MAPSI — cours 10 : Regressions

Vincent Guigue, Christophe Gonzales

vincent.guigue@lip6.fr

LIP6 – Université Paris 6, France

Situation générale

- Jusqu'ici, beaucoup de problèmes de **classification**
  - supervisés (chiffres, lettres)
  - non-supervisés (geyser)
- D'autres problèmes existent...
  - suivi de cibles (cf cours 9)
  - modélisation explicative (neurosciences)
  - **regression** : modèle expliquant une variable continue
- Sources de données
  - `www.kaggle.com`
  - `http://archive.ics.uci.edu/ml/`
- Jouer avec les données... C'est un métier : data scientist.

Regression : cas d'usage

- Prédiction des prix des maisons (Boston)

```
1. CRIM      per capita crime rate by town
2. ZN        proportion of residential land zoned for lots over
             25,000 sq.ft.
3. INDUS     proportion of non-retail business acres per town
4. CHAS      Charles River dummy variable (= 1 if tract bounds
             river; 0 otherwise)
5. NOX       nitric oxides concentration (parts per 10 million)
6. RM        average number of rooms per dwelling
7. AGE       proportion of owner-occupied units built prior to 1940
8. DIS       weighted distances to five Boston employment centres
9. RAD       index of accessibility to radial highways
10. TAX      full-value property-tax rate per $10,000
11. PTRATIO  pupil-teacher ratio by town
12. B        1000(Bk - 0.63)^2 where Bk is the proportion of blacks
             by town
13. LSTAT    % lower status of the population
14. MEDV     Median value of owner-occupied homes in $1000's
```

- Prédiction des notes du vin
- Prédiction du prix des voitures d'occasion

Regression : cas d'usage

- Prédiction des prix des maisons (Boston)
- Prédiction des notes du vin

```
1) Alcohol
2) Malic acid
3) Ash
4) Alcalinity of ash
5) Magnesium
6) Total phenols
7) Flavanoids
8) Nonflavanoid phenols
9) Proanthocyanins
10)Color intensity
11)Hue
12)OD280/OD315 of diluted wines
13)Proline
```

- Prédiction du prix des voitures d'occasion

Regression : cas d'usage

- Prédiction des prix des maisons (Boston)
- Prédiction des notes du vin
- Prédiction du prix des voitures d'occasion

```
 1. symboling:                -3, -2, -1, 0, 1, 2, 3.
 2. normalized-losses:        continuous from 65 to 256.
 3. make:                     alfa-romero, audi, bmw, chevrolet, dodge, honda,
                              isuzu, jaguar, mazda, mercedes-benz, mercury,
                              mitsubishi, nissan, peugot, plymouth, porsche,
                              renault, saab, subaru, toyota, volkswagen, volvo
 4. fuel-type:                diesel, gas.
 5. aspiration:               std, turbo.
 6. num-of-doors:             four, two.
 7. body-style:               hardtop, wagon, sedan, hatchback, convertible.
 8. drive-wheels:             4wd, fwd, rwd.
 9. engine-location:          front, rear.
10. wheel-base:               continuous from 86.6 120.9.
11. length:                   continuous from 141.1 to 208.1.
12. width:                    continuous from 60.3 to 72.3.
13. height:                   continuous from 47.8 to 59.8.
14. curb-weight:              continuous from 1488 to 4066.
15. engine-type:              dohc, dohcv, l, ohc, ohcf, ohcv, rotor.
16. num-of-cylinders:         eight, five, four, six, three, twelve, two.
17. engine-size:              continuous from 61 to 326.
18. fuel-system:              1bbl, 2bbl, 4bbl, idi, mfi, mpfi, spdi, spfi.
19. bore:                     continuous from 2.54 to 3.94.
20. stroke:                   continuous from 2.07 to 4.17.
21. compression-ratio:        continuous from 7 to 23.
22. horsepower:               continuous from 48 to 288.
23. peak-rpm:                 continuous from 4150 to 6600.
24. city-mpg:                 continuous from 13 to 49.
25. highway-mpg:              continuous from 16 to 54.
26. price:                    continuous from 5118 to 45400.
```

Regression : cas d’usage

- Prédiction des prix des maisons (Boston)
- Prédiction des notes du vin
- Prédiction du prix des voitures d’occasion
- Résistance du béton
- Propagation des feux de forêt
- Consommation électrique
- Eruptions solaires
- ...

Régression simple (1)

- X et Y jouent des rôles dissymétriques
- Y = variable expliquée = variable endogène
- on veut « expliquer » la valeur de Y par celle de X

- X et Y jouent des rôles dissymétriques
- Y = variable expliquée = variable endogène
- on veut « expliquer » la valeur de Y par celle de X

X = taux d'alcool dans le sang $\Longrightarrow$ Y = vitesse

X = surface du logement $\Longrightarrow$ Y = prix au m^2

X = quantité d'engrais à l'hectare $\Longrightarrow$ Y = rendement

Variable exogène X peut être aléatoire, mais pas forcément :

$\Longrightarrow$ l'expérimentateur peut faire varier comme il veut la quantité d'engrais de parcelle en parcelle

Régression simple (2)

Variable exogène X peut être aléatoire, mais pas forcément :

$\Longrightarrow$ l'expérimentateur peut faire varier comme il veut la quantité d'engrais de parcelle en parcelle

Hypothèse

- relation imprécise entre X et Y
- valeur de Y dépend de X et d'un facteur aléatoire $\mathcal{E}$:
  $Y = f(X, \mathcal{E})$
- $\mathcal{E}$ = résidu = erreur = bruit

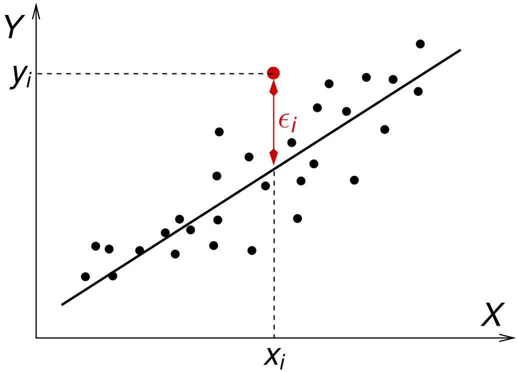
Régression simple (3)

$$Y = f(X, \mathcal{E})$$

- $\mathcal{E}$ variable aléatoire $\Longrightarrow$ Y variable aléatoire

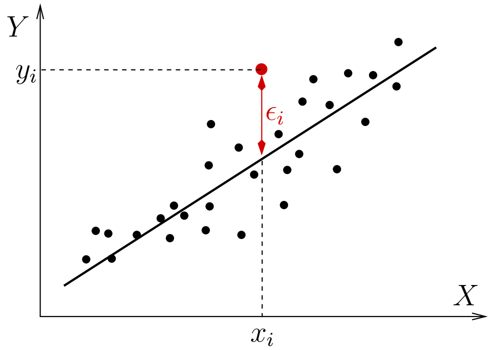
Modèle linéaire ou régression

- On dispose de n observations (x_i, y_i) du couple (X, Y)
- fonction f affine : $Y = \alpha + \beta X + \mathcal{E}$
- α et β = paramètres inconnus
- observations telles que : $y_i = \alpha + \beta x_i + \mathcal{E}_i$
- existence des résidus $\mathcal{E}_i$
  $\Longrightarrow$ les points (x_i, y_i) ne sont pas sur une même droite
  $\Longrightarrow$ on ne peut déterminer exactement α et β
  $\Longrightarrow$ estimation de α et β



$$Y = \alpha + \beta X + \mathcal{E}$$

- Cas simple : régression linéaire mono-dimensionnelle



Modélisation : $Y = \alpha + \beta X + \mathcal{E}$
On dispose d'un ensemble d'observations (x_i, y_i)
$\Rightarrow$ trouver $\alpha^\star, \beta^\star$

Formalisation mono-dimensionnelle (2)

- Modélisation : $Y = \alpha + \beta X + \mathcal{E}$
- $\mathcal{E}$ est une variable aléatoire, $\{\dots, \mathcal{E}_i, \dots\}$ sont des tirages selon cette loi
- Hypothèse (dite du bruit blanc) : $\mathcal{E} \sim \mathcal{N}(0, \sigma)$
- Notations :
  - $Y_i = \alpha + \beta X_i + \mathcal{E}_i$ et : $E[Y_i] = \alpha + \beta x_i, \; V[Y_i] = \sigma^2$
  - On note $Y_i \sim \mathcal{N}(\alpha + \beta x_i, \sigma)$

Résolution analytique

$$Y = \alpha + \beta X + \mathcal{E} \quad E(Y) = \alpha + \beta E(X)$$

Résolution analytique

$$Y = \alpha + \beta X + \mathcal{E} \quad E(Y) = \alpha + \beta E(X)$$

$$Y - E(Y) = \beta(X - E(X)) + \mathcal{E}$$

Résolution analytique

$$Y = \alpha + \beta X + \mathcal{E} \quad E(Y) = \alpha + \beta E(X)$$

$$Y - E(Y) = \beta(X - E(X)) + \mathcal{E}$$

Multiplication par $(X - E(X))$ et passage à l'espérance :

$$E[(Y - E(Y))(X - E(X))] = \beta E[(X - E(X))^2] + E[\mathcal{E}(X - E(X))]$$

Résolution analytique

$$Y = \alpha + \beta X + \mathcal{E} \quad E(Y) = \alpha + \beta E(X)$$

$$Y - E(Y) = \beta(X - E(X)) + \mathcal{E}$$

Multiplication par $(X - E(X))$ et passage à l'espérance :

$$E[(Y - E(Y))(X - E(X))] = \beta E[(X - E(X))^2] + E[\mathcal{E}(X - E(X))]$$

$\text{cov}(X, Y) = \beta\sigma_x^2 + \text{cov}(\mathcal{E}, X)$ or : $\text{cov}(\mathcal{E}, X) = 0$ par hypothèse (bruit

Résolution analytique

$$Y = \alpha + \beta X + \mathcal{E} \quad E(Y) = \alpha + \beta E(X)$$

$$Y - E(Y) = \beta(X - E(X)) + \mathcal{E}$$

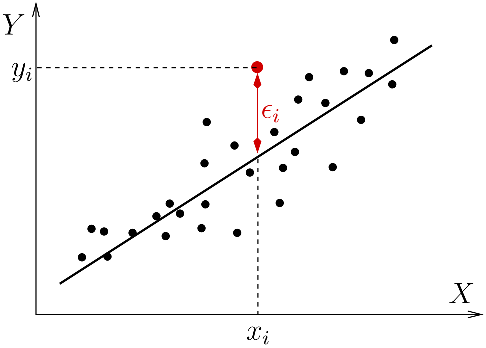
Multiplication par $(X - E(X))$ et passage à l'espérance :

$$E[(Y - E(Y))(X - E(X))] = \beta E[(X - E(X))^2] + E[\mathcal{E}(X - E(X))]$$

$\text{cov}(X, Y) = \beta\sigma_x^2 + \text{cov}(\mathcal{E}, X)$ or : $\text{cov}(\mathcal{E}, X) = 0$ par hypothèse (bruit

$$\beta^\star = \frac{\text{cov}(X, Y)}{\sigma_x^2} \quad \alpha^\star = E(Y) - \frac{\text{cov}(X, Y)}{\sigma_x^2} E(X)$$

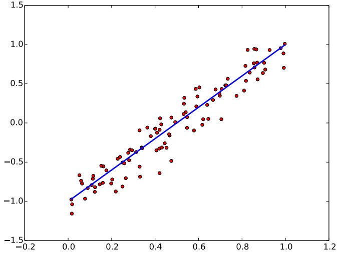
On peut trouver l'équation de la droite qui explique les points (avec des hypothèses sur $\mathcal{E}$)



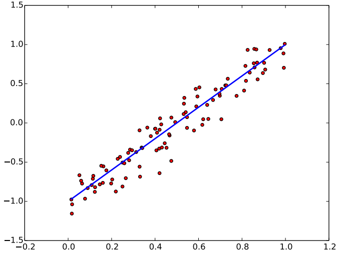
$$\beta^\star = \frac{\text{cov}(X, Y)}{\sigma_X^2} \quad \alpha^\star = E(Y) - \frac{\text{cov}(X, Y)}{\sigma_X^2} E(X)$$

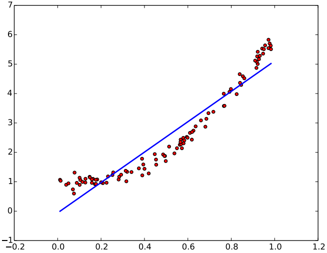
Conclusion (2)

- Ca marche bien...

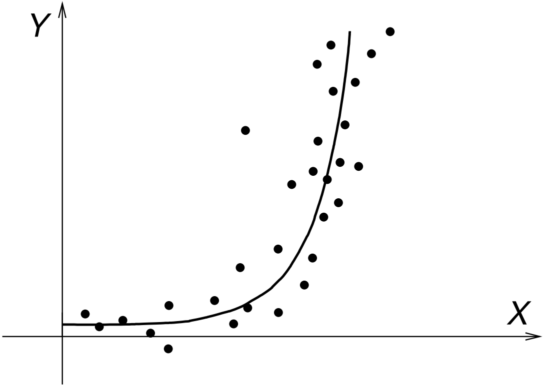


- Ca marche bien... sur des données linéaires





Changement de variable



$\ln Y = -1 + 0,5X^2$

$\Longrightarrow$ changement de variables : $Y' = \ln Y$ et $X' = X^2$

$\Longrightarrow Y' = -1 + 0,5X'$

Apprentissage par MV (mono-dimensionnel)

- On dispose toujours d'observations iid $\{(x_i, y_i)\}_{i=1,\dots,N}$ et on fait toujours une hypothèse gaussienne sur le bruit
- Généralisation à n'importe quel modélisation $Y = f(X)$,
- Par exemple : $Y = \alpha X^2 + \beta X + \gamma + \mathcal{E}$
- Notations :
  - $Y_i \sim \mathcal{N}(\alpha x_i^2 + \beta x_i + \gamma, \sigma)$
  - Proba. d'observation :

$$p(y_i|x_i, \theta, \sigma) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma} \exp(-\frac{1}{2\sigma^2}\|y_i - f(x_i)\|^2)$$

Apprentissage par MV (mono-dimensionnel)

- On dispose toujours d'observations iid $\{(x_i, y_i)\}_{i=1,\dots,N}$ et on fait toujours une hypothèse gaussienne sur le bruit
- Généralisation à n'importe quel modélisation $Y = f(X)$,
- Par exemple : $Y = \alpha X^2 + \beta X + \gamma + \mathcal{E}$
- Notations :
  - $Y_i \sim \mathcal{N}(\alpha x_i^2 + \beta x_i + \gamma, \sigma)$
  - Proba. d'observation :

$$p(y_i|x_i, \theta, \sigma) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma} \exp(-\frac{1}{2\sigma^2}\|y_i - f(x_i)\|^2)$$

  - Vraisemblance :

$$\mathcal{L} = p(\mathbf{y}|\mathbf{x}, \theta, \sigma) = \prod_i \frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma} \exp(-\frac{1}{2\sigma^2}\|y_i - f(x_i)\|^2)$$

MV : résolution

- Comment maximiser la vraisemblance ?

$$\mathcal{L} = p(\mathbf{y}|\mathbf{x}, \theta, \sigma) = \prod_i \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma}} \exp(-\frac{1}{2\sigma^2}(y_i - f(x_i))^2)$$

- On fait souvent l'hypothèse que σ est connu
- Passage au log :

$$log\mathcal{L} = \sum_i -\log(\sqrt{2\pi}\sigma) - \frac{1}{2\sigma^2}(y_i - f(x_i))^2$$

Approche standard :

- Calcul du gradient
- Annulation du gradient
  - Analytique (si possible)
  - Itérative (sinon)

Définition : gradient = vecteur des dérivées par rapport aux paramètres

- Simplification (si σ est connu), et $f(x) = \alpha x^2 - \beta x - \gamma$

$$\arg\max_{\alpha,\beta,\gamma} \sum_i -\log(\sqrt{2\pi}\sigma) - \frac{1}{2\sigma^2}(y_i - f(x_i))^2 = \arg\max_{\alpha,\beta,\gamma} \sum_i -(y_i - f(x_i))^2$$

- Calcul du gradient (∇) :

- Simplification (si σ est connu), et $f(x) = \alpha x^2 - \beta x - \gamma$

$$\arg\max_{\alpha,\beta,\gamma} \sum_i -\log(\sqrt{2\pi}\sigma) - \frac{1}{2\sigma^2}(y_i - f(x_i))^2 = \arg\max_{\alpha,\beta,\gamma} \sum_i -(y_i - f(x_i))^2$$

- Calcul du gradient (∇) :

$$\nabla_{\alpha,\beta,\gamma}\mathcal{L}_{red} = \begin{bmatrix} \frac{\partial(\sum_i -(y_i - f(x_i))^2)}{\partial\alpha} \\ \frac{\partial(\sum_i -(y_i - f(x_i))^2)}{\partial\beta} \\ \frac{\partial(\sum_i -(y_i - f(x_i))^2)}{\partial\gamma} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \sum_i 2x_i^2(y_i - \alpha x_i^2 - \beta x_i - \gamma) \\ \sum_i 2x_i(y_i - \alpha x_i^2 - \beta x_i - \gamma) \\ \sum_i 2(y_i - \alpha x_i^2 - \beta x_i - \gamma) \end{bmatrix}$$

MV : résolution (2)

- Simplification (si σ est connu), et $f(x) = \alpha x^2 - \beta x - \gamma$

$$\arg\max_{\alpha,\beta,\gamma} \sum_i -\log(\sqrt{2\pi}\sigma) - \frac{1}{2\sigma^2}(y_i - f(x_i))^2 = \arg\max_{\alpha,\beta,\gamma} \sum_i -(y_i - f(x_i))^2$$

- Calcul du gradient (∇) :

$$\nabla_{\alpha,\beta,\gamma}\mathcal{L}_{red} = \begin{bmatrix} \frac{\partial(\sum_i -(y_i - f(x_i))^2)}{\partial\alpha} \\ \frac{\partial(\sum_i -(y_i - f(x_i))^2)}{\partial\beta} \\ \frac{\partial(\sum_i -(y_i - f(x_i))^2)}{\partial\gamma} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \sum_i 2x_i^2(y_i - \alpha x_i^2 - \beta x_i - \gamma) \\ \sum_i 2x_i(y_i - \alpha x_i^2 - \beta x_i - \gamma) \\ \sum_i 2(y_i - \alpha x_i^2 - \beta x_i - \gamma) \end{bmatrix}$$

- Bonne ou mauvaise nouvelle ?

MV : résolution (3)

- **Très bonne nouvelle !** Ces équations forment un système de *n* équations linéaires à *n* inconnues

$$\nabla_{\alpha,\beta,\gamma} \log \mathcal{L} = 0 \Leftrightarrow \begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} & a_{13} \\ a_{21} & a_{22} & a_{23} \\ a_{31} & a_{32} & a_{33} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \alpha \\ \beta \\ \gamma \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} b_1 \\ b_2 \\ b_3 \end{bmatrix}$$

- Résolution par facto. matricielle (LU, QR, Choleski...)
- En python :
  - `numpy.linalg.solve` :

numpy.linalg.solve(*a*, *b*)

Solve a linear matrix equation, or system of linear scalar equations.

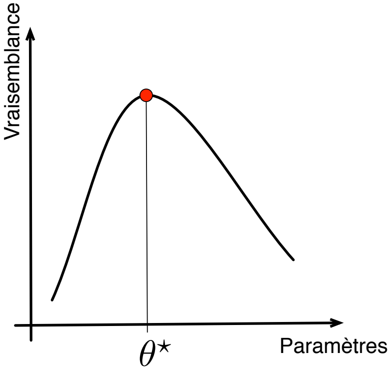
Computes the "exact" solution, *x*, of the well-determined, i.e., full rank, linear matrix equation *ax = b*.

Parameters:	**a** : *(..., M, M) array_like* Coefficient matrix. **b** : *{(..., M,), (..., M, K)}, array_like* Ordinate or "dependent variable" values.
Returns:	**x** : *{(..., M,), (..., M, K)} ndarray* Solution to the system a x = b. Returned shape is identical to *b*.
Raises:	**LinAlgError** : If *a* is singular or not square.

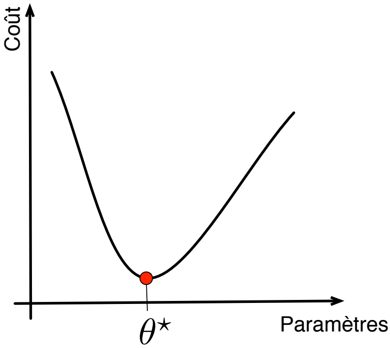
  - `sklearn`

Approche par minimisation du coût

Approches probabilistes : trouver les paramètres $\theta^\star$ qui maximisent la vraisemblance



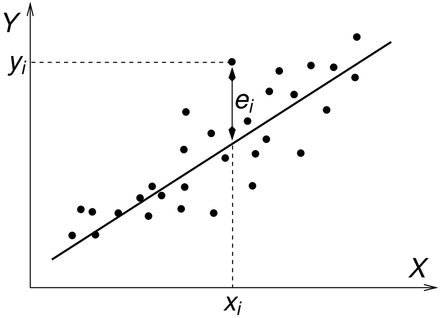
Approches par coût : trouver les paramètres $\theta^\star$ qui minimisent un coût défini



Coût des moindres carrés (1)

observations $\Longrightarrow$ couples (x_i, y_i) $\Longrightarrow$ en principe $y_i = a + bx_i$

en pratique : $e_i = y_i - (a + bx_i) \neq 0$



$\Longrightarrow$ on cherche la droite $y = a + bx$ dont les couples sont le plus proches

$\Longrightarrow$ min de la la somme des carrés des distances (euclidiennes) verticales entre les points et la droite

Coût des moindres carrés (2)

Définition de la droite

trouver a et b pour lesquels on a : $\min_{a,b} \sum_{i=1}^{n} e_i^2$

ou encore : $F(a,b) = \sum_{i=1}^{n} [y_i - a - bx_i]^2 \Longrightarrow \min_{a,b} F(a,b)$

dérivées partielles = 0 (conditions suffisantes d'optimalité) :

$$\begin{aligned}
\frac{\partial F(a,b)}{\partial a} &= \sum_{i=1}^{n} (-2)[y_i - a - bx_i] = 0 \\
\frac{\partial F(a,b)}{\partial b} &= \sum_{i=1}^{n} (-2)x_i[y_i - a - bx_i] = 0
\end{aligned}$$

$$
\frac{\partial F(a,b)}{\partial a} = \sum_{i=1}^{n} (-2)[y_i - a - bx_i] = 0 \qquad (1)
$$

$$
\frac{\partial F(a,b)}{\partial b} = \sum_{i=1}^{n} (-2)x_i[y_i - a - bx_i] = 0 \qquad (2)
$$

Coût des moindres carrés (3)

$$\frac{\partial F(a,b)}{\partial a} = \sum_{i=1}^{n}(-2)[y_i - a - bx_i] = 0 \qquad (1)$$

$$\frac{\partial F(a,b)}{\partial b} = \sum_{i=1}^{n}(-2)x_i[y_i - a - bx_i] = 0 \qquad (2)$$

Lien avec la vision probabiliste :

$(1) \iff a = \overline{y} - b\overline{x}$

$$(2) \iff b\sum_{i=1}^{n} x_i^2 = \sum_{i=1}^{n} x_i y_i - a\sum_{i=1}^{n} x_i$$

donc, d'après (1) : $b\sum_{i=1}^{n} x_i^2 = \sum_{i=1}^{n} x_i y_i - \overline{y}\sum_{i=1}^{n} x_i + nb\left(\sum_{i=1}^{n} x_i\right)^2$

$$\Longrightarrow b = \frac{\sum_i x_i(y_i - \overline{y})}{\sum_i x_i^2 - n(\sum_i x_i)^2} = \frac{cov(x,y)}{s_x^2}$$

Coût des moindres carrés (3)

$$\frac{\partial F(a,b)}{\partial a} = \sum_{i=1}^{n}(-2)[y_i - a - bx_i] = 0 \quad (1)$$

$$\frac{\partial F(a,b)}{\partial b} = \sum_{i=1}^{n}(-2)x_i[y_i - a - bx_i] = 0 \quad (2)$$

Résolution du système d'équations linéaires :

$$\nabla_{a,b} Cout = 0 \Leftrightarrow \begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} \\ a_{21} & a_{22} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} a \\ b \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} b_1 \\ b_2 \end{bmatrix}$$

Avec :

$$\begin{array}{ll} a_{11} = n & a_{12} = \sum_i x_i \\ a_{21} = \sum_i x_i & a_{22} = \sum_i x_i^2 \end{array}, \qquad \begin{array}{l} b_1 = \sum_i y_i \\ b_2 = \sum_i x_i y_i \end{array}$$

En route vers l'indicateur R^2

Posons $\hat{y}_i = a + bx_i$

$s_y^2 =$ variance empirique de Y :

$$s_y^2 = \frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n}(y_i - \overline{y})^2 = \frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n}(\hat{y}_i + e_i - \overline{y})^2$$

$$= \frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n}(\hat{y}_i - \overline{y})^2 + \frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n}(e_i)^2 + 2\frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n} e_i(\hat{y}_i - \overline{y})$$

En route vers l'indicateur R^2

Posons $\hat{y}_i = a + bx_i$

$s_y^2 =$ variance empirique de Y :

$$s_y^2 = \frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n}(y_i - \overline{y})^2 = \frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n}(\hat{y}_i + e_i - \overline{y})^2$$

$$= \frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n}(\hat{y}_i - \overline{y})^2 + \frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n}(e_i)^2 + 2\frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n} e_i(\hat{y}_i - \overline{y})$$

Or $\frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n} e_i(\hat{y}_i - \overline{y}) = cov(e_i, \hat{y}_i) = cov(e_i, a + bx_i) = b\, cov(e_i, x_i) = 0$

Donc $s_y^2 = \frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n}(\hat{y}_i - \overline{y})^2 + \frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n}(e_i)^2$

$=$variance expliquée $+$ variance résiduelle

l'indicateur R^2 (1/2)

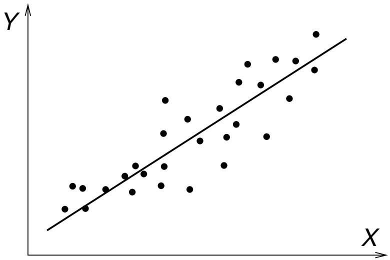
$s_y^2 =$ variance empirique de Y :

$$s_y^2 = \frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n}(\hat{y}_i - \overline{y})^2 + \frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n}(y_i - \hat{y}_i)^2$$

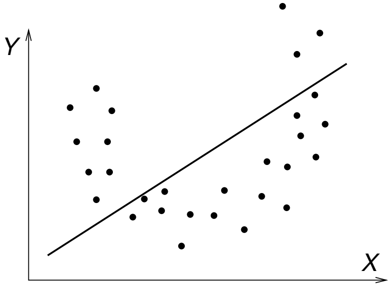
$$= \text{variance expliquée} + \text{variance résiduelle}$$

$$R^2 = \frac{\sum_i(\hat{y}_i - \overline{y})^2}{\sum_i(y_i - \hat{y})^2} = \frac{\text{variance expliquée}}{\text{variance résiduelle}}$$

Le modèle linéaire rend d'autant mieux compte de la liaison entre X et Y que R^2 est plus proche de 1



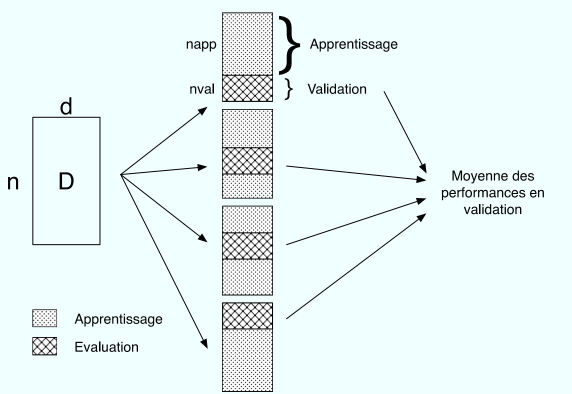
R^2 petit



R^2 élevé

Autre indicateur de qualité... très empirique

- Erreur de reconstruction moyenne en apprentissage **et en test** !
- La plupart du temps, on a une connaissance métier pour juger la qualité des modèles
- Lorsque les données manquent... validation croisée



- La plupart des données réelles sont multi-dimensionnelles

$$X = \begin{bmatrix} x_{11} & x_{12} & \cdots & x_{1d} \\ \vdots & & & \\ x_{N1} & x_{N2} & \cdots & x_{Nd} \end{bmatrix}, Y = \begin{bmatrix} y_1 \\ \vdots \\ y_N \end{bmatrix}.$$

x_{ij}

- i représente un indice d'échantillon
- j un indice de caractéristique.

Notre but : estimer $E[Y|X_1, X_2, ..., X_d]$

- L'hypothèse linéaire correspond à :

$$f(\mathbf{x}_i) = \sum_j x_{ij} w_j + b, \quad \mathbf{x}_i \in \mathbb{R}^d$$

- Le problème de minimisation du coût des moindres carrés :

$$\mathbf{w}^\star, b^\star = \arg\min_{\mathbf{w},b} \sum_{i=1}^{N} (f_{\mathbf{w},b}(\mathbf{x}_i) - y_i)^2$$

- Quand les dimensions augmentent, le modèle linéaire devient complexe

Regression linéaire : formalisation matricielle

Il est possible d'écrire le problème précédent sous forme matricielle :

- plus simple à écrire + inclusion du biais

$$f(\mathbf{x}_i) = \langle \mathbf{x}_i^\dagger, \mathbf{w}^\dagger \rangle, \quad \text{avec : } \mathbf{x}_i^\dagger = [\mathbf{x}_i,\ 1] \text{ et } \mathbf{w}^\dagger = [\mathbf{w},\ b]$$

  - On considère en général **w** comme un vecteur colonne...

$$\mathbf{w}^{\dagger\star} = \arg\min_{\mathbf{w}^\dagger} (X^\dagger \mathbf{w}^\dagger - Y)^T \, (X^\dagger \mathbf{w}^\dagger - Y)$$

- résolution adaptée aux langages de script inaptes aux boucles

Regression linéaire : formalisation matricielle

Il est possible d'écrire le problème précédent sous forme matricielle :

- plus simple à écrire + inclusion du biais

$$f(\mathbf{x}_i) = \langle \mathbf{x}_i^\dagger, \mathbf{w}^\dagger \rangle, \qquad \text{avec : } \mathbf{x}_i^\dagger = [\mathbf{x}_i,\ 1] \text{ et } \mathbf{w}^\dagger = [\mathbf{w},\ b]$$

  - On considère en général $\mathbf{w}$ comme un vecteur colonne...

$$\mathbf{w}^{\dagger\star} = \arg\min_{\mathbf{w}^\dagger} (X^\dagger \mathbf{w}^\dagger - Y)^T \, (X^\dagger \mathbf{w}^\dagger - Y)$$

- résolution adaptée aux langages de script inaptes aux boucles
- résolution très rapide sur GPU

$$\frac{\partial C}{\partial w_j} = \sum_i 2x_{ij}(f_{\mathbf{w}}(\mathbf{x}_i) - y_i)$$

$$\nabla_{\mathbf{w}} C = \begin{bmatrix} \frac{\partial C}{\partial w_1} \\ \vdots \\ \frac{\partial C}{\partial w_d} \end{bmatrix} = 2X^T(X\mathbf{w} - Y) \in \mathbb{R}^d$$

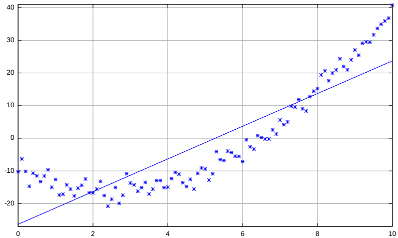
$$\frac{\partial C}{\partial w_j} = \sum_i 2x_{ij}(f_{\mathbf{w}}(\mathbf{x}_i) - y_i)$$

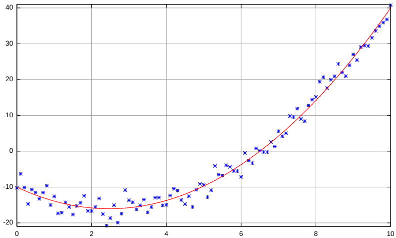
$$\nabla_{\mathbf{w}} C = \begin{bmatrix} \frac{\partial C}{\partial w_1} \\ \vdots \\ \frac{\partial C}{\partial w_d} \end{bmatrix} = 2X^T(X\mathbf{w} - Y) \in \mathbb{R}^d$$

Résolution :

$$\nabla_{\mathbf{w}} C = 0 \Leftrightarrow X^T X\mathbf{w} = X^T Y$$

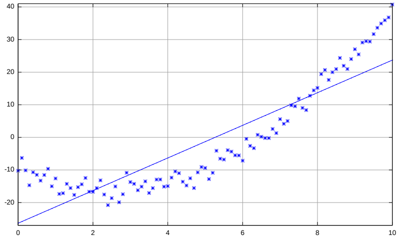
Système d'équations linéaires : $X^T X \in \mathbb{R}^{d\times d}$, $X^T Y \in \mathbb{R}^{d\times 1}$

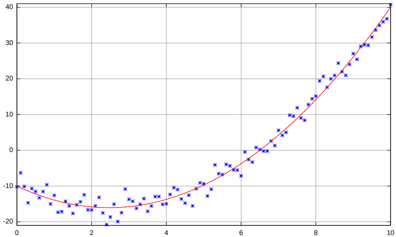




Assez trivial : il suffit d'une astuce...

Passage au non linéaire





Assez trivial : il suffit d'une astuce...

- Concaténation :

$$Xe = [1,\ X,\ X. * X]$$

- Puis résolution standard : $X_e^T X_e \mathbf{w}_e = X_e^T Y$
- Attention à l'inférence sur les nouveaux points et à l'interprétation de $\mathbf{w}_e$

Autres formulations d'apprentissage

Ce cadre de formalisation est très large et généralisable...

- Données $\mathbf{x} \in \mathbb{R}^d$, hypothèse iid : tous les $\mathbf{x}$ sont indépendants
- **Etiquettes** y : Classes (discrimination) , Réels (régression)
- **But** : construire une fonction f telle que $f(\mathbf{x})$ soit une bonne approximation de y
- **Critères** :
  - Coût C :

$$\arg\min_{\theta} \sum_{i=1}^{N} \Delta(f_\theta(\mathbf{x}_i), y_i)$$

- Moindres carrés :

$$C = \sum_{i=1}^{N} \Delta(f_\theta(\mathbf{x}_i), y_i) = \sum_{i=1}^{N} (f_\theta(\mathbf{x}_i) - y_i)^2$$

- Coût charnière (codage $y = \{+1, -1\}$)

$$C = \sum_{i=1}^{N} \Delta(f_\theta(\mathbf{x}_i), y_i) = \sum_{i=1}^{N} (-y_i f_\theta(\mathbf{x}_i))_+$$

Optimisation générale

Dans le cas des fonctions de coût exotique (cf coût logistique), il manque parfois une solution analytique

Algorithme itératif :

1. Initialiser $\mathbf{w}_0$
2. En boucle (avec mise à jour du gradient) :

$$\mathbf{w}^{t+1} = \mathbf{w}^{t} - \epsilon \nabla_{\mathbf{w}} C$$

A condition de choisir ϵ suffisamment petit et de faire suffisamment d'itération, nous trouvons $\mathbf{w}^\star$

Gradient stochastique

Le calcul de $\nabla_{\mathbf{w}} C$ est coûteux... Il est possible de décomposer le problème :

$$C = \sum_{i=1}^{N} C_i, \qquad C_i = (\mathbf{x}_i \mathbf{w} - y_i)^2$$

Algorithme stochastique (Cas MC : ADALINE) :

1. Initialiser $\mathbf{w}_0$
2. En boucle (avec mise à jour du gradient) :
   - Tirage aléatoire d'un échantillon i
   - Calcul de $\nabla_{\mathbf{w}} C_i$ (cas MC : $\nabla_{\mathbf{w}} C_i = 2\mathbf{x}_i^T(\mathbf{x}_i \mathbf{w} - y_i)$)
   - MAJ : $\mathbf{w}^{t+1} = \mathbf{w}^t - \epsilon \nabla_{\mathbf{w}} C_i$

Perceptron

Algorithme de classification binaire des années 60 : toujours très efficace aujourd'hui

$$C = \sum_{i=1}^{N} (-y_i \mathbf{x}_i \mathbf{w})_+$$

Algorithme stochastique (Cas charnière : Perceptron) :

1. Initialiser $\mathbf{w}_0$
2. En boucle (avec mise à jour du gradient) :
   - Tirage aléatoire d'un échantillon i
   - Si $y_i \mathbf{x}_i \mathbf{w} \leq 0$
     - Calcul de $\nabla_{\mathbf{w}} C_i = -y_i x_i^T$
     - MAJ : $\mathbf{w}^{t+1} = \mathbf{w}^t - \epsilon \nabla_{\mathbf{w}} C_i$