ML01 : TD7 - Régression Logistique - Partie 1

Réalisé par Cyprien Gilet et Khaled Belahcene

In [1]:
```
import numpy as np
import pandas as pd
import matplotlib.pyplot as plt
from mpl_toolkits.mplot3d import Axes3D
from sklearn import datasets
import scipy.stats as stats

from IPython.display import Image
```

1. Prise en main de la Descente de Gradient

On considère la fonction convexe $f : \mathbb{R}^2 \to \mathbb{R}$ définie de la façon suivante :

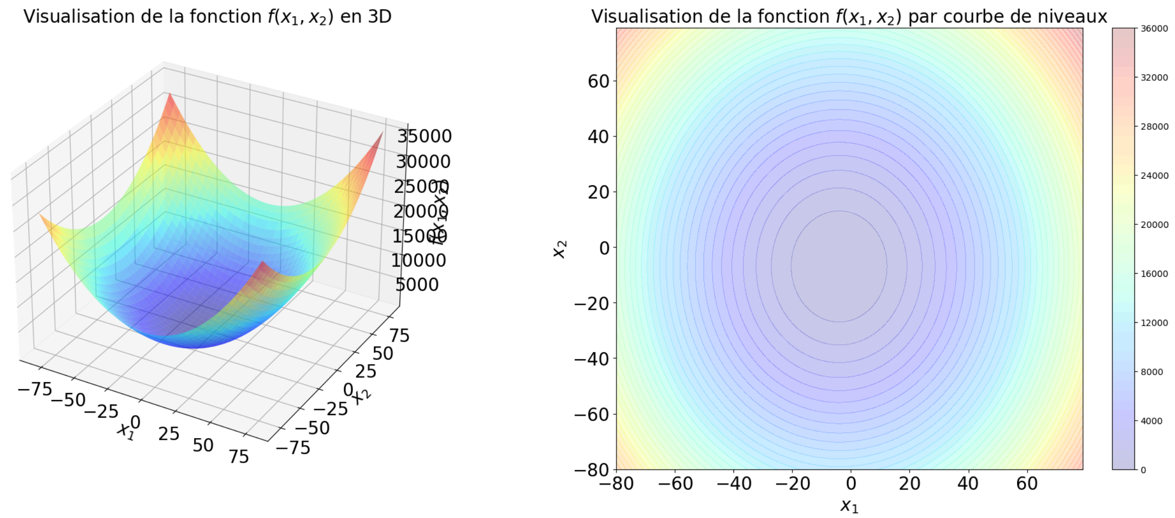
$$f(x_1, x_2) = 3(x_1 + 4)^2 + 2(x_2 + 7)^2 + \frac{6}{7}. \qquad (1)$$

La figure ci-dessous illustre cette fonction f.

In [2]:
```
# objective function
def objective(x1, x2):
        return 3*((x1+4)**2) + ((x2+7)**2)*2 + 6/7

# Plot figure :
figGrad = plt.figure(figsize=(26,9))

# define range for input
r_min, r_max = -80.0, 80.0
x1axis = np.arange(r_min, r_max, 1)
x2axis = np.arange(r_min, r_max, 1)
xx1, xx2 = np.meshgrid(x1axis, x2axis)
# compute targets
f_xx1_xx2 = objective(xx1, xx2)

ax1 = figGrad.add_subplot(1,2,1, projection='3d')
ax1.plot_surface(xx1, xx2, f_xx1_xx2, cmap='jet', alpha=0.5)
ax1.set_xlabel("$x_1$",fontsize=20)
ax1.set_ylabel("$x_2$",fontsize=20)
ax1.set_zlabel("$f(x_1,x_2)$",fontsize=20)
ax1.set_title("Visualisation de la fonction $f(x_1,x_2)$ en 3D",fontsize=20
ax1.tick_params(axis='x', labelsize=20)
ax1.tick_params(axis='y', labelsize=20)
ax1.tick_params(axis='z', labelsize=20)

ax2 = figGrad.add_subplot(1,2,2)
out_f = ax2.contourf(xx1, xx2, f_xx1_xx2, alpha=0.2, levels=50, cmap='jet')
ax2.set_xlabel("$x_1$",fontsize=20)
ax2.set_ylabel("$x_2$",fontsize=20)
ax2.set_title("Visualisation de la fonction $f(x_1,x_2)$ par courbe de nivea
ax2.tick_params(axis='x', labelsize=20)
```

```
ax2.tick_params(axis='y', labelsize=20)
figGrad.colorbar(out_f)
```

Out[2]: `<matplotlib.colorbar.Colorbar at 0x175d2b990>`



Question 1.1. Calculer analytiquement le gradient de f et déterminer le point $\bar{x} = [\bar{x}_1, \bar{x}_2]$ pour lequel f est minimisée.

Réponse à la question 1.1.

$$\nabla f(x_1, x_2) = \begin{bmatrix} \frac{\partial f(x_1,x_2)}{\partial x_1} \\ \frac{\partial f(x_1,x_2)}{\partial x_2} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 6x_1 + 24 \\ 4x_2 + 28 \end{bmatrix}. \tag{2}$$

$$\nabla f(x_1, x_2) = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \end{bmatrix} \Rightarrow \begin{cases} 6x_1 + 24 = 0 \\ 4x_2 + 28 = 0 \end{cases} \Rightarrow \begin{cases} x_1 = -4 \\ x_2 = -7 \end{cases} \tag{3}$$

On en déduit que $\bar{x} = [-4, -7]$ minimise f.

Question 1.2. Implémenter l'algorithme de Descente de Gradient dans le code ci-dessous pour retrouver le point $\bar{x} = [\bar{x}_1, \bar{x}_2]$ pour lequel f est minimisée. On initialisera $x^{(0)} = \left[x_1^{(0)}, x_2^{(0)}\right] = [-60, 60]$. On pourra par exemple considérer $T = 20$ itérations et $\gamma = 0.1$ comme pas du gradient. Pour chaque itération $t \in \{1, \ldots, T\}$ de cet algorithme, on stockera les valeurs de $x^{(t)} = \left[x_1^{(t)}, x_2^{(t)}\right]$ et de $f\left(x_1^{(t)}, x_2^{(t)}\right)$.

In [3]:

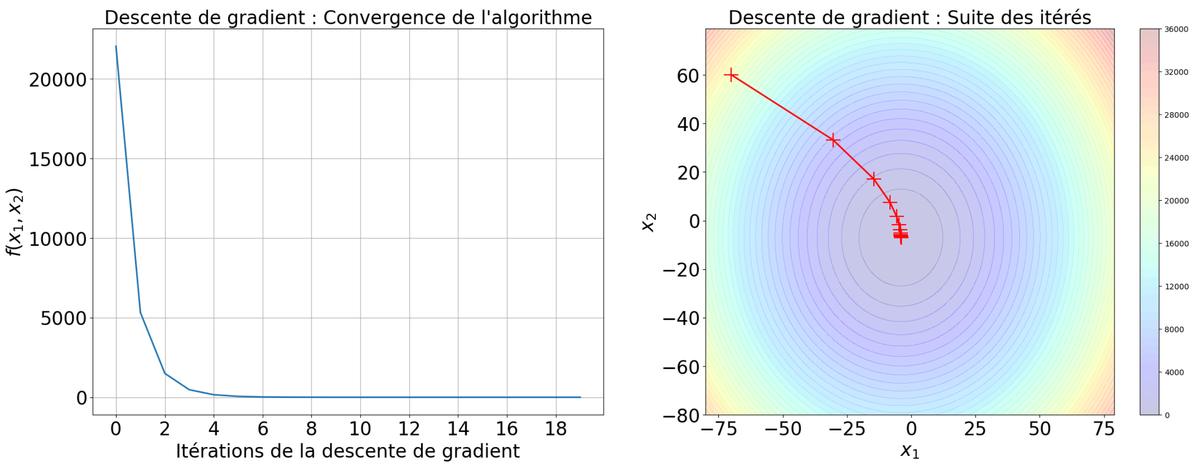
```
# Algorithme de Descente de Gradient :
T = 20
gamma = 0.1
grad = np.zeros(2)
x = np.zeros(2)
x[0] = -70
x[1] = 60

# stock x
stock_x = np.zeros((T,2))
stock_x[0,0] = x[0]
stock_x[0,1] = x[1]
# stock f
stock_f = np.zeros(T)
stock_f[0] = objective(x[0],x[1])
```

```python
for t in range(1,T):
    # Calcul du gradient :
    grad[0] = 6*x[0] + 24
    grad[1] = 4*x[1] + 28
    # Itération du gradient et mise à jour de x :
    x = x - gamma*grad
    # stock x à l'itération t :
    stock_x[t,0] = x[0]
    stock_x[t,1] = x[1]
    # stock f l'itération t :
    stock_f[t] = objective(x[0],x[1])

print('x_bar =', x)


# Plot figure :
figGrad = plt.figure(figsize=(26,9))

ax1 = figGrad.add_subplot(1,2,1)
ax1.plot(np.arange(0, T, 1),stock_f,lw=2)
ax1.set_xlabel("Itérations de la descente de gradient",fontsize=24)
ax1.set_ylabel("$f(x_1,x_2)$",fontsize=24)
ax1.set_title("Descente de gradient : Convergence de l'algorithme",fontsize=
ax1.set_xticks(np.arange(0, T, 2))
ax1.tick_params(axis='x', labelsize=24)
ax1.tick_params(axis='y', labelsize=24)
ax1.grid()

ax2 = figGrad.add_subplot(1,2,2)
out_f = ax2.contourf(xx1, xx2, f_xx1_xx2, alpha=0.2, levels=50, cmap='jet')
ax2.plot(stock_x[:,0],stock_x[:,1],ls='-',lw=2, color='red')
ax2.scatter(stock_x[:,0].tolist(), stock_x[:,1].tolist(), color='red', marke
ax2.set_xlabel("$x_1$",fontsize=24)
ax2.set_ylabel("$x_2$",fontsize=24)
ax2.set_title("Descente de gradient : Suite des itérés",fontsize=24)
ax2.tick_params(axis='x', labelsize=24)
ax2.tick_params(axis='y', labelsize=24)
figGrad.colorbar(out_f)
```

```
x_bar = [-4.00000181 -6.99591729]
```

Out[3]:

```
<matplotlib.colorbar.Colorbar at 0x176c45810>
```



In [ ]:

2. Descente de Gradient pour la Régression Logistique

- Pour chaque observation $i \in \{1, \ldots, n\}$, on rappelle que $Y^{(i)}$ caractérise la variable aléatoire décrivant la classe de l'observation i.
- De plus, pour chaque observation $i \in \{1, \ldots, n\}$, $X^{(i)} = \left[X_1^{(i)}, \ldots, X_d^{(i)}\right]$ caractérise le vecteur aléatoire décrivant le profile de l'observation i, composés de d variables descriptives.

La Régression Logistique binaire ($K = 2$ classes : $Y^{(i)} \in \{0, 1\}$) est un classifieur discriminatif. La règle de décision de la Régression Logistique peut se définir comme :

$$\hat{Y}^{(i)} = \begin{cases} 1 & \text{si } \sigma\left(\beta_0 + \sum_{j=1}^{d} \beta_j X_j^{(i)}\right) \geq 0.5 \\ 0 & \text{sinon.} \end{cases} \tag{4}$$

- Où $\beta = [\beta_0, \ldots, \beta_d] \in \mathbb{R}^{d+1}$ correspond à un vecteur de poids générateur de l'hyperplan séparant la classe 0 de la classe 1
- Et où quelque soit $z \in \mathbb{R},\ \sigma(z) = \frac{1}{1 + \exp(-z)}$.
- Rappelons que la fonction $\sigma\left(\beta_0 + \sum_{j=1}^{d} \beta_j X_j^{(i)}\right)$ cherche à modéliser $\mathbb{P}\left(Y^{(i)} = 1 \mid X^{(i)}\right)$.

Comme illustré dans la figure ci-dessous, l'architecture de la Régression Logistique peut se voir comme un réseau de 1 seul neurone avec comme couche de sortie la fonction logistique (aussi appelée sigmoïde) σ.

title

L'objectif de cet exercice est de construire un algorithme permettant de calibrer la Régression Logistique sur une base d'apprentissage. Nous avons vu dans le cours que pour calibrer les paramètres $\beta \in \mathbb{R}^{d+1}$ de la Régression Logistique, cela est équivalent à calculer les paramètres $\bar{\beta} \in \mathbb{R}^{d+1}$ minimisant

$$\mathcal{L}(\beta) = \sum_{i=1}^{n} \log\left[1 + \mathrm{e}^{\left(\beta_0 + \sum_{j=1}^{d} \beta_j x_j^{(i)}\right)}\right] - y^{(i)}\left(\beta_0 + \sum_{j=1}^{d} \beta_j x_j^{(i)}\right).$$

Pour ce faire, nous pouvons utiliser l'algorithme de descente de gradient où

$$\nabla \mathcal{L}(\beta) = \begin{bmatrix} \frac{\partial \mathcal{L}(\beta)}{\partial \beta_0} \\ \vdots \\ \frac{\partial \mathcal{L}(\beta)}{\partial \beta_j} \\ \vdots \\ \frac{\partial \mathcal{L}(\beta)}{\partial \beta_d} \end{bmatrix} \quad \text{où} \quad \begin{cases} \frac{\partial \mathcal{L}(\beta)}{\partial \beta_0} = \sum_{i=1}^{n} \sigma\left(\beta_0 + \sum_{j=1}^{d} \beta_j x_j^{(i)}\right) - y^{(i)} \\ \\ \text{et où } \ \forall j \in \{1, \ldots, d\}, \\ \\ \frac{\partial \mathcal{L}(\beta)}{\partial \beta_j} = \sum_{i=1}^{n} \left[\sigma\left(\beta_0 + \sum_{j=1}^{d} \beta_j x_j^{(i)}\right) - y^{(i)}\right] x_j^{(i)} \end{cases} \tag{5}$$

Question 2.1. Implémenter la fonction logistique $\sigma : \mathbb{R} \rightarrow (0, 1)$ prenant en entrée une valeur quelconque $z \in \mathbb{R}$.

In [4]:

```
# RÉPONSE À LA QUESTION 2.1 :
```

```python
def sigmoid_logistic(z):
    return 1/(1 + np.exp(-z))
```

Question 2.2. Implémenter une fonction permettant de prédire la classe $\hat{Y}^{(i)} \in \{0,1\}$ à partir d'un vecteur de poids $\beta \in \mathbb{R}^{d+1}$ donné.

In [5]:
```python
# RÉPONSE À LA QUESTION 2.2 :

def predict_LR(X, beta):

    n = X.shape[0]
    d = X.shape[1]
    Yhat = np.zeros(n)
    ProbHat = np.zeros(n)

    for i in range(n):
        Ai = np.concatenate([np.ones(1), X[i,:]])
        Zi = np.dot(beta,Ai)
        sigma_i = sigmoid_logistic(Zi)
        ProbHat[i] = sigma_i
        if sigma_i >= 0.5:
            Yhat[i] = 1

    return Yhat, ProbHat
```

Question 2.3. Implémenter une fonction permettant de calculer $\mathcal{L}(\beta)$ pour un vecteur $\beta \in \mathbb{R}^{d+1}$ donné.

In [6]:
```python
# RÉPONSE À LA QUESTION 2.3 :

def function_objective(XTrain, YRTrain, beta):

    n = XTrain.shape[0]
    d = XTrain.shape[1]

    L_beta = 0

    for i in range(n):
        Ai = np.concatenate([np.ones(1), XTrain[i,:]])
        Zi = np.dot(beta,Ai)
        L_beta = L_beta + np.log(1+np.exp(Zi)) - YRTrain[i]*Zi

    return L_beta
```

Question 2.4. Implémenter une fonction prenant en entrée base d'apprentissage (XTrain, YRTrain) ainsi que des paramètres $\beta = [\beta_0, \ldots, \beta_d] \in \mathbb{R}^{d+1}$ et calculant $\nabla\mathcal{L}(\beta)$.

In [7]:
```python
# RÉPONSE À LA QUESTION 2.4 :

def compute_grad_LR(XTrain, YRTrain, beta):

    n = XTrain.shape[0]
    d = XTrain.shape[1]

    grad = np.zeros(d+1)

    # for beta_0 :
    for i in range(n):
        Ai = np.concatenate([np.ones(1), XTrain[i,:]])
```

```
        Zi = np.dot(beta,Ai)
        grad[0] = grad[0] + (sigmoid_logistic(Zi)-YRTrain[i])

    # for beta_j, j = 1,...,d :
    for j in range(1,d+1):
        for i in range(n):
            Ai = np.concatenate([np.ones(1), XTrain[i,:]])
            Zi = np.dot(beta,Ai)
            grad[j] = grad[j] + (sigmoid_logistic(Zi)-YRTrain[i])*XTrain[i,

    return grad
```

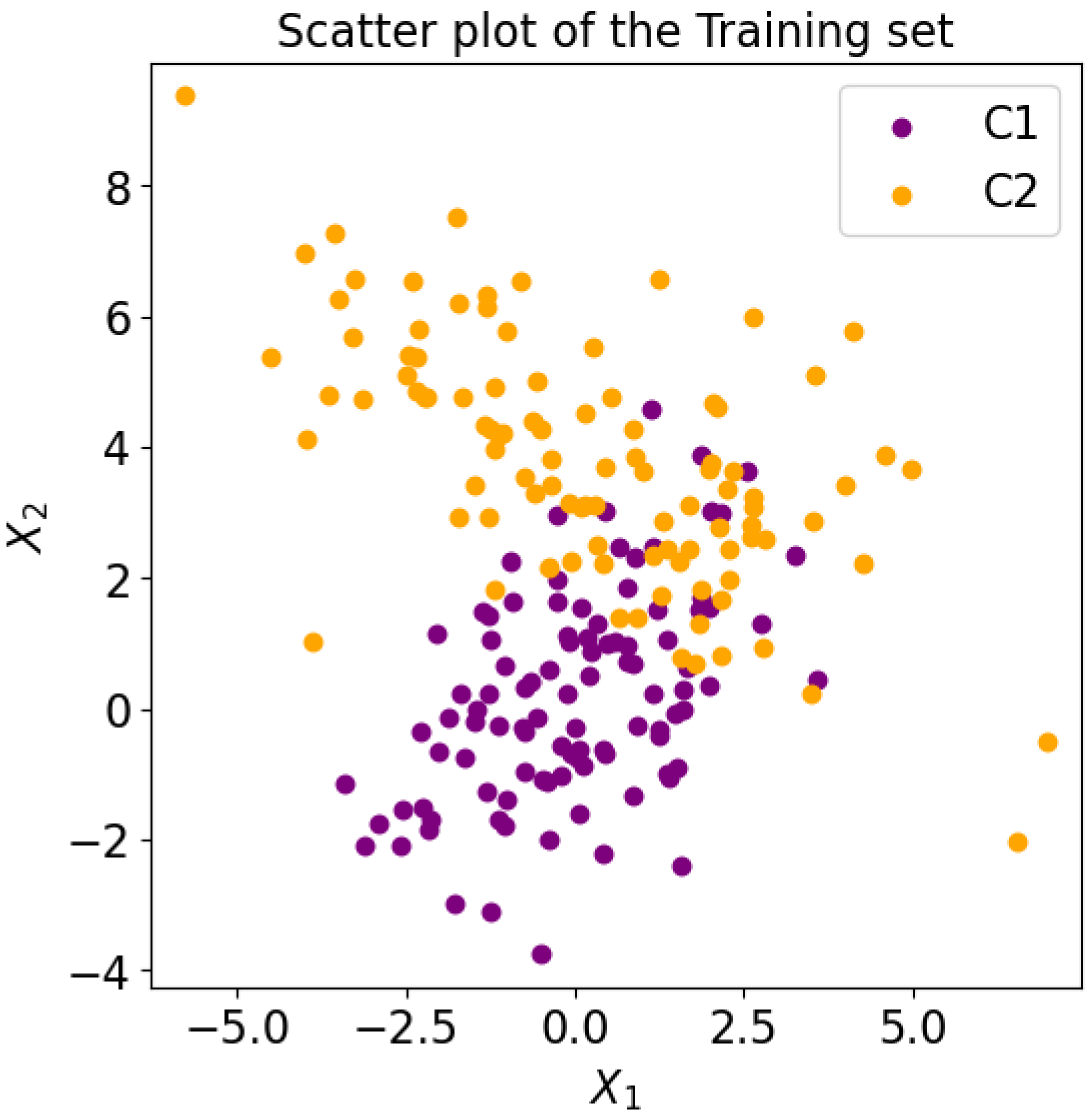
Question 2.5. Implémenter une fonction permettant de calibrer la Regréssion logistique sur une base d'apprentissage (XTrain, YRTrain) à partir d'un algorithme de descente de gradient. Pour chaque itération $t \in \{1, \ldots, T\}$ de cet algorithme, nous stockerons les valeurs de l'accuracy de la Régression Logistique ainsi que les valeurs de $\mathcal{L}(\beta)$.

In [8]:
```
# RÉPONSE À LA QUESTION 2.5 :

def calibration_LR(XTrain, YRTrain, T, gamma):

    n = XTrain.shape[0]
    d = XTrain.shape[1]

    stock_L_beta = np.zeros(T)
    stock_accuracy = np.zeros(T)
    beta = np.zeros(d+1)

    for t in range(T):

        grad_LR = compute_grad_LR(XTrain, YRTrain, beta)
        beta = beta - gamma*grad_LR

        Yhat, ProbHat = predict_LR(XTrain, beta)
        stock_accuracy[t] = np.sum(Yhat==YRTrain)/n
        stock_L_beta[t] = function_objective(XTrain, YRTrain, beta)


    return beta, stock_L_beta, stock_accuracy
```

Question 2.6. Calibrer la Régression Logistique sur la base de données simulée ci-dessous et afficher la convergence de l'algorithme de descente de gradient. On pourra par exemple considérer $T = 300$ itérations avec comme pas du gradient $\gamma = 0.003$.

In [9]:
```
np.random.seed(407)

n1 = 100
n2 = 100
n = n1+n2
mu1 = [0, 0]
mu2 = [0, 4]
Cov1 = np.array([[2, 1], [1, 3]])
Cov2 = np.array([[6, -3], [-3, 3.5]])
rng = np.random.default_rng(0)
XTrain = np.r_[rng.multivariate_normal(mu1, Cov1, size=n1), rng.multivariate
YRTrain = np.r_[np.zeros((n1,1)), np.ones((n2,1))].ravel()

X1_min, X1_max = XTrain[:, 0].min() - 0.5, XTrain[:, 0].max() + 0.5
X2_min, X2_max = XTrain[:, 1].min() - 0.5, XTrain[:, 1].max() + 0.5

figScatter = plt.figure(figsize=(6,6))
```

```python
ax1 = figScatter.add_subplot(1,1,1)
ax1.scatter(XTrain[np.where(YRTrain==0),0], XTrain[np.where(YRTrain==0),1],
ax1.scatter(XTrain[np.where(YRTrain==1),0], XTrain[np.where(YRTrain==1),1],
ax1.legend(fontsize=16, loc='upper right')
ax1.set_xlabel("$X_1$",fontsize=16)
ax1.set_ylabel("$X_2$",fontsize=16)
ax1.set_title("Scatter plot of the Training set",fontsize=16)
ax1.set_xlim([X1_min,X1_max])
ax1.set_ylim([X2_min,X2_max])
ax1.tick_params(axis='x', labelsize=16)
ax1.tick_params(axis='y', labelsize=16)
```



In [10]:

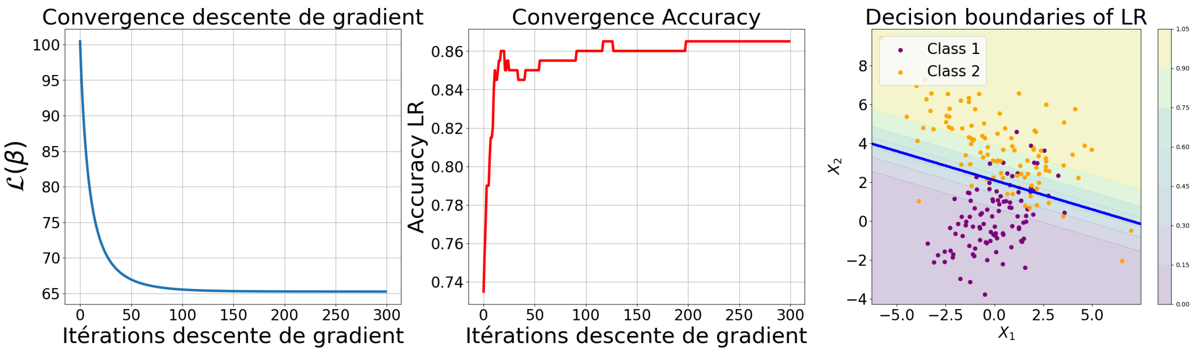
```python
# RÉPONSE À LA QUESTION 2.6 :
T = 300
gamma = 0.003
beta, stock_L_beta, stock_accuracy = calibration_LR(XTrain, YRTrain, T, gamr
print('beta_LR =', beta)

# Plot figure :
figConvLR = plt.figure(figsize=(33,8))

ax1 = figConvLR.add_subplot(1,3,1)
ax1.plot(np.arange(0, T, 1), stock_L_beta, lw=4)
ax1.set_xlabel("Itérations descente de gradient",fontsize=35)
ax1.set_ylabel(r"$\mathcal{L}(\beta)$",fontsize=40)
ax1.set_title("Convergence descente de gradient",fontsize=35)
ax1.tick_params(axis='x', labelsize=24)
ax1.tick_params(axis='y', labelsize=24)
```

```
ax1.grid()

ax2 = figConvLR.add_subplot(1,3,2)
ax2.plot(np.arange(0, T, 1), stock_accuracy, lw=4, color='red')
ax2.set_xlabel("Itérations descente de gradient",fontsize=35)
ax2.set_ylabel("Accuracy LR",fontsize=35)
ax2.set_title("Convergence Accuracy", fontsize=35)
ax2.tick_params(axis='x', labelsize=24)
ax2.tick_params(axis='y', labelsize=24)
ax2.grid()

ax3 = figConvLR.add_subplot(1,3,3)
nn = 500
xx1, xx2 = np.meshgrid(np.linspace(X1_min, X1_max, nn), np.linspace(X2_min,
Yhat, ProbHat = predict_LR(np.c_[xx1.ravel(), xx2.ravel()], beta)
out_prob = ax3.contourf(xx1, xx2, ProbHat.reshape(xx1.shape), alpha=0.2)
out = ax3.contour(xx1, xx2, Yhat.reshape(xx1.shape), [0.5], linewidths=4.0,
ax3.scatter(XTrain[(np.where(YRTrain==0)),0].tolist(), XTrain[(np.where(YRT
ax3.scatter(XTrain[(np.where(YRTrain==1)),0].tolist(), XTrain[(np.where(YRT
ax3.legend(fontsize=24, loc='upper left')
ax3.set_xlabel("$X_1$",fontsize=24)
ax3.set_ylabel("$X_2$",fontsize=24)
ax3.set_title("Decision boundaries of LR",fontsize=35)
ax3.tick_params(axis='x', labelsize=24)
ax3.tick_params(axis='y', labelsize=24)
figConvLR.colorbar(out_prob)
```

```
beta_LR = [-2.57110235  0.36734659  1.22583538]
```

Out[10]:

```
<matplotlib.colorbar.Colorbar at 0x175cd2e90>
```



In [11]:

```
#figConvLR.savefig('figConvLR.pdf')
```

In [ ]: