

# Discrimination linéaire

R. Flamary

5 mars 2015



## Objectifs du cours

### Introduction

- ▶ Discrimination linéaire binaire.
- ▶ Problème d'optimisation.

### Méthodes de discrimination linéaires

- ▶ Régression logistique.
- ▶ Perceptron de Rosenblatt.
- ▶ Séparateurs à vaste marge.

### Méthodes d'optimisation

- ▶ Méthode du gradient.
- ▶ Méthode de Newton.
- ▶ Méthode du gradient stochastique.

On se concentrera sur des problèmes de classification binaire (deux classes).



## Sommaire

### Introduction

Problème d'apprentissage  
Données d'apprentissage

### Régression logistique

Problème d'optimisation  
Méthode du gradient  
Méthode de Newton  
Conditions d'arrêt  
Régularisation

### Perceptron de Rosenblatt

Méthode du perceptron  
Problème d'optimisation

### Séparateurs à Vaste Marge

Problème d'optimisation

### Conclusions sur la prédiction linéaire

Attache aux données



## Prédiction linéaire

### Fonction linéaire

Fonction  $f : \mathbb{R}^d \rightarrow \mathbb{R}$ , de la forme

$$f(\mathbf{x}) = \sum_{i=1}^d w_i x_i + b = \mathbf{x}^\top \mathbf{w} + b = [\mathbf{x}^\top \ 1] \boldsymbol{\alpha} = \tilde{\mathbf{x}}^\top \boldsymbol{\alpha} \quad (1)$$

avec  $\mathbf{w} \in \mathbb{R}^d$  un vecteur définissant un hyperplan dans  $\mathbb{R}^d$  et  $b \in \mathbb{R}$  un biais qui déplace la fonction perpendiculairement à l'hyperplan, et  $\boldsymbol{\alpha} = \begin{bmatrix} \mathbf{w} \\ b \end{bmatrix}$  est un vecteur de  $\mathbb{R}^{d+1}$  contenant la concaténation de  $\mathbf{w}$  et  $b$ .

### Objectifs

- ▶ Régression :  $f(\cdot) \in \mathbb{R}$ .
- ▶ Classification :  $\text{signe}(f(\cdot)) \in \{-1, 1\}$ .



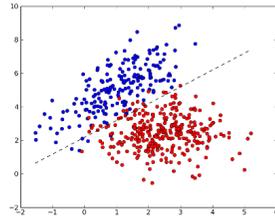
## Classification linéaire

### Objectif

- ▶ Apprendre une fonction linéaire  $f(\cdot)$  permettant de prédire une valeur binaire  $y \in \{-1, 1\}$  à partir d'une observation  $\mathbf{x} \in \mathbb{R}^d$ .
- ▶ En pratique on cherche à déterminer les coefficients  $(\mathbf{w}, b)$  de  $f(\cdot)$  à partir d'un ensemble d'apprentissage  $\{\mathbf{x}_i, y_i\}_{i=1, \dots, n}$ .
- ▶ La classe prédite est le signe de la fonction de prédiction  $f(\cdot)$

### Exemples

- ▶ Reconnaissance de caractères.
- ▶ Aide au diagnostique.
- ▶ Inspection de pièces.



Navigation icons: back, forward, search, etc.

## Représentation des données

$$\mathbf{X} = \begin{bmatrix} \mathbf{x}_1^\top & 1 \\ \mathbf{x}_2^\top & 1 \\ \vdots & \vdots \\ \mathbf{x}_i^\top & 1 \\ \vdots & \vdots \\ \mathbf{x}_n^\top & 1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} x_{11} & x_{12} & \dots & x_{1j} & \dots & x_{1d} & 1 \\ x_{21} & x_{22} & \dots & x_{2j} & \dots & x_{2d} & 1 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ x_{i1} & x_{i2} & \dots & x_{ij} & \dots & x_{id} & 1 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ x_{n1} & x_{n2} & \dots & x_{nj} & \dots & x_{nd} & 1 \end{bmatrix}, \quad \mathbf{y} = \begin{bmatrix} y_1 \\ y_2 \\ \vdots \\ y_i \\ \vdots \\ y_n \end{bmatrix}$$

### Données d'apprentissage

Exemples :

- ▶  $\mathbf{x}_i \in \mathbb{R}^d$  observations pour  $i = 1, \dots, n$ .
- ▶  $\tilde{\mathbf{x}}_i \in \mathbb{R}^{d+1}$  tel que  $\tilde{\mathbf{x}}_i^\top = [\mathbf{x}_i, 1]^\top$
- ▶  $y_i \in \{-1, 1\}$  valeur à prédire  $i = 1, \dots, n$ .

Forme matricielle :

- ▶  $\mathbf{X} \in \mathbb{R}^{n \times (d+1)}$  telle que  $\mathbf{x} = [\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \dots, \mathbf{x}_n, \mathbf{e}]^\top$  avec  $\mathbf{e} \in \mathbb{R}^d$  et  $e_i = 1, \forall i$
- ▶  $\mathbf{y} \in \mathbb{R}^n$  telle que  $\mathbf{y} = [y_1, y_2, \dots, y_n]^\top$ .
- ▶  $\alpha \in \mathbb{R}^{d+1}$  est un vecteur de tel que  $\alpha = \begin{bmatrix} \mathbf{w} \\ b \end{bmatrix}$

Navigation icons: back, forward, search, etc.

## Régression logistique

### Objectifs

- ▶ Apprendre une fonction linéaire discriminante.
- ▶ Modéliser les probabilités conditionnelles (prédiction probabiliste).
- ▶ Éviter les estimations des paramètres des lois de probabilité.

### Approche

- ▶ On suppose que la probabilité conditionnelle  $P(\omega_1|\mathbf{x})$  est de la forme :

$$P(\omega_1|\mathbf{x}) = \frac{\exp(\mathbf{w}^\top \mathbf{x} + b)}{1 + \exp(\mathbf{w}^\top \mathbf{x} + b)} = \frac{1}{1 + \exp(-\mathbf{w}^\top \mathbf{x} - b)} \quad (2)$$

et donc que

$$P(\omega_2|\mathbf{x}) = 1 - P(\omega_1|\mathbf{x}) = \frac{1}{1 + \exp(\mathbf{w}^\top \mathbf{x} + b)} \quad (3)$$

Navigation icons: back, forward, search, etc.

## Rapport de vraisemblance

### Fonction de décision

- ▶ La fonction de décision utilise le test du rapport de vraisemblance.
- ▶ Si  $P(\omega_1|\mathbf{x}) > P(\omega_2|\mathbf{x})$  choisir  $\omega_1$  sinon  $\omega_2$  :

$$\text{ou } P(\omega_1|\mathbf{x}) \underset{\omega_2}{\overset{\omega_1}{\geq}} P(\omega_2|\mathbf{x})$$

- ▶ On cherche la fonction  $f$  telle que :

$$f(\mathbf{x}) = \log \left( \frac{P(\omega_1|\mathbf{x})}{P(\omega_2|\mathbf{x})} \right) = \log(\exp(\mathbf{w}^\top \mathbf{x} + b)) = \mathbf{w}^\top \mathbf{x} + b$$

dont le signe permet d'obtenir la décision du rapport de vraisemblance.

Navigation icons: back, forward, search, etc.

## Problème d'optimisation

### Log-Vraisemblance

On cherche à maximiser la log-vraisemblance sur les données et donc à minimiser :

$$J(\mathbf{w}, b) = -\log\left(\prod_i P(y_i|\mathbf{x}_i)\right) = -\sum_{i \in \mathcal{I}_1} \log(P(\omega_1|\mathbf{x}_i)) - \sum_{i \in \mathcal{I}_2} \log(P(\omega_2|\mathbf{x}_i)) \quad (4)$$

où  $\mathcal{I}_1$  et  $\mathcal{I}_2$  sont les ensembles des éléments de la classe  $\omega_1$  et  $\omega_2$  respectivement.

### Fonction de coût

On obtient la fonction de coût suivante :

$$\begin{aligned} J(\mathbf{w}, b) &= \sum_{i \in \mathcal{I}_1} \log(1 + \exp(-\mathbf{w}^\top \mathbf{x}_i - b)) + \sum_{i \in \mathcal{I}_2} \log(1 + \exp(\mathbf{w}^\top \mathbf{x}_i + b)) \\ &= \sum_i \log(1 + \exp(-y_i(\mathbf{w}^\top \mathbf{x}_i + b))) \end{aligned} \quad (5)$$



## Calcul du gradient

- ▶ La fonction  $J(\mathbf{w}, b)$  est convexe et différentiable. On va donc calculer son gradient. Après avoir reformulé le problème sous la forme :

$$J(\alpha) = \sum_i \log(1 + \exp(-y_i \alpha^\top \tilde{\mathbf{x}}_i)) \quad (6)$$

- ▶ La dérivée partielle de  $J(\alpha)$  par rapport à  $\alpha_j$  est

$$\frac{\partial J(\alpha)}{\partial \alpha_j} = \sum_i \frac{-y_i(\tilde{\mathbf{x}}_i)_j \exp(-y_i \alpha^\top \tilde{\mathbf{x}}_i)}{1 + \exp(-y_i \alpha^\top \tilde{\mathbf{x}}_i)} = \sum_i \frac{-y_i(\tilde{\mathbf{x}}_i)_j p_i}{1 + p_i} \quad (7)$$

avec  $p_i = \exp(-y_i \alpha^\top \tilde{\mathbf{x}}_i)$

- ▶ Ce qui nous permet d'obtenir le gradient :

$$\nabla_\alpha J(\alpha) = -\mathbf{X}^\top \mathbf{P} \mathbf{y} \quad (8)$$

où  $\mathbf{P}$  est une matrice diagonale contenant les valeurs  $\frac{p_i}{1+p_i}$  qui dépendent de  $\alpha$ .  $\nabla_\alpha J(\alpha) = \mathbf{0}$  définit des équations non-linéaires qui ne peuvent être résolues directement → Méthode d'optimisation itérative.



## Méthode du gradient

### Méthodes itérative

- ▶ Basées sur la mise à jour d'une solution à chaque itération.
- ▶ A l'itération  $t$  la solution est mise à jour par :

$$\alpha^{(t)} = \alpha^{(t-1)} + \mu_t \mathbf{d}_t \quad (9)$$

où  $\mathbf{d}_t$  est une direction de descente c'est à dire  $\mathbf{d}_t^\top \nabla_\alpha J(\alpha^{(t-1)}) < 0$  et  $\mu_t > 0$  est le pas de la descente.

### Méthode du gradient

- ▶ On choisit  $\mathbf{d}_t = -\nabla_\alpha J(\alpha^{(t-1)})$ , qui est une direction de descente.
- ▶ Le pas  $\mu_t$  doit être choisi pour assurer une descente suffisante de la fonction.
- ▶ Méthode où chaque itération est efficace mais qui converge lentement.



## Méthode du gradient (2)

### Algorithme du gradient

```
Initialisation de  $\alpha$ ,  $\mu$  et  $\mathbf{P} = \mathbf{I}$ 
repeat
  for  $i = 1, \dots, n$  do
     $p_i \leftarrow \exp(-y_i \alpha^\top \tilde{\mathbf{x}}_i)$ 
     $P_{i,i} \leftarrow \frac{p_i}{1+p_i}$ 
  end for
   $\mathbf{d} \leftarrow \mathbf{X}^\top \mathbf{P} \mathbf{y}$ 
   $\alpha \leftarrow \alpha + \mu \mathbf{d}$ 
until Convergence
```

### Discussion

- ▶ Sensible à l'initialisation de  $\alpha$ .
- ▶ On peut aussi s'assurer de la décroissance du coût en ajoutant une étape de recherche linéaire :

### Méthode de backtracking

Initialisation de  $\mu$  et  $0 < \rho < 1$ .

### repeat

```
 $\mu \leftarrow \rho \mu$ 
until  $J(\alpha + \mu \mathbf{d}) < J(\alpha)$ 
```

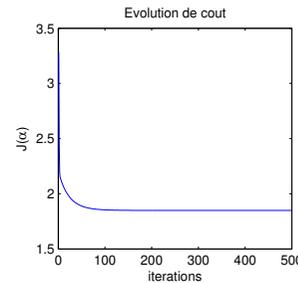
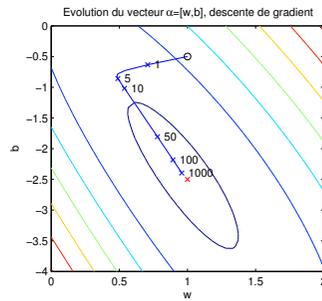
- ▶ Les conditions d'arrêt et la convergence sont discutées dans la suite.



## Exemple de descente de gradient

### Simulation

- ▶ Régression logistique régularisée.
- ▶ Descente de gradient.
- ▶ Données  $(x_i, y_i)$  avec  $d = 1$  :  
 $(1, -1), (2, -1), (3, 1), (4, 1)$
- ▶  $\mu = 0.1, \lambda = 1$
- ▶ 1000 itérations
- ▶ Initialisation  $\alpha_0 = [1, -0.5]$
- ▶ Solution du système :  
 $\alpha^* = [1, -2.5]$



### Discussion

- ▶ Convergence lente vers la solution du système.
- ▶ Après 1000 itérations, toujours pas convergé.
- ▶ Complexité  $\mathcal{O}(nd)$  par itération.

## Matrice Hessienne

- ▶ La matrice Hessienne est la matrice symétrique  $\mathbf{H} \in \mathbb{R}^{d+1 \times d+1}$  telle que

$$H_{u,v} = \frac{\partial^2 J(\alpha)}{\partial \alpha_u \partial \alpha_v} \quad (10)$$

Elle contient les dérivées secondes d'une fonction à plusieurs variables.

- ▶ Pour la régression logistique on a

$$\frac{\partial^2 J(\alpha)}{\partial \alpha_u \partial \alpha_v} = \sum_i \frac{(\tilde{\mathbf{x}}_i)_u (\tilde{\mathbf{x}}_i)_v \exp(-y_i \alpha^\top \tilde{\mathbf{x}}_i)}{(1 + \exp(-y_i \alpha^\top \tilde{\mathbf{x}}_i))^2} = \sum_i \frac{(\tilde{\mathbf{x}}_i)_u (\tilde{\mathbf{x}}_i)_v p_i}{(1 + p_i)^2} \quad (11)$$

- ▶ Ce qui nous donne en matriciel :

$$\mathbf{H} = \mathbf{X}^\top \tilde{\mathbf{P}} \mathbf{X} \quad (12)$$

avec  $\tilde{\mathbf{P}}$  une matrice diagonale contenant  $\frac{p_i}{(1+p_i)^2}$  sur chaque élément de sa diagonale.

## Méthode de Newton

### Principe

- ▶ Approximation quadratique  $\tilde{J}(\alpha)$  de la fonction  $J(\alpha)$  à chaque itération.
- ▶ La minimisation revient à prendre  $\mathbf{d} = -\mathbf{H}^{-1} \nabla_\alpha J(\alpha^{(t-1)})$
- ▶ Si la fonction à optimiser est convexe,  $\mathbf{H}$  est définie positive et  $\mathbf{d}$  est donc une direction de descente.

### Algorithme de Newton

Initialisation de  $\alpha$ ,  $\mu$  et  $\mathbf{P} = \mathbf{I}$  et  $\tilde{\mathbf{P}} = \mathbf{I}$   
**repeat**  
 Mise à jour de  $\mathbf{P}$  et  $\tilde{\mathbf{P}}$   
 $\mathbf{d} \leftarrow (\mathbf{X}^\top \tilde{\mathbf{P}} \mathbf{X})^{-1} \mathbf{X}^\top \mathbf{P} \mathbf{y}$   
 $\alpha \leftarrow \alpha + \mu \mathbf{d}$   
**until** Convergence

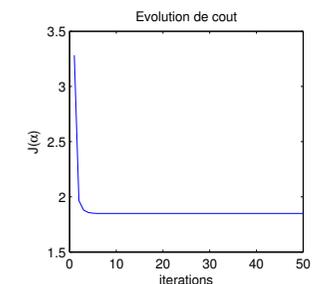
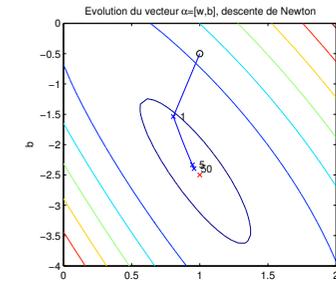
### Discussion

- ▶ Meilleure vitesse de convergence.
- ▶ Nécessite le calcul et l'inversion de la Hessienne.
- ▶ Itération plus complexe que la méthode du gradient.
- ▶ Si le problème est quadratique, l'algorithme converge en une seule itération.

## Exemple de descente de Newton

### Simulation

- ▶ Régression logistique régularisée.
- ▶ Descente de gradient.
- ▶ Données  $(x_i, y_i)$  avec  $d = 1$  :  
 $(1, -1), (2, -1), (3, 1), (4, 1)$
- ▶  $\mu = 0.1, \lambda = 1$
- ▶ 1000 itérations
- ▶ Initialisation  $\alpha_0 = [1, -0.5]$
- ▶ Solution du système :  
 $\alpha^* = [1, -2.5]$



### Discussion

- ▶ Convergence Rapide vers la solution du système.
- ▶ Après 5 itérations, même position que 100 en descente de gradient.
- ▶ Complexité  $\mathcal{O}(nd^2 + d^3)$  par itération.

## Conditions d'arrêt des algorithmes

### Convergence

- ▶ L'utilisation de méthodes itérative soulève le problème de convergence.
- ▶ La convergence est démontrée dans certains cas (Nocedal, Convex Optimization)
- ▶ Un point stationnaire est atteint par l'algorithme si :

$$\nabla_{\alpha} J(\alpha) = \mathbf{0} \quad (13)$$

### Conditions d'arrêt

En pratique on arrête les itérations selon une des conditions suivantes :

- ▶ Norme du gradient inférieure à un seuil :  $\|\nabla_{\alpha} J(\alpha)\| < \epsilon$
- ▶ Variation relative du coût entre deux itérations inférieure à un seuil :  $\frac{|J(\alpha^t) - J(\alpha^{t-1})|}{|J(\alpha^{t-1})|} < \epsilon$
- ▶ Nombre maximum d'itérations  $t_{max}$  atteint.



## Conclusions sur la régression logistique

### Avantages

- ▶ Modélisation probabiliste. La probabilité d'appartenir à chaque classe peut être obtenue.
- ▶ Problème convexe, il existe une solution unique.
- ▶ Possibilité de régulariser pour éviter le sur-apprentissage.
- ▶ Beaucoup moins de paramètres à estimer que la discrimination bayésienne

$$d + 1 < \underbrace{2d + 2}_{\text{(Cas 1)}} \ll \underbrace{3d + 2}_{\text{(Cas 2)}} \ll \underbrace{d^2 + 2d + 2}_{\text{(Cas 3)}}$$

### Inconvénient

- ▶ Problème difficile à optimiser (non linéaire).
- ▶ Méthodes itératives nécessaires (gradient ou Newton).



## Régularisation

### A priori sur $\mathbf{w}$

- ▶ Un *a priori*  $P(\mathbf{w})$  sur la loi de probabilité de  $\mathbf{w}$  peut être facilement ajouté à la log-vraisemblance.
- ▶ Si on suppose que  $\mathbf{w} \sim \mathcal{N}(\mathbf{0}, \sigma^2 \mathbf{I})$  alors on a

$$P(\mathbf{w}) = e^{-\frac{\|\mathbf{w}\|^2}{2\sigma^2}} \quad (14)$$

- ▶ Et minimiser la log-vraisemblance revient donc à minimiser :

$$\begin{aligned} J(\mathbf{w}, b) &= -\log \left( P(\mathbf{w}) \prod_i P(y_i | \mathbf{x}_i) \right) = -\log(P(\mathbf{w})) - \log \left( \prod_i P(y_i | \mathbf{x}_i) \right) \\ &= \sum_i \log(1 + \exp(-y_i \alpha^T \tilde{\mathbf{x}}_i)) + \frac{1}{2\sigma^2} \|\mathbf{w}\|^2 \end{aligned} \quad (15)$$

On reconnaît un régularisation de type ridge avec  $\lambda = \frac{1}{\sigma^2}$

- ▶ Il est possible d'avoir d'autres *a priori* qui mèneront à des régularisations différentes.



## Méthode du perceptron

### Historique

- ▶ Le perceptron a été proposé en 1957 par Frank Rosenblatt.
- ▶ Tout premier réseau de neurone (linéaire).
- ▶ Capable d'apprendre uniquement sur des données séparables.

### Principe

- ▶ On cherche un hyperplan défini par  $f(\mathbf{x}) = \mathbf{w}^T \mathbf{x} + b = 0$  séparant les données d'apprentissage.
- ▶ Méthode itérative.
- ▶ Mise à jour  $(\mathbf{w}, b)$  par rapport aux exemples mal classés.
- ▶ Arrêt des itérations quand tous les exemples sont bien classifiés.

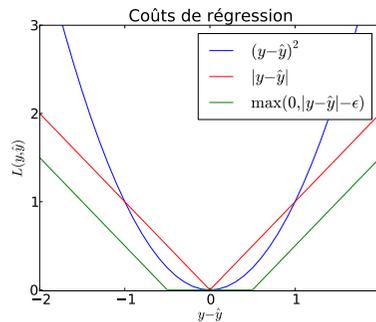






## Attache aux données de Régression

Coût	$L(y, \hat{y})$	Rég.	Cvx.
Carré	$(y - \hat{y})^2$	✓	✓
Valeur absolue	$ y - \hat{y} $	-	✓
$\epsilon$ insensible	$\max(0,  y - \hat{y}  - \epsilon)$	-	✓



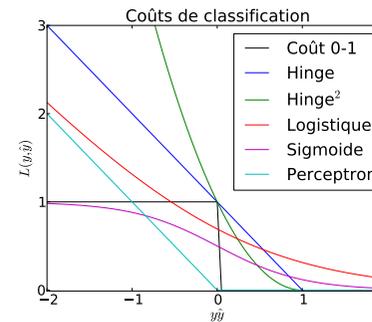
### Problème de régression

- ▶ **Objectif** : prédire une valeur réelle.
- ▶ Erreur si  $y \neq \hat{y}$ .
- ▶ **Mesure d'erreur** :  $|y - \hat{y}|$



## Attache aux données de Classification

Coût	$L(y, \hat{y})$	Rég.	Cvx.
Coût 0-1	$(1 - \text{sgn}(y\hat{y}))/2$	-	-
Hinge	$\max(0, 1 - y\hat{y})$	-	✓
Hinge au carré	$\max(0, 1 - y\hat{y})^2$	✓	✓
Logistique	$\log(1 + \exp(-y\hat{y}))$	✓	✓
Sigmoïde	$(1 - \tanh(y\hat{y}))/2$	✓	-
Perceptron	$\max(0, -y\hat{y})$	-	✓



### Problème de régression

- ▶ **Objectif** : prédire une valeur binaire.
- ▶ Erreur si  $y \neq \text{signe}(\hat{y})$  ou si  $y$  et  $\hat{y}$  sont de signe différents.
- ▶ **Mesure d'erreur** :  $y\hat{y}$

