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 *Erresp*.
- En pratique on minimisera *Err_{train}* tout en s'assurant que *Err_{train}* ne dévie pas de *Err_{esp}*.
- 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.

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

- En théorie on veut minimiser *Erresp*.
- En pratique on minimisera Err_{train} tout en s'assurant que Err_{train} ne dévie pas de Err_{esp}.
- 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_j 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_j est un nombre réel représente un information du style : salaire, découvert max, endettement, etc.
- On se doute qu'un score du style :

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

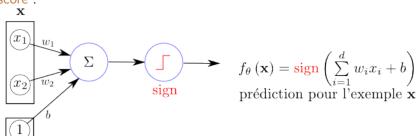
est pertinent pour décider de l'attribution du crédit..

- 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_j est un nombre réel représente un information du style : salaire, découvert max, endettement, etc.
- On se doute qu'un score du style :

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

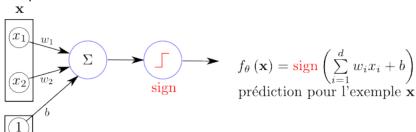
est pertinent pour décider de l'attribution du crédit.. à condition que les paramètres w_1 , w_2 , w_3 , et b soient bien réglés!

- 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.

8 / 50

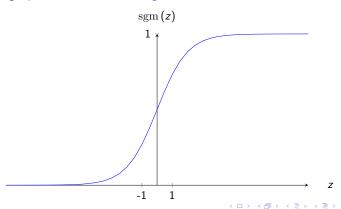
- Une fonction qui permet d'obtenir cela est la fonction sigmoïde.
- \bullet La fonction sigmoïde sgm est une fonction continue de $\mathbb R$ dans [0; 1], telle que

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

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

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

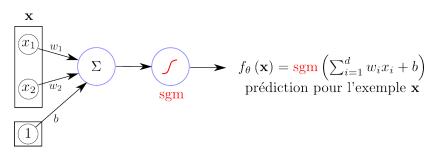
• Voici le graphe de la fonction sigmoïde :



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 θ le vecteur qui contient tous les paramètres du modèle :

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

Soit θ 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 θ explique le mieux l'observation d'un couple $(\mathbf{x}^{(i)}, c^{(i)})$?

Soit θ 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 θ explique le mieux l'observation d'un couple $(\mathbf{x}^{(i)}, c^{(i)})$?

→ Celle qui maximise

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

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

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

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

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

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

→ Celle qui maximise la vraisemblance :

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

Selon le modèle de la régression logistique, quelle valeur de θ 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)

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

$$(9)$$

12 / 50

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

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

$$\tag{9}$$

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 $p_{Y|\mathbf{X}=\mathbf{x}^{(i)};\theta}(c) = \mathrm{Ber}\left(f_{\theta}\left(\mathbf{x}^{(i)}\right)\right).$

12 / 50

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

$$\tag{9}$$

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 $p_{Y|\mathbf{X}=\mathbf{x}^{(i)};\boldsymbol{\theta}}(c) = \mathrm{Ber}\left(f_{\boldsymbol{\theta}}\left(\mathbf{x}^{(i)}\right)\right).$

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

 $= -n \times Err_{train} \tag{11}$

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

$$(12)$$

Posons:

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

On a NLL (θ)

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

On continues et $NLL(\theta)$

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

 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 / 50

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 :

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

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.

Régression Linéaire | Perceptron | Régression Logistique

16 / 50

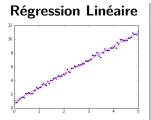
	Régression Linéaire	Perceptron	Régression Logistique
$f_{\theta}(\mathbf{x})$	$\mathbf{w}^T.\mathbf{x} + \mathbf{b}$	$ \operatorname{sign} \left(\mathbf{w}^T . \mathbf{x} + b \right) $	$\operatorname{sgm}\left(\mathbf{w}^{T}.\mathbf{x}+b\right)$
Pred.			
Tâche	Régression	Classification	Classification

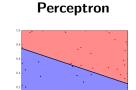
$f_{\theta}(\mathbf{x})$ Pred.	Régression Linéaire $\mathbf{w}^T . \mathbf{x} + \mathbf{b}$	$\frac{Perceptron}{sign\left(\mathbf{w}^{T}.\mathbf{x}+b\right)}$	Régression Logistique $\operatorname{sgm}\left(\mathbf{w}^{T}.\mathbf{x}+b\right)$
Tâche	Régression	Classification	Classification
Sortie	valeur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

Modèles linéaires : bilan

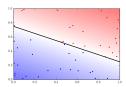
$f_{\theta}(\mathbf{x})$ Pred.	Régression Linéaire $\mathbf{w}^T . \mathbf{x} + \mathbf{b}$	Perceptron $\operatorname{sign}\left(\mathbf{w}^{T}.\mathbf{x}+b\right)$	Régression Logistique $\operatorname{sgm}\left(\mathbf{w}^{T}.\mathbf{x}+b\right)$
Tâche	Régression	Classification	Classification
Sortie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

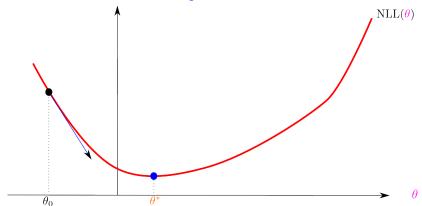
• Impossible de calculer le MLE analytiquement.

John Klein (Lille1) A2DI 19 / 50

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 θ selon :

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

Minimisation de la NLL par descente de gradient



Pause Optim!

• Cet algorithme repose sur une mise à jour itérative de θ selon :

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

avec η un paramètre de convergence, appelé *learning rate*.





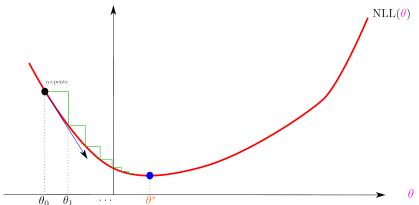
Pause Optim!

• Quand η est bien choisi, l'algorithme fonctionne ainsi :



Pause Optim!

• Quand η est bien choisi, l'algorithme fonctionne ainsi :







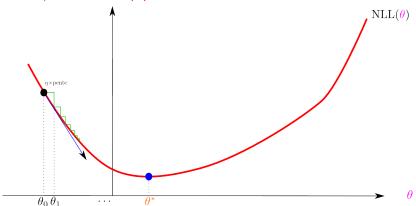
Pause Optim!

• Quand η est choisi trop petit :



Pause Optim!

• Quand η est choisi trop petit :







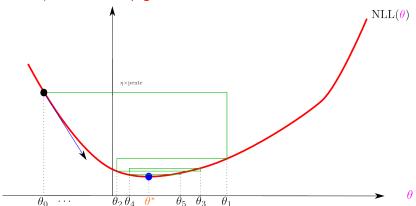
Pause Optim!

• Quand η est choisi trop grand :



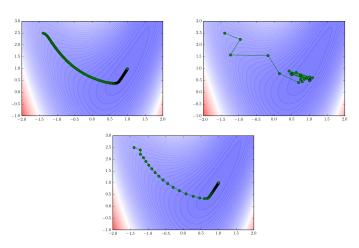
Pause Optim!

• Quand η est choisi trop grand :





Pause Optim! Même explication en 2D







Pause Optim!

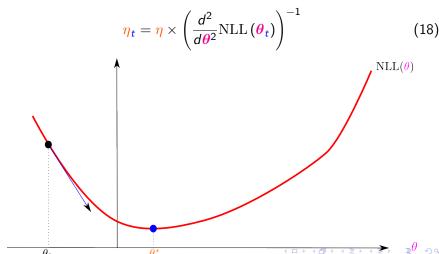
• N'y a-t-il pas un moyen intelligent de choisir η ?



- N'y a-t-il pas un moyen intelligent de choisir η ?
- 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 η est appelée méthode de Newton.



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



- Cette façon de calculer η 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 η 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.

28 / 50

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.

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

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

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

John Klein (Lille1) A2DI 29 / 50

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

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

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 : $\sharp C = \ell \geq 3$.

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

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

• 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 / 50

• 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

$$\pi(\mathbf{x}) = \begin{bmatrix} \text{score}_1(\mathbf{x}) \\ \vdots \\ \text{score}_{\ell}(\mathbf{x}) \end{bmatrix}$$
 (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 / 50

• Quelle fonction f peut envoyer les combinaisons $\mathbf{w}_{i}^{T}.\mathbf{x} + b_{i}$ vers un vecteur π contenant des probabilités?

- Quelle fonction f peut envoyer les combinaisons $\mathbf{w}_i^T . \mathbf{x} + b_i$ vers un vecteur π 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 π 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)

• Θ 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 π contenant des probabilités?
- $\bullet \rightarrow la$ fonction smax softmax peut faire cela :

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

- Θ 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 π 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)

- Θ 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 / 50

- 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

$$\mathbf{w}_{1}^{T}.\mathbf{x} + b_{1} = 0.1$$
 (31)

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

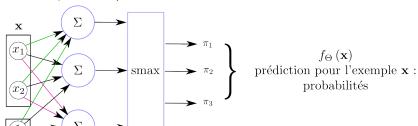
$$\mathbf{w}_3^T.\mathbf{x} + b_3 = 100$$
 (33)

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.

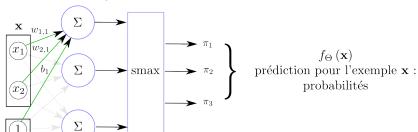
• Schématiquement, ça donne :

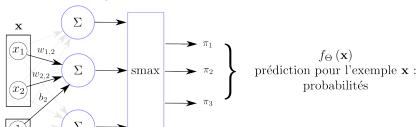


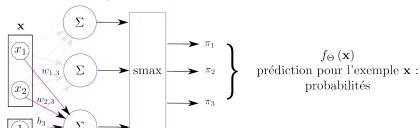
36 / 50

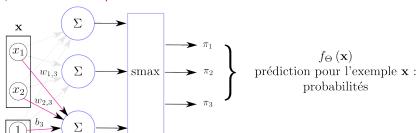
• Qu'advient-il des paramètres?

John Klein (Lille1) A2DI 37 / 50







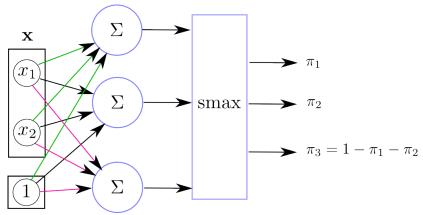


Donc
$$\Theta =$$

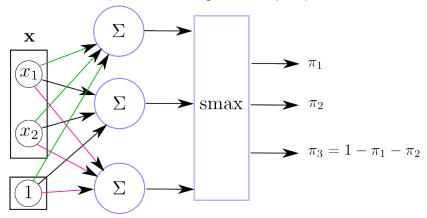
• Qu'advient-il des paramètres? Regardons de plus près ...

John Klein (Lille1) 40 / 50

• 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!

- Qu'advient-il des paramètres? Regardons de plus près ...
- On peut montrer que pour tout vecteur ψ de même taille que les θ_i , si la matrice Θ^* 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 Θ dans le problème de minimisation de la NLL.

- Qu'advient-il des paramètres? Regardons de plus près ...
- On peut montrer que pour tout vecteur ψ de même taille que les θ_i , si la matrice Θ^* 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 Θ dans le problème de minimisation de la NLL.

- Qu'advient-il des paramètres? Regardons de plus près ...
- On peut montrer que pour tout vecteur ψ de même taille que les θ_i , si la matrice Θ^* 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 Θ dans le problème de minimisation de la NLL.

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

- 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 θ_i selon :

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

Plan du chapitre

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

43 / 50

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

- 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)

John Klein (Lille1) 45 / 50

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!

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 θ ?

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 θ ?
- 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)

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 θ ?
- Peut on faire la màj exemple par exemple selon :

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

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

• Pourquoi stochastique?

John Klein (Lille1) 46 / 50

- 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

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

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

$$\mathbb{E}_{\mathbf{U}}[g] = \sum_{\mathbf{u}=1}^{n} err_{\mathbf{u}} \times \mathbf{x}^{(\mathbf{u})} p_{\mathbf{U}}(\mathbf{u}), \qquad (42)$$

- 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

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

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

$$\mathbb{E}_{\mathbf{U}}[g] = \sum_{u=1}^{n} err_{u} \times \mathbf{x}^{(u)} p_{\mathbf{U}}(u), \qquad (42)$$

$$= -$$

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

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

John Klein (Lille1) 47 / 50

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

$$\mathbb{E}\left[\text{m}\grave{\text{a}}\text{j}\right] = \text{cible}$$
 (43)

$$\Leftrightarrow \mathbb{E}_{\boldsymbol{U}}\left[\text{gradient pour }\mathbf{x}^{(\boldsymbol{U})} \text{ seul}\right] = \frac{d}{d\boldsymbol{\theta}} \text{NLL}\left(\boldsymbol{\theta}\right). \tag{44}$$

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

$$\mathbb{E}\left[\text{màj}\right] = \text{cible}$$
 (43)

$$\Leftrightarrow \mathbb{E}_{\boldsymbol{U}}\left[\text{gradient pour }\mathbf{x}^{(\boldsymbol{U})} \text{ seul}\right] = \frac{d}{d\boldsymbol{\theta}} \text{NLL}\left(\boldsymbol{\theta}\right). \tag{44}$$

• Je peux alors invoquer le résultat suivant :

Conditions de Robbins-Monroe

Si la suite η_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 θ^* .

SGD

```
Initialiser \theta_0 et \eta_0.

while pas convergé do

if (i \text{ multiple de } n) Mélanger les données aléatoirement (Shuffle).

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

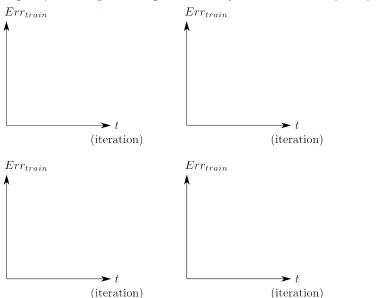
Mettre à jour les paramètres : \theta_{t+1} \longleftarrow \theta_t - \eta_t \times \mathbf{g}.

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

end while
```

48 / 50

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_{train}*.
- La NLL doit être minimisée par rapport aux paramètres θ 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.