# A2DI: Régression logistique

John Klein

Lille1 Université - CRIStAL UMR CNRS 9189





Où en est-on dans notre problème d'apprentissage supervisé?

- En théorie on veut minimiser *Errgen*.
- En pratique on minimisera *Err<sub>train</sub>* tout en s'assurant que *Err<sub>train</sub>* ne dévie pas de *Err<sub>gen</sub>*.
- Les solutions minimisant  $Err_{train}$  au sens de la théorie de la décision pour des fonctions de perte classiques tournent autour de solutions probabilistes reposant sur la connaissance de la distribution  $p_{Y|X}$
- Si, on cherche directement  $p_{Y|X}$ , on parle de modèle discriminatif.

John Klein (Lille1) A2DI 2 / 47

Où en est-on dans notre problème d'apprentissage supervisé?

- En théorie on veut minimiser *Errgen*.
- En pratique on minimisera *Err<sub>train</sub>* tout en s'assurant que *Err<sub>train</sub>* ne dévie pas de *Err<sub>gen</sub>*.
- Les solutions minimisant  $Err_{train}$  au sens de la théorie de la décision pour des fonctions de perte classiques tournent autour de solutions probabilistes reposant sur la connaissance de la distribution  $p_{Y|X}$
- Si, on cherche directement  $p_{Y|X}$ , on parle de modèle discriminatif.

La régression logistique offre une solution de cette nature pour un problème de classification.

# Plan du chapitre

- 1 Origines du modèle
- Descente de gradient
- 3 Descente de gradient stochastique
- 4 Conclusions

• Soit un problème de classification avec  $\mathbb{Y} = \{0; 1\}$  où 0 représente l'hypothèse d'un crédit n'est pas accordé et 1 qu'un crédit est accordé.

- Soit un problème de classification avec  $\mathbb{Y} = \{0; 1\}$  où 0 représente l'hypothèse d'un crédit n'est pas accordé et 1 qu'un crédit est accordé.
- Soit X l'espace des attributs brutes où chaque dimension x<sub>j</sub> est un nombre réel représente un information du style : salaire, découvert max, endettement, etc.

- Soit un problème de classification avec  $\mathbb{Y} = \{0; 1\}$  où 0 représente l'hypothèse d'un crédit n'est pas accordé et 1 qu'un crédit est accordé.
- Soit X l'espace des attributs brutes où chaque dimension x<sub>j</sub> est un nombre réel représente un information du style : salaire, découvert max, endettement, etc.
- On se doute qu'un score du style :

$$score = w_1 \times salaire + w_2 \times decouvert + w_3 \times endettement + b$$

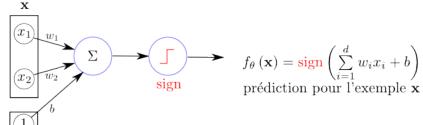
est pertinent pour décider de l'attribution du crédit..

- Soit un problème de classification avec  $\mathbb{Y} = \{0; 1\}$  où 0 représente l'hypothèse d'un crédit n'est pas accordé et 1 qu'un crédit est accordé.
- Soit X l'espace des attributs brutes où chaque dimension x<sub>j</sub> est un nombre réel représente un information du style : salaire, découvert max, endettement, etc.
- On se doute qu'un score du style :

$$score = w_1 \times salaire + w_2 \times decouvert + w_3 \times endettement + b$$

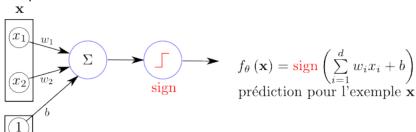
est pertinent pour décider de l'attribution du crédit.. à condition que les paramètres  $w_1$ ,  $w_2$ ,  $w_3$ , et b soient bien réglés!

- Partir sur cette idée reviens à choisir un modèle linéaire.
- .. mais, le score n'est ni une classe, ni une probabilité d'appartenance à une classe.
- Avec le perceptron, on avait décidé d'appliquer la fonction sign au score :



#### Le perceptron :

- fournit directement une classe sans passer par la case proba,
- repose sur l'hypothèse de séparabilité linéaire qui n'est pas réaliste en pratique.



## Adoptons une solution plus réaliste :

- y n'est pas directement déductible de score (x).
- On autorise donc des réponses bruitées et on cherche  $p_{Y|\text{score}(x)}$ .
- Comme  $Y|\mathbf{X} = \mathbf{x}$  est binaire, on sait que  $Y|\mathbf{X} = \mathbf{x} \sim \mathrm{Ber}\left(\mu\left(\mathbf{x}\right)\right)$  avec  $\mu \in [0;1].$
- Pourquoi ne pas faire en sorte que le score soit la probabilité d'appartenance à la classe 1?

$$score(\mathbf{x}) = \mu(\mathbf{x}). \tag{1}$$

• Il suffit de faire en sorte que score  $(x) \in [0; 1]!$ 

• Une fonction qui permet d'obtenir cela est la fonction sigmoïde.

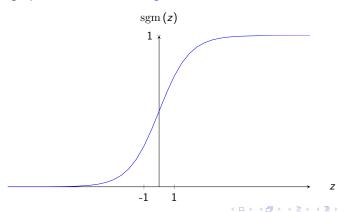
- Une fonction qui permet d'obtenir cela est la fonction sigmoïde.
- La fonction sigmoïde  $\operatorname{sgm}$  est une fonction continue de  $\mathbb R$  dans [0;1], telle que

$$\operatorname{sgm}(z) = \frac{1}{1 + e^{-z}}.$$
 (2)

- Une fonction qui permet d'obtenir cela est la fonction sigmoïde.
- $\bullet$  La fonction sigmoïde  $\operatorname{sgm}$  est une fonction continue de  $\mathbb R$  dans [0; 1], telle que

$$\operatorname{sgm}(z) = \frac{1}{1 + e^{-z}}.$$
 (2)

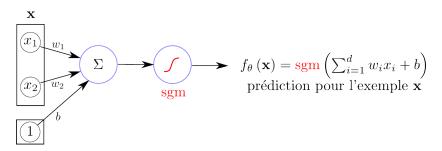
• Voici le graphe de la fonction sigmoïde :



Le modèle complet de la régression logistique est :

$$Y|X = x \sim \operatorname{Ber}(\operatorname{sgm}(\operatorname{score}(x))),$$
 (3)

$$\Leftrightarrow Y|\mathbf{X} = \mathbf{x} \sim \operatorname{Ber}\left(\operatorname{sgm}\left(\mathbf{w}^{T}.\mathbf{x} + \mathbf{b}\right)\right) \tag{4}$$



Soit  $\theta$  le vecteur qui contient tous les paramètres du modèle :

$$\boldsymbol{\theta} = \begin{bmatrix} w_1 \\ \vdots \\ w_d \\ b \end{bmatrix} \tag{5}$$

Soit  $\theta$  le vecteur qui contient tous les paramètres du modèle :

$$\boldsymbol{\theta} = \begin{bmatrix} w_1 \\ \vdots \\ w_d \\ b \end{bmatrix} \tag{5}$$

Selon le modèle de la régression logistique, quelle valeur de  $\theta$  explique le mieux l'observation d'un couple  $(\mathbf{x}^{(i)}, c^{(i)})$ ?

John Klein (Lille1) A2DI 10 / 47

Soit  $\theta$  le vecteur qui contient tous les paramètres du modèle :

$$\boldsymbol{\theta} = \begin{bmatrix} w_1 \\ \vdots \\ w_d \\ b \end{bmatrix} \tag{5}$$

Selon le modèle de la régression logistique, quelle valeur de  $\theta$  explique le mieux l'observation d'un couple  $(\mathbf{x}^{(i)}, c^{(i)})$ ?

→ Celle qui maximise

$$p_{Y|\mathbf{X}=\mathbf{x}^{(i)};\boldsymbol{\theta}}\left(c^{(i)}\right) = \begin{cases} \operatorname{sgm}\left(\mathbf{w}^{T}.\mathbf{x} + b\right) & \text{si } c^{(i)} = 1\\ 1 - \operatorname{sgm}\left(\mathbf{w}^{T}.\mathbf{x} + b\right) & \text{si } c^{(i)} = 0 \end{cases}. \tag{6}$$

John Klein (Lille1) A2DI 10 / 47'

$$p_{Y|\mathbf{X}=\mathbf{x}^{(i)};\boldsymbol{\theta}}\left(c^{(i)}\right) = \operatorname{sgm}\left(\mathbf{w}^{T}.\mathbf{x}^{(i)} + b\right)^{c^{(i)}} \times \left(1 - \operatorname{sgm}\left(\mathbf{w}^{T}.\mathbf{x}^{(i)} + b\right)\right)^{1 - c^{(i)}}.$$
(7)

John Klein (Lille1) A2DI 11 / 4

$$p_{Y|\mathbf{X}=\mathbf{x}^{(i)};\boldsymbol{\theta}}\left(c^{(i)}\right) = \operatorname{sgm}\left(\mathbf{w}^{T}.\mathbf{x}^{(i)} + \boldsymbol{b}\right)^{c^{(i)}} \times \left(1 - \operatorname{sgm}\left(\mathbf{w}^{T}.\mathbf{x}^{(i)} + \boldsymbol{b}\right)\right)^{1 - c^{(i)}}.$$
(7)

Selon le modèle de la régression logistique, quelle valeur de  $\theta$  explique le mieux tout mon ensemble d'apprentissage?

John Klein (Lille1) A2DI 11 / 47

$$\rho_{Y|\mathbf{X}=\mathbf{x}^{(i)};\boldsymbol{\theta}}\left(c^{(i)}\right) = \operatorname{sgm}\left(\mathbf{w}^{T}.\mathbf{x}^{(i)} + \boldsymbol{b}\right)^{c^{(i)}} \times \left(1 - \operatorname{sgm}\left(\mathbf{w}^{T}.\mathbf{x}^{(i)} + \boldsymbol{b}\right)\right)^{1 - c^{(i)}}.$$
(7)

Selon le modèle de la régression logistique, quelle valeur de  $\theta$  explique le mieux tout mon ensemble d'apprentissage?

→ Celle qui maximise la vraisemblance :

John Klein (Lille1) A2DI 11 / 47

$$p_{Y|\mathbf{X}=\mathbf{x}^{(i)};\boldsymbol{\theta}}\left(c^{(i)}\right) = \operatorname{sgm}\left(\mathbf{w}^{T}.\mathbf{x}^{(i)} + \boldsymbol{b}\right)^{c^{(i)}} \times \left(1 - \operatorname{sgm}\left(\mathbf{w}^{T}.\mathbf{x}^{(i)} + \boldsymbol{b}\right)\right)^{1 - c^{(i)}}.$$
(7)

Selon le modèle de la régression logistique, quelle valeur de  $\theta$  explique le mieux tout mon ensemble d'apprentissage?

→ Celle qui maximise la vraisemblance :

$$\mathcal{L}(\boldsymbol{\theta}) = \prod_{i=1}^{n} \operatorname{sgm}\left(\mathbf{w}^{T}.\mathbf{x}^{(i)} + b\right)^{c^{(i)}} \times \left(1 - \operatorname{sgm}\left(\mathbf{w}^{T}.\mathbf{x}^{(i)} + b\right)\right)^{1 - c^{(i)}}$$
(8)

John Klein (Lille1) A2DI 11 / 47'

$$= -\sum_{i=1}^{n} c^{(i)} \log \operatorname{sgm} \left( \mathbf{w}^{T} . \mathbf{x}^{(i)} + \mathbf{b} \right) + \left( 1 - c^{(i)} \right) \log \left( 1 - \operatorname{sgm} \left( \mathbf{w}^{T} . \mathbf{x}^{(i)} + \mathbf{b} \right) \right).$$

$$(9)$$

John Klein (Lille1) A2DI 12 / 47

$$= -\sum_{i=1}^{n} c^{(i)} \log \operatorname{sgm} \left( \mathbf{w}^{T} . \mathbf{x}^{(i)} + b \right) + \left( 1 - c^{(i)} \right) \log \left( 1 - \operatorname{sgm} \left( \mathbf{w}^{T} . \mathbf{x}^{(i)} + b \right) \right).$$
(9)

Cette équation peut s'interprêter comme l'entropie croisée moyenne entre :

• la distribution empirique des classes pour le seul échantillon  $c^{(i)}$ :  $\hat{p}^{(i)}(c) = \mathbb{I}_{c^{(i)}}(c)$  et

John Klein (Lille1) A2DI 12 / 47

$$= -\sum_{i=1}^{n} c^{(i)} \log \operatorname{sgm} \left( \mathbf{w}^{T} . \mathbf{x}^{(i)} + b \right) + \left( 1 - c^{(i)} \right) \log \left( 1 - \operatorname{sgm} \left( \mathbf{w}^{T} . \mathbf{x}^{(i)} + b \right) \right).$$

$$\tag{9}$$

Cette équation peut s'interprêter comme l'entropie croisée moyenne entre :

- la distribution empirique des classes pour le seul échantillon  $c^{(i)}$  :  $\hat{p}^{(i)}(c) = \mathbb{I}_{c^{(i)}}(c)$  et
- la distribution prédite par notre modèle  $p_{Y|\mathbf{X}=\mathbf{x}^{(i)};\theta}(c) = \mathrm{Ber}\left(f_{\theta}\left(\mathbf{x}^{(i)}\right)\right)$ .

John Klein (Lille1) A2DI 12 / 47

$$= -\sum_{i=1}^{n} c^{(i)} \log \operatorname{sgm} \left( \mathbf{w}^{T} . \mathbf{x}^{(i)} + b \right) + \left( 1 - c^{(i)} \right) \log \left( 1 - \operatorname{sgm} \left( \mathbf{w}^{T} . \mathbf{x}^{(i)} + b \right) \right).$$

$$\tag{9}$$

Cette équation peut s'interprêter comme l'entropie croisée moyenne entre :

- la distribution empirique des classes pour le seul échantillon  $c^{(i)}$  :  $\hat{p}^{(i)}(c) = \mathbb{I}_{c^{(i)}}(c)$  et
- la distribution prédite par notre modèle  $p_{Y|\mathbf{X}=\mathbf{x}^{(i)};\boldsymbol{\theta}}(c) = \mathrm{Ber}\left(f_{\boldsymbol{\theta}}\left(\mathbf{x}^{(i)}\right)\right).$

$$NLL(\boldsymbol{\theta}) = -\sum_{i=1}^{n} H(\hat{p}^{(i)}, p_{Y|\mathbf{X}=\mathbf{x}^{(i)};\boldsymbol{\theta}}), \qquad (10)$$

 $= Err_{train} \tag{11}$ 

$$= -\sum_{i=1}^{n} c^{(i)} \log \operatorname{sgm} \left( \mathbf{w}^{T} . \mathbf{x}^{(i)} + b \right) + \left( 1 - c^{(i)} \right) \log \left( 1 - \operatorname{sgm} \left( \mathbf{w}^{T} . \mathbf{x}^{(i)} + b \right) \right).$$
(12)

Posons:

$$\mathbf{x}_{+}^{(i)} = \begin{bmatrix} x_{+,1}^{(i)} \\ \vdots \\ x_{+,d}^{(i)} \\ 1 \end{bmatrix}$$
 (13)

On a NLL  $(\theta)$ 

$$= -\sum_{i=1}^{n} c^{(i)} \log \left( \frac{1}{1 + e^{-\boldsymbol{\theta}^{T} \cdot \mathbf{x}_{+}^{(i)}}} \right) + \left( 1 - c^{(i)} \right) \log \left( 1 - \frac{1}{1 + e^{-\boldsymbol{\theta}^{T} \cdot \mathbf{x}_{+}^{(i)}}} \right). \tag{14}$$

On continues et  $NLL(\theta)$ 

$$= \sum_{i=1}^{n} c^{(i)} \log \left( 1 + e^{-\boldsymbol{\theta}^{T}.\mathbf{x}_{+}^{(i)}} \right) - \left( 1 - c^{(i)} \right) \log \left( \frac{e^{-\boldsymbol{\theta}^{T}.\mathbf{x}_{+}^{(i)}}}{1 + e^{-\boldsymbol{\theta}^{T}.\mathbf{x}_{+}^{(i)}}} \right). \tag{15}$$

John Klein (Lille1) A2DI 14 / 47

Au final,

$$NLL\left(\boldsymbol{\theta}\right) = \sum_{i=1}^{n} \left(1 - c^{(i)}\right) \left(\boldsymbol{\theta}^{T}.\mathbf{x}_{+}^{(i)}\right) - \log \operatorname{sgm}\left(\boldsymbol{\theta}^{T}.\mathbf{x}_{+}^{(i)}\right). \tag{16}$$

John Klein (Lille1) 15 / 47

Au final,

$$NLL\left(\boldsymbol{\theta}\right) = \sum_{i=1}^{n} \left(1 - c^{(i)}\right) \left(\boldsymbol{\theta}^{T}.\mathbf{x}_{+}^{(i)}\right) - \log \operatorname{sgm}\left(\boldsymbol{\theta}^{T}.\mathbf{x}_{+}^{(i)}\right). \tag{16}$$

Cette fonction est convexe mais il n'y pas de solution explicite au problème de minimisation :

$$\underset{\boldsymbol{\theta}}{\operatorname{arg min}} \operatorname{NLL}\left(\boldsymbol{\theta}\right).$$

John Klein (Lille1) A2DI 15 / 47

Au final,

$$NLL\left(\boldsymbol{\theta}\right) = \sum_{i=1}^{n} \left(1 - c^{(i)}\right) \left(\boldsymbol{\theta}^{T}.\mathbf{x}_{+}^{(i)}\right) - \log \operatorname{sgm}\left(\boldsymbol{\theta}^{T}.\mathbf{x}_{+}^{(i)}\right). \tag{16}$$

Cette fonction est convexe mais il n'y pas de solution explicite au problème de minimisation :

$$\underset{\boldsymbol{\theta}}{\operatorname{arg min}} \operatorname{NLL}\left(\boldsymbol{\theta}\right).$$

On va donc devoir utiliser algorithme d'optimisation.

John Klein (Lille1) A2DI 15 / 47

Régression Linéaire | Perceptron | Régression Logistique

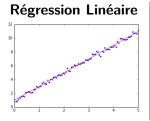
	Régression Linéaire	Perceptron	Régression Logistique
$f_{\theta}\left(\mathbf{x}\right)$	$\mathbf{w}^T.\mathbf{x} + \mathbf{b}$	$   \operatorname{sign} \left( \mathbf{w}^T . \mathbf{x} + \mathbf{b} \right)   $	$\operatorname{sgm}\left(\mathbf{w}^{T}.\mathbf{x}+b\right)$
Pred.			
Tâche	Régression	Classification	Classification

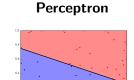
	Régression Linéaire	Perceptron	Régression Logistique
$f_{\boldsymbol{\theta}}\left(\mathbf{x}\right)$	$\mathbf{w}^T.\mathbf{x} + \mathbf{b}$	$\operatorname{sign}\left(\mathbf{w}^{T}.\mathbf{x}+b\right)$	$\operatorname{sgm}\left(\mathbf{w}^{T}.\mathbf{x}+\mathbf{b}\right)$
Pred.		,	/
Tâche	Régression	Classification	Classification
Sortie	valeur	classe	proba de classe

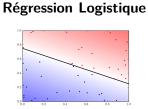
#### Modèles linéaires : bilan

$f_{\theta}(\mathbf{x})$ Pred.	Régression Linéaire $\mathbf{w}^T . \mathbf{x} + \mathbf{b}$	$\frac{\mathbf{Perceptron}}{\mathbf{sign}\left(\mathbf{w}^{T}.\mathbf{x}+b\right)}$	Régression Logistique $\operatorname{sgm}\left(\mathbf{w}^{T}.\mathbf{x}+b\right)$
Tâche	Régression	Classification	Classification
Sortie	valeur	classe	proba de classe
Perte	Quadratique	0-1	Entropie croisée

## Modèles linéaires : bilan







# Plan du chapitre

- 1 Origines du modèle
- 2 Descente de gradient
- 3 Descente de gradient stochastique
- 4 Conclusions

# Retour à la régression logistique :

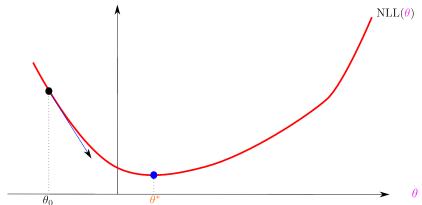
Prochain défi : minimiser la NLL

• Impossible de calculer le MLE analytiquement.

# Retour à la régression logistique :

Prochain défi : minimiser la NLL

- Impossible de calculer le MLE analytiquement.
- On va utiliser une descente de gradient.



# Minimisation de la NLL par descente de gradient



#### Minimisation de la NLL par descente de gradient



## Pause Optim!

• Cet algorithme repose sur une mise à jour itérative de  $\theta$  selon :

$$\boldsymbol{\theta}_{t+1} \longleftarrow \boldsymbol{\theta}_{t} - \eta \times \frac{d}{d\boldsymbol{\theta}} \text{NLL}(\boldsymbol{\theta}),$$

#### Minimisation de la NLL par descente de gradient



#### Pause Optim!

• Cet algorithme repose sur une mise à jour itérative de  $\theta$  selon :

$$\theta_{t+1} \longleftarrow \theta_t - \frac{d}{\eta} \times \frac{d}{d\theta} \text{NLL}(\theta),$$

avec  $\eta$  un paramètre de convergence, appelé *learning rate*.





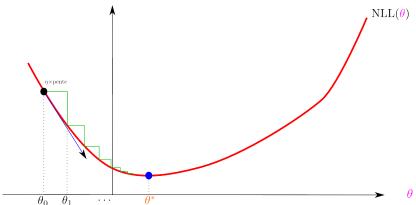
## Pause Optim!

• Quand  $\eta$  est bien choisi, l'algorithme fonctionne ainsi :



#### Pause Optim!

• Quand  $\eta$  est bien choisi, l'algorithme fonctionne ainsi :







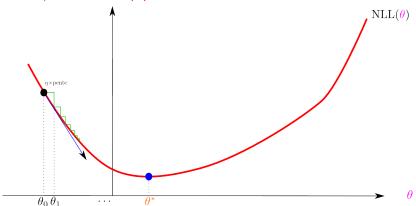
# Pause Optim!

• Quand  $\eta$  est choisi trop petit :



#### Pause Optim!

• Quand  $\eta$  est choisi trop petit :







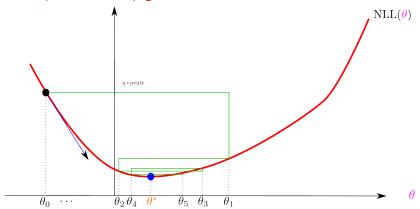
## Pause Optim!

• Quand  $\eta$  est choisi trop grand :



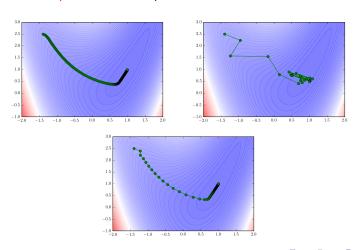
#### Pause Optim!

• Quand  $\eta$  est choisi trop grand :





## Pause Optim! Même explication en 2D



24 / 47





## Pause Optim!

• N'y a-t-il pas un moyen intelligent de choisir  $\eta$ ?

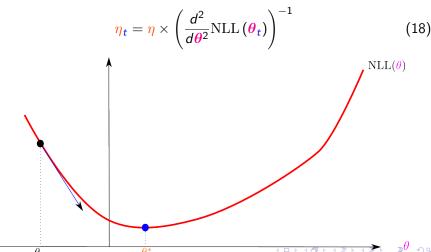
John Klein (Lille1) 25 / 47



- N'y a-t-il pas un moyen intelligent de choisir  $\eta$ ?
- Oui, en le rendant itératif selon :

$$\eta_t = \frac{\eta}{\frac{d^2}{d\theta^2} \text{NLL}(\theta_t)}$$
 (17)







## Pause Optim!

• Cette façon de calculer  $\eta$  est appelée méthode de Newton.



- Cette façon de calculer  $\eta$  est appelée méthode de Newton.
- Elle peut converger vers un max si la fonction n'est pas convexe.



- Cette façon de calculer  $\eta$  est appelée méthode de Newton.
- Elle peut converger vers un max si la fonction n'est pas convexe.
- Le calcul des dérivées secondes peut être couteux.



- Cette façon de calculer  $\eta$  est appelée méthode de Newton.
- Elle peut converger vers un max si la fonction n'est pas convexe.
- Le calcul des dérivées secondes peut être couteux.
- Ca peut déraper si les dérivées secondes sont trop approximatives (matrice non définie).

Retour à la régression logistique : minimisation la NLL par la méthode de Newton

La logreg est le cas idéal pour Newton :

• Les dérivées 1ères et 2ndes sont faciles à calculer.

Retour à la régression logistique : minimisation la NLL par la méthode de Newton

La logreg est le cas idéal pour Newton :

- Les dérivées 1ères et 2ndes sont faciles à calculer.
- La NLL est convexe donc la convergence est assurée.

28 / 47

On avait obtenu

$$NLL\left(\boldsymbol{\theta}\right) = \sum_{i=1}^{n} \left(1 - c^{(i)}\right) \left(\boldsymbol{\theta}^{T}.\mathbf{x}_{+}^{(i)}\right) - \log \operatorname{sgm}\left(\boldsymbol{\theta}^{T}.\mathbf{x}_{+}^{(i)}\right). \tag{19}$$

On montre alors que

$$\frac{\partial}{\partial w_j} \text{NLL}\left(\boldsymbol{\theta}\right) = -\sum_{i=1}^n x_j^{(i)} \left(c^{(i)} - \text{sgm}\left(\boldsymbol{\theta}^T.\mathbf{x}_+^{(i)}\right)\right), \tag{20}$$

$$\frac{\partial}{\partial b} \text{NLL}\left(\boldsymbol{\theta}\right) = -\sum_{i=1}^{n} \left(c^{(i)} - \text{sgm}\left(\boldsymbol{\theta}^{T}.\mathbf{x}_{+}^{(i)}\right)\right)$$
(21)

Régression logistique : minimisation la NLL par la méthode de Newton Calcul des dérivées 1ères (gradient) sous forme matricielle : Soit **err** le vecteur rassemblant les écarts entre prédiction et réalité pour tous les éléments de  $\mathcal D$  :

$$\mathbf{err} = \begin{pmatrix} \operatorname{sgm} \left( \boldsymbol{\theta}^{T} . \mathbf{x}_{+}^{(1)} \right) - c^{(1)} \\ \vdots \\ \operatorname{sgm} \left( \boldsymbol{\theta}^{T} . \mathbf{x}_{+}^{(n)} \right) - c^{(n)} \end{pmatrix}. \tag{22}$$

Régression logistique : minimisation la NLL par la méthode de Newton Calcul des dérivées 1ères (gradient) sous forme matricielle : Soit  ${\bf err}$  le vecteur rassemblant les écarts entre prédiction et réalité pour tous les éléments de  ${\cal D}$  :

$$\mathbf{err} = \begin{pmatrix} \operatorname{sgm} \left( \boldsymbol{\theta}^{T} . \mathbf{x}_{+}^{(1)} \right) - c^{(1)} \\ \vdots \\ \operatorname{sgm} \left( \boldsymbol{\theta}^{T} . \mathbf{x}_{+}^{(n)} \right) - c^{(n)} \end{pmatrix}. \tag{22}$$

Introduisons également une matrice X qui aggrège tous les vecteurs d'exemple d'apprentissage en y ajoutant une ligne de "1" à la fin :

$$\mathbf{X} = \left( \begin{bmatrix} \mathbf{x}^{(1)} \\ 1 \end{bmatrix} \cdots \begin{bmatrix} \mathbf{x}^{(n)} \\ 1 \end{bmatrix} \right). \tag{23}$$

$$\frac{d}{d\theta}$$
NLL $(\theta) = X.err$ . (24)

$$\frac{d}{d\theta} \text{NLL}(\theta) = \mathbf{X}.\text{err}. \tag{24}$$

Pour les dérivées 2ndes, on a :

$$\frac{d^2}{d\theta^2} \text{NLL}(\theta) = \mathbf{X}.\mathbf{S}.\mathbf{X}^T, \qquad (25)$$

$$\frac{d}{d\theta} \text{NLL}(\theta) = \mathbf{X}.\text{err}. \tag{24}$$

Pour les dérivées 2ndes, on a :

$$\frac{d^2}{d\theta^2} \text{NLL}(\theta) = \mathbf{X}.\mathbf{S}.\mathbf{X}^T, \qquad (25)$$

avec

$$\mathbf{S} = \begin{bmatrix} f_{\theta} \left( \mathbf{x}^{(1)} \right) \left( 1 - f_{\theta} \left( \mathbf{x}^{(1)} \right) \right) & \mathbf{0} \\ & \ddots & \\ \mathbf{0} & f_{\theta} \left( \mathbf{x}^{(n)} \right) \left( 1 - f_{\theta} \left( \mathbf{x}^{(n)} \right) \right) \end{bmatrix}$$
(26)

Régression logistique : minimisation la NLL par la méthode de Newton

Bilan sous forme matricielle : la màj se fait selon

$$\boldsymbol{\theta}_{t+1} \longleftarrow \boldsymbol{\theta}_t - \left(\mathbf{X}\mathbf{S}\mathbf{X}^{\mathsf{T}}\right)^{-1}\mathbf{X}.\text{err}.$$
 (27)

John Klein (Lille1) 32 / 47

Régression logistique : minimisation la NLL par la méthode de Newton

Bilan sous forme matricielle : la màj se fait selon

$$\boldsymbol{\theta}_{t+1} \longleftarrow \boldsymbol{\theta}_t - \left(\mathbf{X}\mathbf{S}\mathbf{X}^T\right)^{-1}\mathbf{X}.\text{err}.$$
 (27)

Cette approche est équivalente à une autre appelée IRLS (*iteratively reweighted least squares*).

• Supposons à présent un problème à plus de 2 classes :  $\sharp C = \ell \geq 3$ .

John Klein (Lille1) A2DI 33 / 47

• Supposons à présent un problème à plus de 2 classes :  $\sharp \mathcal{C} = \ell \geq 3$ . Exemple : autorisation de carte bancaire

$$\mathcal{C} = \{\textit{refus}, \textit{electron}, \textit{standard}, \textit{gold}\}$$

John Klein (Lille1) A2DI 33 / 47

• Supposons à présent un problème à plus de 2 classes :  $\sharp \mathcal{C} = \ell \geq 3$ . Exemple : autorisation de carte bancaire

$$C = \{ refus, electron, standard, gold \}$$

• Le modèle  $Y|X = \mathbf{x} \sim \mathrm{Ber}(\mathrm{score}(\mathbf{x}))$  ne convient plus!

John Klein (Lille1) A2DI 33 / 47

• Supposons à présent un problème à plus de 2 classes :  $\sharp \mathcal{C}=\ell\geq 3$ . Exemple : autorisation de carte bancaire

$$\mathcal{C} = \{\textit{refus}, \textit{electron}, \textit{standard}, \textit{gold}\}$$

- Le modèle  $Y|X = \mathbf{x} \sim \mathrm{Ber}\left(\mathrm{score}\left(\mathbf{x}\right)\right)$  ne convient plus!
- On doit passer à  $Y|X = \mathbf{x} \sim \operatorname{Cat}(\boldsymbol{\pi}(\mathbf{x}))$  avec

$$\pi(\mathbf{x}) = \begin{bmatrix} \text{score}_1(\mathbf{x}) \\ \vdots \\ \text{score}_{\ell}(\mathbf{x}) \end{bmatrix}$$
 (28)

• Supposons à présent un problème à plus de 2 classes :  $\sharp \mathcal{C}=\ell\geq 3$ . Exemple : autorisation de carte bancaire

$$C = \{ refus, electron, standard, gold \}$$

- Le modèle  $Y|X = \mathbf{x} \sim \mathrm{Ber}\left(\mathrm{score}\left(\mathbf{x}\right)\right)$  ne convient plus!
- On doit passer à  $Y|X = \mathbf{x} \sim \operatorname{Cat}(\boldsymbol{\pi}(\mathbf{x}))$  avec

$$\pi(\mathbf{x}) = \begin{bmatrix} \mathbf{score}_1(\mathbf{x}) \\ \vdots \\ \mathbf{score}_{\ell}(\mathbf{x}) \end{bmatrix}$$
(28)

et

$$score_{i}(\mathbf{x}) = f\left(\mathbf{w}_{i}^{T}.\mathbf{x} + b_{i}\right). \tag{29}$$

33 / 47

• Quelle fonction f peut envoyer les combinaisons  $\mathbf{w}_i^T . \mathbf{x} + b_i$  vers un vecteur  $\pi$  contenant des probabilités?

- Quelle fonction f peut envoyer les combinaisons  $\mathbf{w}_i^T . \mathbf{x} + b_i$  vers un vecteur  $\pi$  contenant des probabilités?
- $\bullet \rightarrow$  la fonction smax softmax peut faire cela :

$$\operatorname{smax}(\mathbf{x}; \boldsymbol{\Theta}) = \begin{bmatrix} \frac{\exp \mathbf{w}_{1}^{T} . \mathbf{x} + b_{1}}{\sum_{k=1}^{\ell} \exp(\mathbf{w}_{k}^{T} . \mathbf{x} + b_{k})} \\ \vdots \\ \frac{\exp \mathbf{w}_{\ell}^{T} . \mathbf{x} + b_{\ell}}{\sum_{k=1}^{\ell} \exp(\mathbf{w}_{k}^{T} . \mathbf{x} + b_{k})} \end{bmatrix}$$
(30)

- Quelle fonction f peut envoyer les combinaisons  $\mathbf{w}_i^T . \mathbf{x} + b_i$  vers un vecteur  $\pi$  contenant des probabilités?
- $\bullet \rightarrow la$  fonction smax softmax peut faire cela :

$$\operatorname{smax}(\mathbf{x}; \boldsymbol{\Theta}) = \begin{bmatrix} \frac{\exp \mathbf{w}_{1}^{T}.\mathbf{x} + \mathbf{b}_{1}}{\sum_{k=1}^{\ell} \exp(\mathbf{w}_{k}^{T}.\mathbf{x} + \mathbf{b}_{k})} \\ \vdots \\ \exp \mathbf{w}_{\ell}^{T}.\mathbf{x} + \mathbf{b}_{\ell} \\ \frac{\exp \mathbf{w}_{\ell}^{T}.\mathbf{x} + \mathbf{b}_{\ell}}{\sum_{k=1}^{\ell} \exp(\mathbf{w}_{k}^{T}.\mathbf{x} + \mathbf{b}_{k})} \end{bmatrix}$$
(30)

•  $\Theta$  est une matrice rassemblant tous les paramètres.

- Quelle fonction f peut envoyer les combinaisons  $\mathbf{w}_i^T . \mathbf{x} + b_i$  vers un vecteur  $\pi$  contenant des probabilités?
- $\bullet \rightarrow la$  fonction smax softmax peut faire cela :

$$\operatorname{smax}(\mathbf{x}; \boldsymbol{\Theta}) = \begin{bmatrix} \frac{\exp \mathbf{w}_{1}^{T}.\mathbf{x} + b_{1}}{\sum_{k=1}^{\ell} \exp(\mathbf{w}_{k}^{T}.\mathbf{x} + b_{k})} \\ \vdots \\ \frac{\exp \mathbf{w}_{\ell}^{T}.\mathbf{x} + b_{\ell}}{\sum_{k=1}^{\ell} \exp(\mathbf{w}_{k}^{T}.\mathbf{x} + b_{k})} \end{bmatrix}$$
(30)

- $\Theta$  est une matrice rassemblant tous les paramètres.
- Elle généralise la sigmoïde.

- Quelle fonction f peut envoyer les combinaisons  $\mathbf{w}_i^T . \mathbf{x} + b_i$  vers un vecteur  $\pi$  contenant des probabilités?
- $\bullet \rightarrow la$  fonction smax softmax peut faire cela :

$$\operatorname{smax}(\mathbf{x}; \boldsymbol{\Theta}) = \begin{bmatrix} \frac{\exp \mathbf{w}_{1}^{T}.\mathbf{x} + \mathbf{b}_{1}}{\sum_{k=1}^{\ell} \exp(\mathbf{w}_{k}^{T}.\mathbf{x} + \mathbf{b}_{k})} \\ \vdots \\ \exp \mathbf{w}_{\ell}^{T}.\mathbf{x} + \mathbf{b}_{\ell} \\ \frac{\sum_{k=1}^{\ell} \exp(\mathbf{w}_{k}^{T}.\mathbf{x} + \mathbf{b}_{k})}{\sum_{k=1}^{\ell} \exp(\mathbf{w}_{k}^{T}.\mathbf{x} + \mathbf{b}_{k})} \end{bmatrix}$$
(30)

- $\Theta$  est une matrice rassemblant tous les paramètres.
- Elle généralise la sigmoïde.
- Elle appartient à la famille des distributions de Boltzmann.

• D'où vient le nom softmax?

John Klein (Lille1) A2DI 35 / 47

- D'où vient le nom softmax?
- Supposons  $\ell = 3$  et

$$\mathbf{w}_1^T.\mathbf{x} + \mathbf{b}_1 = 0.1 \tag{31}$$

$$\mathbf{w}_2^T.\mathbf{x} + \mathbf{b}_2 = 0.1 \tag{32}$$

$$\mathbf{w}_{3}^{T}.\mathbf{x} + \mathbf{b}_{3} = 100$$
 (33)

- D'où vient le nom softmax?
- Supposons  $\ell = 3$  et

$$\mathbf{w}_1^T.\mathbf{x} + \mathbf{b}_1 = 0.1 \tag{31}$$

$$\mathbf{w}_{2}^{T}.\mathbf{x} + \mathbf{b}_{2} = 0.1$$
 (32)

$$\mathbf{w}_{3}^{T}.\mathbf{x} + \mathbf{b}_{3} = 100$$
 (33)

On aurait alors:

$$\operatorname{smax}\left(\mathbf{x};\mathbf{W}\right) \approx \begin{bmatrix} 0\\0\\1 \end{bmatrix} \tag{34}$$

- D'où vient le nom softmax?
- Supposons  $\ell = 3$  et

$$\mathbf{w}_1^T.\mathbf{x} + \mathbf{b}_1 = 0.1 \tag{31}$$

$$\mathbf{w}_{2}^{T}.\mathbf{x} + b_{2} = 0.1$$
 (32)

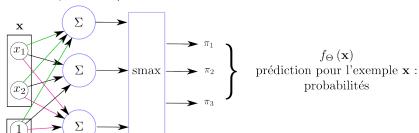
$$\mathbf{w}_3^T.\mathbf{x} + b_3 = 100$$
 (33)

On aurait alors :

$$\operatorname{smax}(\mathbf{x}; \mathbf{W}) \approx \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{bmatrix} \tag{34}$$

• En conclusion, quand une classe i a un gros score pour l'exemple  $\mathbf{x}$  la proba que y = i est proche de 1.

• Schématiquement, ça donne :

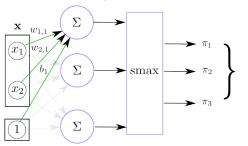


36 / 47

• Qu'advient-il des paramètres?

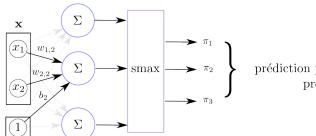
John Klein (Lille1) A2DI 37 / 4

• Qu'advient-il des paramètres?



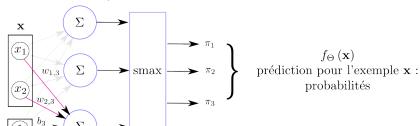
 $f_{\Theta}(\mathbf{x})$  prédiction pour l'exemple  $\mathbf{x}$ : probabilités

• Qu'advient-il des paramètres?

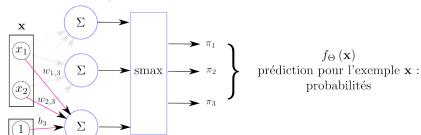


 $f_{\Theta}(\mathbf{x})$  prédiction pour l'exemple  $\mathbf{x}$ : probabilités

• Qu'advient-il des paramètres?



• Qu'advient-il des paramètres?

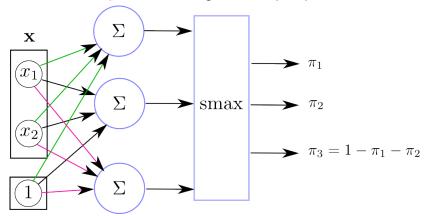


Donc  $\Theta =$ 

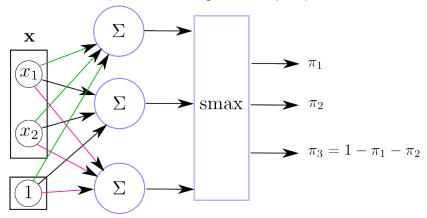
• Qu'advient-il des paramètres? Regardons de plus près ...

John Klein (Lille1) A2DI 38 / 47

• Qu'advient-il des paramètres? Regardons de plus près ...



• Qu'advient-il des paramètres? Regardons de plus près ...



C'est comme si une des sorties du softmax de servait à rien!

John Klein (Lille1) A2DI 38 / 47

- Qu'advient-il des paramètres? Regardons de plus près ...
- On peut montrer que pour tout vecteur  $\psi$  de même taille que les  $\theta_i$ , si la matrice  $\Theta^*$  minimise la NLL alors, la matrice suivant aussi :

$$\Theta^* - \left( \left[ \begin{array}{c} \psi \end{array} \right] \dots \left[ \begin{array}{c} \psi \end{array} \right] \right) \tag{35}$$

38 / 47

- Qu'advient-il des paramètres? Regardons de plus près ...
- On peut montrer que pour tout vecteur  $\psi$  de même taille que les  $\theta_i$ , si la matrice  $\Theta^*$  minimise la NLL alors, la matrice suivant aussi :

$$\Theta^* - \left( \left[ \begin{array}{c} \psi \end{array} \right] \dots \left[ \begin{array}{c} \psi \end{array} \right] \right) \tag{35}$$

• Par convention, on choisit  $\psi = \theta_{\ell}$  et on supprime la dernière colonne de  $\Theta$  dans le problème de minimisation de la NLL.

38 / 47

• Qu'advient-il de la descente de gradient?

John Klein (Lille1) A2DI 39 / 47

- Qu'advient-il de la descente de gradient?
- La même approche reste valable, mais les dérivées sont plus nombreuses.

- Qu'advient-il de la descente de gradient?
- La même approche reste valable, mais les dérivées sont plus nombreuses.
- Le plus simple est de calculer à chaque itération t, les dérivées séparemment pour chaque vecteur  $\theta_i$  selon :

$$\frac{\partial}{\partial \theta_i} \text{NLL}\left(\mathbf{\Theta}\right) = -\sum_{j=1}^n \mathbf{x}^{(j)} \left( \mathbb{I}_i \left( \mathbf{y}^{(j)} \right) - \pi_i \right) \tag{36}$$

# Plan du chapitre

- Origines du modèle
- Descente de gradient
- 3 Descente de gradient stochastique
- Conclusions

40 / 47

• Imaginons que  $n = 10^9$  (ex : nombre d'utilisateurs de Facebook).

John Klein (Lille1) 41 / 47

- Imaginons que  $n = 10^9$  (ex : nombre d'utilisateurs de Facebook).
- Pour une itération de la descente de gradient, je dois calculer :

$$\frac{d}{d\theta}$$
 NLL  $(\theta) = \mathbf{X}.\text{err}$  (37)

- Imaginons que  $n = 10^9$  (ex : nombre d'utilisateurs de Facebook).
- Pour une itération de la descente de gradient, je dois calculer :

$$\frac{d}{d\theta} \text{NLL}(\theta) = \mathbf{X}.\text{err}. \tag{37}$$

Problème : la matrice X ne tient pas sur ma mémoire :

$$\mathbf{X} = \left( \left[ \begin{array}{c} \mathbf{x}^{(1)} \end{array} \right] \dots \left[ \begin{array}{c} \mathbf{x}^{(10^9)} \end{array} \right] \right) \tag{38}$$

Reformulons ce calcul matriciel :

$$\frac{d}{d\theta} \text{NLL}(\theta) = \mathbf{X}.\text{err} = \sum_{i=1}^{n} err_i \times \mathbf{x}^{(i)}.$$
 (39)

Reformulons ce calcul matriciel :

$$\frac{d}{d\theta} \text{NLL}(\theta) = \mathbf{X}.\text{err} = \sum_{i=1}^{n} err_i \times \mathbf{x}^{(i)}.$$
 (39)

 Bonne nouvelle : je n'ai pas besoin de charger en mémoire tous mes exemples d'un coup!

## Régression logistique et Big Data

• Reformulons ce calcul matriciel :

$$\frac{d}{d\theta} \text{NLL}(\theta) = \mathbf{X}.\text{err} = \sum_{i=1}^{n} err_i \times \mathbf{x}^{(i)}.$$
 (39)

- Bonne nouvelle : je n'ai pas besoin de charger en mémoire tous mes exemples d'un coup!
- mais finalement... pourquoi attendre d'avoir vu tous mes exemples pour mettre à jour  $\theta$ ?

## Régression logistique et Big Data

Reformulons ce calcul matriciel :

$$\frac{d}{d\theta} \text{NLL}(\theta) = \mathbf{X}.\text{err} = \sum_{i=1}^{n} err_i \times \mathbf{x}^{(i)}.$$
 (39)

- Bonne nouvelle : je n'ai pas besoin de charger en mémoire tous mes exemples d'un coup!
- mais finalement... pourquoi attendre d'avoir vu tous mes exemples pour mettre à jour  $\theta$ ?
- Peut on faire la màj exemple par exemple selon :

$$\boldsymbol{\theta}_{t+1} \longleftarrow \boldsymbol{\theta}_t - \eta_t \times err_i \times \mathbf{x}^{(i)}$$
? (40)

## Régression logistique et Big Data

Reformulons ce calcul matriciel :

$$\frac{d}{d\theta} \text{NLL}(\theta) = \mathbf{X}.\text{err} = \sum_{i=1}^{n} err_i \times \mathbf{x}^{(i)}.$$
 (39)

- Bonne nouvelle : je n'ai pas besoin de charger en mémoire tous mes exemples d'un coup!
- mais finalement... pourquoi attendre d'avoir vu tous mes exemples pour mettre à jour  $\theta$ ?
- Peut on faire la màj exemple par exemple selon :

$$\boldsymbol{\theta}_{t+1} \longleftarrow \boldsymbol{\theta}_t - \eta_t \times err_i \times \mathbf{x}^{(i)}$$
? (40)

→ Oui, ça s'appelle faire une descente de gradient stochastique.

• Pourquoi stochastique?

- Pourquoi stochastique?
- Imaginons tirer  $U \sim \mathcal{U}_{\{1;n\}}$  uniformément afin de choisir au hasard une de nos données  $\mathbf{x}^{(U)}$ .

- Pourquoi stochastique?
- Imaginons tirer  $U \sim \mathcal{U}_{\{1;n\}}$  uniformément afin de choisir au hasard une de nos données  $\mathbf{x}^{(U)}$ .
- Le gradient de l'erreur pour cet exemple est donc

$$g(U) = err_{U} \times \mathbf{x}^{(U)}. \tag{41}$$

- Pourquoi stochastique?
- Imaginons tirer  $U \sim \mathcal{U}_{\{1;n\}}$  uniformément afin de choisir au hasard une de nos données  $\mathbf{x}^{(U)}$ .
- Le gradient de l'erreur pour cet exemple est donc

$$g(U) = err_{U} \times \mathbf{x}^{(U)}. \tag{41}$$

• Prenons l'espérance sous la loi de *U* :

- Pourquoi stochastique?
- Imaginons tirer  $U \sim \mathcal{U}_{\{1;n\}}$  uniformément afin de choisir au hasard une de nos données  $\mathbf{x}^{(U)}$ .
- Le gradient de l'erreur pour cet exemple est donc

$$g(U) = err_{U} \times \mathbf{x}^{(U)}. \tag{41}$$

• Prenons l'espérance sous la loi de *U* :

• Le gradient qu'on cherche est l'espérance de celui plus sur un exemple au hasard.

• Est-ce que ça converge vers  $\theta^* = \underset{\theta}{\operatorname{arg min NLL}}(\theta)$ ?

John Klein (Lille1) 44 / 47

- Est-ce que ça converge vers  $\theta^* = \arg\min_{\theta} \text{NLL}(\theta)$ ?
- J'ai :

$$\mathbb{E}\left[\text{màj}\right] = \text{cible}$$
 (44)

$$\Leftrightarrow \mathbb{E}_{U}\left[\text{gradient pour }\mathbf{x}^{(U)} \text{ seul}\right] = \frac{d}{d\theta} \text{NLL}\left(\theta\right).$$
 (45)

- Est-ce que ça converge vers  $\theta^* = \arg\min_{\theta} \text{NLL}(\theta)$ ?
- J'ai :

$$\mathbb{E}\left[\text{m}\grave{\text{a}}\text{j}\right] = \text{cible}$$
 (44)

$$\Leftrightarrow \mathbb{E}_{\boldsymbol{U}}\left[\text{gradient pour }\mathbf{x}^{(\boldsymbol{U})} \text{ seul}\right] = \frac{d}{d\boldsymbol{\theta}} \text{NLL}\left(\boldsymbol{\theta}\right). \tag{45}$$

Je peux alors invoquer le résultat suivant :

#### Conditions de Robbins-Monroe

Si la suite  $\eta_t$  des *learning rates* est telle que  $\sum\limits_{t\geq 0}\eta_t=\infty$  et  $\sum\limits_{t\geq 0}\eta_t^2<\infty$  alors l'algorithme du gradient stochastique converge vers l'optimum  $\theta^*$ .

```
SGD
```

```
Initialiser 	heta_0 et \eta_0.

while pas convergé do

Mélanger les données aléatoirement (Shuffle).

for i de 1 à n do

Calculer le gradient sur l'exemple \mathbf{x}^{(i)}: \mathbf{g} \leftarrow err_i \times \mathbf{x}^{(i)}.

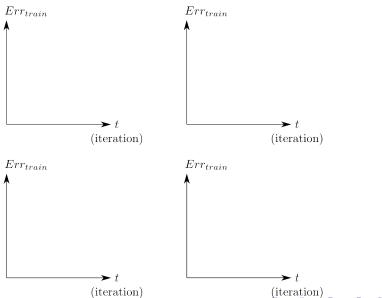
Mettre à jour les paramètres : \theta_{t+1} \longleftarrow \theta_t - \eta_t \times \mathbf{g}.

Mettre à jour le learning rate : \eta_{t+1} \longleftarrow \frac{a}{t+b}

end for

end while
```

# Régression logistique et Big Data : grad. stoch. / 4 situations en pratique



## Messages importants du chapitre :

- La régression logistique offre une estimation de  $p_{Y|X;\theta}$  à partir des données. C'est donc un modèle discriminatif.
- Elle fonctionne pour une perte *L* appelée entropie croisée.
- Avec cette perte, la NLL de la régression logistique est l'erreur Err<sub>train</sub>.
- La NLL doit être minimisée par rapport aux paramètres  $\theta$  du modèle de la régression logistique.
- Puisqu'il n'y a pas de solution analytique, on utilise la descente de gradient.
- Quand le dataset est grand, on préfère la descente de gradient stochastique.