Dérivées

Introduction à l'apprentissage automatique
Master Sciences Cognitives
Aix Marseille Université

Alexis Nasr

Motivations

- De nombreuses méthodes d'apprentissage automatique reposent sur la notion de **fonction d'erreur** ou **fonction de perte**.
- On recherche les valeurs des **paramètres** de la fonction d'erreur qui permettent de **minimiser** celle-ci : de faire **le moins d'erreurs** possibles sur les **exemples d'apprentissage**.
- Pour minimiser la fonction d'erreur, nous avons besoin de calculer sa **dérivée**.
- Il est possible, grâce à la dérivée, de savoir comment modifier les paramètres de la fonction d'erreur afin de diminuer sa valeur, à l'aide de l'algorithme de **descente du gradient**.

Objectifs

- Comprendre la notion de dérivée
- Comprendre pourquoi certaines fonctions ne sont pas dérivables
- Calculer la dérivée des fonctions élémentaires
- Calculer la dérivée de fonctions complexes
- Minimiser la valeur d'une fonction convexe à l'aide de la dérivée.

Plan

Tangente à une courbe

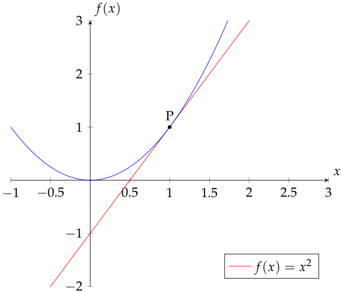
Dérivée

Dérivées des fonction élémentaires

Dérivées des fonctions complexes

Recherche des valeurs extremales d'une fonction

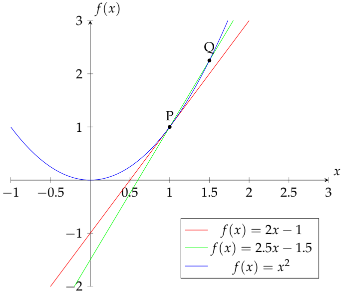
Pente de la tangente à une courbe en un point



- La tangente[1] t à une courbe C en un point P est une droite qui touche C en P au plus près au voisinage de ce point. C et t forment alors un angle nul en P.
- Comment déterminer l'équation de la tangente ?

1. Tangente vient du latin *tangere*, toucher.

Calcul de l'équation de la tangente



- C'est une fonction affine : $y = ax + b$, qui passe par le point $(1, 1)$
- Nous avons besoin de calculer sa pente a.
- Pour cela, nous avons besoin d'un autre point. On peut choisir un autre point de C, pas trop loin de P et calculer ainsi une approximation de a.
- On choisit par exemple le point Q de coordonnées $(1.5, 2.25)$ et on obtient $a' = 2.5$.
- Au fur et à mesure que Q se rapproche de P, a' se rapproche de a.

Dérivée d'une fonction en un point

- Le calcul de la pente d'une tangente t à une courbe C d'équation $y = f(x)$ en un point a est un type de limite particulier appelé **dérivée** de la fonction f en a, notée $f'(a)$.

$$f'(a) = \lim_{x \to a} \frac{f(x) - f(a)}{x - a}$$

ou

$$f'(a) = \lim_{h \to 0} \frac{f(a+h) - f(a)}{h}$$

- La dérivée est donc la limite du rapport de la variation de $f(x)$ sur la variation de x

Dérivée d'une fonction en un point

- La dérivée est **nulle** si f est **constante** :
  - $f(x) = 2$,
    $$\lim_{x \to a} \frac{f(x) - f(a)}{x - a} = \frac{0}{x - a} = 0$$
- Elle est **positive** si f est **croissante** en a :
  - $f(x) = x$
    $$\lim_{x \to a} \frac{f(x) - f(a)}{x - a} = \frac{x - a}{x - a} = 1$$
- Elle est **négative** si f est **décroissante** en a :
  - $f(x) = -x$
    $$\lim_{x \to a} \frac{f(x) - f(a)}{x - a} = \frac{-x + a}{x - a} = -1$$

Dérivée vue comme une fonction

- On s'était intéressé jusque là aux dérivées en un point particulier $(a, f(a))$.

$$f'(a) = \lim_{h \to 0} \frac{f(a+h) - f(a)}{h}$$

- On peut changer de perspective et voir a comme une variable, on obtient :

$$f'(x) = \lim_{h \to 0} \frac{f(x+h) - f(x)}{h}$$

- $f'(x)$ est une nouvelle fonction, appelée **dérivée** de f, qui donne, lorsqu'elle existe, la dérivée (la pente de la tangente) pour toute valeur du domaine de f.

Dérivée vue comme une fonction

- La fonction dérivée permet de calculer la pente de la tangente à la courbe pour tout point de cette dernière.
- La fonction dérivée f' est positive lorsque la fonction f est croissante, négative lorsque f est décroissante et nulle aux points où f change de sens.
- Une fonction f est dérivable en a si $f'(a)$ existe.
- Elle est dérivable sur un intervalle I si elle est dérivable en tout point de I.

Notation de Leibnitz

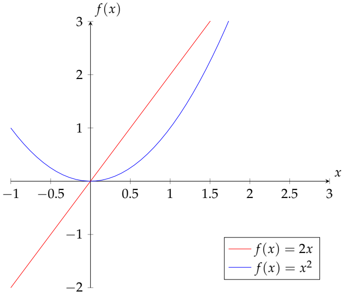
- On note aussi $f'(x)$ de la façon suivante : $\frac{d}{dx}f(x)$ ou bien $\frac{df}{dx}$
- Cette notation est appelée **notation de Leibnitz**.
- $\frac{d}{dx}$ doit être vu comme un opérateur, appelé **opérateur de dérivation**, il représente l'opération de calcul de la dérivée.
- Si on introduit la variable y, telle que $y = f(x)$, alors on peut noter la dérivée de $f(x)$ de la façon suivante : $\frac{dy}{dx}$
- Pour indiquer la dérivée de f pour la valeur a, on écrit :

$$\left.\frac{df}{dx}\right|_{x=a}$$

Exemple : calcul de la dérivée de la fonction $f(x) = x^2$

$$\begin{aligned}
f'(x) &= \lim_{h\to 0} \frac{(x+h)^2 - x^2}{h} \\
&= \lim_{h\to 0} \frac{x^2 + 2xh + h^2 - x^2}{h} \\
&= \lim_{h\to 0} \frac{h(2x+h)}{h} \\
&= \lim_{h\to 0} 2x + h \\
&= 2x
\end{aligned}$$

Exemple : dérivée de la fonction $f(x) = x^2$



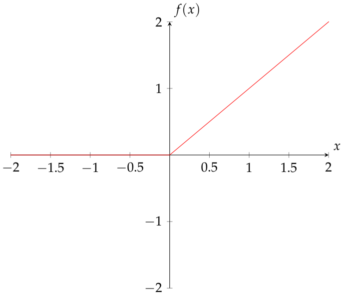
Fonctions non dérivables

- Si une fonction n'est pas continue en a, alors elle n'est pas dérivable en a.
  - La fonction de Heaviside n'est pas dérivable en 0.
- Mais une fonction peut être continue en a sans être dérivable en a si sa dérivée à gauche et sa dérivée à droite en a sont différentes :

$$\lim_{h \to 0^-} \frac{f(a+h) - f(x)}{h} \neq \lim_{h \to 0^+} \frac{f(a+h) - f(x)}{h}$$

  - La fonction ReLU (Rectified Linear Unit) n'est pas dérivable en 0.

Rectified Linear Unit



$$f(x) = \begin{cases} 0 & si\ x < 0 \\ x & si\ x \geq 0 \end{cases}$$

Dérivée de ReLU en 0

- pour $x = 0$ on a

$$\lim_{h \to 0} \frac{f(0+h) - f(0)}{h} = \lim_{h \to 0} \frac{f(h)}{h}$$

- on calcule les limites à gauche et à droite séparément :

$$\lim_{h \to 0^-} \frac{f(h)}{h} = \lim_{h \to 0^-} \frac{0}{h} = 0$$

  et

$$\lim_{h \to 0^+} \frac{f(h)}{h} = \lim_{h \to 0^+} \frac{h}{h} = 1$$

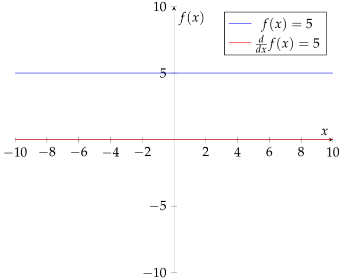
- La fonction ReLU n'est pas dérivable en 0

Dérivées des fonction élémentaires

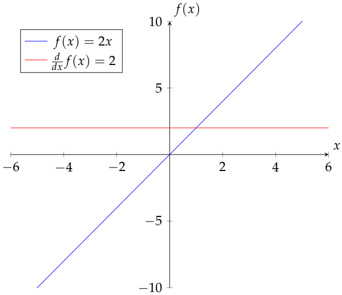
nom	$f(x)$	$\frac{d}{dx}f(x)$
constante	a	0
linéaire	ax	a
puissance	x^n	n x^{n-1}
exponentielle	a^x	$\ln(a) \times a^x$
exponentielle naturelle	e^x	e^x
logarithme	$\log_b(x)$	$\frac{1}{\ln(b) \times x}$
logarithme naturel	$\ln(x)$	$\frac{1}{x}$

Nos fonctions élémentaires sont dérivables

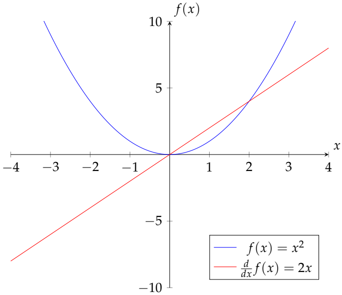
Fonction constante $f(x) = a$



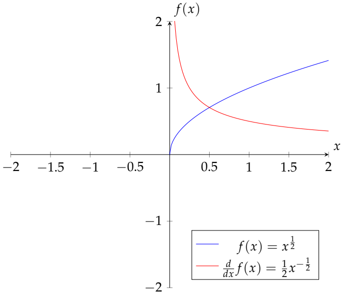
Fonction linéaire $f(x) = ax$



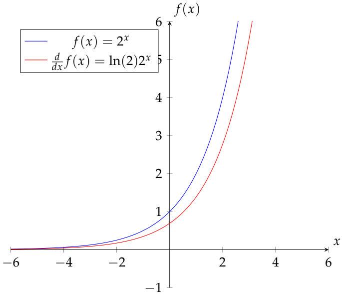
Fonction puissance $f(x) = x^n$



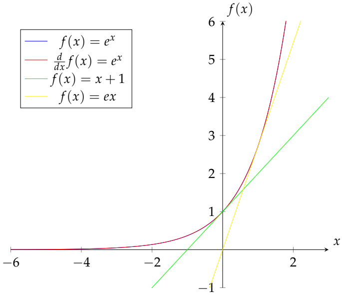
Fonction puissance $f(x) = x^{\frac{1}{n}}$



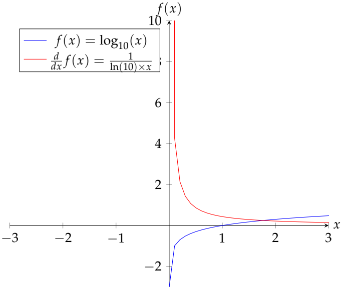
Fonction exponentielle $f(x) = a^x, a > 0$



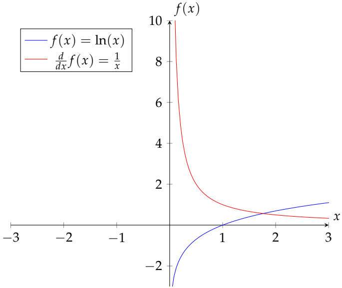
$f(x) = e^x$



Fonction logarithme $f(x) = \log_a(x)$



$f(x) = \ln(x)$



Dérivées des fonctions obtenues par combinaisons arithmétiques

	$f(x)$	$\frac{d}{dx}f(x)$
Somme	$g(x)+h(x)$	$\frac{d}{dx}g(x)+\frac{d}{dx}h(x)$
Différence	$g(x)-h(x)$	$\frac{d}{dx}g(x)-\frac{d}{dx}h(x)$
Produit	$g(x)\times h(x)$	$\frac{d}{dx}g(x)\times h(x)+g(x)\frac{d}{dx}\times h(x)$
Quotient	$\frac{g(x)}{h(x)}$	$\frac{\frac{d}{dx}g(x)\times h(x)-g(x)\times\frac{d}{dx}h(x)}{g(x)^2}$

Dérivée de fonctions composées

$$\begin{aligned} f(x) &= g \circ h(x) \\ &= g(h(x)) \end{aligned}$$

- On introduit les variables y et u :

$$\begin{aligned} y &= g(u) \\ u &= h(x) \end{aligned}$$

- On définit la dérivée de $f(x)$ de la manière suivante

$$\frac{d}{dx} f(x) = \frac{dy}{du}\frac{du}{dx}$$

Exemple : dérivée de $g(x)^n$

- $g(x)^n$ peut être vue comme la composition de la fonction $g(x)$ et de la fonction puissance x^n
- On note :
  - $y = u^n$
  - $u = g(x)$
- En utilisant la dérivée d'une fonction composée on obtient

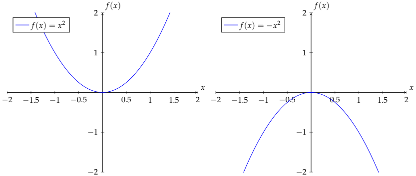
$$\begin{aligned}
\frac{dy}{dx} &= \frac{dy}{du}\frac{du}{dx} \\
&= nu^{n-1}\frac{du}{dx} \\
&= ng(x)^{n-1}\frac{d}{dx}g(x)
\end{aligned}$$

Recherche des valeurs extremales d'une fonction

- Une application majeure de la dérivée d'une fonction est la recherche de valeurs maximales ou minimales de cette dernière.

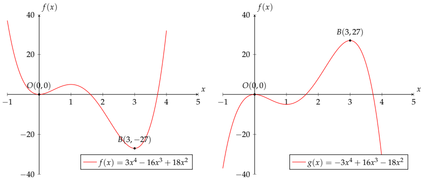
Maximum et minimum d'une fonction

- Etant donné c un nombre appartenant au domaine D d'une fonction f.
- $f(c)$ est le :
  - **maximum global** de f si $f(c) \geq f(x)\ \forall\ x \in D$
  - **minimum global** de f si $f(c) \leq f(x)\ \forall\ x \in D$
- c est un **extremum** global de f si c'est un maximum global ou un minimum global.



Maximum et minimum locaux d'une fonction

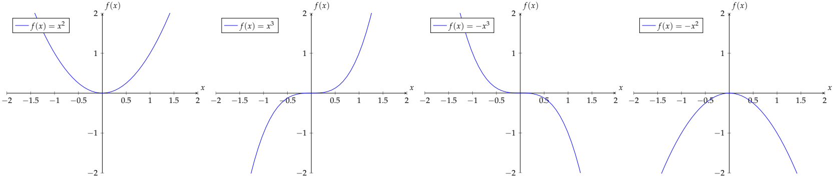
- Etant donné un intervalle ouvert $I \subseteq D$ et $c \in I$.
- $f(c)$ est un :
  - **maximum local** de f si $f(c) \geq f(x)\ \forall\ x \in I$
  - **minimum local** de f si $f(c) \leq f(x)\ \forall\ x \in I$



- O est un minimum local de $f(x)$
- O est un maximum local de $g(x)$

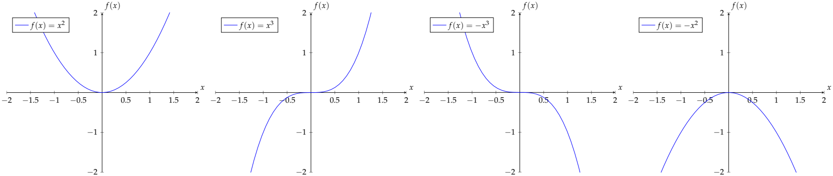
Points critiques d'une fonction

- Un point critique c d'une fonction $f(x)$ est un nombre $c \in Dom(f)$ tel que :
  - $f'(c) = 0$
  - ou $f'(c)$ n'existe pas
- Il se passe généralement des choses intéressantes au niveau de la fonction f aux points critiques :



- Dans les quatre cas $f'(0) = 0$ mais cela correspond à des phénomènes différents.

Points critiques d'une fonction



- $f(x) = x^2$, le point $(0,0)$ est le minimum global de la fonction.
- $f(x) = x^3$ ou $f(x) = -x^3$, le point $(0,0)$ est un point d'**inflexion**.
- $f(x) = -x^2$, le point $(0,0)$ est le maximum global.
- Seuls certains points critiques sont des extremums de la fonction, ceux pour lesquels la dérivée **change de signe**.
  - Si la dérivée est positive avant le point critique et négative après, alors il s'agit d'un **maximum local** (peut être global !)
  - Si la dérivée est négative avant le point critique et positive après, alors il s'agit d'un **minimum local** (peut être global !)

Fonctions convexes

- Une fonction est convexe si quels que soient deux points A et B du graphe de la fonction, le segment $[AB]$ est entièrement situé au-dessus du graphe.
- Si la fonction f est convexe, alors tout minimum local de f est aussi un minimum global.
- Si f est deux fois dérivables sur un intervalle I, alors elle est convexe si et seulement si sa dérivée seconde est à valeurs positives ou nulles.
- Exemples :
  - $f(x) = x^2$, $f'(x) = 2x$, $f''(x) = 2$, f est convexe.
  - $f(x) = x^3$, $f'(x) = 3x^2$, $f''(x) = 6x$, f n'est pas convexe.

Recherche d'extremums d'une fonction

- La recherche des extremums de la fonction $f(x)$ suppose donc de résoudre l'équation :

$$f'(x) = 0$$

- Dans certains cas, on peut trouver une solution **exacte** de l'équation.
- Mais la plupart du temps (dans notre cas) on a recours à une méthode itérative qui donnera une solution **approchée** de l'équation.

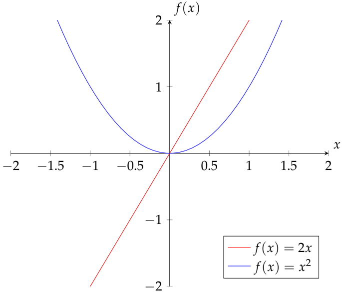
Recherche itérative de minimums d'une fonction

- On utilise le signe de la dérivée en un point a .
  - Si $\left.\frac{df}{dx}\right|_{x=a} > 0$, alors f est croissante en a.
    - Dans ce cas, si on **diminue** la valeur de x ($x = a - \varepsilon$), la valeur de $f(x)$ diminue.
  - Si, $\left.\frac{df}{dx}\right|_{x=a} < 0$, alors f est décroissant en a.
    - Dans ce cas, si on **augmente** la valeur de x ($x = a + \varepsilon$), la valeur de $f(x)$ diminue.
- Méthode **itérative** : on procède par étapes
- à chaque étape on modifie la valeur de x :

$$x \leftarrow x - \eta \frac{d}{dx} f(x)$$

- jusqu'à atteindre un critère d'arrêt.

Recherche du minimum de la fonction $f(x) = x^2$

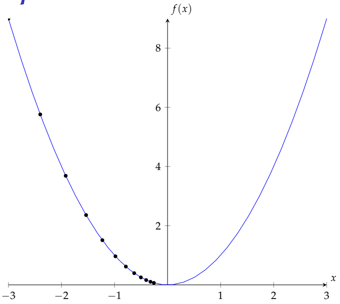


- Etape de mise à jour :

$$x \leftarrow x - 2\eta x$$

Exemple : $f(x) = x^2$, $\frac{df}{dx} = 2x$, $\eta = 0.1$

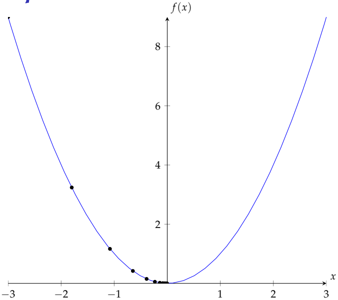
i	x	$2x$	x^2	$x - \eta \times 2x$
0	-3.000	-6.000	9.000	-2.400
1	-2.400	-4.800	5.760	-1.920
2	-1.920	-3.840	3.686	-1.536
3	-1.536	-3.072	2.359	-1.229
4	-1.229	-2.458	1.510	-0.983
5	-0.983	-1.966	0.966	-0.786
6	-0.786	-1.573	0.618	-0.629
7	-0.629	-1.258	0.396	-0.503
8	-0.503	-1.007	0.253	-0.403
9	-0.403	-0.805	0.162	-0.322
10	-0.322	-0.644	0.104	-0.258
11	-0.258	-0.515	0.066	-0.206
12	-0.206	-0.412	0.043	-0.165
13	-0.165	-0.330	0.027	-0.132
14	-0.132	-0.264	0.017	-0.106
15	-0.106	-0.211	0.011	-0.084
16	-0.084	-0.169	0.007	-0.068
17	-0.068	-0.135	0.005	-0.054
18	-0.054	-0.108	0.003	-0.043
19	-0.043	-0.086	0.002	-0.035
20	-0.035	-0.069	0.001	-0.028



plus vite !

Exemple : $f(x) = x^2$, $\frac{df}{dx} = 2x$, $\eta = 0.2$

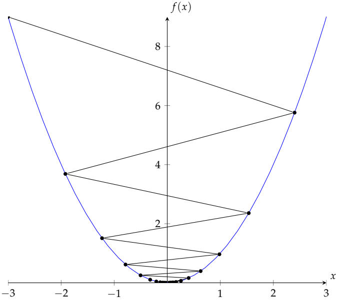
i	x	$2x$	x^2	$x - \eta \times 2x$
0	-3.000	-6.000	9.000	-1.800
1	-1.800	-3.600	3.240	-1.080
2	-1.080	-2.160	1.166	-0.648
3	-0.648	-1.296	0.420	-0.389
4	-0.389	-0.778	0.151	-0.233
5	-0.233	-0.467	0.054	-0.140
6	-0.140	-0.280	0.020	-0.084
7	-0.084	-0.168	0.007	-0.050
8	-0.050	-0.101	0.003	-0.030
9	-0.030	-0.060	0.001	-0.018
10	-0.018	-0.036	0.000	-0.011
11	-0.011	-0.022	0.000	-0.007
12	-0.007	-0.013	0.000	-0.004
13	-0.004	-0.008	0.000	-0.002
14	-0.002	-0.005	0.000	-0.001
15	-0.001	-0.003	0.000	-0.001
16	-0.001	-0.002	0.000	-0.001
17	-0.001	-0.001	0.000	-0.000
18	-0.000	-0.001	0.000	-0.000
19	-0.000	-0.000	0.000	-0.000
20	-0.000	-0.000	0.000	-0.000



encore plus vite !

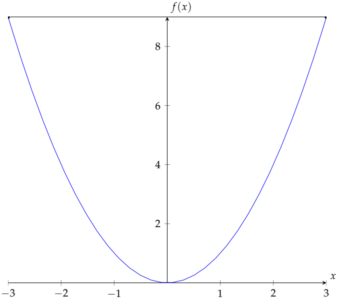
Exemple : $f(x) = x^2$, $\frac{df}{dx} = 2x$, $\eta = 0.9$

i	x	$2x$	x^2	$x - \eta \times 2x$
0	-3.000	-6.000	9.000	2.400
1	2.400	4.800	5.760	-1.920
2	-1.920	-3.840	3.686	1.536
3	1.536	3.072	2.359	-1.229
4	-1.229	-2.458	1.510	0.983
5	0.983	1.966	0.966	-0.786
6	-0.786	-1.573	0.618	0.629
7	0.629	1.258	0.396	-0.503
8	-0.503	-1.007	0.253	0.403
9	0.403	0.805	0.162	-0.322
10	-0.322	-0.644	0.104	0.258
11	0.258	0.515	0.066	-0.206
12	-0.206	-0.412	0.043	0.165
13	0.165	0.330	0.027	-0.132
14	-0.132	-0.264	0.017	0.106
15	0.106	0.211	0.011	-0.084
16	-0.084	-0.169	0.007	0.068
17	0.068	0.135	0.005	-0.054
18	-0.054	-0.108	0.003	0.043
19	0.043	0.086	0.002	-0.035
20	-0.035	-0.069	0.001	0.028



Exemple : $f(x) = x^2$, $\frac{df}{dx} = 2x$, $\eta = 1$

i	x	$2x$	x^2	$x - \eta \times 2x$
0	-3.000	-6.000	9.000	3.000
1	3.000	6.000	9.000	-3.000
2	-3.000	-6.000	9.000	3.000
3	3.000	6.000	9.000	-3.000
4	-3.000	-6.000	9.000	3.000
5	3.000	6.000	9.000	-3.000
6	-3.000	-6.000	9.000	3.000
7	3.000	6.000	9.000	-3.000
8	-3.000	-6.000	9.000	3.000
9	3.000	6.000	9.000	-3.000
10	-3.000	-6.000	9.000	3.000
11	3.000	6.000	9.000	-3.000
12	-3.000	-6.000	9.000	3.000
13	3.000	6.000	9.000	-3.000
14	-3.000	-6.000	9.000	3.000
15	3.000	6.000	9.000	-3.000
16	-3.000	-6.000	9.000	3.000
17	3.000	6.000	9.000	-3.000
18	-3.000	-6.000	9.000	3.000
19	3.000	6.000	9.000	-3.000
20	-3.000	-6.000	9.000	3.000



Sources

- Stewart, James. Essential calculus : Early transcendentals. Cengage Learning, 8ème édition, 2012