = 1 \mid X) o 1$
 $eta_0 + eta_1 X_1 + \dots + eta_p X_p o - \infty$ implique $\Pr(Y = 1 \mid X) o 0$

- ▶ On aimerait que $\Pr(Y=1\mid \pmb{X})\in [0,1]$, 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:

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

Remarques

$$eta_0 + eta_1 X_1 + \dots + eta_p X_p \to +\infty$$
 implique $\Pr(Y = 1 \mid \boldsymbol{X}) \to 1$
 $eta_0 + eta_1 X_1 + \dots + eta_p X_p \to -\infty$ implique $\Pr(Y = 1 \mid \boldsymbol{X}) \to 0$

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

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

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

Remarques:

$$\begin{split} \beta_0 + \beta_1 X_1 + \dots + \beta_p X_p &\to +\infty \text{ implique } \Pr(Y = 1 \mid \boldsymbol{X}) \to 1 \\ \beta_0 + \beta_1 X_1 + \dots + \beta_p X_p &\to -\infty \text{ implique } \Pr(Y = 1 \mid \boldsymbol{X}) \to 0 \end{split}$$

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

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

Remarques:

$$\begin{split} \beta_0 + \beta_1 X_1 + \dots + \beta_p X_p &\to +\infty \text{ implique } \Pr(Y = 1 \mid \boldsymbol{X}) \to 1 \\ \beta_0 + \beta_1 X_1 + \dots + \beta_p X_p &\to -\infty \text{ implique } \Pr(Y = 1 \mid \boldsymbol{X}) \to 0 \end{split}$$

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

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

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

implique que la fonction logit est de la forme linéaire suivante

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

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

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

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

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

- lacktriangle Étant donné un training set $S_{ ext{train}} = \{(m{x_1}, y_1), \dots, (m{x_N}, y_N)\}$, on aimerait estimer les paramètres $\beta = (\beta_0, \beta_1, \dots, \beta_n)$ de la fonction logit de manière pertinente...

$$y_i = 1 \implies \hat{\Pr}(Y = 1 \mid X = x_i) > 0.5$$

 $y_i = 0 \implies \hat{\Pr}(Y = 0 \mid X = x_i) = 1 - \hat{\Pr}(Y = 1 \mid X = x_i) \le 0.5$

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

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

$$y_i = 1 \implies \hat{\Pr}(Y = 1 \mid \mathbf{X} = \mathbf{x_i}) > 0.5$$

 $y_i = 0 \implies \hat{\Pr}(Y = 0 \mid \mathbf{X} = \mathbf{x_i}) = 1 - \hat{\Pr}(Y = 1 \mid \mathbf{X} = \mathbf{x_i}) \le 0.5.$

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

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

$$\begin{split} \hat{\beta} &= \arg\max_{\beta} L(\beta) \quad \text{où} \\ L(\hat{\beta}) &= L(\beta_0, \beta_1, \dots, \beta_p) := \\ &\prod_{\{i: y_i = 1\}} \Pr(Y = 1 \mid \boldsymbol{X} = \boldsymbol{x_i}) \prod_{\{j: y_j = 0\}} \left(1 - \Pr(Y = 1 \mid \boldsymbol{X} = \boldsymbol{x_j})\right) = \\ &\prod_{\{i: y_i = 1\}} \frac{e^{\beta_0 + \sum_{k=1}^p \beta_k x_{ik}}}{1 + e^{\beta_0 + \sum_{k=1}^p \beta_k x_{ik}}} \prod_{\{j: y_j = 0\}} \left(1 - \frac{e^{\beta_0 + \sum_{k=1}^p \beta_k x_{jk}}}{1 + e^{\beta_0 + \sum_{k=1}^p \beta_k x_{jk}}}\right) = \\ &\prod_{\{i: y_i = 1\}} \frac{e^{\beta^T x_i}}{1 + e^{\beta^T x_i}} \prod_{\{j: y_j = 0\}} \left(\frac{1}{1 + e^{\beta^T x_j}}\right) \quad \text{où } \boldsymbol{x_i} = (1, \boldsymbol{x_i}) \\ &\text{(abus de notation)} \end{split}$$

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

$$\begin{split} \hat{\beta} &= \arg\max_{\beta} L(\beta) \quad \text{où} \\ L(\hat{\beta}) &= L(\beta_0, \beta_1, \dots, \beta_p) := \\ &\prod_{\{i: y_i = 1\}} \Pr(Y = 1 \mid \boldsymbol{X} = \boldsymbol{x_i}) \prod_{\{j: y_j = 0\}} \left(1 - \Pr(Y = 1 \mid \boldsymbol{X} = \boldsymbol{x_j})\right) = \\ &\prod_{\{i: y_i = 1\}} \frac{e^{\beta_0 + \sum_{k=1}^p \beta_k x_{ik}}}{1 + e^{\beta_0 + \sum_{k=1}^p \beta_k x_{ik}}} \prod_{\{j: y_j = 0\}} \left(1 - \frac{e^{\beta_0 + \sum_{k=1}^p \beta_k x_{jk}}}{1 + e^{\beta_0 + \sum_{k=1}^p \beta_k x_{jk}}}\right) = \\ &\prod_{\{i: y_i = 1\}} \frac{e^{\beta^T x_i}}{1 + e^{\beta^T x_i}} \prod_{\{j: y_j = 0\}} \left(\frac{1}{1 + e^{\beta^T x_j}}\right) \quad \text{où } \boldsymbol{x_i} = (1, \boldsymbol{x_i}) \\ &\text{(abus de notation)} \end{split}$$

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

$$\begin{split} \hat{\boldsymbol{\beta}} &= \arg\max_{\boldsymbol{\beta}} L(\boldsymbol{\beta}) \ \ \, \text{où} \\ L(\hat{\boldsymbol{\beta}}) &= L(\beta_0, \beta_1, \dots, \beta_p) := \\ &\prod_{\{i:y_i=1\}} \Pr(Y=1 \mid \boldsymbol{X} = \boldsymbol{x_i}) \prod_{\{j:y_j=0\}} \left(1 - \Pr(Y=1 \mid \boldsymbol{X} = \boldsymbol{x_j})\right) = \\ &\prod_{\{i:y_i=1\}} \frac{e^{\beta_0 + \sum_{k=1}^p \beta_k x_{ik}}}{1 + e^{\beta_0 + \sum_{k=1}^p \beta_k x_{ik}}} \prod_{\{j:y_j=0\}} \left(1 - \frac{e^{\beta_0 + \sum_{k=1}^p \beta_k x_{jk}}}{1 + e^{\beta_0 + \sum_{k=1}^p \beta_k x_{jk}}}\right) = \\ &\prod_{\{i:y_i=1\}} \frac{e^{\boldsymbol{\beta}^T \boldsymbol{x_i}}}{1 + e^{\boldsymbol{\beta}^T \boldsymbol{x_i}}} \prod_{\{j:y_j=0\}} \left(\frac{1}{1 + e^{\boldsymbol{\beta}^T \boldsymbol{x_j}}}\right) \quad \text{où } \boldsymbol{x_i} = (1, \boldsymbol{x_i}) \\ &\text{(abus de notation)} \end{split}$$

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

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

$$\begin{split} \hat{\boldsymbol{\beta}} &= \arg\max_{\boldsymbol{\beta}} L(\boldsymbol{\beta}) \ \ \, \text{où} \\ L(\hat{\boldsymbol{\beta}}) &= L(\beta_0, \beta_1, \dots, \beta_p) := \\ &\prod_{\{i:y_i=1\}} \Pr(Y=1 \mid \boldsymbol{X} = \boldsymbol{x_i}) \prod_{\{j:y_j=0\}} \left(1 - \Pr(Y=1 \mid \boldsymbol{X} = \boldsymbol{x_j})\right) = \\ &\prod_{\{i:y_i=1\}} \frac{e^{\beta_0 + \sum_{k=1}^p \beta_k x_{ik}}}{1 + e^{\beta_0 + \sum_{k=1}^p \beta_k x_{ik}}} \prod_{\{j:y_j=0\}} \left(1 - \frac{e^{\beta_0 + \sum_{k=1}^p \beta_k x_{jk}}}{1 + e^{\beta_0 + \sum_{k=1}^p \beta_k x_{jk}}}\right) = \\ &\prod_{\{i:y_i=1\}} \frac{e^{\boldsymbol{\beta}^T \boldsymbol{x_i}}}{1 + e^{\boldsymbol{\beta}^T \boldsymbol{x_i}}} \prod_{\{j:y_j=0\}} \left(\frac{1}{1 + e^{\boldsymbol{\beta}^T \boldsymbol{x_j}}}\right) \quad \text{où } \boldsymbol{x_i} = (1, \boldsymbol{x_i}) \\ &\text{(abus de notation)} \end{split}$$

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

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

$$\begin{split} \hat{\boldsymbol{\beta}} &= \arg\max_{\boldsymbol{\beta}} L(\boldsymbol{\beta}) \ \, \text{où} \\ L(\hat{\boldsymbol{\beta}}) &= L(\beta_0, \beta_1, \dots, \beta_p) := \\ &\prod_{\{i: y_i = 1\}} \Pr(Y = 1 \mid \boldsymbol{X} = \boldsymbol{x_i}) \prod_{\{j: y_j = 0\}} \left(1 - \Pr(Y = 1 \mid \boldsymbol{X} = \boldsymbol{x_j})\right) = \\ &\prod_{\{i: y_i = 1\}} \frac{e^{\beta_0 + \sum_{k=1}^p \beta_k x_{ik}}}{1 + e^{\beta_0 + \sum_{k=1}^p \beta_k x_{ik}}} \prod_{\{j: y_j = 0\}} \left(1 - \frac{e^{\beta_0 + \sum_{k=1}^p \beta_k x_{jk}}}{1 + e^{\beta_0 + \sum_{k=1}^p \beta_k x_{jk}}}\right) = \\ &\prod_{\{i: y_i = 1\}} \frac{e^{\boldsymbol{\beta}^T \boldsymbol{x_i}}}{1 + e^{\boldsymbol{\beta}^T \boldsymbol{x_i}}} \prod_{\{j: y_j = 0\}} \left(\frac{1}{1 + e^{\boldsymbol{\beta}^T \boldsymbol{x_j}}}\right) \quad \text{où } \boldsymbol{x_i} = (1, \boldsymbol{x_i}) \\ \text{(abus de notation)} \end{split}$$

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

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

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

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

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

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 .

$$\Pr(ar{Y}=oldsymbol{1}_i\mid X=oldsymbol{x})>\Pr(ar{Y}=oldsymbol{1}_i\mid X=oldsymbol{x})$$
 pour tout $j
eq i$

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 .

- lackbox On code Y par une variable $\bar{Y} = (Y_1, \dots, Y_k)$ telle que $Y_i = 1$ ssi $Y = c_i$ (1-hot encoding).

$$\Pr(\bar{Y} = \mathbf{1}_i \mid X = x) > \Pr(\bar{Y} = \mathbf{1}_j \mid X = x)$$
 pour tout $j \neq i$

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 .

- lacktriangle 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 $\hat{\beta} = (\hat{\beta}_0, \hat{\beta}_1, \dots, \hat{\beta}_p)$ de manière similaire, ce qui permet l'estimation $\Pr(\bar{Y} = \bar{y} \mid X = x)$.

$$\Pr(\bar{Y} = \mathbf{1}_i \mid X = x) > \Pr(\bar{Y} = \mathbf{1}_j \mid X = x)$$
 pour tout $j \neq i$.

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 .

- lacktriangle 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 $\hat{\beta} = (\hat{\beta}_0, \hat{\beta}_1, \dots, \hat{\beta}_p)$ de manière similaire, ce qui permet l'estimation $\Pr(\bar{Y} = \bar{y} \mid X = x)$.
- \blacktriangleright La prédiction \hat{y} associée à 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): $haty = c_i$ si et seulement si

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

- 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:

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

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)

- 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:

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

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)

- 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:

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

 $lackbox{ où } f_1,\ldots,f_p$ 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)

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 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 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 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:



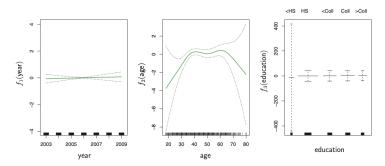


FIGURE 7.13. For the Wage data, the logistic regression GAM given in (7.19) is fit to the binary response I(wage>250). Each plot displays the fitted function and pointwise standard errors. The first function is linear in year, the second function a smoothing spline with five degrees of freedom in age,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

BIBLIOGRAPHIE

K-NN



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.