SD204 : GLM

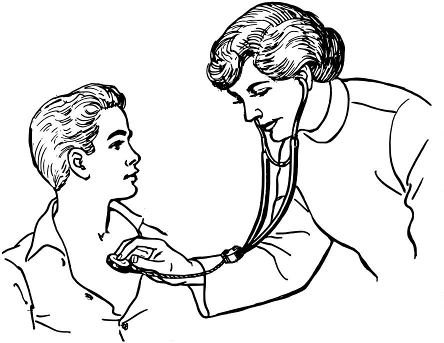
Joseph Salmon
http://josephsalmon.eu
Télécom Paristech, Institut Mines-Télécom

Outline

Table of Contents

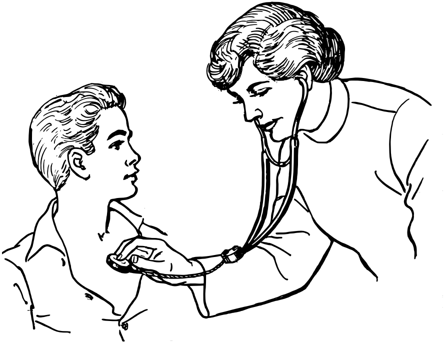
La classification : cadre binaire

Diagnostiquer des patients :



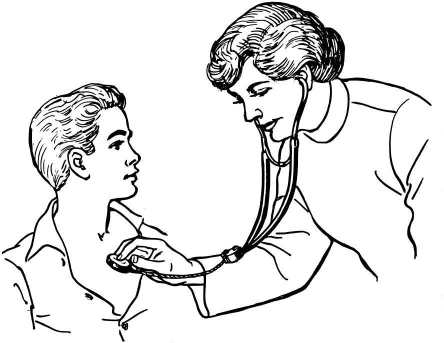
La classification : cadre binaire

Diagnostiquer des patients : malades



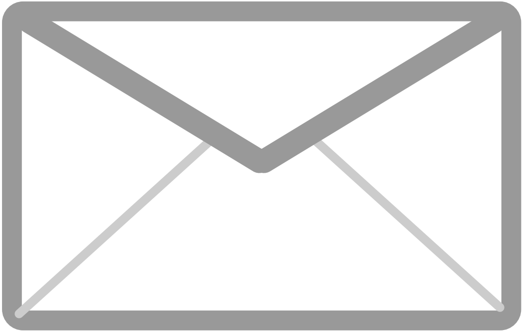
La classification : cadre binaire

Diagnostiquer des patients : ~~malades~~ sains



La classification : cadre binaire

Classer des emails :



La classification : cadre binaire

Classer des emails : pourriels (spams)

La classification : cadre binaire

Classer des emails : ~~pourriels (spams)~~ normaux

La classification : cadre binaire

Classer des clients :

La classification : cadre binaire

Classer des clients : mauvais payeurs/fraudeurs

La classification : cadre binaire

Classer des clients : ~~mauvais payeurs/fraudeurs~~ bon payeurs

La classification : cadre binaire

Classer les surfeurs :

La classification : cadre binaire

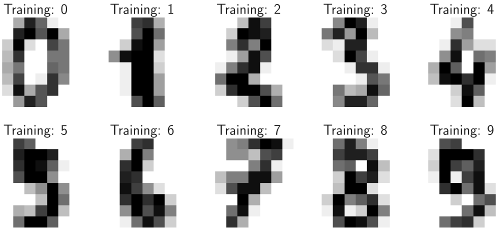
Classer les surfeurs : futurs acheteurs

La classification : cadre binaire

Classer les surfeurs : ~~futurs acheteurs~~ ou pas...

La classification : cadre multi-classe

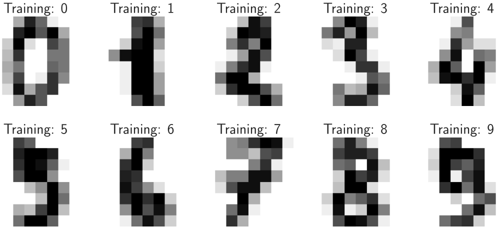
- Classer des chiffres numérisés (*e.g.*,codes postaux de courriers 80's/90's)



- Classer des objets dans des images (http://image-net.org/, 2010's)

La classification : cadre multi-classe

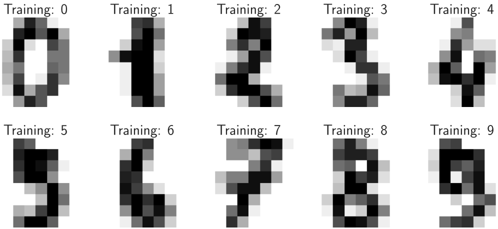
- Classer des chiffres numérisés (*e.g.*,codes postaux de courriers 80's/90's)



- Classer des objets dans des images (`http://image-net.org/`, 2010's)
- Classer des textes par thème (*e.g.*,`RCV20`)

La classification : cadre multi-classe

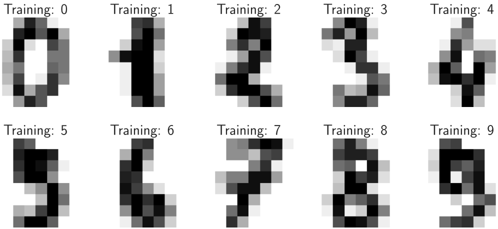
- Classer des chiffres numérisés (*e.g.*,codes postaux de courriers 80's/90's)



- Classer des objets dans des images (http://image-net.org/, 2010's)
- Classer des textes par thème (*e.g.*,`RCV20`)
- Classer des espèces animales/végétales (*e.g.*,`iris`)

La classification : cadre multi-classe

- Classer des chiffres numérisés (*e.g.*,codes postaux de courriers 80's/90's)



- Classer des objets dans des images (`http://image-net.org/`, 2010's)
- Classer des textes par thème (*e.g.*,`RCV20`)
- Classer des espèces animales/végétales (*e.g.*,`iris`)

Modèle de classification

K représente le nombre de classes ; on suppose que les classes sont indexées par l'ensemble $\llbracket 0, K-1 \rrbracket := \{0, \ldots, K-1\}$

Observations : $\mathbf{y} \in \llbracket 0, K-1 \rrbracket^n$

Variables explicatives : $X = [x_1, \ldots, x_n]^\top \in \mathbb{R}^{n \times p}$, n observations, p variables

Classifieur : c'est un estimateur $h_{\boldsymbol{\theta}}$: $\begin{cases} \mathbb{R}^p & \mapsto \llbracket 0, K-1 \rrbracket \\ \mathbf{x} & \to h_{\boldsymbol{\theta}}(\mathbf{x}) \end{cases}$

Objectif : minimiser l'erreur $\boxed{\mathbb{P}(y \neq h_{\boldsymbol{\theta}}(\mathbf{x})) = \mathbb{E}(\mathbb{1}_{y \neq h_{\boldsymbol{\theta}}(\mathbf{x})})}$, équivalent à maximiser la précision (🇬🇧 : *accuracy*) : $\mathbb{P}(y = h_{\boldsymbol{\theta}}(\mathbf{x}))$

Table of Contents

Prédiction linéaire et indicatrices

Tentative : utiliser un outil de prédiction linéaire pour faire de la classification

Simple, mais ne marche pas (on va le voir quand même pour s'en convaincre)

Traitement par régression linéaire brute

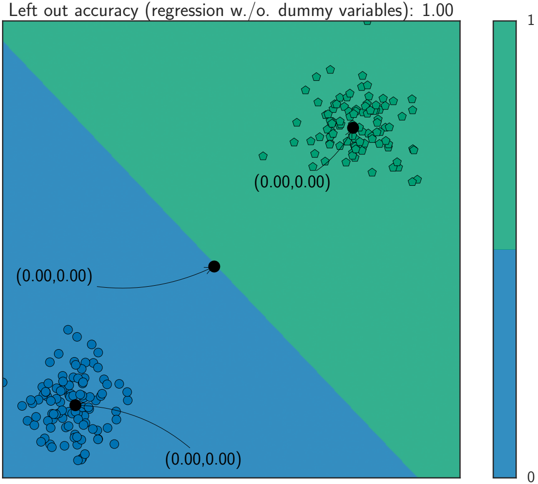
Idée naïve (I) : choisir comme classifieur $h_{\boldsymbol{\theta}}(\mathbf{x}) \approx \langle \mathbf{x}, \boldsymbol{\theta} \rangle$ (*i.e.*,faire le choix $\mathbf{y} \approx X\boldsymbol{\theta}$!), ou plus exactement, la classe la plus proche

$$\hat{\boldsymbol{\theta}} \in \operatorname*{arg\,min}_{\boldsymbol{\theta} \in \mathbb{R}^p} \|\mathbf{y} - X\boldsymbol{\theta}\|^2$$

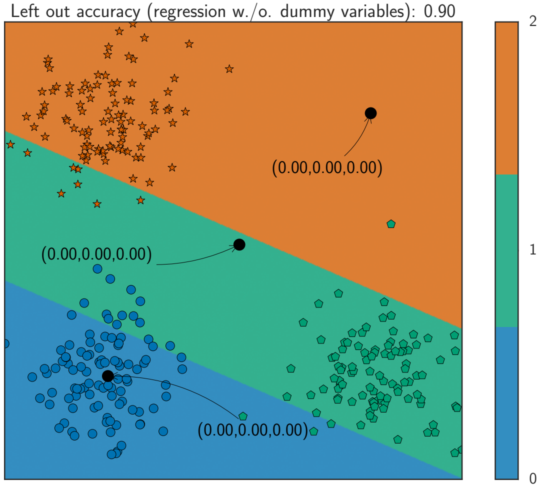
$$h_{\hat{\boldsymbol{\theta}}}(\mathbf{x}) = \operatorname*{arg\,min}_{k \in [\![0, K-1]\!]} \left| k - \langle \mathbf{x}, \hat{\boldsymbol{\theta}} \rangle \right|$$

Numériquement : on utilise un solveur de moindres carrés

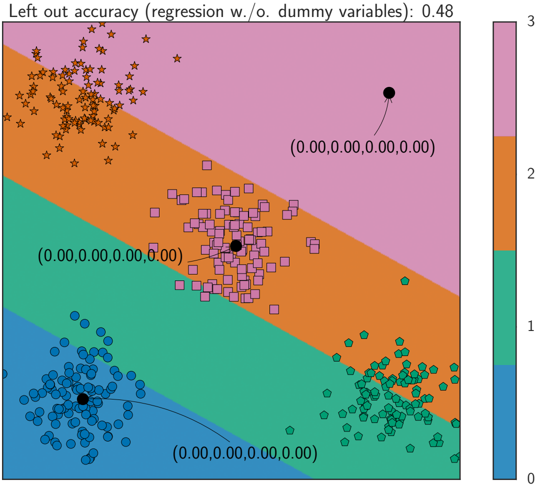
Un exemple avec deux classes



Un exemple avec trois classes



Un exemple avec quatre classes



Prédiction linéaire et indicatrices

Idée naïve : utiliser une méthode de régression pour estimer $\mathbb{P}(y=0|\mathbf{x})$, $\mathbb{P}(y=1|\mathbf{x}), \ldots, \mathbb{P}(y=K-1|\mathbf{x})$ et choisir la classe qui donne la plus grande probabilité.

Rem:$\mathbb{P}(y=k|\mathbf{x}) = \mathbb{E}(Z^{(k)}|\mathbf{x})$ et l'on définit

$$Z^{(k)} \in \mathbb{R}^n, \quad Z_i^{(k)} = \mathbb{1}_{y_i=k} = \begin{cases} 1, & \text{si } y_i = k, \\ 0, & \text{sinon.} \end{cases}$$

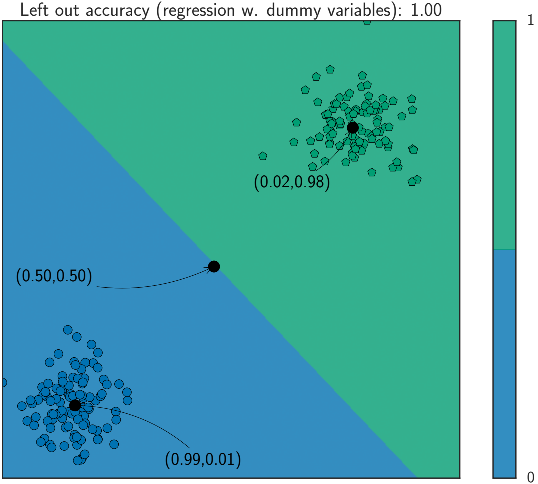
Moindres carrés : $\boxed{\hat{\boldsymbol{\theta}}^{(k)} = \mathop{\arg\min}_{\boldsymbol{\theta}\in\mathbb{R}^p} \|X\boldsymbol{\theta} - Z^{(k)}\|^2}$

Le classifieur (choisit la probabilité estimée la plus grande) :

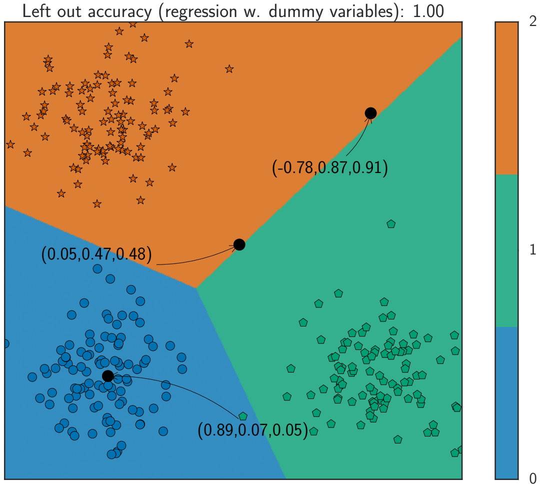
$$h_{\hat{\boldsymbol{\theta}}}(\mathbf{x}) = \mathop{\arg\max}_{k\in[\![0,K-1]\!]} \langle \mathbf{x}, \hat{\boldsymbol{\theta}}^{(k)} \rangle$$

Rem:on peut utiliser un solveur de moindres carrés multi-tâches

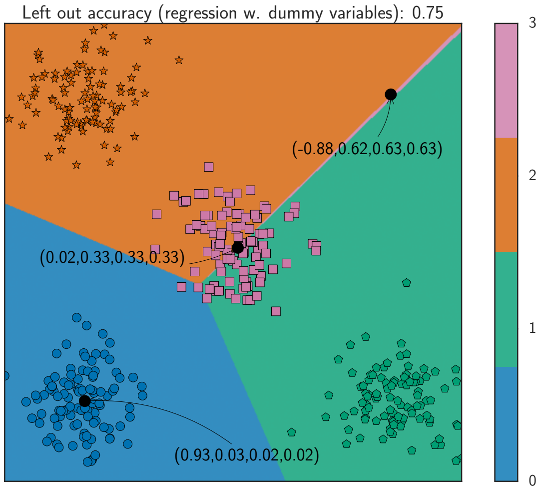
Un exemple avec deux classes



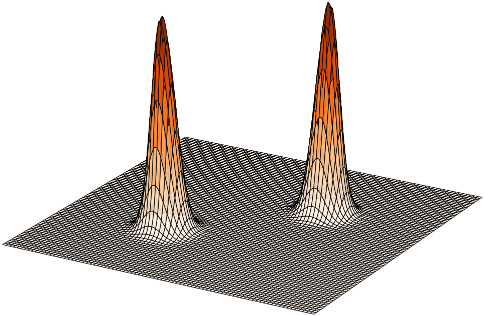
Un exemple avec trois classes



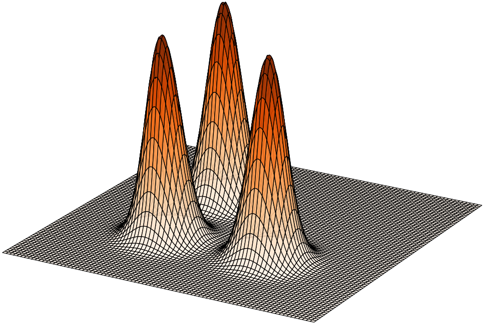
Un exemple avec quatre classes



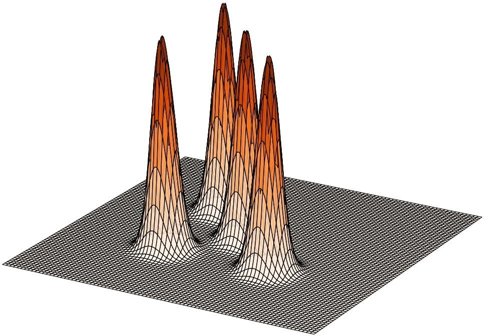
Distribution sous-jacente



Distribution sous-jacente



Distribution sous-jacente



Avantages / Inconvénients : prédiction linéaire et indicatrice

Avantages

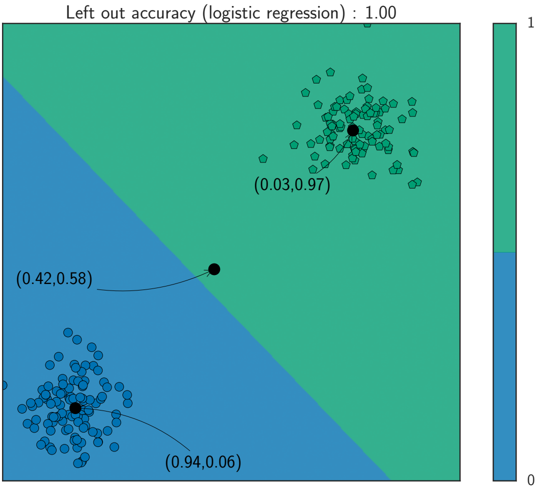
- Simple : sans hypothèse de modèle (encore que)
- Implémentable facilement avec un solveur de moindres carrés
- $\sum_{k=0}^{K-1}\langle \mathbf{x}, \hat{\boldsymbol{\theta}}^{(k)} \rangle = 1$ (si X contient la colonne constante)

Inconvénients

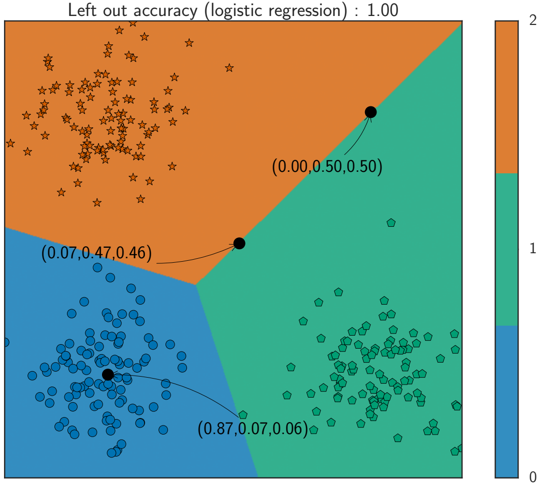
- les estimations $\langle \mathbf{x}, \hat{\boldsymbol{\theta}}^{(k)} \rangle$ de $\mathbb{P}(y = k|\mathbf{x})$ peuvent être négatives
- effet masque
- ne pas utiliser (sauf peut-être en binaire)

Table of Contents

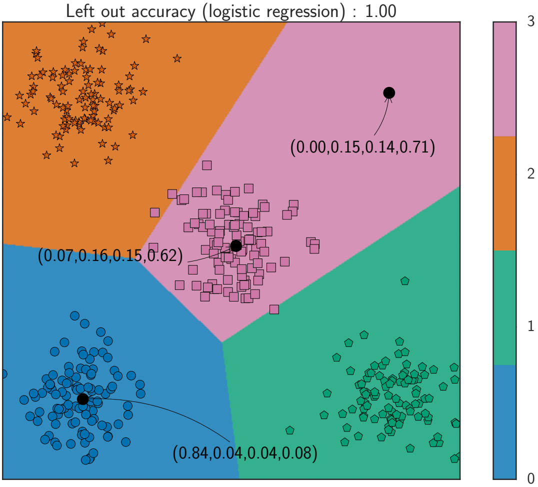
Un exemple avec deux classes



Un exemple avec trois classes



Un exemple avec quatre classes



L'approche gaussienne

Supposons que les densités des observations des classes 0 et 1 sont gaussiennes isotropes (de même variance) :

$$\varphi_{\mu_0,\sigma}(\mathbf{x}) = \frac{1}{(2\pi)^{p/2}\sigma^{n/2}} \exp\left(-\frac{\|\mathbf{x}-\mu_0\|^2}{2\sigma^2}\right)$$

$$\varphi_{\mu_1,\sigma}(\mathbf{x}) = \frac{1}{(2\pi)^{p/2}\sigma^{n/2}} \exp\left(-\frac{\|\mathbf{x}-\mu_1\|^2}{2\sigma^2}\right)$$

La règle de Bayes donne alors : $\mathbb{P}(y=k|\mathbf{x}) = \frac{\mathbb{P}(\mathbf{x}|y=k)\mathbb{P}(y=k)}{\mathbb{P}(\mathbf{x})}$, puis

$$\log\left(\frac{\mathbb{P}(y=0|\mathbf{x})}{\mathbb{P}(y=1|\mathbf{x})}\right) = \theta_0 + \langle \boldsymbol{\theta}, \mathbf{x} \rangle$$

Exo: donner θ_0 et $\boldsymbol{\theta}$ en fonction de μ_1, μ_0, σ et $\pi_0 = \mathbb{P}(y=0)$

Régression logistique : cas binaire

Ainsi, il est raisonnable de modéliser le log-ratio (des probabilités conditionnelles par classe) linéairement

$$\log\left(\frac{\mathbb{P}(y=0|\mathbf{x})}{\mathbb{P}(y=1|\mathbf{x})}\right) = \boldsymbol{\theta}^\top \mathbf{x}, \quad \text{avec } \boldsymbol{\theta} \in \mathbb{R}^p$$

Rem:constantes incorporées si besoin dans les variables explicatives

Sous cette hypothèse la règle de classification est simplement :

$$\begin{cases} \text{si } \langle \boldsymbol{\theta}, \mathbf{x} \rangle \leqslant 0, \text{on étiquette } 1 \text{ au point } \mathbf{x} \\ \text{si } \langle \boldsymbol{\theta}, \mathbf{x} \rangle > 0, \text{on étiquette } 0 \text{ au point } \mathbf{x} \end{cases}$$

Rem:en binaire il peut être plus simple de modéliser les classes par des -1 (au lieu des 1) et des $+1$ (au lieu de 0), le classifieur étant alors $h_{\boldsymbol{\theta}}(\mathbf{x}) = \operatorname{sign}(\langle \boldsymbol{\theta}, \mathbf{x} \rangle)$, et non $h_{\boldsymbol{\theta}}(\mathbf{x}) = -(1 + \operatorname{sign}(\langle \boldsymbol{\theta}, \mathbf{x} \rangle))/2$

Régression logistique : estimation de probabilités

On peut alors estimer les probabilités conditionnelles facilement :

$$\mathbb{P}(y = 0|\mathbf{x}) = \frac{\exp\left(\langle \boldsymbol{\theta}, \mathbf{x} \rangle\right)}{1 + \exp\left(\langle \boldsymbol{\theta}, \mathbf{x} \rangle\right)}$$

$$\mathbb{P}(y = 1|\mathbf{x}) = \frac{1}{1 + \exp\left(\langle \boldsymbol{\theta}, \mathbf{x} \rangle\right)}$$

Ainsi connaissant une estimation de $\hat{\boldsymbol{\theta}}$ de $\boldsymbol{\theta}$ on pourra proposer comme estimation des probabilités :

$$\widehat{\mathbb{P}}(y = 0|\mathbf{x}) = \frac{\exp\left(\langle \hat{\boldsymbol{\theta}}, \mathbf{x} \rangle\right)}{1 + \exp\left(\langle \hat{\boldsymbol{\theta}}, \mathbf{x} \rangle\right)}$$

$$\widehat{\mathbb{P}}(y = 1|\mathbf{x}) = \frac{1}{1 + \exp\left(\langle \hat{\boldsymbol{\theta}}, \mathbf{x} \rangle\right)}$$

Régression logistique et vraisemblance

Maximisation de la (log-)vraisemblance ($\ell(\boldsymbol{\theta})$)

$$\begin{aligned}\ell(\boldsymbol{\theta}) &= \sum_{i=1}^{n} \log(\mathbb{P}(y = y_i | \mathbf{x} = x_i, \boldsymbol{\theta})) \\ &= \sum_{i=1}^{n} \sum_{k=0}^{1} \mathbb{1}_{\{y_i = k\}} \log(\mathbb{P}(y = k | \mathbf{x} = x_i, \boldsymbol{\theta}))\end{aligned}$$

On résout : $\hat{\boldsymbol{\theta}} \in \underset{\boldsymbol{\theta} \in \mathbb{R}^p}{\arg\max}\, \ell(\boldsymbol{\theta}) \quad \left(= \underset{\boldsymbol{\theta} \in \mathbb{R}^p}{\arg\min} -\ell(\boldsymbol{\theta}) \right)$

Exo: montrer qu'avec $u_i = (2\mathbb{1}_{\{y_i=0\}} - 1)$

$$\begin{aligned}\ell(\boldsymbol{\theta}) &= \sum_{i=1}^{n} \left(\mathbb{1}_{\{y_i=0\}} \langle \boldsymbol{\theta}, x_i \rangle - \log[1 + \exp(\langle \boldsymbol{\theta}, x_i \rangle)] \right) \\ &= \sum_{i=1}^{n} \left(\log[1 + \exp(-u_i \langle \boldsymbol{\theta}, x_i \rangle)] \right)\end{aligned}$$

Interprétation des coefficients

Pour un vecteur $\mathbf{x} \in \mathbb{R}^p$, et une variable $j \in [\![1, p]\!]$, augmenter $\mathbf{x}_j$ d'1 unité (en gardant toutes les autres composantes fixes)

- augmente le log-ratio de la classe 0 d'un facteur additif $\hat{\theta}_j$
- augmente la probabilité de la classe 0 d'un facteur multiplicatif $\exp(\hat{\theta}_j)$

<u>Rem</u>:en pratique il n'est pas toujours possible de ne faire varier qu'une seule variable

Régression logistique et méthode Newton

- Hessienne calculable : on peut appliquer la méthode de Newton
- Approche descente par coordonnées envisageable aussi (notamment si l'on régularise)

Pour les détails techniques, calculs de la Hessienne etc. Hastie *et al.* (2009, page 120)
http://www-stat.stanford.edu/~tibs/ElemStatLearn/

Détour : de deux à plusieurs classes

On peut passer du cadre binaire au multi-classe pour toute méthode, *e.g.*,il suffit de tester :

- "un contre tous" (en : **One-vs.-rest/all**) : créer un classifieur par classe, et produire un score (par exemple une probabilité). Prédire la classe de score maximum
  Coût : K classifieurs
- "un contre un" (en : **One-vs.-one**) : calculer un classifieur pour toutes les $K(K-1)/2$ paires. Prédire la classe qui gagne le plus de "duels"
  Coût : $K(K-1)/2$ classifieurs

Rem:dans `sklearn` la descente par coordonnée avec LIBLINEAR
http://www.csie.ntu.edu.tw/~cjlin/liblinear/
utilise"one-vs-rest"

Détour : de deux à plusieurs classes

On peut passer du cadre binaire au multi-classe pour toute méthode, *e.g.*,il suffit de tester :

- "un contre tous" (en : **One-vs.-rest/all**) : créer un classifieur par classe, et produire un score (par exemple une probabilité). Prédire la classe de score maximum
  Coût : K classifieurs
- "un contre un" (en : **One-vs.-one**) : calculer un classifieur pour toutes les $K(K-1)/2$ paires. Prédire la classe qui gagne le ~~plus de "duels"~~ championnat
  Coût : $K(K-1)/2$ classifieurs

Rem:dans `sklearn` la descente par coordonnée avec LIBLINEAR http://www.csie.ntu.edu.tw/~cjlin/liblinear/ utilise"one-vs-rest"

Régression logistique (I)

De nouveau, on modélise les probabilités conditionnelles des classes, ou plutôt leur log-ratio, par des quantités linéaires :

$$\log\left(\frac{\mathbb{P}(y=k\,|\mathbf{x})}{\mathbb{P}(y=K-1|\mathbf{x})}\right)=\langle\boldsymbol{\theta}_k,\mathbf{x}\rangle,\text{avec } \forall k\in[\![0,K-2]\!],\boldsymbol{\theta}_k\in\mathbb{R}^p$$

Paramètre globale : $\Theta=[\boldsymbol{\theta}_0,\ldots,\boldsymbol{\theta}_{K-2},\underbrace{\boldsymbol{\theta}_{K-1}}_{=0}]\in\mathbb{R}^{p\times K}$

Rem:constante incorporée si besoin dans les variables explicatives

Sous cette hypothèse les séparatrices inter-classes sont **linéaires** : la bascule entre deux classes a lieu le long d'hyperplans. On teste par exemple k et k' ainsi

$$\begin{cases}\text{si } \langle\boldsymbol{\theta}_k-\boldsymbol{\theta}_{k'},\mathbf{x}\rangle\geqslant 0, & \text{on préfère } k \text{ à } k' \text{ au point } \mathbf{x}\\ \text{si } \langle\boldsymbol{\theta}_k-\boldsymbol{\theta}_{k'},\mathbf{x}\rangle< 0, & \text{on préfère } k' \text{ à } k \text{ au point } \mathbf{x}\end{cases}$$

Régression logistique (II)

On peut alors estimer les probabilités conditionnelles facilement :

$$\text{Pour } k = 0, \dots, K-2 : \mathbb{P}(y = k|\mathbf{x}) = \frac{\exp\left(\langle \boldsymbol{\theta}_k, \mathbf{x} \rangle\right)}{1 + \sum_{l=0}^{K-2} \exp\left(\langle \boldsymbol{\theta}_l, \mathbf{x} \rangle\right)}$$

$$\text{Pour } k = K-1 : \mathbb{P}(y = K-1|\mathbf{x}) = \frac{1}{1 + \sum_{l=0}^{K-2} \exp\left(\langle \boldsymbol{\theta}_l, \mathbf{x} \rangle\right)}$$

Règle de classification : choisir la classe qui a la plus probable

$$h_\Theta(\mathbf{x}) = \underset{k \in [\![0, K-1]\!]}{\arg\max}\, \widehat{\mathbb{P}}(y = k|\mathbf{x})$$

Rem:numériquement le problème devient plus dur (à écrire et à traiter) qu'en binaire, *cf.* Hastie *et al.* (2009)

Régression logistique et vraisemblance

Formulation possible : on note $\Theta = [\boldsymbol{\theta}_0, \ldots, \boldsymbol{\theta}_{K-1}] \in \mathbb{R}^{p\times K}$

$$\text{Pour } k \in [\![0, K-1]\!] : \mathbb{P}(y = k|\mathbf{x}) = \frac{\exp\left(\langle \boldsymbol{\theta}_k, \mathbf{x}\rangle\right)}{\sum_{l=0}^{K-1} \exp\left(\langle \boldsymbol{\theta}_l, \mathbf{x}\rangle\right)}$$

Rem: on retrouve le précédent modèle en prenant $\boldsymbol{\theta}_{K-1} = 0$

Maximisation de la (log-)vraisemblance ($\ell(\boldsymbol{\theta})$)

$$\begin{aligned}\ell(\Theta) &= \sum_{i=1}^{n}\sum_{k=0}^{K-1} \mathbb{1}_{\{y_i=k\}} \log(\mathbb{P}(y = k|\mathbf{x} = x_i, \Theta)) \\ &= \sum_{i=1}^{n}\sum_{k=0}^{K-1} \mathbb{1}_{\{y_i=k\}} \langle \boldsymbol{\theta}_k, x_i\rangle - \log\left(\sum_{k=0}^{K-1} \exp(\langle \boldsymbol{\theta}_k, x_i\rangle)\right)\end{aligned}$$

On résout : $\quad \hat{\Theta} \in \underset{\Theta\in\mathbb{R}^{p\times K}}{\arg\max}\, \ell(\Theta) \quad \left(= \underset{\Theta\in\mathbb{R}^{p\times K}}{\arg\min} -\ell(\boldsymbol{\theta})\right)$

Numériques / astuces

- Régularisation avec une pénalisation ℓ_1, ℓ_2^2 (on travaille avec l'opposée de la log-vraisemblance pour avoir un problème convexe) :

$$\underset{\Theta \in \mathbb{R}^{p \times K}}{\arg\min}(-\ell(\Theta) + \mathrm{pen}(\Theta))$$

avec $$-\ell(\Theta) = \sum_{i=1}^{n} \log \Big(\sum_{k=0}^{K-1} \exp(\langle \boldsymbol{\theta}_k, x_i \rangle) \Big) - \sum_{k=0}^{K-1} \mathbb{1}_{\{y_i = k\}} \langle \boldsymbol{\theta}_k, x_i \rangle$$

- Gestion atypique de la constante pour les matrices sparses
- Algorithmes (LBFGS, SAG, Prox-Newton, etc.)

Avantages / Inconvénients : régression logistique

Avantages

- connu pour avoir des probabilités estimées bonnes
- séparations inter-classes linéaires

Inconvénients

- classification binaire plus facile
- problème d'optimisation plus complexe (temps de calcul)
- parfois géré par la technique du "un contre tous" et non par le cas logistique multinomial (surtout si K est petit)

Table of Contents

Formulation GLM

Ce sont des modèles de la forme :

$$\mu = \mathbb{E}(y|\mathbf{x}) = f^{-1}(\langle \mathbf{x}, \boldsymbol{\theta} \rangle)$$

c'est-à-dire qu'on modélise :

$$\mathbf{y} \approx f^{-1}(X\boldsymbol{\theta})$$

On appelle fonction de lien la fonction f (et on note $g = f^{-1}$ son inverse)

Quelques modèles classiques

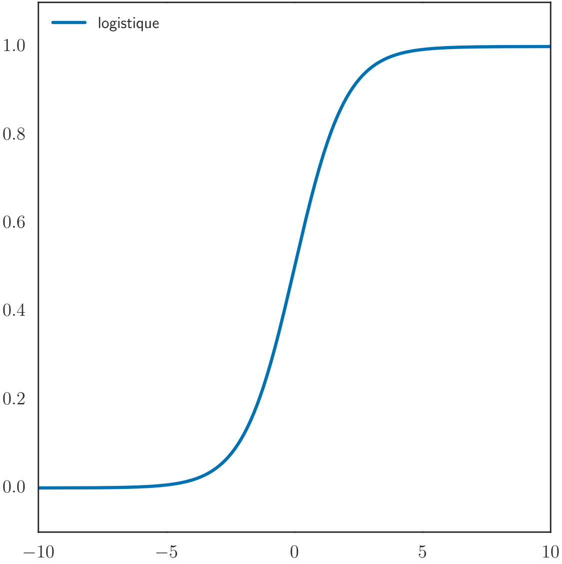
Distribution	Fonction de lien f	Espérance
Gaussienne	Id	$X\boldsymbol{\theta}$
Poisson	$\log$	$\exp(X\boldsymbol{\theta})$
Binomial	logit	$\mathrm{logistic}(X\boldsymbol{\theta})$

Avec

$$\mathrm{logit}(p) = \log\left(\frac{p}{1-p}\right)$$

$$\mathrm{logistic}(t) = \mathrm{logit}^{-1}(t) = \frac{1}{1+\exp(-t)} = \frac{\exp(t)}{\exp(t)+1}$$

Visualisation : fonction logistique



Points non abordés : extensions possibles

- <u>Robustesse</u> : attache aux données ℓ_1, régression quantile, moyennes tronquées, etc.
- Méthodes gloutones (: *greedy*)
- boosting/bagging
- Point de vue bayesien
- Arbres / forêts (classification surtout)
- K-plus proches voisins
- SVM (classification)
- Réseaux de neurones (classification surtout)

Table of Contents

Modèles linéaires généralisés

- Modèle linéaire :
$$\mathbb{E}\left[y|\mathbf{x}\right] \sim \mathbf{x}^\top \boldsymbol{\theta}$$
- Modèle linéaire généralisé
$$\mathbb{E}\left[y|\mathbf{x}\right] \sim g(\mathbf{x}^\top \boldsymbol{\theta})$$

  avec g une fonction de lien

Le cas $y = \{-1, 1\}$

- Lien avec la probabilité $\mathbb{P}\left(y = 1|x\right)$
- Remarque :

$$\begin{aligned}\mathbb{E}\left[y|\mathbf{x}\right] &= -1 \times \mathbb{P}\left(y = -1|x\right) + 1 \times \mathbb{P}\left(y = 1|x\right)\\ &= 2\mathbb{P}\left(y = 1|x\right) - 1\end{aligned}$$

- Modèle généralisé $y \in \{-1, 1\}$,

$$\begin{aligned}\mathbb{P}\left(\widehat{y = 1}|x\right) &= \mathrm{logistic}(\mathbf{x}^\top \boldsymbol{\theta})\\ g(\mathbf{x}^\top \boldsymbol{\theta}) &= 2\,\mathrm{logistic}(\mathbf{x}^\top \boldsymbol{\theta}) - 1\end{aligned}$$

- Classifieur associé :

$$h_{\boldsymbol{\theta}}(x) = \begin{cases} +1 & \text{if } \mathrm{logistic}(\mathbf{x}^\top \boldsymbol{\theta}) > \frac{1}{2} \Leftrightarrow g(\mathbf{x}^\top \boldsymbol{\theta}) > 0 \\ -1 & \text{sinon} \end{cases}$$

- Vrai risque de notre classifieur (notant $\mathbb{P}_1 = \mathbb{P}(y=1)$ et $\mathbb{P}_{-1} = \mathbb{P}(y=-1)$)
$$\mathbb{P}\left(g(\mathbf{x}^\top \boldsymbol{\theta}) \leqslant 0 \middle| y=1\right) \mathbb{P}_1 + \mathbb{P}\left(g(\mathbf{x}^\top \boldsymbol{\theta}) > 0 \middle| y=-1\right) \mathbb{P}_{-1}$$

- Risque empirique de notre classifieur :
$$\frac{1}{n}\sum_{i=1}^n \mathbb{1}_{y_i \neq h_{\boldsymbol{\theta}}(x_i)} = \frac{1}{n}\sum_{i=1}^n \mathbb{1}_{y_i g(x_i^\top \boldsymbol{\theta}) < 0}$$

- Minimisation du risque empirique :
$$\widehat{\boldsymbol{\theta}} = \operatorname*{arg\,min}_{\boldsymbol{\theta} \in \mathbb{R}^p} \frac{1}{n}\sum_{i=1}^n \mathbb{1}_{y_i g(x_i^\top \boldsymbol{\theta}) < 0}$$

- Problème d'optimisation difficile (non convexe)

- Divergence de Kullback-Leibler :
  $\mathrm{KL}(\mathcal{B}(\mathbb{P}(y=1|X)), \mathcal{B}(\tilde{g}(X^\top \boldsymbol{\theta}))$

$$
\begin{aligned}
&= \mathbb{E}_X \left[\mathbb{P}(y=1|X) \log \frac{\mathbb{P}(y=1|X)}{\tilde{g}(X^\top \boldsymbol{\theta})} \right. \\
&\qquad \left. + (1-\mathbb{P}(y=1|X)) \log \frac{1-\mathbb{P}(y=1|X)}{1-\tilde{g}(X^\top \boldsymbol{\theta})} \right] \\
&= \mathbb{E}_X \left[-\mathbb{P}(y=1|X) \log(\tilde{g}(X^\top \boldsymbol{\theta})) \right. \\
&\qquad \left. -(1-\mathbb{P}(y=1|X)) \log(1-\tilde{g}(X^\top \boldsymbol{\theta})) \right] + C_{X,y}
\end{aligned}
$$

- contrepartie empirique :
  $$-\frac{1}{n} \sum_{i=1}^{n} \left(\mathbb{1}_{y_i=1} \log(\tilde{g}(x_i^\top \boldsymbol{\theta})) + \mathbb{1}_{y_i=-1} \log(1-\tilde{g}(x_i^t \boldsymbol{\theta})) \right)$$

Minimisation du risque empirique

- Minimisation possible si $\tilde{g}$ est lisse...

$$-\frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n}\left(\mathbb{1}_{y_i=1}\log(\tilde{g}(x_i^\top\boldsymbol{\theta}))+\mathbb{1}_{y_i=-1}\log(1-\tilde{g}(x_i^\top\boldsymbol{\theta}))\right)$$

- Choix classiques $\tilde{g}$:

$$\tilde{g}(t)=\frac{e^t}{1+e^t} \qquad \text{logit or logistic}$$

$$\tilde{g}(t)=F_{\mathcal{N}}(t) \qquad \text{probit}$$

$$\tilde{g}(t)=1-e^{-e^t} \qquad \text{log-log}$$

Régression logistique

- Modèle : $\tilde{g}(t) = \frac{e^t}{1+e^t}$
- La loi de Bernoulli $\mathcal{B}(\tilde{g}(t))$ satisfait
$$\frac{\mathbb{P}\left(y=1\right)}{\mathbb{P}\left(y=-1\right)} = e^t \Leftrightarrow \log \frac{\mathbb{P}\left(y=1\right)}{\mathbb{P}\left(y=-1\right)} = t$$

- Opposée de la $\log$-vraisemblance :

$$
\begin{aligned}
& -\frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n}\left(\mathbb{1}_{y_i=1}\log(\tilde{g}(x_i^\top \boldsymbol{\theta})) + \mathbb{1}_{y_i=-1}\log(1-\tilde{g}(x_i^t\boldsymbol{\theta}))\right) \\
&= -\frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n}\left(\mathbb{1}_{y_i=1}\log\frac{e^{x_i^t\boldsymbol{\theta}}}{1+e^{x_i^\top\boldsymbol{\theta}}} + \mathbb{1}_{y_i=-1}\log\frac{1}{1+e^{x_i^\top\boldsymbol{\theta}}}\right) \\
&= \frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n}\log\left(1+e^{-y_i(x_i^\top\boldsymbol{\theta})}\right)
\end{aligned}
$$

- Fonction convexe et dérivable de $\boldsymbol{\theta}$
- Optimisation facile

Classifieur associé

- $$h_{\boldsymbol{\theta}}(x) = \begin{cases} 1 & \text{if } \frac{e^{\mathbf{x}^\top \boldsymbol{\theta}}}{1+e^{\mathbf{x}^\top \boldsymbol{\theta}}} > 1/2 \Leftrightarrow \mathbf{x}^\top \boldsymbol{\theta} > 0 \\ -1 & \text{otherwise} \end{cases}$$

- Lien entre le coût de prédiction empirique et la vraisemblance :

$$\frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n} \mathbb{1}_{y_i \neq h_{\boldsymbol{\theta}}(x_i)} = \frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n} \mathbb{1}_{y_i(x_i^\top \boldsymbol{\theta})<0} \leqslant \frac{1}{n \log 2}\sum_{i=1}^{n} \log\left(1 + e^{-y_i(x_i^\top \boldsymbol{\theta})}\right)$$

- Preuve :

$$\mathbb{1}_{y_i(x_i^\top \boldsymbol{\theta})<0} \leqslant \frac{\log\left(1 + e^{-y_i(x_i^\top \boldsymbol{\theta})}\right)}{\log 2}$$

- Convexification du risque

Références I

- T. Hastie, R. Tibshirani, and J. Friedman.
  The elements of statistical learning.
  Springer Series in Statistics. Springer, New York, second edition, 2009.
  http://www-stat.stanford.edu/~tibs/ElemStatLearn/.