Régression linéaire et gradient stochastique

Ce TD-TP a pour objectif de plonger de manière un peu plus individualisée dans le cours d'optimisation stochastique. Il n'est pas noté, mais j'encourage très vivement les étudiants à rédiger consciencieusement leurs réponses et leurs idées. La rédaction force à mieux présenter les choses et surtout à mieux les cerner. Ca me permettra aussi plus facilement de corriger d'éventuelles incompréhensions.

1 Introduction

L'objectif de ce TP est d'illustrer la première partie du cours d'optimisation stochastique sur les erreurs en apprentissage et d'implémenter les premières versions du gradient stochastique. Il a aussi pour objectif de vous entraîner à effectuer des calculs avec des variables aléatoires pour les rendre plus accessibles et mieux comprendre les cours à venir.
Nous allons nous placer dans le cadre de travail le plus simple : la régression linéaire. Ce cadre présente plusieurs avantages :

— C'est probablement le plus simple d'un point de vue théorique et il permet d'appréhender de nombreux phénomènes avec des mathématiques relativement élémentaires.

— C'est probablement encore le plus utilisé dans les applications, et il me semble nécessaire de le comprendre profondément.

2 Le cadre

Soit X un vecteur aléatoire de $\mathbb{R}^d$, pour $d \in \mathbb{N}$ suivant une certaine distribution de probabilité inconnue P_X. Pour un certain vecteur $\theta \in \mathbb{R}^d$, on construit une variable aléatoire $Y \in \mathbb{R}$ définie par :

$Y = \langle \theta, X \rangle + B$ où $B \sim \mathcal{N}(0, \sigma^2)$ est une variable aléatoire gaussienne indépendante de X.

L'objectif de ce TP est d'apprendre le vecteur θ inconnu à partir de $n \in \mathbb{N}$ observations $(x_i, y_i)_{1 \leq i \leq n}$ tirées indépendamment suivant la loi P.

Pour ce faire, on peut simplement résoudre le problème de minimisation du risque empirique suivant :

$$\underset{\omega \in \mathbb{R}^d}{inf} E_n(\omega) = \frac{1}{2n} \sum_{i=1}^{n} (\langle \omega, x_i \rangle - y_i)^2 \qquad (1)$$

On notera ω_n^* n'importe quel minimiseur (sous réserve d'existence) du problème ci-dessus.

3 Questions préliminaires

1. Déterminer les espaces $\mathcal{X}$ et $\mathcal{Y}$ du cours. Quelle est la fonction perte l utilisée ici ? Quelle est la famille $\mathcal{H}$ de prédicteurs utilisés ?

   On a : $h : \mathcal{X} \to \mathcal{Y}$.

   Fonction perte : $$\begin{aligned} l : \mathcal{X} \times \mathcal{Y} &\to \mathbb{R} \\ (x, y) &\mapsto \frac{1}{2}(\langle \omega, x \rangle - y)^2 \end{aligned}$$

   La famille des prédicteurs est $\mathcal{H} = \{x \mapsto \langle \omega, x \rangle, \omega \in \mathbb{R}^d\}$.

2. Déterminer la loi conditionnelle $P(Y|X)$.

   Loi conditionnelle $P(Y|X)$:

   $$\begin{aligned} P(Y = y|X = x) &= P(\langle \theta, X \rangle + B = y|X = x) \\ &= P(\langle \theta, x \rangle + B = y) \\ &= P(B = y - \langle \theta, x \rangle) \end{aligned}$$

   $\Rightarrow Y|X = x \sim \mathcal{N}(\langle \theta, x \rangle, \sigma^2)$

3. Quelle est la définition du risque moyen ici ?

   Risque moyen :

   $$\begin{aligned} E(\omega) &= \mathbb{E}_{(X,Y)}\left[l(X, Y)\right] \\ &= \mathbb{E}_{(X,Y)}\left[\frac{1}{2}(\langle \omega, X \rangle - Y)^2\right] \\ &= \frac{1}{2}\mathbb{E}_{(X,Y)}\left[(\langle \omega, X \rangle - \langle \theta, X \rangle - B)^2\right] \\ &= \frac{1}{2}\mathbb{E}_{(X,Y)}\left[(\langle \omega - \theta, X \rangle - B)^2\right] \\ &= \frac{1}{2}\mathbb{E}_{(X,Y)}\left[\langle \omega - \theta, X \rangle^2\right] - \mathbb{E}_{(X,Y)}\left[\langle \omega - \theta, X \rangle B\right] + \frac{1}{2}\mathbb{E}_{(X,Y)}\left[B^2\right] \\ &= \frac{1}{2}\mathbb{E}_{(X,Y)}\left[\langle \omega - \theta, X \rangle^2\right] - \mathbb{E}_{(X,Y)}\left[\langle \omega - \theta, X \rangle\right]\mathbb{E}_{(X,Y)}\left[B\right] + \frac{1}{2}Var(B) \\ &= \frac{1}{2}\mathbb{E}_{(X,Y)}\left[\langle \omega - \theta, X \rangle^2\right] + \frac{\sigma^2}{2} \end{aligned}$$

4. Quel est le prédicteur optimal ω^* ? Est-il unique ? Que vaut $E(\omega^*)$?

   Prédicteur optimal : $\omega^* = \theta$.
   Il n'est pas unique si $X = 0$ presque partout.

5. Si $X \sim \mathcal{N}(0, I_d)$ que vaut $E(\omega)$?

   Si $X \sim \mathcal{N}(0, I_d)$, alors :

$$
\begin{aligned}
E(\omega) &= \frac{1}{2}\mathbb{E}\left[\langle \omega - \theta, X\rangle^2\right] + \frac{\sigma^2}{2} \\
&= \frac{1}{2}\mathbb{E}\left[\langle \omega - \theta, X\rangle\langle \omega - \theta, X\rangle\right] + \frac{\sigma^2}{2} \\
&= \frac{1}{2}\mathbb{E}\left[(\omega - \theta)^T X X^T (\omega - \theta)\right] + \frac{\sigma^2}{2} \\
&= \frac{1}{2}(\omega - \theta)^T \mathbb{E}\left[X X^T\right](\omega - \theta) + \frac{\sigma^2}{2} \\
&= \frac{1}{2}(\omega - \theta)^T Var(X)(\omega - \theta) + \frac{\sigma^2}{2} \\
&= \frac{1}{2}(\omega - \theta)^T I_d(\omega - \theta) + \frac{\sigma^2}{2} \\
&= \frac{1}{2}(\omega - \theta)^T (\omega - \theta) + \frac{\sigma^2}{2} \\
&= \frac{1}{2}\|\omega - \theta\|^2 + \frac{\sigma^2}{2} \text{ (Norme de Mahalanobis)}
\end{aligned}
$$

6. Déterminer l'erreur d'approximation $\mathcal{E}_{app}$ pour ce problème.

   On a : $\mathcal{E}_{app} = E(h^*) - E(h^*_{\mathcal{H}})$.

$$
\text{avec : } h^* = \underset{h \in \mathbb{R}^d}{\operatorname{argmin}}\ E(h)
$$
$$
h^*_{\mathcal{H}} = \underset{h \in \mathcal{H}}{\operatorname{argmin}}\ E_n(h)
$$

$$
\begin{aligned}
E(h) &= \mathbb{E}\left[l(h(X), Y)\right] \\
&= \frac{1}{2}\mathbb{E}\left[(h(X) - Y)^2\right] \\
&= \frac{1}{2}\mathbb{E}\left[(h(X) - \langle \theta, X\rangle - B)^2\right] \\
&= \frac{1}{2}\mathbb{E}\left[(h(X) - \langle \theta, X\rangle)^2\right] + \frac{\sigma^2}{2} \geq \frac{\sigma^2}{2}
\end{aligned}
$$

   $h^*(x) = \langle \theta, x\rangle \in \mathcal{H}$, donc $E(h^*) - E(h^*_{\mathcal{H}}) = 0$: Pas d'erreur d'approximation.

7. Est-ce que la fonction E_n est convexe ou non convexe ?

   On a : $E_n(\omega) = \frac{1}{2n}\sum_{i=1}^n (\langle \omega, x_i\rangle - y_i)^2$.
   avec : $\omega \mapsto \langle \omega, x_i\rangle - y_i$ et $t \mapsto t^2$ convexes.

   Donc E_n est convexe par somme et composition de fonctions convexes.

8. Calculer $\nabla E_n(\omega)$.

   On a : $E_n(\omega) = \frac{1}{2n}\sum_{i=1}^{n}(\langle \omega, x_i\rangle - y_i)^2$.

   On pose : $X = \Big(x_1, \ldots, x_n\Big) \in \mathbb{R}^{d\times n}$

   et $\quad Y = \Big(y_1, \ldots, y_n\Big) \in \mathbb{R}^{n}$

   On a donc : $E_n(\omega) = \frac{1}{2n}\|X^T\omega - Y\|^2$.

   Donc :
   $$\begin{aligned}\nabla E_n(\omega) &= \frac{1}{n}(X^T)^T(X^T\omega - Y)\\ &= \frac{1}{n}X(X^T\omega - Y)\end{aligned}$$

9. Est-ce que le problème (1) possède une solution ? Une solution unique ?

   La fonction E_n est convexe, différentiable et coercive (car $E_n(\omega) \xrightarrow[||\omega||\to\infty]{} \infty$).
   On a la condition d'optimalité : $\nabla E_n(\omega) = 0 \Leftrightarrow \frac{1}{n}X(X^T\omega - Y) = 0 \Leftrightarrow XX^T\omega = XY$.

   On montre que ce problème admet une solution : on montre $XY \in Im(XX^T)$.

   - On a : $XY \in Im(X)$ (trivial).

   - Avec une SVD, on a : $X = U\Sigma V^T$ avec U et V unitaires
     $U = \Big(u_1, \ldots, u_r\Big)$ avec $r = rg(X)$

     Donc : $Im(X) = \text{Vect}(u_1, \ldots, u_r)$

   - On a aussi : $XX^T = U\Sigma V^T V\Sigma^T U^T = U\Sigma\Sigma^T U^T$

     Donc : $Im(XX^T) = \text{Vect}(u_1, \ldots, u_r) = Im(X)$

   On obtient donc : $XY \in Im(XX^T)$, donc le problème admet une solution.

4 Erreur d'estimation

Dans cette partie, on se propose de borner l'erreur d'estimation $\mathcal{E}$

$$\mathcal{E}_{est} = E(\omega_n^*) - E(\omega^*),$$

pour se faire une idée de la vitesse de convergence du risque empirique.

Soient $(Z_i)_{1\leq i\leq n}$ un ensemble de variables aléatoires i.i.d. de variance σ^2.

1. Que vaut $Var(\frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n} Z_i)$?

   Les variables aléatoires (Z_i) sont indépendantes donc :

$$
\begin{aligned}
Var(\frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n} Z_i) &= \frac{1}{n^2} Var(\sum_{i=1}^{n} Z_i) \\
&= \frac{1}{n^2}\sum_{i=1}^{n} Var(Z_i) \text{ (car les } Z_i \text{ sont indépendantes)} \\
&= \frac{1}{n^2} n Var(Z_1) \\
&= \frac{1}{n} Var(Z_1) \\
&= \frac{\sigma^2}{n}
\end{aligned}
$$

2. Que peut-on en déduire sur la différence $E_n(\omega) - E(\omega)$?

   On cherche la variance de l'estimateur : $E_n(\omega) - E(\omega)$.

$$
\begin{aligned}
\mathbb{E}\left[(E_n(\omega) - E(\omega))^2\right] &= \mathbb{E}\left[\left[\frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n}\left(\frac{1}{2}(\langle \omega, x_i\rangle - y_i)^2 - E(\omega)\right)^2\right]^2\right] \\
&= 1
\end{aligned}
$$

Malheureusement, ce résultat est valable pour un vecteur $\omega \in \mathbb{R}^d$ quelconque, mais ne permet pas de contrôler $E(\omega_n^*) - E(\omega^*)$ directement. On va donc affiner ce résultat. On suppose que les paramètres optimaux ω^* et ω_n^* vivent dans une boule de rayon $R > 0$. On utilise la décomposition suivante :

$$
\mathcal{E}_{est} = [E(\omega_n^*) - E_n(\omega_n^*)] + [E_n(\omega_n^*) - E_n(\omega^*)] + [E_n(\omega^*) - E(\omega^*)].
$$

1. Que pouvez-vous dire de $E_n(\omega_n^*) - E_n(\omega^*)$?

   Erreur d'estimation : $E(\omega_n^*) - E(\omega^*)$.

$$
\begin{aligned}
\text{avec :} \quad & \omega_n^* = \underset{\omega \in \mathbb{R}^d}{\text{argmin}}\ E_n(\omega) \\
\text{et} \quad & \omega^* = \underset{\omega \in \mathbb{R}^d}{\text{argmin}}\ E(\omega)
\end{aligned}
$$

   On a : $E_n(\omega_n^*) - E_n(\omega^*) \leq 0$ car $\omega_n^* \overset{def}{=} \underset{\omega \in \mathbb{R}^d}{\text{argmin}}\ E_n(\omega)$.

2. En déduire que : $\quad \mathcal{E}_{est} \leq 2 \underset{||\omega||_2 \leq R}{sup} |E(\omega) - E_n(\omega)|$.

On a :

$$
\begin{aligned}
\mathcal{E}_{est} &= [E(\omega_n^*) - E_n(\omega_n^*)] + [E_n(\omega_n^*) - E_n(\omega^*)] + [E_n(\omega^*) - E(\omega^*)] \\
&\leq [E(\omega_n^*) - E_n(\omega_n^*)] + [E_n(\omega^*) - E(\omega^*)] \\
&\leq |E(\omega_n^*) - E_n(\omega_n^*) + E_n(\omega^*) - E(\omega^*)| \\
&\leq |E(\omega_n^*) - E_n(\omega_n^*)| + |E_n(\omega^*) - E(\omega^*)| \\
&\leq \underset{||\omega||_2 \leq R}{sup} |E(\omega) - E_n(\omega)| + \underset{||\omega||_2 \leq R}{sup} |E(\omega) - E_n(\omega)| \\
&\leq 2 \underset{||\omega||_2 \leq R}{sup} |E(\omega) - E_n(\omega)|
\end{aligned}
$$

3. Etablir l'identité suivante :

$$
\begin{aligned}
E_n(\omega) - E(\omega) = \frac{1}{2}\langle \omega, (\frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n} x_i x_i^T - \mathbb{E}(XX^T))\omega\rangle \\
- \langle \omega^T, (\frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n} y_i x_i^T - \mathbb{E}(YX))\rangle \\
+ \frac{1}{2}(\frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n} y_i^2 - \mathbb{E}(Y^2)).
\end{aligned}
$$

4. Borner la valeur absolue des erreurs ci-dessus en espérance. Vous pourrez par exemple utiliser des inégalités de Bernstein (scalaires, vectorielles et matricielles). Que conclure sur le taux de convergence de $\mathcal{E}_{est}$ vers 0 ?