Méthodes d'apprentissage

IFT603

Régression linéaire

Par
Pierre-Marc Jodoin
/
Hugo Larochelle

Apprentissage supervisé

RAPPEL

Deux sortes d'apprentissage supervisé

- **Classification :** la cible est un indice de classe $t \in \{1, \ldots, K\}$
  - Exemple : reconnaissance de caractères
    - ✓ $\vec{x}$: vecteur des intensités de tous les pixels de l'image
    - ✓ t : identité du caractère
- **Régression :** la cible est un nombre réel $t \in \mathbb{R}$
  - Exemple : prédiction de la valeur d'une action à la bourse
    - ✓ $\vec{x}$: vecteur contenant l'information sur l'activité économique de la journée
    - ✓ t : valeur d'une action à la bourse le lendemain

2

Apprentissage supervisé

RAPPEL

Deux sortes d'apprentissage supervisé

- **Classification :** la cible est un indice de classe $t \in \{1, \ldots, K\}$
  - Exemple : reconnaissance de caractères
    - ✓ $\vec{x}$: vecteur des intensités de tous les pixels de l'image
    - ✓ t : identité du caractère
- **Régression :** la cible est un nombre réel $t \in \mathbb{R}$
  - Exemple : prédiction de la valeur d'une action à la bourse
    - ✓ $\vec{x}$: vecteur contenant l'information sur l'activité économique de la journée
    - ✓ t : valeur d'une action à la bourse le lendemain

3

Régression linéaire

- Le modèle de **régression linéaire** est le suivant :

$$y_{\vec{w}}(\vec{x}) = w_0 + w_1 x_1 + w_2 x_2 + \ldots + w_d x_d$$

où $\vec{x} = (x_1, x_2, \ldots, x_d)^{\mathrm{T}}$

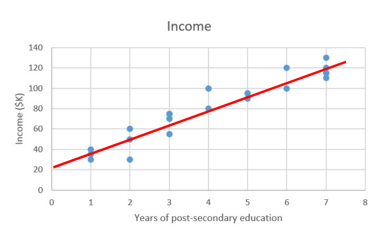
- La prédiction correspond donc à
  - Une **droite** pour *d=1*
  - Un **plan** pour *d=2*
  - Un **hyperplan** pour *d>2*

4

Régression linéaire 1D

Exemple

$$y_{\vec{w}}(x) = w_0 + w_1 x$$



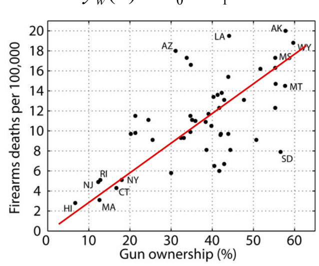
Credit : medium.com/machine-learning-for-humans/supervised-learning-740383a2feab

5

Régression linéaire 1D

Exemple

$$y_{\vec{w}}(x) = w_0 + w_1 x$$



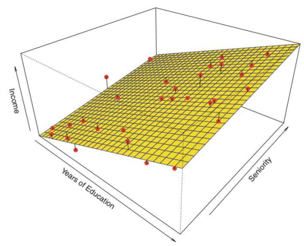
Source: http://election.princeton.edu/2012/12/22/scientific-americans-gun-error/

6

Régression linéaire 2D

Exemple

$$y_{\vec{w}}(\vec{x}) = w_0 + w_1 x_1 + w_2 x_2$$



Credit : sphweb.bumc.bu.edu/otlt/MPH-Modules/BS/R/R5_Correlation-Regression/R5_Correlation-Regression4.html

7

Régression linéaire

$$y_{\vec{w}}(\vec{x}) = w_0 + w_1 x_1 + w_2 x_2 + \ldots + w_d x_d$$

Biais **poids**

8

Régression linéaire

$$y_{\vec{w}}(\vec{x}) = w_0 + w_1 x_1 + w_2 x_2 + \ldots + w_d x_d$$

$$y_{\vec{w}}(\vec{x}) = \vec{w}^{\mathrm{T}} \vec{x}'$$

où $\vec{x}' = (1, x_1, x_2, \ldots, x_d)^{\mathrm{T}}$

9

Régression linéaire

Produit scalaire

Par simplicité, nous écrirons

$$y_{\vec{w}}(\vec{x}) = \vec{w}^{\mathrm{T}}\vec{x}$$

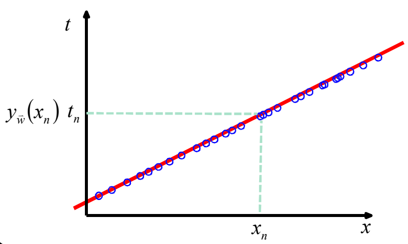
10

Problème à résoudre

Soit un ensemble d'apprentissage :

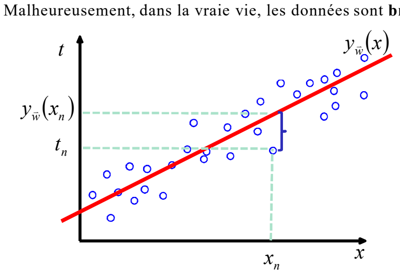
$$D = \{(x_1, t_1), (x_2, t_2), \ldots, (x_N, t_N)\}$$

Idéalement, on souhaiterait trouver un modèle tel que $y_{\vec{w}}(x_i) = t_i$



Problème à résoudre

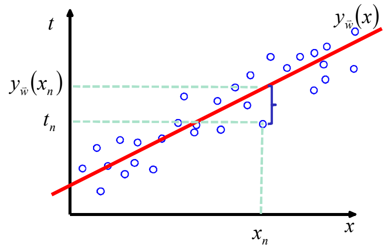
Malheureusement, dans la vraie vie, les données sont **bruitées**



Dans ce cas, le but est de trouver un modèle qui **fait le moins d'erreurs possible**.

Problème à résoudre

$$\vec{w} = \arg\min_{\vec{w}} \sum_{n=1}^{N} \left(y_{\vec{w}}(x_n) - t_n \right)^2$$



Problème à résoudre

$$\vec{w} = \arg\min_{\vec{w}} \sum_{n=1}^{N} \left(y_{\vec{w}}(x_n) - t_n \right)^2$$

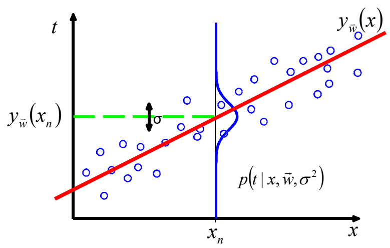
Il est très bien connu en technique d'apprentissage que cette solution est **optimale** lorsque le **bruit est gaussien.**

Régression et maximum de vraisemblance

15

Formulation probabiliste

Loi gaussienne conditionnelle



Formulation probabiliste

Pour entraîner le modèle $y_{\vec{w}}(x)$ nous passerons par une formulation probabiliste :

$$p(t \mid x, \vec{w}, \sigma^2) = N(t \mid y_{\vec{w}}(x), \sigma^2)$$

➢ Revient à supposer que les **cibles** sont des **versions bruitées** du vrai modèle

$$t_n = y_{\vec{w}}(x_n) + \varepsilon$$

Bruit gaussien de moyenne 0 et de variance σ^2

Maximum de vraisemblance

Soit notre **ensemble d'entraînement**

$D = (X, T)$

où

$X = \{\vec{x}_1, \ldots, \vec{x}_N\}$ et $\vec{x}_i \in R^d$

$T = \{t_1, \ldots, t_N\}$

et la fonction de **probabilités dont les données sont issues**

$$p(T \mid X, \vec{w}, \sigma^2)$$

Le **maximum de vraisemblance** s'exprime comme

$$\vec{w} = \arg\max_{\vec{w}} p(\underbrace{T \mid X}_{\text{Connue}}, \underbrace{\vec{w}, \sigma^2}_{\text{Inconnue}})$$

19

Maximum de vraisemblance

$$\vec{w} = \arg\max_{\vec{w}} p\left(T \mid X, \vec{w}, \sigma^2\right)$$
$$= \arg\max_{\vec{w}} p\left(t_1, \ldots, t_N \mid \vec{x}_1, \ldots, \vec{x}_N, \vec{w}, \sigma^2\right)$$

En supposant que **les données sont i.i.d**

$$\vec{w} = \arg\max_{\vec{w}} \prod_{n=1}^{N} p\left(t_n \mid \vec{x}_n, \vec{w}, \sigma^2\right)$$
$$= \arg\max_{\vec{w}} \prod_{n=1}^{N} N\left(t_n \mid y_{\vec{w}}(\vec{x}_n), \sigma^2\right)$$
$$= \arg\max_{\vec{w}} \prod_{n=1}^{N} \frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma} e^{-\frac{(y_{\vec{w}}(\vec{x}_n)-t_n)^2}{2\sigma^2}}$$

Maximum de vraisemblance

$$\vec{w} = \arg\max_{\vec{w}} \ln\left(\prod_{n=1}^{N} \frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma} e^{-\frac{(y_{\vec{w}}(\vec{x}_n)-t_n)^2}{2\sigma^2}}\right)$$
$$= \arg\max_{\vec{w}} \sum_{n=1}^{N} \ln\left(\frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma} e^{-\frac{(y_{\vec{w}}(\vec{x}_n)-t_n)^2}{2\sigma^2}}\right)$$
$$= \arg\max_{\vec{w}} \underbrace{\cancel{N \ln\left(\frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma}\right)}}_{\text{Indépendant de } \vec{w}} + \sum_{n=1}^{N} \ln\left(e^{-\frac{(y_{\vec{w}}(\vec{x}_n)-t_n)^2}{2\sigma^2}}\right)$$
$$= \arg\max_{\vec{w}} \sum_{n=1}^{N} -\frac{\left(y_{\vec{w}}(\vec{x}_n)-t_n\right)^2}{2\sigma^2}$$

Maximum de vraisemblance

$$\vec{w} = \arg\max_{\vec{w}} \sum_{n=1}^{N} -\frac{\left(y_{\vec{w}}(\vec{x}_n) - t_n\right)^2}{\cancel{2\sigma^2}}$$

$$\vec{w} = \arg\min_{\vec{w}} \sum_{n=1}^{N} \left(y_{\vec{w}}(\vec{x}_n) - t_n\right)^2$$

Et puisque $y_{\vec{w}}(\vec{x}) = \vec{w}^{\mathrm{T}} \vec{x}$ (voir quelques pages précédentes)

$$\boxed{\vec{w} = \arg\min_{\vec{w}} \sum_{n=1}^{N} \left(\vec{w}^{\mathrm{T}} \vec{x}_n - t_n\right)^2}$$

Maximum de vraisemblance

$$\boxed{\vec{w} = \arg\min_{\vec{w}} \underbrace{\sum_{n=1}^{N} \left(\vec{w}^{\mathrm{T}} \vec{x}_n - t_n\right)^2}_{E_D(\vec{w})}}$$

Le « meilleur » $\vec{w}$ est celui pour lequel le **gradient est nul**

$$\nabla_{\vec{w}} E_D(\vec{w}) = \sum_{n=1}^{N} \left(\vec{w}^{\mathrm{T}} \vec{x}_n - t_n\right) \vec{x}_n^{\mathrm{T}} = 0$$

$$\vec{w}^{\mathrm{T}} \sum_{n=1}^{N} \vec{x}_n \vec{x}_n^{\mathrm{T}} - \sum_{n=1}^{N} t_n \vec{x}_n^{\mathrm{T}} = 0$$

Maximum de vraisemblance

$$\vec{w}^{\mathrm{T}} \sum_{n=1}^{N} \vec{x}_n \vec{x}_n^{\mathrm{T}} - \sum_{n=1}^{N} t_n \vec{x}_n^{\mathrm{T}} = 0$$

En **isolant** $\vec{w}$, on obtient que

$$\boxed{\vec{w}_{\mathrm{MV}} = \left(X^{\mathrm{T}} X\right)^{-1} X^{\mathrm{T}} T}$$

où

$$X = \begin{pmatrix} 1 & x_{1,1} & \cdots & x_{1,d} \\ 1 & x_{2,1} & \cdots & x_{2,d} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 1 & x_{N,1} & \cdots & x_{N,d} \end{pmatrix} \qquad T = \begin{pmatrix} t_1 \\ t_2 \\ \vdots \\ t_N \end{pmatrix}$$

En résumé

Maximiser la vraisemblance de **données gaussiennes**

$$\vec{w} = \arg\max_{\vec{w}} \prod_{n=1}^{N} \frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma} e^{-\frac{(y_{\vec{w}}(\vec{x}_n)-t_n)^2}{2\sigma^2}}$$

Équivaut à minimiser la **somme de l'erreur au carré**

$$\vec{w} = \arg\min_{\vec{w}} \frac{1}{2}\sum_{n=1}^{N}\left(\vec{w}^{\mathrm{T}}\vec{x}_n - t_n\right)^2$$

Très important à comprendre!

Et **en forçant à zéro le gradient**, on obtient la solution

$$\vec{w}_{\mathrm{MV}} = \left(X^{\mathrm{T}}X\right)^{-1}X^{\mathrm{T}}T$$

26

Maximum *a posteriori* (MAP)

Cherche les meilleurs paramètres $\vec{w}$ en **maximisant la probabilité a posteriori**

Inconnue **Connues**

$$\vec{w} = \arg\max_{\vec{w}} p\left(\vec{w} \mid X, T, \sigma^2\right)$$

$$= \arg\max_{\vec{w}} \frac{p\left(T \mid X, \vec{w}, \sigma^2\right)p(\vec{w})}{P\left(X, T, \sigma^2\right)}$$

=> Par le théorème de Bayes

Constante par rapport à

$$= \arg\max_{\vec{w}} p\left(T \mid X, \vec{w}, \sigma^2\right)p(\vec{w})$$

Maximum *a posteriori* (MAP)

On va émettre l'hypothèque que les données X,T ainsi que les paramètres $\vec{w}$ sont iid de **distributions gaussiennes**

$$
\begin{aligned}
\vec{w} &= \arg\max_{\vec{w}} p\left(T \mid X, \vec{w}, \sigma^2\right) p(\vec{w}) \\
&= \arg\max_{\vec{w}} \prod_{n=1}^{N} N\left(t_n \mid y_{\vec{w}}(\vec{x}_n), \vec{w}, \sigma^2\right) N\left(\vec{w} \mid 0, \alpha^2\right)
\end{aligned}
$$

Moyenne nulle

$$
N\left(t_n \mid y_{\vec{w}}(\vec{x}_n), \sigma^2\right) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma} e^{-\frac{(y_{\vec{w}}(\vec{x}_n)-t_n)^2}{2\sigma^2}}
$$

$$
N(\vec{w} \mid 0, \Sigma) = \frac{1}{(2\pi)^{1/d}|\Sigma|} e^{-\frac{\vec{w}^T\Sigma^{-1}\vec{w}}{2}}
$$

Maximum *a posteriori* (MAP)

Cherche les meilleurs paramètres $\vec{w}$ en **maximisant la probabilité *a posteriori***

$$
\begin{aligned}
\vec{w} &= \arg\max_{\vec{w}} \ln\left[\prod_{n=1}^{N} N\left(t_n \mid y_{\vec{w}}(x_n), \sigma^2\right) N(\vec{w} \mid 0, \Sigma)\right] \\
&= \arg\max_{\vec{w}} \sum_{n=1}^{N} \ln\left[N\left(t_n \mid y_{\vec{w}}(x_n), \sigma^2\right) N(\vec{w} \mid 0, \Sigma)\right] \\
&= \arg\max_{\vec{w}} \sum_{n=1}^{N} \ln\left[\frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma} e^{-\frac{(t_n - y_{\vec{w}}(x_n))^2}{2\sigma^2}}\right] + \ln\left[\frac{1}{(2\pi)^{1/M}|\Sigma|} e^{-\frac{\vec{w}^T\Sigma^{-1}\vec{w}}{2}}\right] \\
&= \arg\max_{\vec{w}} \sum_{n=1}^{N} -\frac{(t_n - y_{\vec{w}}(x_n))^2}{2\sigma^2} - \frac{\vec{w}^T\Sigma^{-1}\vec{w}}{2} + \ln\left[\frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma}\right] + \ln\left[\frac{1}{(2\pi)^{1/M}|\Sigma|}\right]
\end{aligned}
$$

Maximum *a posteriori* (MAP)

Cherche les meilleurs paramètres $\vec{w}$ en **maximisant la probabilité a posteriori**

$$
\vec{w} = \arg\max_{\vec{w}} \sum_{n=1}^{N} -\frac{(t_n - y_{\vec{w}}(x_n))^2}{\cancel{2}\sigma^2} - \frac{\vec{w}^T\Sigma^{-1}\vec{w}}{\cancel{2}} + \cancel{\ln\left[\frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma}\right]} + \cancel{\ln\left[\frac{1}{(2\pi)^{1/M}|\Sigma|}\right]}
$$

Constante par rapport à $\vec{w}$

De plus, comme on ne connaît généralement pas Σ, on suppose qu'elle est isotropique

$$
\Sigma = \begin{pmatrix} \alpha^2 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & \alpha^2 & & \vdots \\ \vdots & & \ddots & \\ 0 & 0 & \dots & \alpha^2 \end{pmatrix} = \alpha^2 I
$$

Maximum *a posteriori* (MAP)

Cherche les meilleurs paramètres $\vec{w}$ en **maximisant la probabilité *a posteriori***

$$\begin{aligned}
\vec{w} &= \arg\max_{\vec{w}} \sum_{n=1}^{N} -\frac{\left(t_n - y_{\vec{w}}(x_n)\right)^2}{\sigma^2} - \frac{\vec{w}^{\mathrm{T}}\Sigma^{-1}\vec{w}}{} \\
&= \arg\max_{\vec{w}} \sum_{n=1}^{N} -\frac{\left(t_n - y_{\vec{w}}(x_n)\right)^2}{\sigma^2} - \frac{\vec{w}^{\mathrm{T}}\vec{w}}{\alpha^2} \\
&= \arg\min_{\vec{w}} \sum_{n=1}^{N} \left(t_n - y_{\vec{w}}(x_n)\right)^2 + \lambda \vec{w}^{\mathrm{T}}\vec{w} \qquad \text{où } \lambda = \frac{\sigma^2}{\alpha^2}
\end{aligned}$$

Maximum *a posteriori* (MAP)

Cherche les meilleurs paramètres $\vec{w}$en **maximisant la probabilité a posteriori**

$$\boxed{\vec{w} = \arg\min_{\vec{w}} \sum_{n=1}^{N} \left(t_n - y_{\vec{w}}(x_n)\right)^2 + \lambda \vec{w}^{\mathrm{T}}\vec{w}}$$

NOTE

Formule également connue sous le nom de
« **régression de *Ridge*** »

Voir sklearn pour une implémentation simple
scikit-learn.org/stable/modules/generated/sklearn.linear_model.Ridge.html

Maximum *a posteriori* (MAP)

$$\boxed{\vec{w} = \arg\min_{\vec{w}} \underbrace{\sum_{n=1}^{N} \left(t_n - y_{\vec{w}}(x_n)\right)^2 + \lambda \vec{w}^{\mathrm{T}}\vec{w}}_{E_D(\vec{w})}}$$

Les meilleurs paramètres sont ceux qui correspondent au gradient nul

$$\nabla_{\vec{w}} E_D(\vec{w}) = 0$$

Maximum *a posteriori* (MAP)

Puisque $y_{\vec{w}}(\vec{x}) = \vec{w}^{\mathrm{T}}\vec{x}$ (voir quelques pages précédentes)

$$E_D(\vec{w}) = \sum_{n=1}^{N}\left(t_n - \vec{w}^{\mathrm{T}}\vec{x}\right)^2 + \lambda\vec{w}^{\mathrm{T}}\vec{w}$$

En forçant le **gradient à zéro** $\nabla E_D(W) = 0$ on peut démontrer que

$$\boxed{W_{\mathrm{MAP}} = \left(X^{\mathrm{T}}X + \lambda I\right)^{-1}X^{\mathrm{T}}T}$$

Cette preuve est sujette à devoir…

Maximum *a posteriori* (MAP)

$$\boxed{W_{\mathrm{MAP}} = \left(X^{\mathrm{T}}X + \lambda I\right)^{-1}X^{\mathrm{T}}T}$$

- Le terme de régularisation $\lambda\frac{W^{\mathrm{T}}W}{2}$ est souvent appelé ***weight decay***
- La régression avec un ***weight decay*** est souvent appelé ***régression de Ridge***
- On retrouve le **maximum de vraisemblance** lorsque $\lambda = 0$
- Permet de réduire le **sur-apprentissage** lorsque $\lambda > 0$

Régression non-linéaire

Régression linéaire

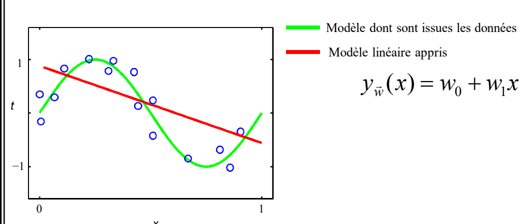
- Le modèle de **régression linéaire** est le suivant :

$$y_{\vec{w}}(\vec{x}) = w_0 + w_1 x_1 + w_2 x_2 + \ldots + w_d x_d$$

où $\vec{x} = (x_1, x_2, \ldots, x_d)$

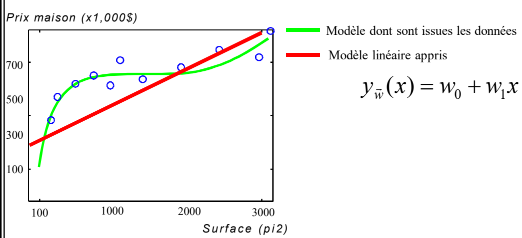
- **Problème**
  - ➢ Un modèle linéaire est souvent **pas assez flexible** pour bien représenter les données

Exemple sous-apprentissage



$$y_{\vec{w}}(x) = w_0 + w_1 x$$

Exemple sous-apprentissage



$$y_{\vec{w}}(x) = w_0 + w_1 x$$

40

Fonctions de base

Solution: on va projeter les donnée dans un **espace plus grand**, là où les données sont **distribuées linéairement.**

=> régression sur des données *M* dimensions au lieu de *d* dimensions (*M*>*d*)

$$\phi : R^d \rightarrow R^M$$

41

Fonctions de base

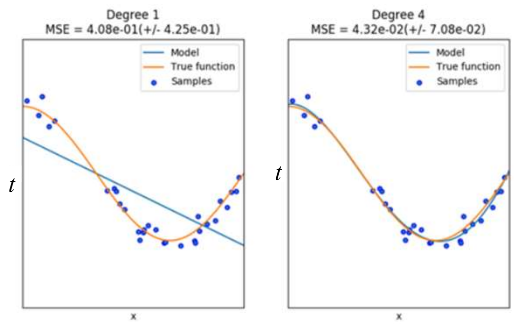
Exemple: au lieu de faire une régression linéaire 1D,
=> faire une régression linéaire en 4D

$$\phi(x) \rightarrow \left(x, x^2, x^3, x^4\right)$$

$$y_{\vec{w}}(x) = w_0 + w_1 x$$

$$y_{\vec{w}}(x) = w_0 + w_1 x + w_2 x^2 + w_3 x^3 + w_4 x^4$$
$$= w_0 + \sum_{i=1}^{4} w_i \phi_i(x)$$

42



$$y_{\vec{w}}(x) = w_0 + w_1 x \qquad y_{\vec{w}}(x) = w_0 + \sum_{i=1}^{4} w_i \phi_i(x)$$

Source : stats.stackexchange.com/questions/305619/artificial-neural-networks-equivalent-to-linear-regression-with-polynomial-featu

43

Fonctions de base

De façon plus générale

$$y_{\vec{w}}(\vec{x}) = w_0 + \sum_{i=1}^{M} w_i \phi_i(\vec{x})$$

où les $\phi_i(\vec{x})$ sont des **fonctions de base** (*basis functions*)

- Cas particulier : $\phi_i(\vec{x}) = x_i$ et $M = d + 1$

44

Fonctions de base

Pour **simplifier la notation**, on va supposer que $\phi_0(\vec{x}) = 1$ afin d'inclure le **biais** dans la sommation

hyperparamètre

paramètre

$$y_{\vec{w}}(\vec{x}) = \sum_{i=0}^{M-1} w_i \phi_i(\vec{x})$$

Fonction de base

45

Fonctions de base

Pour **simplifier la notation**, on va supposer que $\phi_0(\vec{x}) = 1$
afin d'inclure le **biais** dans la sommation

$$\begin{aligned} y_{\vec{w}}(\vec{x}) &= \sum_{i=0}^{M-1} w_i \phi_i(\vec{x}) \\ &= \vec{w}^{\mathrm{T}} \vec{\phi}(\vec{x}) \end{aligned}$$

$(\phi_0(\vec{x}), \ldots, \phi_{M-1}(\vec{x}))^{\mathrm{T}}$

$(w_0, \ldots, w_{M-1})$

46

Fonctions de base

Une des fonctions de base les plus fréquentes est la **fonction polynomiale**

$$\phi_i(x) = x^i$$

=> Régression polynomiale

47

48

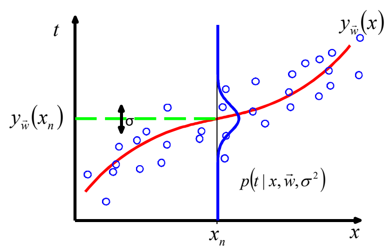
Régression et maximum de vraisemblance

49

Formulation probabiliste

Loi gaussienne conditionnelle

Comme auparavant, on suppose ici que les données sont corrompues par un **bruit gaussien**.



Maximum de vraisemblance

Suivant le même processus que précédemment, on obtient que

$$\boxed{\vec{w} = \arg\min_{\vec{w}} \underbrace{\sum_{n=1}^{N} \left(\vec{w}^{\mathrm{T}} \vec{\phi}(\vec{x}_n) - t_n\right)^2}_{E_D(\vec{w})}}$$

Et ici aussi, le « meilleur » $\vec{w}$ est celui pour lequel le **gradient est nul**

$$\nabla_{\vec{w}} E_D(\vec{w}) = \sum_{n=1}^{N} \left(\vec{w}^{\mathrm{T}} \vec{\phi}(\vec{x}_n) - t_n\right) \vec{\phi}(\vec{x}_n)^{\mathrm{T}} = 0$$

Maximum de vraisemblance

$$\vec{w}^{\mathrm{T}} \sum_{n=1}^{N} \vec{\phi}(\vec{x}_n)\vec{\phi}(\vec{x}_n)^{\mathrm{T}} - \sum_{n=1}^{N} t_n \vec{\phi}(\vec{x}_n)^{\mathrm{T}} = 0$$

En **isolant** $\vec{w}$**,** on obtient que

$$\boxed{\vec{w}_{\mathrm{MV}} = \left(\Phi^{\mathrm{T}}\Phi\right)^{-1}\Phi^{\mathrm{T}} T}$$

où

$$\Phi = \begin{pmatrix} \phi_0(\vec{x}_1) & \phi_1(\vec{x}_1) & \cdots & \phi_{M-1}(\vec{x}_1) \\ \phi_0(\vec{x}_2) & \phi_1(\vec{x}_2) & \cdots & \phi_{M-1}(\vec{x}_2) \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \phi_0(\vec{x}_N) & \phi_1(\vec{x}_N) & \cdots & \phi_{M-1}(\vec{x}_N) \end{pmatrix} \qquad T = \begin{pmatrix} t_1 \\ t_2 \\ \vdots \\ t_N \end{pmatrix}$$

Maximum *a posteriori* (MAP)

Encore une fois, en suivant les même étapes qu'auparavant, que la solution au maximum *a posteriori* s'exprime sous la forme suivante

$$\vec{w} = \arg\min_{\vec{w}} \underbrace{\sum_{n=1}^{N} \frac{\left(t_n - \vec{w}^{T}\vec{\phi}(\vec{x}_n)\right)^2}{2} + \lambda \frac{\vec{w}^{\mathrm{T}}\vec{w}}{2}}_{E_D(W)}$$

NOTE

Formule également connue sous le nom de « **régression de *Ridge*** »

Exemple pour une fonction de base polynomiale **https://scikit-learn.org/stable/auto_examples/linear_model/plot_polynomial_interpolation.html**

Maximum *a posteriori* (MAP)

Ici aussi on obtiens la solution optimale en forçant le **gradient à zéro**

$$\nabla E_D(\vec{w}) = 0$$

Et ainsi obtenir

$$\boxed{\vec{w}_{\mathrm{MAP}} = \left(\Phi^{\mathrm{T}}\Phi + \lambda I\right)^{-1}\Phi^{\mathrm{T}} T}$$

Cette preuve est sujette à devoir…

Maximum *a posteriori* (MAP)

$$\vec{w}_{\text{MAP}} = \left(\Phi^{\mathrm{T}}\Phi + \lambda I\right)^{-1}\Phi^{\mathrm{T}}T$$

- Le terme de régularisation $\lambda\frac{\vec{w}^{\mathrm{T}}\vec{w}}{2}$ est souvent appelé ***weight decay***
- La régression avec un ***weight decay*** est souvent appelé ***régression de Ridge***
- On retrouve le **maximum de vraisemblance** lorsque $\lambda = 0$
- Permet de réduire le **sur-apprentissage** lorsque $\lambda > 0$

Régression avec **prédictions multiples**

56

Régression avec **prédiction simple**

RAPPEL

$D = (X, T)$

où

$X = \{\vec{x}_1, \ldots, \vec{x}_N\}$ et $\vec{x}_i \in R^d$

$T = \{t_1, \ldots, t_N\}$

Exemple: prédiction du prix d'une maison (d=1)

x : Surface (pi2)	t : prix maison
250	89,000$
554	197,000$
710	261,000$
…	…
2890	681,000$

57

Régression avec **prédiction simple**

RAPPEL

$D = (X, T)$

où

$X = \{\vec{x}_1, \ldots, \vec{x}_N\}$ et $\vec{x}_i \in R^d$

$T = \{t_1, \ldots, t_N\}$

Exemple: prédiction du prix d'une maison (d=2)

$\vec{x}$: Surface (pi2); âge de la maison (années) — t : prix maison

(250, 45)	89,000$
(554, 90)	197,000$
(710, 12)	261,000$
…	…
(2890, 51)	681,000$

58

Régression avec **prédictions multiples**

$D = (X, T)$

où

$X = \{\vec{x}_1, \ldots, \vec{x}_N\}$ **et** $\vec{x}_i \in R^d$

$\mathbf{T} = \{\vec{t}_1, \ldots, \vec{t}_N\}$ **et** $\vec{t}_i \in R^K$

Exemple: prédiction de plusieurs éléments d'une maison (d=2, K=3)

$\vec{x}$: Surface (pi2); âge de la maison (années) — $\vec{t}$: prix maison; coût chauffage; taxes

(250, 45)	(89,000$, 720$, 1231$)
(554, 90)	(197,000$, 1301$, 1711$)
(710, 12)	(261,000$, 1445$, 1199$)
…	…
(2890, 51)	(681,000$, 3789$, 2998$)

59

Régression avec **prédictions multiples**

Le modèle doit maintenant **prédire un vecteur**

$$y_{\mathrm{W}}(\vec{x}) = \mathrm{W}^{\mathrm{T}} \vec{\phi}(\vec{x})$$

Où **W** est une matrice ***M* x *K***

Chaque ligne de **W** peut être vue comme un vecteur W_k du modèle $y_{\vec{w}_k}(\vec{x}) = \vec{w}_k^T \vec{\phi}(\vec{x})$ pour la k^e cible

60

Régression avec **prédictions multiples**

Si on suppose encore une fois un modèle de bruit gaussien

$$p\left(\vec{t} \mid \vec{x}, W, \sigma^2\right) = N\left(\vec{t} \mid \vec{y}_W(\vec{x}), \sigma^2\right)$$

On peut montrer que la solution du **maximum de vraisemblance** est

$$\boxed{\mathbf{W}_{\mathbf{ML}} = \left(\Phi^{\mathrm{T}}\Phi\right)^{-1}\Phi^{\mathrm{T}}\mathbf{T}}$$

Et la solution du **maximum *a posteriori*** est

$$\boxed{\mathbf{W}_{\mathbf{MAP}} = \left(\Phi^{\mathrm{T}}\Phi + \lambda I\right)^{-1}\Phi^{\mathrm{T}}\mathbf{T}}$$

Où **T** est une matrice ***N*** x ***K***

61

Résumé régression linéaire

- **Modèle** : $y_{\vec{w}}(\vec{x}) = \sum_{i=0}^{M-1} \underbrace{w_i}_{\text{Paramètre}} \underbrace{\phi_i}_{\text{Fonction de base}}(\vec{x}) = \vec{w}^{\mathrm{T}}\vec{\phi}(\vec{x})$
- Entraînement par **maximum de vraisemblance**: $\boxed{\vec{w}_{\mathrm{MV}} = \left(\Phi^{\mathrm{T}}\Phi\right)^{-1}\Phi^{\mathrm{T}}T}$
- Entraînement par **maximum *a posteriori***: $\boxed{\vec{w}_{\mathrm{MAP}} = \left(\Phi^{\mathrm{T}}\Phi + \lambda I\right)^{-1}\Phi^{\mathrm{T}}T}$
- **Hyper-paramètres** : M et λ

62