Cours accéléré Statistiques
Partie 2: Modèle linéaire
Master 2 Mathématiques et Applications

Christine Keribin

[1]Laboratoire de Mathématiques d'Orsay
Université Paris-Saclay

2023-2024

université PARIS-SACLAY

FACULTÉ DES SCIENCES D'ORSAY

L'UNIVERSITÉ PARIS-SUD devient en 2020 L'UNIVERSITÉ PARIS-SACLAY

Sommaire

Introduction

- Expliquer ou prédire une variable aléatoire réponse Y en fonction d'une liste de variables explicatives $X = (X_1, \ldots, X_p)$ observées sur des individus

$$Y = f(X)$$

- Modéliser Y par une fonction des variables explicatives X

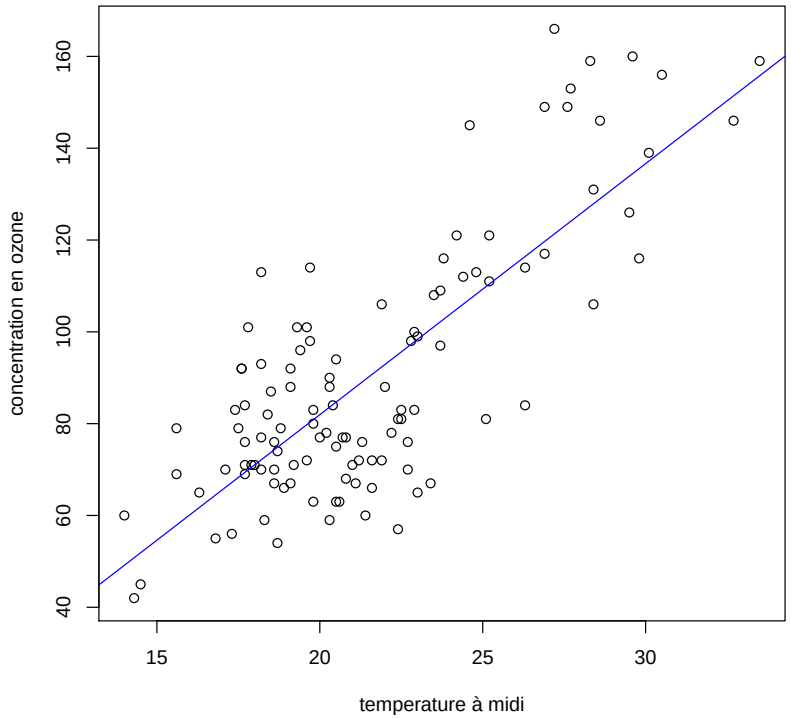
$$Y_{|X=x} = m(x) + \varepsilon$$

$m(x) = \mathbb{E}(Y|X = x)$ est la fonction de régression

  - choix est guidé par la connaissance d'un phénomène physique, biologique,...
  - ou non...
  - hypothèses de modélisation guidées par l'observation

- apprentissage supervisé

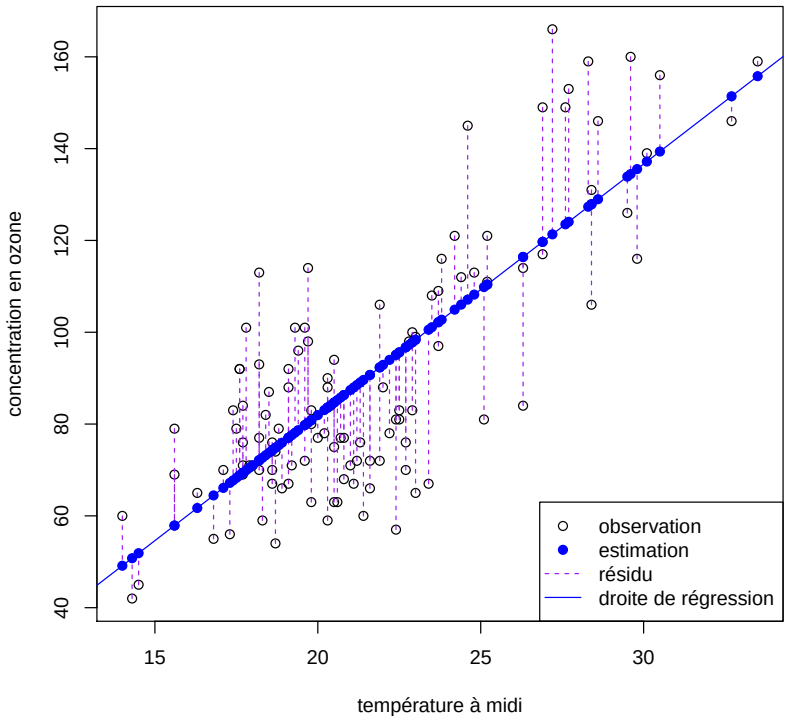
Exemple : régression linéaire (simple) [1]



$$Y_i = \underbrace{\theta_1 + \theta_2 x_i}_{\text{déterministe}} + \underbrace{\varepsilon_i}_{\text{bruit aléatoire}}$$

1. *http ://www.agrocampus-ouest.fr/math/livreR/*

Exemple : régression linéaire (simple)

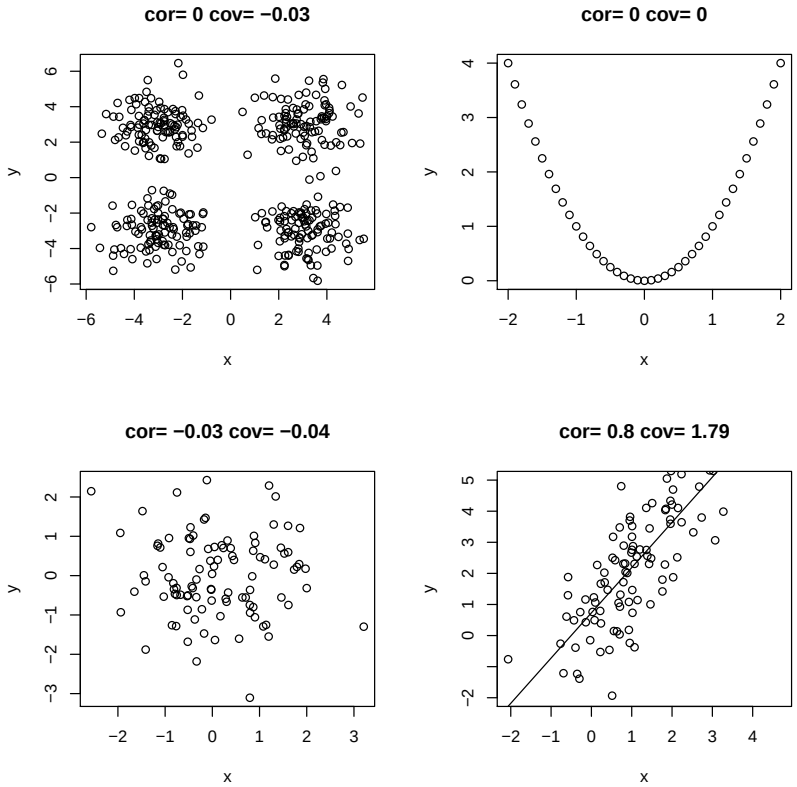


$\mathbb{E}(Y_i|\mathrm{x}_i) = \theta_1 + \theta_2 x_i$ est l'équation de la droite de régression [2] : modélise le comportement moyen pour chaque condition d'expérience $\hookrightarrow$ estimer $\theta = (\theta_1, \theta_2)$

2. "Régression" : Sir Galton (1822-1911)

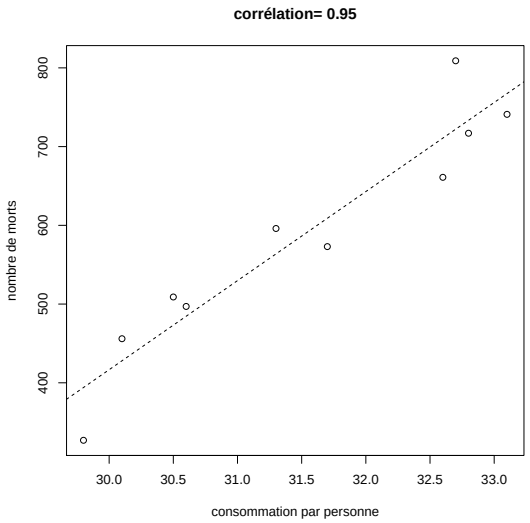
Que cherche-t-on à détecter ?

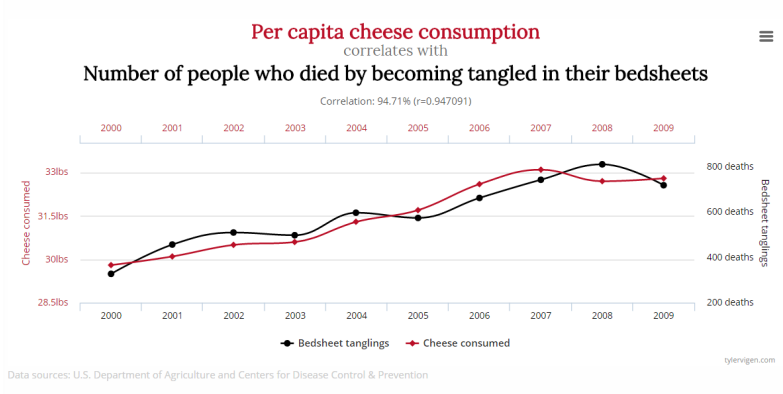
La corrélation entre Y et x... qui n'est que l'expression d'une liaison linéaire



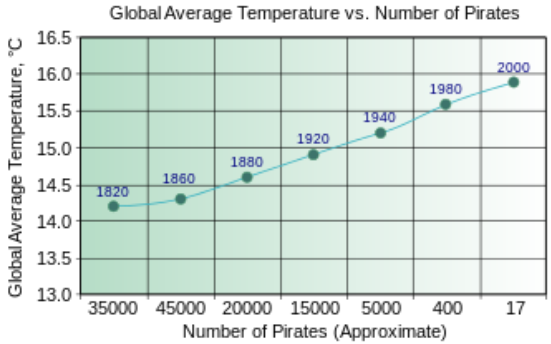
Une corrélation nulle n'indique pas forcément une absence de liaison

Mais attention : corrélation $\neq$ causalité





source : http ://tylervigen.com/spurious-correlations



source : Wikipédia

Apprentissage supervisé

- Données d'apprentissage :
  $\mathcal{D} = \{(\mathbf{X}_1, Y_1), \ldots, (\mathbf{X}_n, Y_n)\} \quad (\text{i.i.d.} \sim \mathbf{P})$
- Prédicteur : $f : \mathcal{X} \to \mathcal{Y}$ mesurable
- Fonction de perte ou de coût : $\ell(f(\mathbf{X}), Y)$ mesure avec quelle qualité $f(\mathbf{X})$ "prédit" Y, d'où le risque :

$$\mathcal{R}(f) = \mathbb{E}\ell(Y, f(\mathbf{X}))$$

$\hookrightarrow$ souvent $\ell(f(\mathbf{X}), Y) = \|f(\mathbf{X}) - Y\|^2$ ou $\ell(f(\mathbf{X}), Y) = \mathbf{1}_{Y \neq f(\mathbf{X})}$

But : apprendre une règle pour construire un classifieur / régresseur $\widehat{f} \in \mathcal{F}$ à partir des données d'apprentissage $\mathcal{D}_n$ avec un risque $\mathcal{R}(\widehat{f})$ petit en moyenne ou avec grande probabilité par rapport à $\mathcal{D}_n$.

Fonction de régression

Approcher Y par une fonction $h(X)$ de la variable X.
Risque quadratique :

$$R(h) = \mathbb{E}[(Y - h(X))^2] = \int (y - h(x))^2 dP(x, y).$$

Théorème

La fonction qui minimise le risque quadratique $R(.)$ est $m(X) = \mathbb{E}(Y|X)$, l'espérance de Y conditionnellement à X

$$\forall x, m(x) = \mathbb{E}(Y|X = x).$$

Elle est appelée fonction de régression.

- PB : on ne sait pas la calculer dans le cas général
- Si X est déterministe, on travaille également à $X = x$ fixé... et les développements sont identiques.

$\hookrightarrow$ poser des hypothèses de modélisation.

Bibliographie

J. Pagès. *Statistique générales pour utilisateurs*. Presses Universitaires de Rennes, Rennes, 2005.

J.-M. Azais et J.-M. Bardet. *Le modèle linéaire par l'exemple*. Dunod, Paris, 2005.

P.-A. Cornillon et E. Matzner-Løber. *Régression Théorie et applications*. Springer, Paris, 2007.

P.-A. Cornillon et al. *Statistiques avec R*. Presses Universitaires de Rennes, Rennes, 2008.

Sommaire

Régression linéaire : Y est une variable quantitative

à partir de n observations $(\mathrm{x}_1, Y_1), \ldots, (\mathrm{x}_n, Y_n)$

1. Modèle à bruit additif posant une relation de linéarité de l'espérance $\mathbb{E}(Y_i|\mathrm{x}_i)$ en un paramètre θ :

$$\begin{aligned} Y_i &= x_{i1}\theta_1 + \ldots + x_{ip}\theta_p + \varepsilon_i \\ &= \mathrm{x}_i\theta + \varepsilon_i, \end{aligned}$$

2. Les résidus sont centrés : $\mathbb{E}(\varepsilon_i|\mathrm{x}_i) = 0$.
3. La variance de l'erreur est constante : $\mathrm{var}(\varepsilon_i|\mathrm{x}_i) = \sigma^2$.
4. Les résidus sont décorrélés : $\mathrm{cov}(\varepsilon_i, \varepsilon_j|\mathrm{x}_i, \mathrm{x}_j) = 0$ pour $i \neq j$.
5. Eventuellement : ε_i est gaussien

$\hookrightarrow$ x_i est la valeur fixée des variables explicatives pour la i-ème observation. Elle n'est pas aléatoire

$\hookrightarrow$ $m(\mathrm{x}_i) = \mathrm{x}_i\theta$ est appelée fonction de régression

Modèle linéaire gaussien

- Matriciellement : $Y = X\theta + \varepsilon$

$$Y_{n\times 1} = X_{n\times p}\theta_{p\times 1} + \varepsilon_{n\times 1};$$

$$\mathbb{E}(\varepsilon_{n\times 1}) = 0; \quad \text{var}(\varepsilon_{n\times 1}) = \sigma^2 Id_n,$$

X est la matrice du plan d'expérience, concaténation des n vecteurs lignes x_i ou des p variables colonnes $X_j = (x_{1j}, \ldots, x_{nj})'$.
Remarque : En général, $\forall i, x_{i1} = 1$, X_1 est l'intercept.

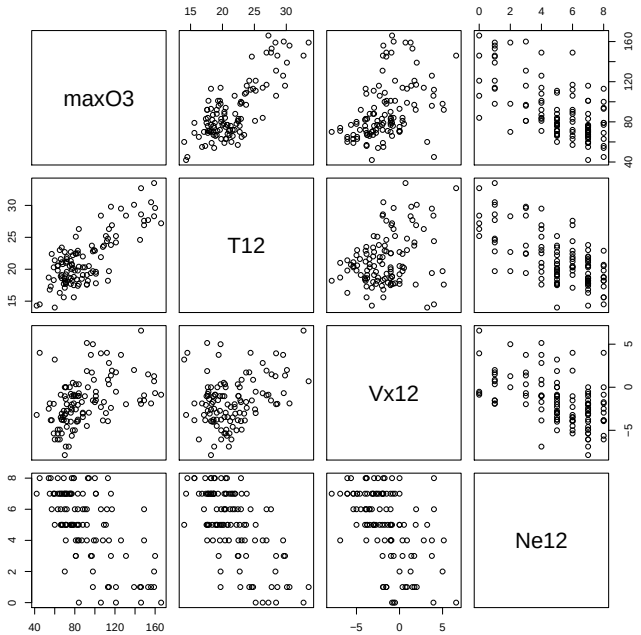
- Modèle linéaire gaussien

$$Y = m + \varepsilon; \quad \varepsilon \sim \mathcal{N}(0, \Sigma); \quad (\Sigma = \sigma^2 Id_n)$$

où $m \in V$, sous espace vectoriel de $\mathbb{R}^n$ de dimension p.

Régression multiple

- les covariables X sont quantitatives
- si $p = 2$ dont un intercept : régression simple
  $m(\mathrm{x}_i) = \theta_1 + \theta_2 x_i$; $\mathrm{x}_i = (1 \;\; x_i)$; $\theta = (\theta_1, \theta_2)'$
- si $p > 2$, régression multiple



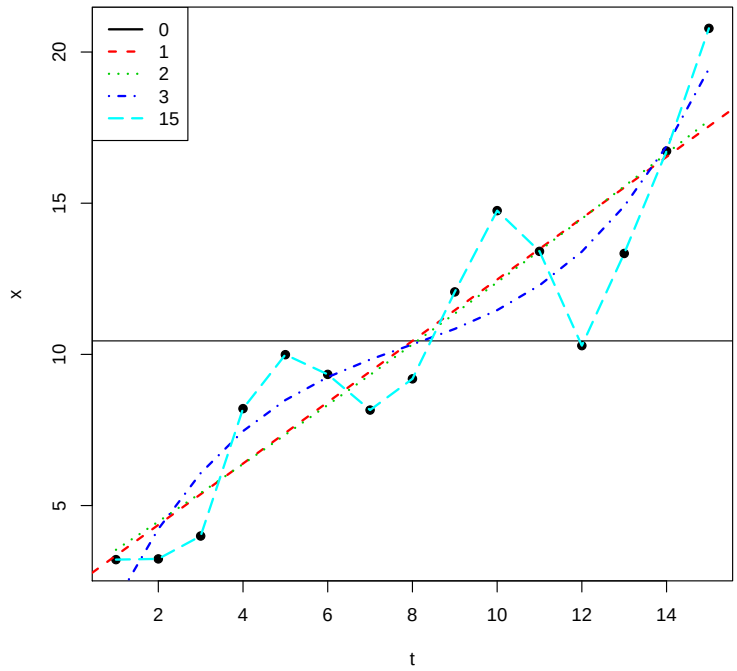
$$\texttt{maxO3} = \theta_1 + \texttt{T12}\ \theta_2 + \texttt{Vx12}\ \theta_3 + \texttt{Ne12}\ \theta_4 + \varepsilon$$

Régression polynomiale

Un cas particulier de régression multiple : régression polynômiale

$$Y_t = \theta_1 + t\theta_2 + t^2\theta_3 + t^3\theta_4 + \varepsilon_t$$

$$X = \begin{pmatrix} 1 & t_1 & \cdots & t_1^{p-1} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ 1 & t_n & \cdots & t_n^{p-1} \end{pmatrix}$$



Un régression linéaire (en θ) peut permettre de représenter un phénomène non-linéaire (en t)

Identifiabilité

Définition : deux paramètres différents définissent deux lois différentes

Théorème (CNS d'identifiabilité)

La paramétrisation $\mathbb{E}(Y) = X\theta$ est identifiable si et seulement si l'une des propriétés équivalentes suivantes est vérifiée :

- *les colonnes de X sont indépendantes,*
- *X est de rang plein,*
- *X est injective,*
- *$Ker(X) = \{0\}$.*

Définition

On appelle dimension du modèle la dimension de $Im(X)$.
On a : $dim(Im(X)) \leq dim(\theta)$

$\hookrightarrow$ On suppose dans la suite que le modèle est identifiable ou régulier.

Sommaire

Estimateur des Moindres Carrés (EMC)

Recherche un estimateur de θ sous forme d'un minimiseur de la somme des carrés résiduels $SCR(\theta) = ||Y - X\theta||^2$:

$$\widehat{\theta} = \arg\min_{\theta \in \Theta} ||Y - X\theta||^2.$$

On a : $\widehat{\theta} = (X'X)^{-1}X'Y$

Proposition

$\widehat{Y} := \widehat{\mathbb{E}(Y)} = X\widehat{\theta} = H_X Y$ *est la projection orthogonale de* Y *sur* $Im(X)$ *:*

$$H_X = X(X'X)^{-1}X'$$

- H_X : Hat matrix
- $\widehat{Y}$: valeurs ajustées
- $\widehat{\varepsilon} = Y - \widehat{Y}$: résidus (estimés)
- la droite de régression $y = x\widehat{\theta}$ passe par le point moyen $(\bar{Y}, \bar{X}^{(1)}, \ldots, \bar{X}^{(p)})$

Exemple : régression linéaire (simple)

Le modèle s'écrit $Y = \theta_1 \mathbb{1} + \theta_2 X_2 + \varepsilon$, où $\mathbb{1}$ est l'intercept, et $X_2 = (x_1, \ldots, x_n)'$

$$X'X = \begin{pmatrix} n & \sum_i x_i \\ \sum_i x_i & \sum_i x_i^2 \end{pmatrix}$$

$$(X'X)^{-1} = \frac{1}{n\sum_i x_i^2 - \sum_i x_i \sum_i x_i} \begin{pmatrix} \sum_i x_i^2 & -\sum_i x_i \\ -\sum_i x_i & n \end{pmatrix}$$

soit

$$\widehat{\theta} = (X'X)^{-1}X'Y = \begin{pmatrix} \widehat{\theta}_1 = \bar{Y} - \bar{x}\widehat{\theta}_2 \\ \widehat{\theta}_2 = \frac{(\frac{1}{n}\sum_i x_i Y_i) - \bar{x}\bar{Y}}{(\frac{1}{n}\sum_i x_i^2) - \bar{x}^2} \end{pmatrix}$$

La droite de régression estimée $\widehat{y} = \widehat{\theta}_1 + \widehat{\theta}_2 x$ passe par le point moyen $(\overline{x}, \overline{Y})$.

Propriétés ne nécessitant pas l'hyp. gaussienne

Proposition

L'EMC $\widehat{\theta}$ de θ est

- *sans biais* : $\mathbb{E}(\widehat{\theta}) = \theta$
- *de variance* $\text{var}(\widehat{\theta}) = \sigma^2(X'X)^{-1}$.

De plus, $\widehat{\theta}$ vérifie la propriété de Gauss-Markov :

Théorème (Gauss-Markov)

Parmi les estimateurs linéaires et sans biais de θ, l'EMCO $\widehat{\theta}$ est de variance minimum.

Estimateurs de la variance σ^2 :

- $\widehat{s}^2 = SCR(\widehat{\theta})/n$ est biaisé à distance finie, et asymptotiquement sans biais
- $\widehat{\sigma}^2 = SCR(\widehat{\theta})/(n-p)$ est sans biais

Estimateur du Maximum de Vraisemblance (EMV)

Si la loi de ε est connue (gaussienne), la vraisemblance de l'échantillon est

$$L_n(\theta, \sigma^2; Y) = \frac{1}{(\sqrt{2\pi\sigma^2})^n} \exp\left(-\frac{1}{2\sigma^2} \underbrace{||Y - X\theta||^2}_{SCR(\theta)} \right).$$

L'EMV $\widehat{\beta} = (\widehat{\theta}, \widehat{s}^2)$ est

$$\widehat{\beta} = \arg \max_{\beta \in \mathbb{R}^p \times \mathbb{R}^{+*}} \log L_n(\beta; Y).$$

D'où

$$\widehat{\theta} = (X'X)^{-1}X'Y.$$

... identique à l'EMC. L'EMV de σ^2 est

$$\widehat{s}^2 = \frac{1}{n}||Y - X\widehat{\theta}||^2 = \frac{1}{n}SCR(\widehat{\theta})$$

Sommaire

Cas gaussien

Théorème

L'EMV $\widehat{\beta} = (\widehat{\theta}, \widehat{s}^2)$ du modèle linéaire gaussien

$$Y = X\theta + \varepsilon, \quad \varepsilon \sim \mathcal{N}_n(0, \sigma^2 I_n), \quad \theta \in \mathbb{R}^p, \quad \sigma \in \mathbb{R}^{+*},$$

supposé régulier, suit la loi suivante :

$$\widehat{\theta} \sim \mathcal{N}\left(\theta, \sigma^2 (X'X)^{-1}\right); \quad \widehat{s}^2 = \frac{||Y - X\widehat{\theta}||^2}{n} \sim \frac{\sigma^2}{n}\chi^2(n-p).$$

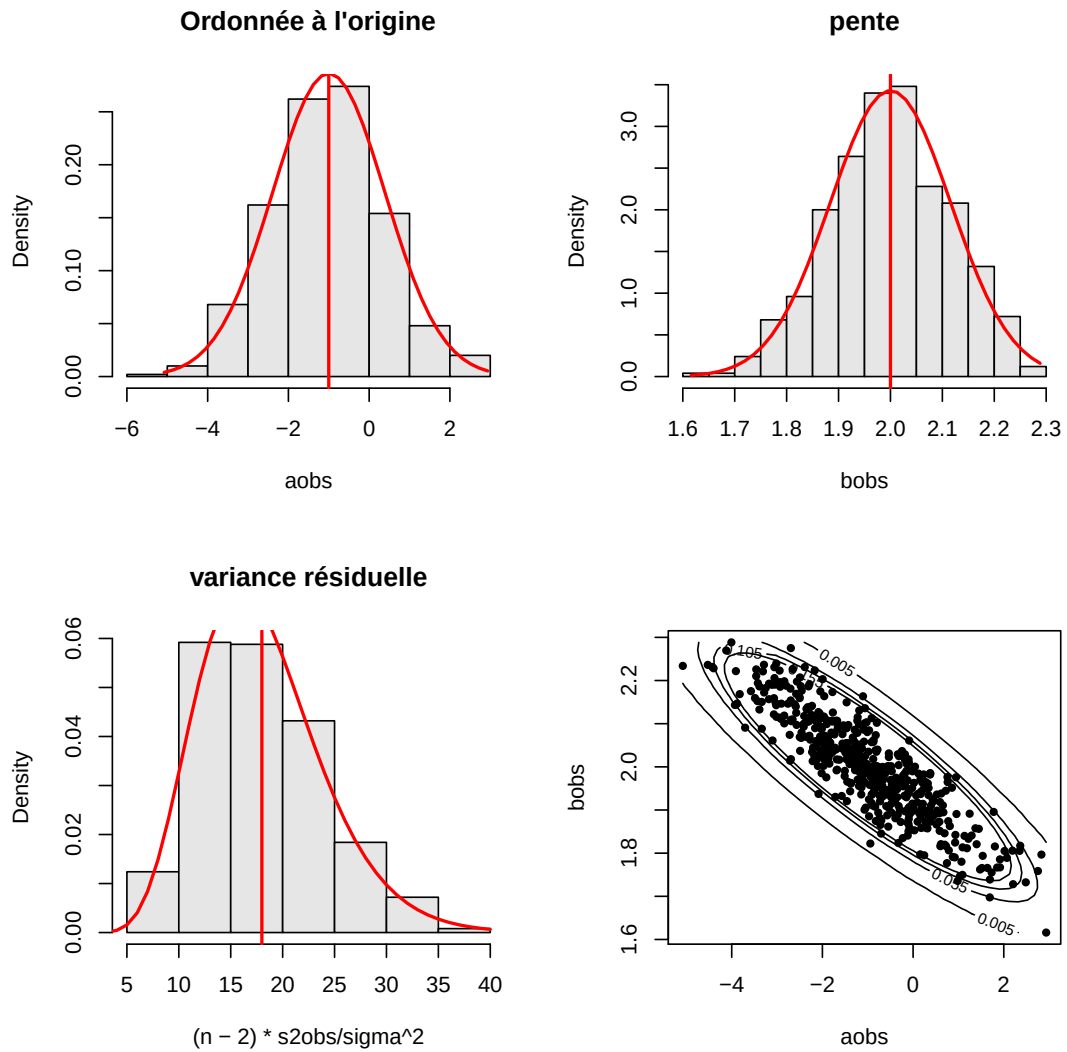
De plus, $\widehat{\theta}$ et $\widehat{s}^2$ sont indépendants

Csq : Soit A une matrice $q \times p$ de rang $q \leq p$

$$A\widehat{\theta} \sim \mathcal{N}_q(A\theta, \sigma^2 A(X'X)^{-1}A')$$

Illustration simulée

500 échantillons (Y, X) de taille $n = 30$, avec $x = 1 : 30$ et $m(x) = -1 + 2x$



Cas gaussien

Quand ε est gaussien, on utilise plutôt l'estimateur non biaisé de la variance $\widehat{\sigma}^2 = ||Y - X\widehat{\theta}||^2/(n-p)$

Résultats

- $\widehat{\theta}_{MV} = \widehat{\theta}_{MC}$ et $\widehat{\sigma}^2$ sont indépendants
- $\widehat{\theta} \sim \mathcal{N}(\theta, \sigma^2(X'X)^{-1})$, $(n-p)\widehat{\sigma}^2/\sigma^2 \sim \chi^2(n-p)$
- pour toute matrice L non nulle de dimension $(1 \times p)$: $(L(X'X)^{-1}L')^{-1/2}(L\widehat{\theta} - L\theta)/\widehat{\sigma} \sim \mathcal{T}(n-p)$
- pour toute matrice A de dimension $q \times p$ et de rang $q \leq p$: $(A(\widehat{\theta}-\theta))'[A(X'X)^{-1}A']^{-1}A(\widehat{\theta}-\theta)/(r\widehat{\sigma}^2) \sim \mathcal{F}(r, n-p)$

Intervalle de confiance d'une espérance

Théorème

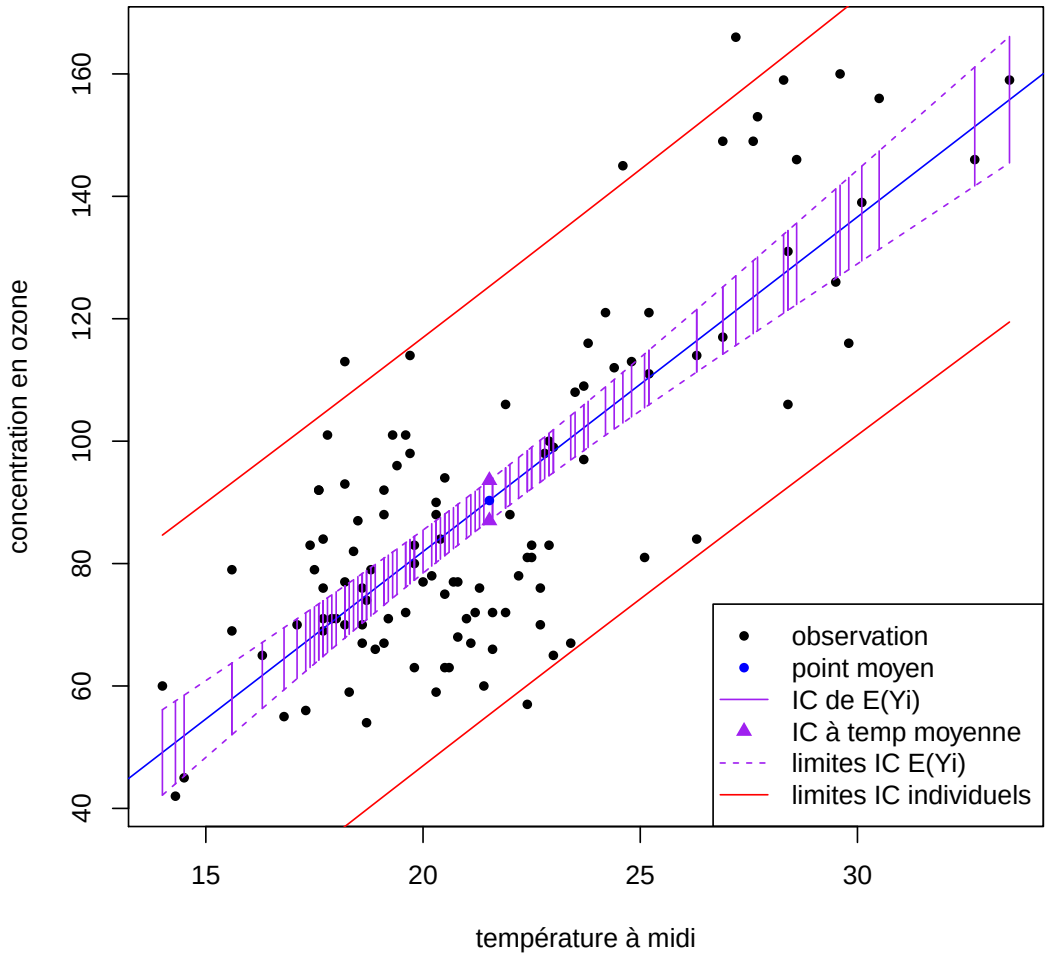
Soit L une matrice de dimension $1 \times p$. Un intervalle de confiance de niveau $1-\alpha$ d'une forme linéaire de $L\theta$ est donné par

$$\left[L\widehat{\theta} \pm q_{1-\alpha/2}^{\mathcal{T}_{n-p}} \widehat{\sigma} \sqrt{L(X'X)^{-1}L'} \right],$$

où $q_{1-\alpha/2}^{\mathcal{T}_{n-p}}$ est le quantile d'ordre $1-\alpha/2$ de la loi de Student à $n-p$ degrés de liberté.

Applications : IC d'une composante de θ, IC de $\mathbb{E}(Y|\mathrm{x}_0)$

IC d'une valeur moyenne ou d'une prédiction individuelle



Intervalle de confiance d'une prévision

A partir de n observations ($\hookrightarrow \widehat{\theta}$), prédire une nouvelle observation individuelle indépendante sous la condition d'expérience $\mathrm{x}_{n+1} = (x_{n+1,1}, \ldots, x_{n+1,p})$

- modèle : $Y_{n+1} = \mathrm{x}_{n+1}\theta + \varepsilon_{n+1}$,
- observation prédite : $\widehat{Y}^p_{n+1} = \mathrm{x}_{n+1}\widehat{\theta}$
- erreur de prévision

$$\widehat{\varepsilon}^p_{n+1} = Y_{n+1} - \widehat{Y}^p_{n+1},$$

$\mathbb{E}(\widehat{\varepsilon}^p_{n+1}) = 0$, $\mathrm{var}(\widehat{\varepsilon}^p_{n+1}) = \sigma^2(\mathrm{x}_{n+1}(X'X)^{-1}\mathrm{x}'_{n+1} + 1)$.

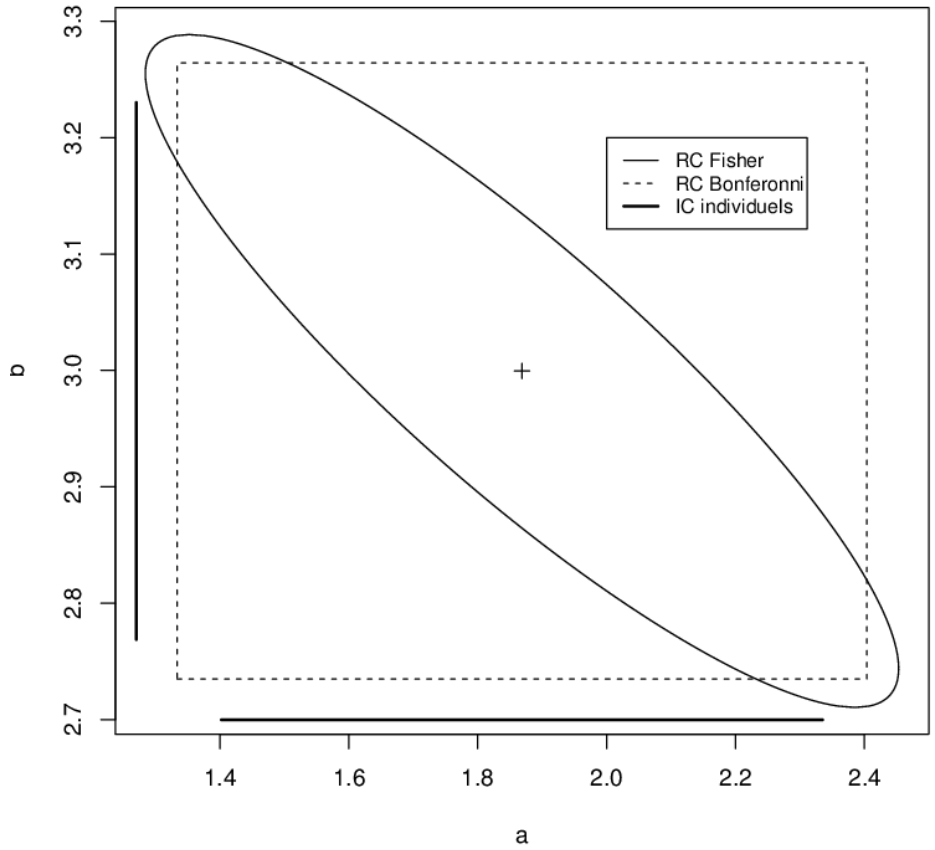
- IC de prévision de niveau $1-\alpha$:

$$\left[\mathrm{x}_{n+1}\widehat{\theta} \pm q^{\mathcal{T}_{n-p}}_{1-\alpha/2}\widehat{\sigma}\sqrt{\mathrm{x}_{n+1}(X'X)^{-1}\mathrm{x}'_{n+1} + 1}\right].$$

Région de confiance simultanée (Bonferroni)

$$\mathbb{P}\left((\theta_1, \theta_2) \notin RC_\alpha(\theta_1, \theta_2)\right)$$
$$\leq \mathbb{P}(\theta_1 \notin IC_{1-\alpha/2}(\theta_1)) + \mathbb{P}(\theta_2 \notin IC_{1-\alpha/2}(\theta_2)) \leq \alpha.$$

K intervalles de confiance de Bonferroni de risque α/K forment une région de confiance de risque simultané α.



Région de confiance simultanée (autre méthode)

Théorème

Soit A une matrice de dimension $q \times p$ et de rang q. Une région de confiance de Wald de niveau $1-\alpha$ de $A\theta$ est donnée par

$$RC_\alpha(A\theta) =$$

$$\{u \in \mathbb{R}^q, \frac{1}{r\widehat{\sigma}^2}(A\widehat{\theta} - Au)'[A(X'X)^{-1}A']^{-1}(A\widehat{\theta} - Au) \leq f_{r,n-p,1-\alpha}\}$$

où $f_{r,n-p,1-\alpha}$ est le quantile d'ordre $1-\alpha$ de la loi de $\mathcal{F}(r, n-p)$.

Sommaire

Test de Student

Test d'une relation affine des composantes du paramètre $L\theta = c$, avec L matrice ligne de dimension p.

- test bilatéral : $H_0 : L\theta = c$ contre $H_1 : L\theta \neq c$
- statistique de test

$$T = \frac{L\widehat{\theta} - c}{\widehat{\sigma}\sqrt{L(X'X)^{-1}L'}} \sim_{H_0} \mathcal{T}(n-p),$$

- région de rejet du test bilatère de risque α

$$\mathcal{R}_\alpha = \{|T| > t_{n-p,1-\alpha/2}\}.$$

- utilisé pour tester la significativité (non-nullité) d'une composante de θ

Remarque : test unilatéral : $H_0 : L\theta = c$ contre $H_1 : L\theta < c$ de région de rejet à gauche :

$$\mathcal{R}_\alpha = \{T < t_{n-p,\alpha}\}.$$

Exemple : $Y = \mu + \beta_1 V1 + \beta_2 V2 + \beta_3 V3 + \varepsilon$

```
> out=lm(Y~V1+V2+V3, data=df); summary(out)

Coefficients:
            Estimate Std. Error t value Pr(>|t|)
(Intercept) -20.3129    51.8246  -0.392    0.701        H0       H1
V1           -3.2241     3.6100  -0.893    0.386      ~V2+V3 vs ~V1+V2+V3
V2            0.2334     0.2768   0.843    0.412      ~V1+V3 vs ~V1+V2+V3
V3           20.3895     1.2662  16.103  7.1e-11 ***  ~V1+V2 vs ~V1+V2+V3

Residual standard error: 4.163 on 15 degrees of freedom
F-statistic: 584.6 on 3 and 15 DF,  p-value: 9.386e-16
```

Test de Wald avec loi exacte

Modèle emboîté $\omega \subset \Omega$ défini par des hypothèses affines : $A\theta = c$ contre $A\theta \neq c$, A matrice $r \times p$ de rang r, $dim(\omega) = p - r = q$

$$W_{exact} = W/r = W = \frac{1}{r\widehat{\sigma}^2}(A\widehat{\theta} - c)'[A(X'X)^{-1}A']^{-1}(A\widehat{\theta} - c) \sim_{(H_0)} \mathcal{F}(r, n-p)$$

- tester la significativité globale de la régression : tous les coeff. sont nuls sauf celui de l'intercept : $(H_0) : A\theta = 0$ contre $(H_0) : A\theta \neq 0$

$$A = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

```
F-statistic: 584.6 on 3 and 15 DF,  p-value: 9.386e-16
```

- tester des modèles emboîtés.

Petite interprétation géométrique

Soit ω un sev de $\Omega \in \mathbb{R}^n$, $dim(\omega) = q < dim(\Omega) = p$.

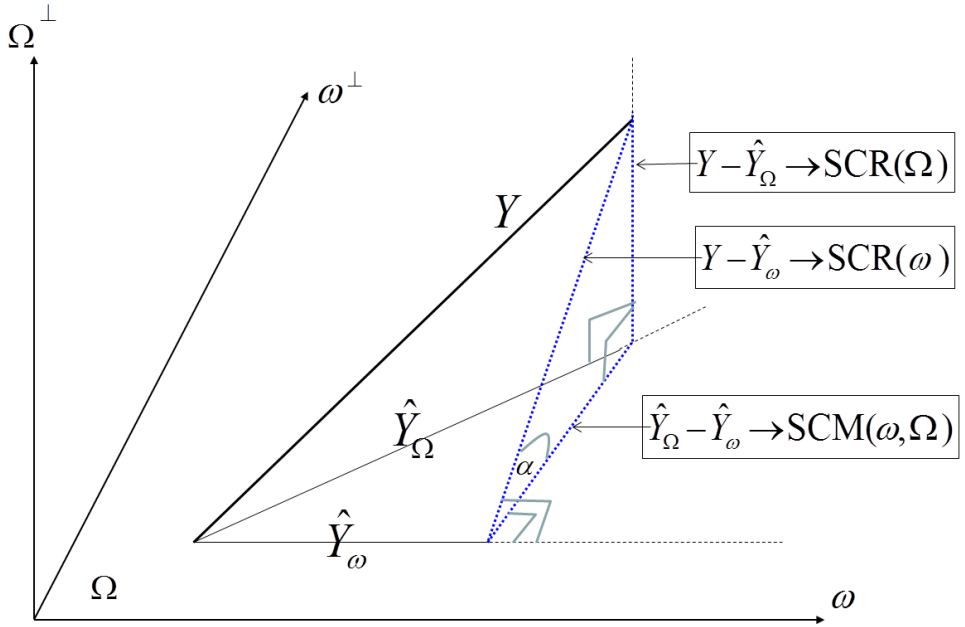
On note $\widehat{Y}_\Omega = H_\Omega(Y)$. On a :

$$||Y - \widehat{Y}_\omega||^2 = ||\widehat{Y}_\Omega - \widehat{Y}_\omega||^2 + ||Y - \widehat{Y}_\Omega||^2$$

$$\text{SCR}(\omega) = \text{SCM}(\omega,\Omega) + \text{SCR}(\Omega).$$

$$F = \frac{(\text{SCR}(\omega) - \text{SCR}(\Omega))/(p-q)}{\text{SCR}(\Omega)/(n-p)} = \frac{\text{SCM}(\omega,\Omega)/(p-q)}{\text{SCR}(\Omega)/(n-p)}$$

$$\sim_\omega \mathcal{F}(p-q, n-p).$$



Test de Fisher

Théorème (Test de Fisher d'un sous-modèle linéaire)

Soit le modèle linéaire gaussien $Y = m + \varepsilon, m \in \Omega$, $\varepsilon \sim \mathcal{N}(0, I_n)$, *de dimension* $dim(\Omega) < n$. *Soit* ω *un sev de* Ω *tel que* $dim(\omega) = q < p$. *Le test de Fisher*

$$H_0 : m \in \omega \text{ contre } H_1 : m \in \Omega \backslash \omega.$$

de région de rejet

$$\mathcal{R}_\alpha = \{F > f_{p-q,n-p,1-\alpha}\},$$

où $f_{p-q,n-p,1-\alpha}$ *est le quantile de la loi de Fisher* $\mathcal{F}(p-q, n-p)$, *est de niveau* α.

- $= W_{exact}$ quand ω est défini par $A\theta = 0$
- = test du rapport des vraisemblances maximales avec loi exacte

Application : tableau d'analyse de la variance

$(H_0) : \omega$ contre $(H_1) : \Omega \setminus \omega$ tq. $\omega \subset \Omega$, $dim(\omega) = q$, $dim(\Omega) = p$

Source	Res.Df	RSS	Df	Sum of Sq	F	Prob>F
ω	$n-q$	$SCR(\omega)$				
Ω	$n-p$	$SCR(\Omega)$	$p-q$	$SCM(\omega,\Omega)$	$f_{obs} = \frac{SCM/(p-q)}{SCR(\Omega)/(n-p)}$	p-value

```
> anova(lm(Y~1,data=df), lm(Y~.,data=df))
Model 1: Y ~ 1
Model 2: Y ~ V1+V2+V3

  Res.Df   RSS Df Sum of Sq      F    Pr(>F)
1     18 30654
2     15   260  3     30394 584.55 9.386e-16 ***

#F-statistic: 584.6 on 3 and 15 DF,  p-value: 9.386e-16
```

Tableau d'analyse de la variance

Une autre utilisation de la fonction anova

```
> anova(lm(Y~.,data=df))
Response: Y
          Df  Sum Sq Mean Sq F value    Pr(>F)
V1         1 18252.3 18252.3 1053.11 2.603e-15 ***
V2         1  7647.5  7647.5  441.24 1.548e-12 ***
V3         1  4494.2  4494.2  259.31 7.101e-11 ***
Residuals 15   260.0    17.3
```

(H_0)	(H_1)
iid: Y~1	Y~V1
Y~V1	Y~V1+V2
Y~V1+V2	Y~V1+V2+V3

Exemple (suite)

```
> anova(lm(Y~.,data=df))
Response: Y
          Df  Sum Sq Mean Sq F value    Pr(>F)
V1         1 18252.3 18252.3 1053.11 2.603e-15 ***
V2         1  7647.5  7647.5  441.24 1.548e-12 ***
V3         1  4494.2  4494.2  259.31 7.101e-11 ***
Residuals 15   260.0    17.3
```

```
> anova(lm(Y~V3+V2+V1,data=df))
Response: y
          Df  Sum Sq Mean Sq   F value Pr(>F)
V3         1 30377.9 30377.9 1752.7292 <2e-16 ***
V2         1     2.3     2.3    0.1349 0.7186
V1         1    13.8    13.8    0.7976 0.3859
Residuals 15   260.0    17.3
```

Attention à l'ordre des termes quand les variables explicatives ne sont pas orthogonales

Sommaire

Validation

- L'étape de validation fait partie intégrante de la démarche statistique
- Elle peut remettre en cause le modèle initialement choisi, donner des idées de modifications pour repartir pour un tour...
- Outils : tests, critères, étude graphique
  $\hookrightarrow$ étude des résidus

Critère du R^2

Si ω est le modèle iid (constant) :

- Coefficient de détermination

$$R^2 = \frac{SCM}{SCT} = \frac{||\widehat{Y} - \bar{y}\mathbb{1}||^2}{||Y - \bar{y}\mathbb{1}||^2} = \cos^2 \alpha$$

  Part de la variabilité expliquée par le modèle sur la variabilité totale

- Indication de la qualité d'ajustement, mais pas forcément de la qualité de prévision
- Pour compte de la dimension de $Im(X)$: $\hookrightarrow$ R^2 ajusté :

$$R_a^2 = 1 - \frac{n-1}{n-p} \frac{||\widehat{\epsilon}||^2}{||Y - \bar{y}\mathbb{1}||^2}$$

```
Multiple R-squared:  0.9915,Adjusted R-squared:  0.9898
```

Tests utiles

- Significativité globale : test de Fisher du modèle iid contre le modèle d'étude.
- Significativité d'un régresseur : $\hookrightarrow$ des stratégies de sélection de variables.
- Adéquation : comparer le modèle d'étude Ω à un surmodèle Ω_S peu contestable qui contient Ω
- Hypothèse gaussienne : test de Kolmogorov-Smirnov ou test de Shapiro-Wilks.

Propriété des résidus

Proposition

Dans le modèle linéaire gaussien, les résidus $\widehat{\varepsilon} = Y - \widehat{Y}$ *possèdent les propriétés suivantes :*

- *centrés :* $\mathbb{E}(\widehat{\varepsilon}) = 0$.
- *hétéroscédastiques :* $\text{var}(\widehat{\varepsilon}) = \sigma^2(I - H)$.
- *décorrélés avec les valeurs estimées :* $\text{cov}(\widehat{Y}, \widehat{\varepsilon}) = 0$.
- *Si* $\mathbb{1} \in Im(X)$, *les résidus estimés sont linéairement dépendants*.

Différents résidus

- Les résidus normalisés éliminent l'hétéroscédasticité

$$r_i = \frac{\widehat{\varepsilon}_i}{\sigma\sqrt{1-h_{ii}}}.$$

- résidus standardisés, parfois également appelés studentisés : de variance 1

$$t_i = \frac{\widehat{\varepsilon}_i}{\widehat{\sigma}\sqrt{1-h_{ii}}}.$$

- Les résidus studentisés par validation croisée sont définis par

$$t_i^* = \frac{\widehat{\varepsilon}_i}{\widehat{\sigma}_{(i)}\sqrt{1-h_{ii}}}.$$

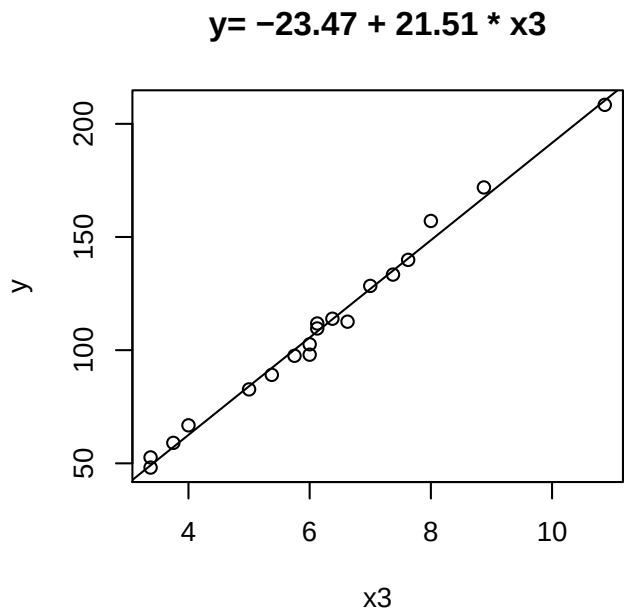
où $\widehat{\sigma}_{(i)}$ est calculé dans un échantillon privé de l'observation i. Dans le cas gaussien, $t_i^* \sim \mathcal{T}(n-1-p)$.
$\hookrightarrow$ points aberrants

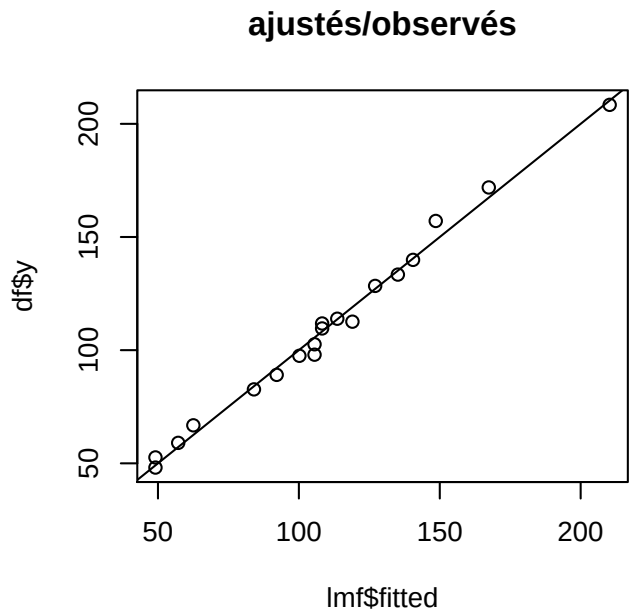
Visualisations

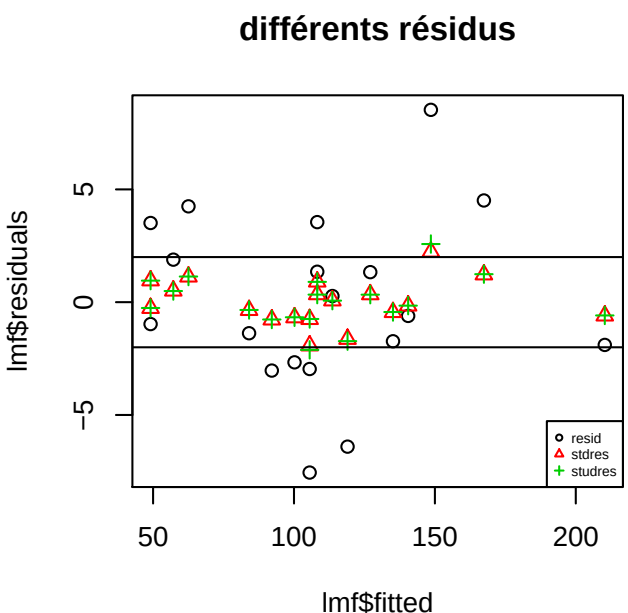
Différents types de graphiques permettent une étude visuelle :

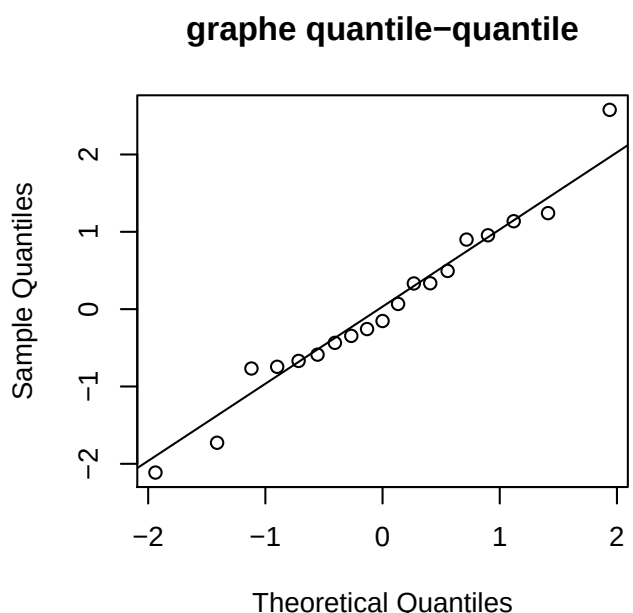
- valeurs estimées en fonction de valeurs observées,
- résidus en fonction des valeurs estimées,
- résidus en fonction d'une valeur de covariable,
- résidus de l'observation $i+1$ en fonction du résidu de l'observation i,
- graphe quantile/quantile des résidus.

Exemple de diagnostics visuels





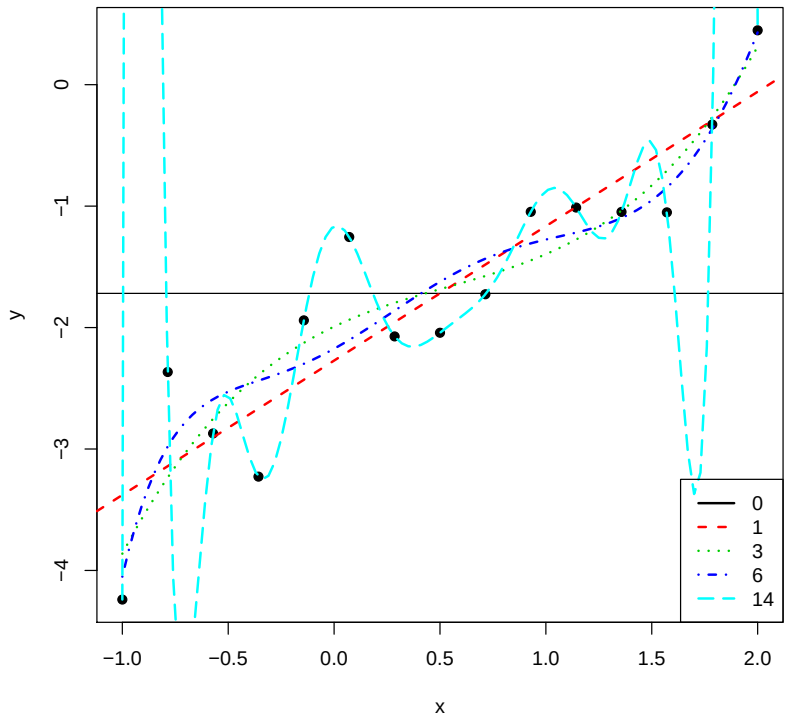




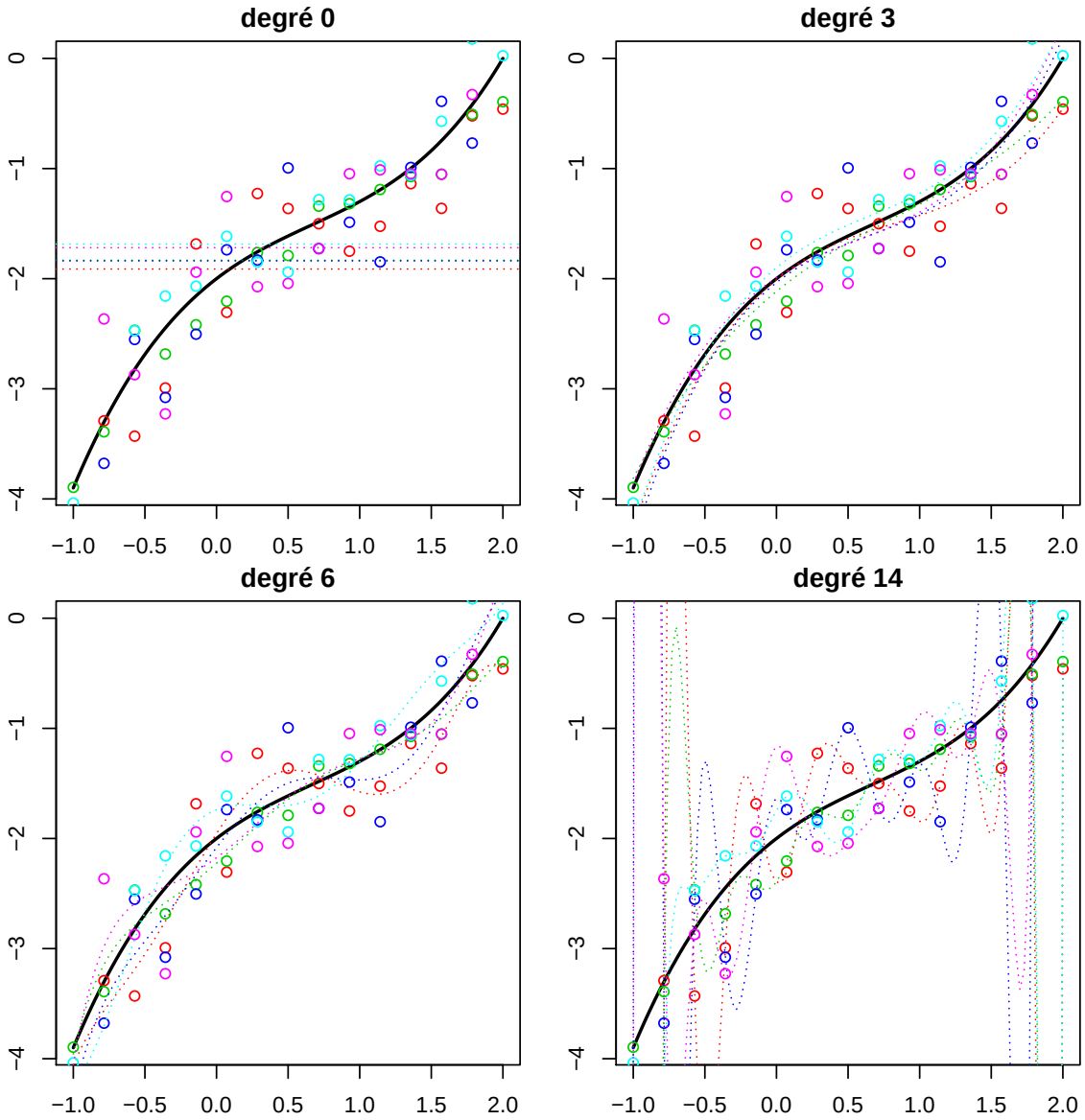
Sommaire

Apprentissage supervisé

- as so far : recherche d'un modèle minimisant l'erreur empirique sur un ensemble donné d'observations
- Choix entre
  - $\neq$ modélisations (choix de $\mathcal{L}$, de la fonction de régression m, ...)
  - plusieurs régresseurs (sélection de variables)
  - $\neq$ règles de prédiction/classification



Choix de modèle



Comprendre ou prévoir ?

- L'objectif n'est pas tant de comprendre/expliquer que de prédire
  - ↪ Estimer un paramètre de la loi (objectif stat)
  - ↪ Prédire aussi bien que la meilleure des règles d'apprentissage en terme de risque (objectif ML)
- Définir et établir la performance du modèle
- Choisir un modèle

Modèle

- On appelle modèle un ensemble de fonctions $\mathcal{S}$

  Ex : régression linéaire simple, régression polynomiale d'ordre 3, modèle logistique avec lien probit et 3 covariables, fonctions étagées

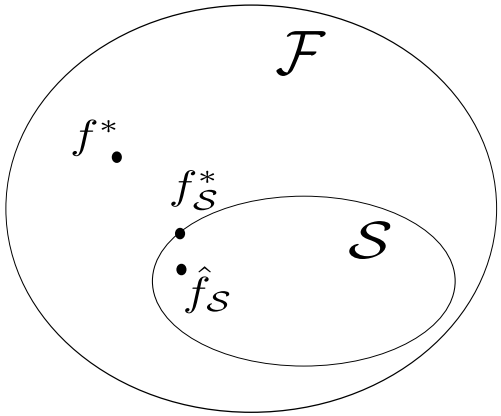
- On appelle famille de modèles, une collection $\mathcal{G}$ de modèles

  Ex : cas de sélection de variables on peut identifier les variables par un numéro :

  - famille exhaustive : $\mathcal{G} = \mathcal{P}(1 \cup \{2, \ldots, p\})$
  - famille emboîtée : $\mathcal{G} = \{\{1, \ldots, j\}_{1 \leq j \leq p}\}$

Cadre

$\mathcal{F} = \{\text{fonctions mesurables } \mathcal{X} \to \mathcal{Y}\}$



- meilleure solution : $f^* = \arg\min_{f \in \mathcal{F}} \mathcal{R}(f)$
- Modèle $\mathcal{S} \subset \mathcal{F}$
- meilleure solution dans $\mathcal{S}$: $f^*_{\mathcal{S}} = \arg\min_{f \in \mathcal{S}} \mathcal{R}(f)$
- Estimation dans $\mathcal{S}$: $\widehat{f_{\mathcal{S}}}$

Décomposition du risque

$$\mathcal{R}(\widehat{f}_{\mathcal{S}}) - \mathcal{R}(f^*) = \underbrace{\mathcal{R}(\widehat{f}_{\mathcal{S}}) - \mathcal{R}(f^*_{\mathcal{S}})}_{\text{Estimation error}} + \underbrace{\mathcal{R}(f^*_{\mathcal{S}}) - \mathcal{R}(f^*)}_{\text{Approximation error}}$$

- erreur d'approx. peut être grande si $\mathcal{S}$ n'est pas adapté
- erreur d'estim. peut être grande si le modèle est complexe : sur-apprentissage

$\hookrightarrow$ Dans la collection de modèles $\mathcal{G}$, trouver $\mathcal{S}$ permettant d'obtenir l'estimateur de plus petit risque, réalisant un compromis biais-variance

Exemple :

- On suppose un modèle linéaire

$$Y = X_* \theta_* + \varepsilon \text{ où } \varepsilon \sim \mathcal{N}(0, \sigma_*^2)$$

- On considère le risque quadratique

Conséquence d'une sur-paramétrisation

Pas d'oubli de variables, mais certaines sont superflues

(ω) : $\mathbb{E}(Y) = X_1\theta_1$ (vrai modèle, inconnu),
$dim(\theta_1) = q$, $dim(X_1) = n \times q$

(Ω) : $\mathbb{E}(Y) = X\theta$ (modèle de travail), avec $\theta = (\theta_1', \theta_2')'$ de dimension p et $X = [X_1 X_2]$ de dimension $n \times p$.

Le vrai paramètre dans Ω est $\theta_* = (\theta_1', 0')'$, est estimé par $\hat{\theta}_\Omega = (X'X)^{-1}X'Y$:

- $\hat{\theta}_\Omega$, $\hat{Y}_\Omega = X\hat{\theta}_\Omega$ et $\widehat{\sigma}^2_\Omega = SCR/(n-p)$ sont sans biais
- avec une variance plus forte

$$\underbrace{[(X_1'X_1 - X_1'X_2(X_2'X_2)^{-1}X_2'X_1)^{-1}}_{[\text{var}(\widehat{\theta}_\Omega)]_{1:q\times 1:q}} \geq \underbrace{(X_1'X_1)^{-1}}_{\text{var}(\widehat{\theta}_\omega)}$$

Conséquence d'une sous-paramétrisation

Oubli de covariables.

(ω) : $\mathbb{E}(Y) = X_1\theta_1$ (modèle de travail)

(Ω) : $\mathbb{E}(Y) = X\theta$ (vrai modèle, inconnu), avec $\theta = (\theta_1', \theta_2')'$ de dimension p et $X = [X_1 X_2]$

$\widehat{\theta}_\omega$, $\widehat{Y}_\omega$, et $\widehat{\sigma}^2_\omega$ en général biaisés et de plus faible variance.

Erreur quadratique moyenne (EQM)

Risque quadratique d'utiliser $\widehat{\theta}$ à la place de θ_*

$$EQM(\widehat{\theta}) = \mathbb{E}(||\theta_* - \widehat{\theta}||^2)$$

Risque quadratique d'utiliser $\widehat{F} = F(\widehat{\theta}_\omega, X_\omega)$ à la place de $F_*(\theta_*, X)$

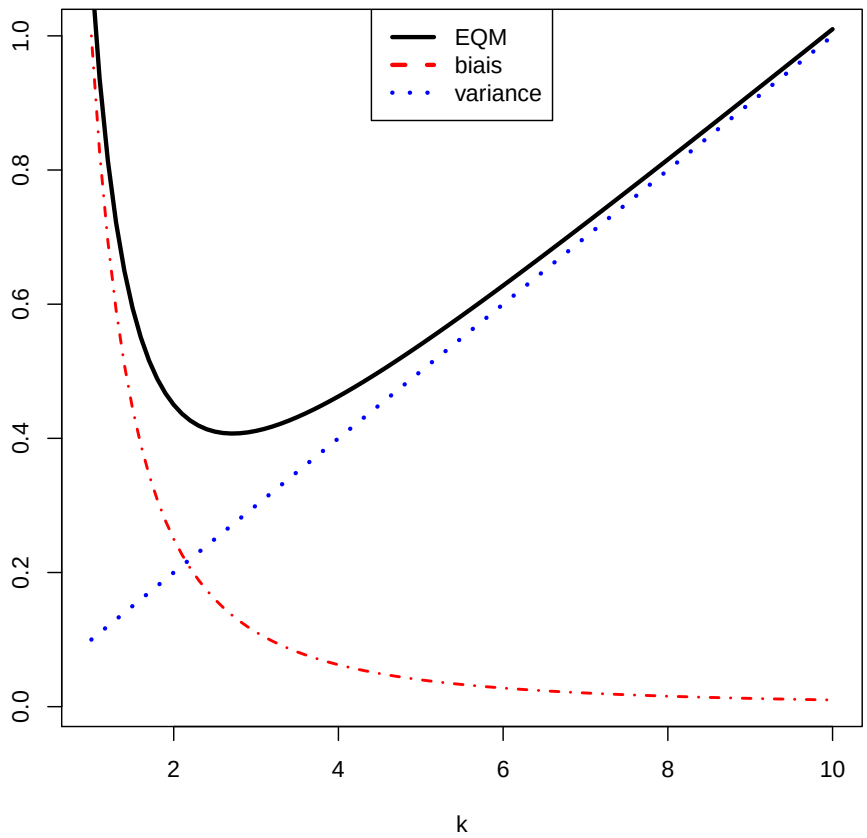
$$\begin{aligned} EQM(\widehat{F}) &= \mathbb{E}||\widehat{F} - F_*||^2 \\ &= ||Biais(\widehat{F})||^2 + tr(\text{var}(\widehat{F})) \\ &= ||Biais(X_\omega \widehat{\theta}_\omega)||^2 + |\omega|\sigma^2 \end{aligned}$$

dans le cas du Mod. lin. de dim $|\omega|$

$\hookrightarrow$ EQM réalise un compromis biais/variance

EQM réalise un compromis Biais Variance

$\leftarrow$ fort biais, faible variance faible biais, forte variance $\rightarrow$



Mais PB : pas calculable car dépend de θ_*

Erreur quadratique moyenne de prévision (EQMP)

Risque quadratique des estimations $\widehat{F}_\omega^v$ dans le modèle (ω) de nouvelles observations (X^v, Y^v)

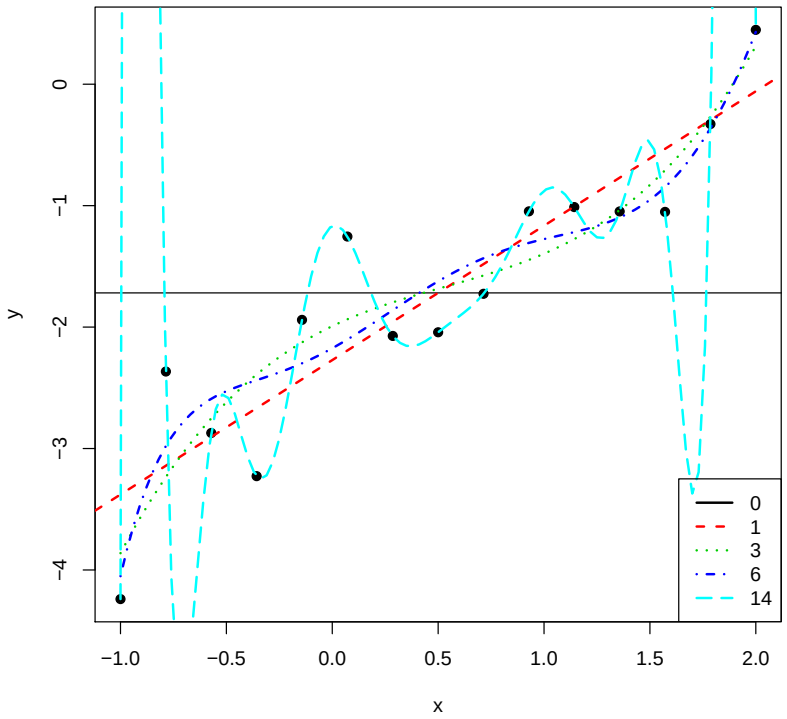
$$\begin{aligned} EQMP(\widehat{F}_\omega^v) &= \mathbb{E}(||\widehat{F}_\omega^v - Y^v||^2) \\ &= \mathbb{E}(||\widehat{F}_\omega^v - F_*^v + F_*^v - Y^v||^2) \\ &= EQM(\widehat{F}_\omega^v) + \mathbb{E}(||F_*^v - Y^v||^2) \\ &-2\mathbb{E}[(X_\omega^v\widehat{\theta}_\omega - X^v\theta)'(F_*^v - Y^v)] \end{aligned}$$

Si l'échantillon (X^v, Y^v) est indépendant de (X, Y) :

- L'espérance du double produit est nulle
- $EQMP(\widehat{F}_\omega^v) = EQM(\widehat{F}_\omega^v) + n^v\sigma^2$
- $EQMP$ réalise le compromis biais/variance et est facile à estimer à partir de données...
- mais attention ! pas directement avec celles ayant pas servi à calculer $\widehat{\theta}_\omega$...

Estimer sur l'échantillon d'apprentissage ?

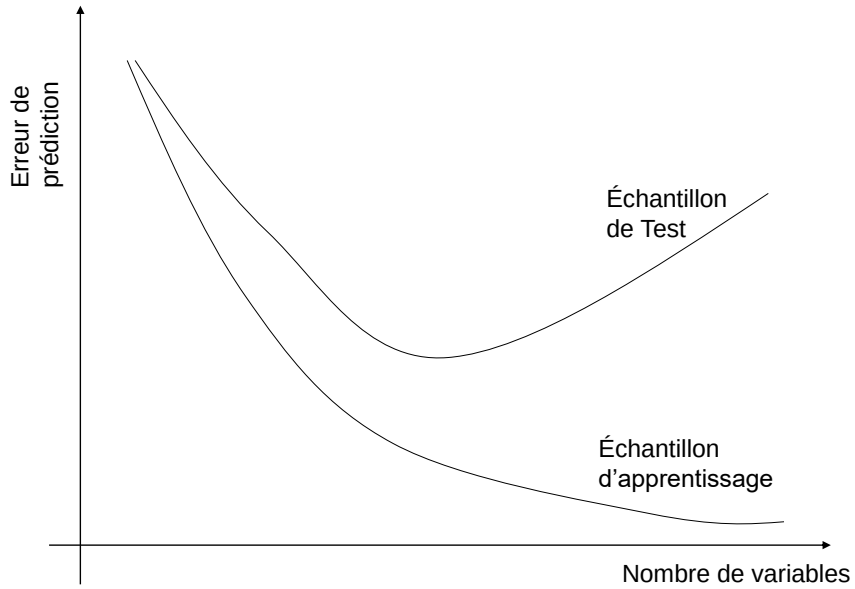
- Estimer une erreur moyenne de prédiction par SCR sur les données d'apprentissage :



- Ne peut réaliser le compromis biais variance, problème de sur-apprentissage

Stratégies

- Calculer une erreur de prédiction sur de nouvelles observations pour établir la performance de généralisation du modèle



- Définir des critères qui corrigent le biais d'apprentissage

Estimation du risque en pratique

- si les données sont suffisamment nombreuses :
  $\hookrightarrow$ les scinder en échantillon d'apprentissage, échantillon de validation

$$\widehat{EQMP}(\omega) = \frac{1}{n^v}||Y^v - F(\widehat{\theta}_\omega, X^v)||^2$$

Estimation du risque en pratique

- si les données sont peu nombreuses :
  $\hookrightarrow$ Validation croisée d'ordre B (*B-fold cross validation*)

$$\widehat{EQMP}(\omega) = \frac{1}{n}\sum_{b=1}^{B} ||Y^b - F(\hat{\theta}_\omega^{(-b)}, X^b)||^2$$

$\hookrightarrow$ cas particulier $B = n$, *leave one out*

$$\text{LOO} = \frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n}(Y_i - \hat{F}_{(-i)})^2 \underbrace{=}_{\text{en régr. lin.}} \frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n}\left(\frac{Y_i - \hat{F}_i}{1-h_i}\right)^2 := PRESS$$

Effet régularisateur du big data !

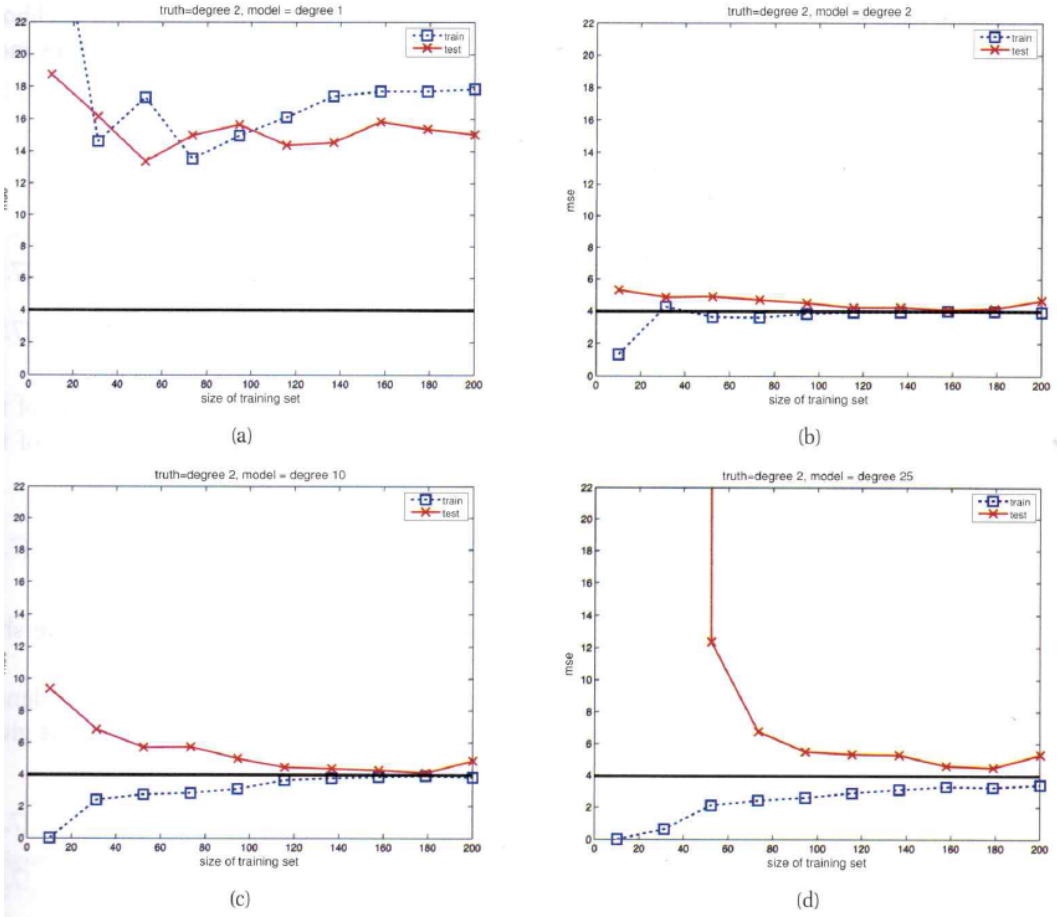


Figure – crédit : Machine Learning A probabilistic perpective- Kevin P. Murphy-

Une alternative : les critères de choix

Pénaliser une estimation directe de performance sur l'échantillon d'apprentissage pour contrecarrer le biais d'optimisme

- à partir du R^2
  $\hookrightarrow$ critère R^2 ajusté
- à partir de SCR
  $\hookrightarrow$ critère de Mallows
- Considérer la distance de Kullback comme étant le critère de performance à estimer sans biais sur l'échantillon
  $\hookrightarrow$ critère AIC
- Considérer la vraisemblance intégrée
  $\hookrightarrow$ critère BIC

Permettent de comparer des modèles, et de faire de la sélection

Estimation de EQM : le C_p de Mallows

- d'une part : $EQM(\widehat{m}_\omega) = ||\mathbb{E}(\widehat{m}_\omega) - \mathbb{E}(Y)||^2 + |\omega|\sigma^2$
- d'autre part : $\mathbb{E}(SCR(\omega))$

$$
\begin{aligned}
&= \mathbb{E}(||Y - \widehat{m}_\omega||^2) \\
&= \mathbb{E}(||Y - \widehat{m}_\omega - \mathbb{E}(Y - \widehat{m}_\omega) + \mathbb{E}(Y - \widehat{m}_\omega)||^2) \\
&= \mathbb{E}(||(I - H_\omega)(Y - \mathbb{E}(Y))||^2) + ||\mathbb{E}(Y) - \mathbb{E}(\widehat{m}_\omega)||^2 \\
&= (n - |\omega|)\sigma^2 + ||\mathbb{E}(Y) - \mathbb{E}(\widehat{m}_\omega)||^2
\end{aligned}
$$

- d'où $\widehat{EQM(\widehat{m}_\omega)} = SCR(\omega) - (n - 2|\omega|)\sigma^2$.
- Soit $\frac{\widehat{EQM(\widehat{m}_\omega)}}{\sigma^2} = \frac{SCR(\omega)}{\sigma^2} + 2|\omega| - n$

Minimiser

$$C_p(\omega) = \frac{SCR(\omega)}{\widehat{\sigma}^2} + 2|\omega| - n$$

avec $\widehat{\sigma}^2$ est calculé en général dans le modèle complet.
Attention ! : à calculer sur un échantillon indépendant de la sélection...

Critères : la vraisemblance pénalisée

La qualité de l'ajustement d'un modèle peut être évaluée par la log-vraisemblance maximale $\log L(\omega)$ calculée dans le modèle (ω) : pénalisation pour éviter le surajustement
Choix du modèle (ω) minimisant

$$\text{critère } (\omega) = -2 \log L(\omega) + |\omega| pen(n)$$

- AIC (Akaike Information Criterion) : $pen(n) = 2$

$$\begin{aligned} AIC(\omega) &= -2 \log L(\omega) + 2|\omega| \\ &= n \log \frac{SCR(\omega)}{n} + 2|\omega| + cte \quad \text{(Cas gaussien)} \end{aligned}$$

- BIC (Bayesian Information Criterion) : $pen(n) = \log(n)$

$$\begin{aligned} BIC(\omega) &= -2 \log L(\omega) + |\omega| \log(n) \\ &= n \log \frac{SCR(\omega)}{n} + |\omega| \log(n) + cte \quad \text{(Cas gaussien)} \end{aligned}$$

Recherche de sous-ensembles de variables

Limite de la recherche exhaustive : $2^{|\omega|-1}$ modèles à comparer suivant un critère
$\hookrightarrow$ méthodes (sous-optimales) explorant l'espace des modèles

- Méthode descendante (backward) :
  à partir du modèle complet, élimination une à une des variables dont la suppression améliore le plus le critère
- Méthode ascendante (forward) :
  A partir du modèle le plus simple, ajout une à une de variables dont l'ajout améliore le plus le critère
- Méthode mixte (stepwise)
  enchaînement des étapes ascendantes et descendantes

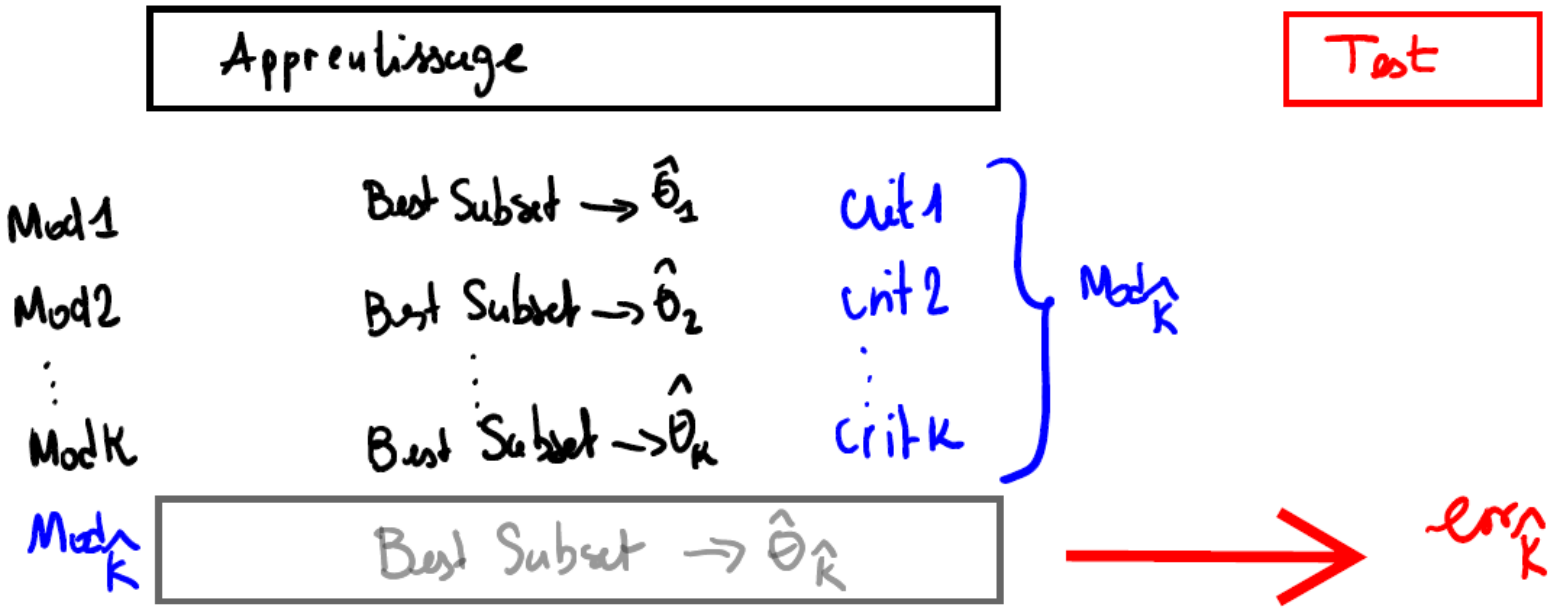
Rappels

- Pour estimer estimer la performance sans biais
  ↪ apprentissage/test
  ↪ validation croisée

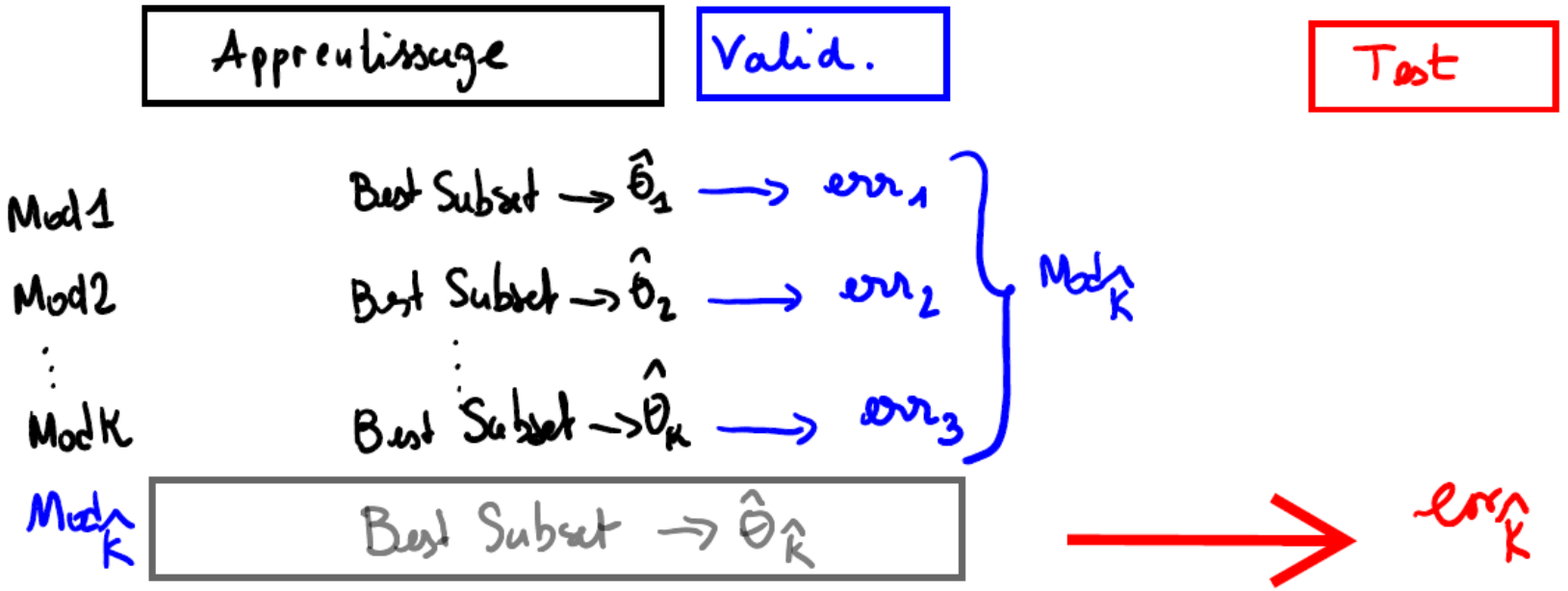
- choix de modèle : réaliser un compromis biais (erreur d'approximation) / variance (erreur d'estimation)
  ↪ par calcul de l'erreur de prédiction (A/V ou VC),
  ↪ par calcul de critères réalisant un compromis biais/variance

- Comment concilier ces deux objectifs ?
  ↪ apprentissage/validation/test ou double VC

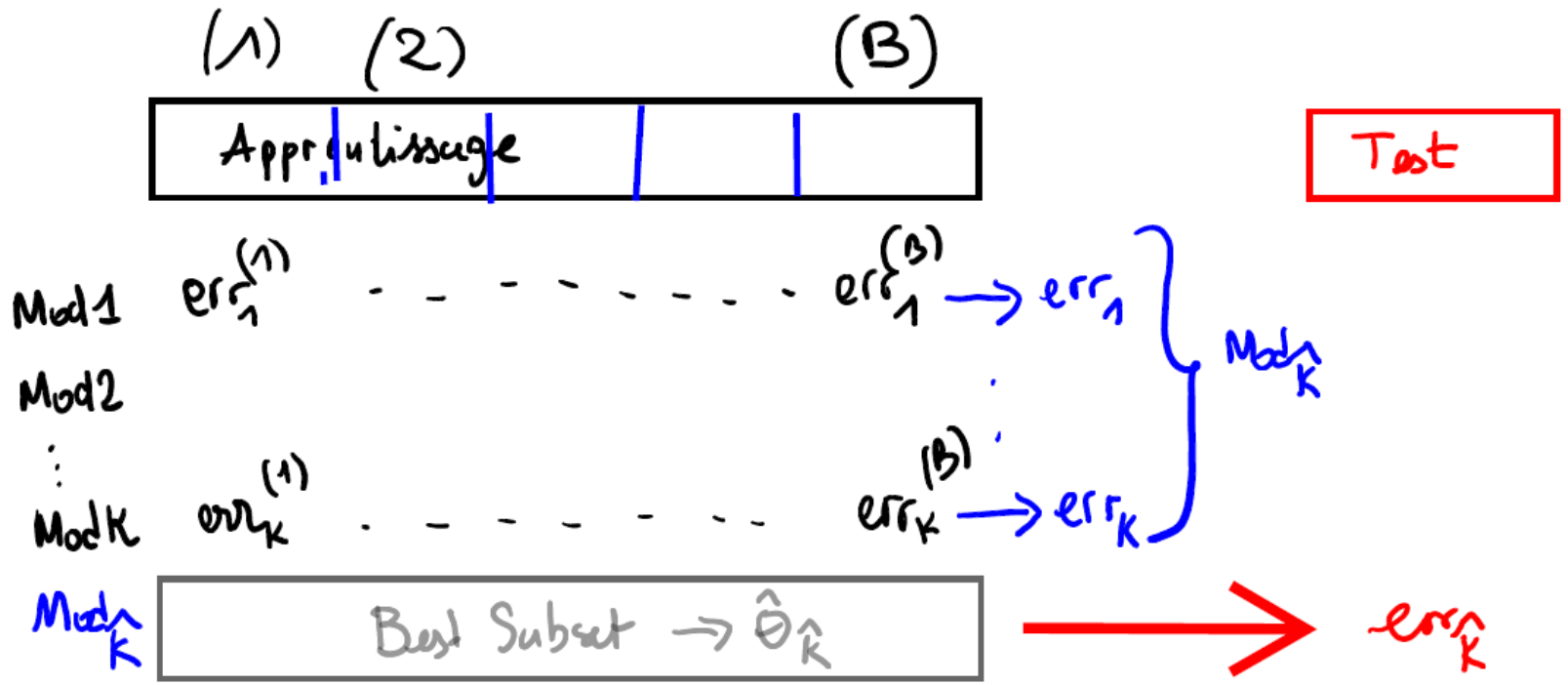
Sélection par critère et erreur de généralisation



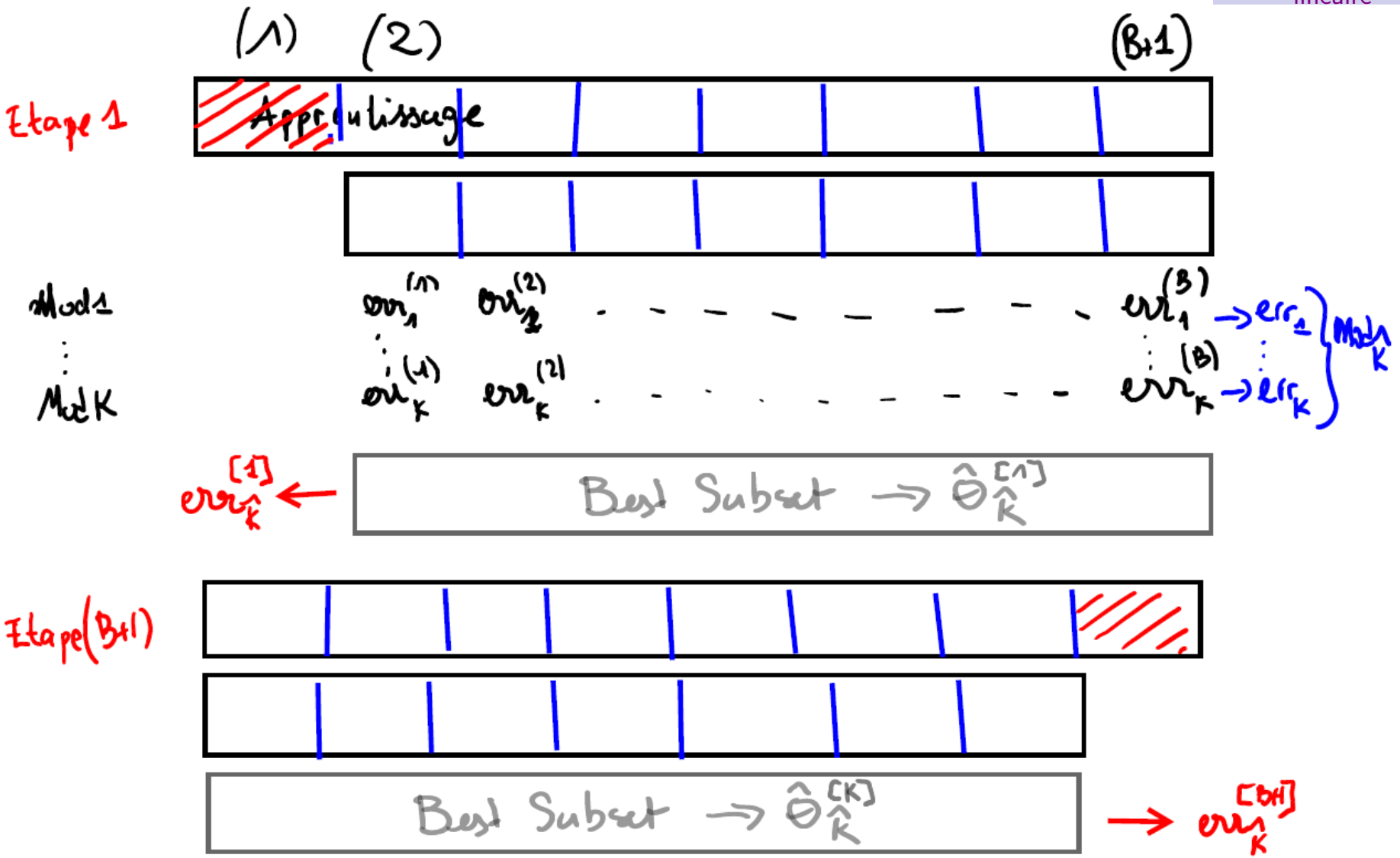
Sélection par A/V et erreur de généralisation



Sélection par VC et erreur de généralisation



Double validation croisée



Quelle taille pour les segments (*folds*) ?

Pour le calcul de l'erreur :

- LOO :
  peu de biais, mais de la variance,
  attention au temps d'exécution !
- Apprentissage/validation :
  potentiellement + biaisé, mais moins de variance
  temps d'exécution maîtrisé
  attention à la stratification
- B segments est une solution intermédiaire

Sommaire

Régularisation

Cas où X n'est pas injective (ou pas loin de ne pas l'être) :

- $n \geq p$, mais les colonnes $(X_1, \ldots X_p)$ forment une famille "presque liée" de R^n : variables explicatives très "corrélées"

$\hookrightarrow$ la variance de $\widehat{\theta}$ peut fortement augmenter si $X'X$ est proche d'une matrice non inversible, donc pb de précision

- $n < p$, le nombre de variables est supérieur au nombre d'observations : "grande dimension"

$\hookrightarrow$ méthodes pour pallier le pb de dégénérescence du rang de X : réduction de dimension, régularisation

Régularisation

- Contraindre les estimations des paramètres
- Réduit significativement la variance
- régression ridge et régression Lasso

Régression ridge (Hoerl et Kennard (1970))

- Les valeurs propres λ_j de $X'X$ sont ≥ 0
- S'il y a dégénérescence du rang, les λ_j ordonnées par ordre décroissant sont quasi-nulles à partir d'un certain rang r.
- $X'X$ et $X'X + \kappa Id_p$ ont les mêmes vecteurs propres, mais des valeurs propres différentes : λ_j et $\lambda_j + \kappa$ respectivement, $j = 1, \ldots, p$
- d'où l'estimateur ridge

$$\widehat{\theta}_{ridge}(\kappa) = (X'X + \kappa Id_p)^{-1} X'Y$$

Régression ridge

En régression linéaire, on optimise

$$SCR(\theta) = \sum_{i=1}^{n} \left(Y_i - \sum_{j=1}^{p} \theta_j x_{ij} \right)^2$$

En régression ridge, on minimise un critère pénalisé

$$SCR(\theta) + \kappa \sum_{j=1}^{p} \theta_j^2 = \sum_{i=1}^{n} \left(Y_i - \sum_{j=1}^{p} \theta_j x_{ij} \right)^2 + \kappa \sum_{j=1}^{p} \theta_j^2$$

où $\kappa \geq 0$ est un paramètre de réglage (tuning) à déterminer séparément

- $SCR(\theta)$ diminue avec p croissant
- $\kappa \sum_{j=1}^{p} \theta_j^2$ augmente avec p

Régression ridge= contrainte ℓ_2

- Minimisation du critère pénalisé

$$\widehat{\theta}_{ridge}(\kappa) = \arg\min_{\theta \in \mathbb{R}^p} ||Y - X\theta||^2 + \kappa||\theta||^2$$

- Revient à un pb de minimisation sous contraintes

$$\tilde{\theta}(\delta) = \arg\min_{\theta \in \mathbb{R}^p; ||\theta||^2 \leq \delta} ||Y - X\theta||^2$$

- N'a d'intérêt que si δ est petit
- Choix de κ (ou δ) ?

Régression ridge : propriétés

- Biais : $\mathbb{E}(\widehat{\theta}_{ridge}) - \theta = -\kappa(X'X + \kappa Id_p)^{-1}\theta$
- Variance :

$$\text{var}(\widehat{\theta}_{ridge}) = \sigma^2(X'X + \kappa Id_p)^{-1}X'X(X'X + \kappa Id_p)^{-1}$$

- $EQM(\widehat{\theta}_{ridge}) =$

$$tr\left[(X'X + \kappa Id_p)^{-1}[\kappa^2\theta\theta' + \sigma^2 X'X](X'X + \kappa Id_p)^{-1}\right]$$

$$= \sum_{j=1}^{p} \frac{\sigma^2\lambda_j + \kappa^2[P'\theta]_j^2}{(\lambda_j + \kappa)^2}$$

- $EQM(\widehat{\theta}_{MC}) = \sigma^2 tr[(X'X)^{-1}] = \sigma^2 \sum_{j=1}^{p} \lambda_j^{-1}$.

Proposition

La régression ridge est plus précise pour l'estimation des paramètres que celle des MC si $\kappa \leq 2\sigma^2/\theta'\theta$

Centrer / réduire les régresseurs ?

- Avec les MC, l'estimation de $X\theta$ n'est pas affectée par la standardisation des variables. Si une variable est divisée par c, son coefficient est multiplié par c et $X\widehat{\theta}$ est le même.
- Mais l'estimation peut considérablement changer dans le cas de la régression ridge, à cause de la pénalisation
- Il est donc recommandé de centrer et réduire les variables en régression ridge
- La pénalité ne s'applique pas en général l'intercept, qui capture la réponse quand les covariables sont nulles
  - En général on centre donc aussi Y qui est remplacé par $Y - \bar{Y}\mathbb{1}_n$ et on n'introduit plus d'intercept
  - On peut aussi réduire Y

Régression ridge : en pratique

- Centrer et réduire les variables X_j (et Y)

$$\tilde{X}_j = (X_j - \bar{X}_j \mathbb{1}_n)/\widehat{\sigma}_j$$

- A κ fixé :

$$\widehat{\theta}_{ridge}(\kappa) = (\tilde{X}'\tilde{X} + \kappa Id_p)^{-1}\tilde{X}'\tilde{Y}$$

- valeurs ajustées

$$\widehat{Y}_{ridge}(\kappa) = \widehat{\sigma}_Y[\tilde{X}\widehat{\theta}_{ridge}(\kappa)] + \bar{Y}\mathbb{1}_n$$

Régr. ridge : Choix de κ à partir des données

- graphiquement : tracer $\widehat{\theta}_{ridge}(\kappa)$ en fonction de κ
  $\hookrightarrow \tilde{\kappa}$ est la plus petite valeur avant laquelle les coefficients "plongent" vers 0
- analytiquement (Hoerl, 1975) : $\tilde{\kappa} = \frac{p\widehat{\sigma}^2_{MC}}{\widehat{\theta}'_{MC}\widehat{\theta}_{MC}}$
- apprentissage/validation
  - Séparer en (X, Y) en (X_a, Y_a) et (X_v, Y_v)
  - Centrer (X_a, Y_a)
  - Sur (X_a, Y_a), régression ridge pour une grille de $\kappa \in [0; \kappa_{max}]$, $\hookrightarrow \widehat{\theta}_{ridge}$ et $\widehat{Y}_{ridge}$

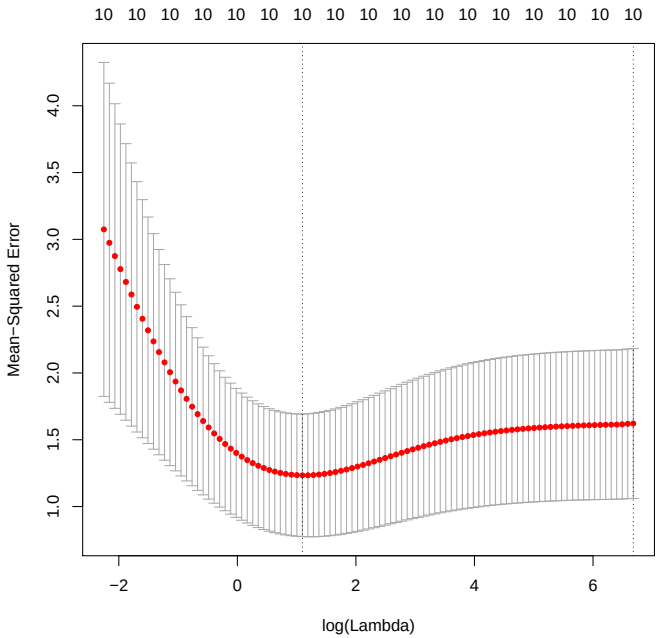
$$\widehat{Y}_{v,ridge}(\kappa) = \widehat{\sigma}_{a,Y} \sum_{j=1}^{p} \frac{X_{v,j} - \bar{X}_{a,j}\mathbb{1}_{n_v}}{\sigma_{a,j}} \widehat{\theta}_{ridge,j}(\kappa) + \bar{Y}_a \mathbb{1}_{n_v}$$

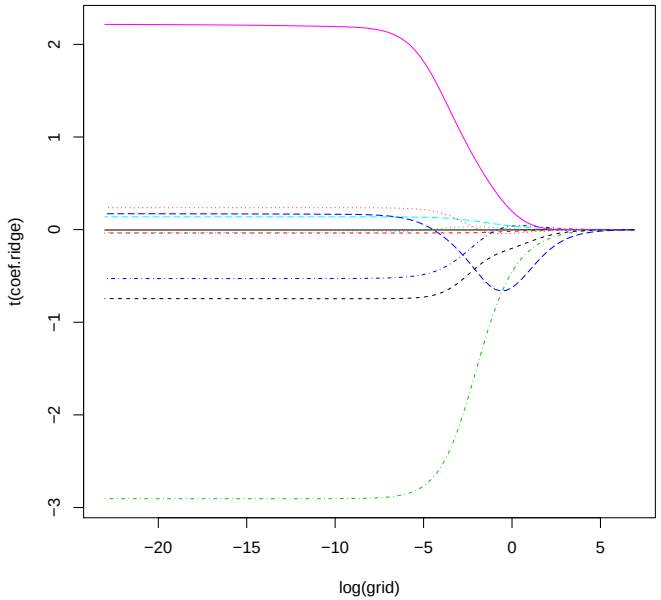
  - $\tilde{\kappa}$ minimise de l'erreur quadratique de prévision observée

$$PRESS(\kappa) = ||\widehat{Y}_{v,ridge}(\kappa) - Y_v||^2$$

- VC : $\tilde{\kappa} = \arg\min_\kappa \sum_i (\frac{y_i - \widehat{y}_{ridge,i}(\kappa)}{1 - H_{jj}(\kappa)})^2$

Exemple





Lasso [3]

On utilise la norme ℓ_1 : $||\theta||_1 = \sum_j |\theta_j|$

$$\tilde{\theta} = \arg \min_{\theta \in \mathbb{R}^p; ||\theta||_1 \leq \delta} ||Y - X\theta||^2$$

soit, résoudre le problème de pénalisation

$$\widehat{\theta}(\tau) = \arg \min_{\theta \in \mathbb{R}^p} ||Y - X\theta||^2 + \tau ||\theta||_1$$

- Si $\tau \geq ||X'Y||_\infty$, $\tilde{\theta}(\tau) = 0$
- au fur et à mesure, des variables sont ajoutées, et les coefficients des variables déjà utilisées sont modifiés
- ... mais certaines variables peuvent être désélectionnées
- Méthode de sélection de variable

3. *Least Absolute Shrinkage and Selection Operator*

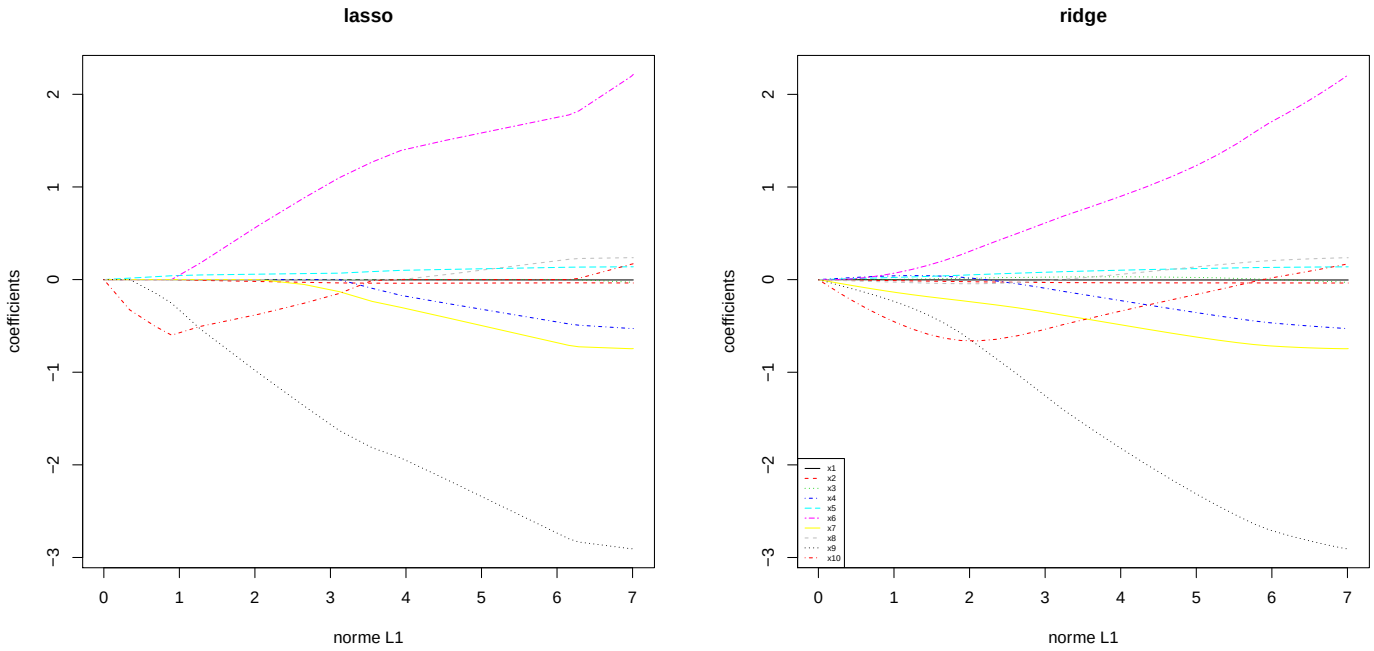
Lasso en pratique

- Centrer et réduire les variables (X, Y) ($\hookrightarrow \tilde{X}, \tilde{Y}$) et ajuster le modèle sans coefficient constant
- Le modèle de prévision est

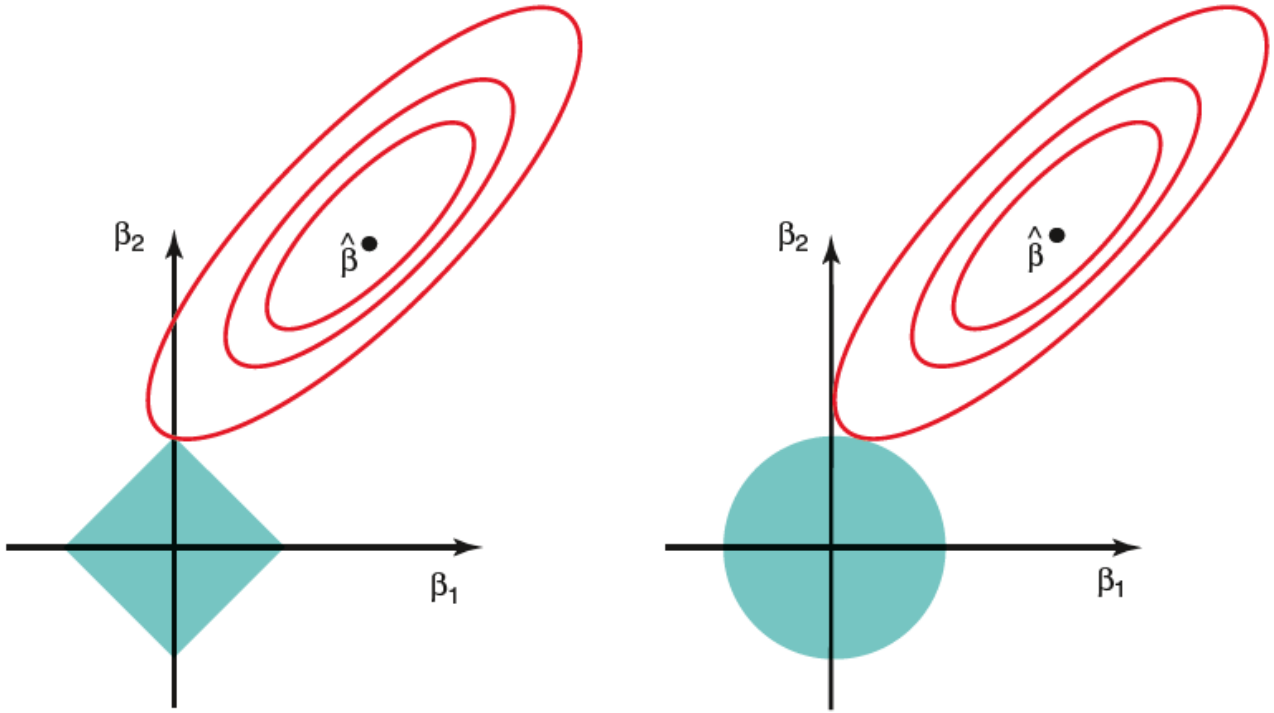
$$\widehat{Y}(\tilde{\tau}) = \widehat{\sigma}_Y^2 \, \tilde{X}\widehat{\theta}(\tilde{\tau}) \; + \; \bar{Y}\mathbb{1}_n$$

- $\tilde{\tau}$ (ou $\tilde{\delta}$) sont choisis grâce aux données, de façon graphique, par méthode analytique ou par VC

Comparaison Lasso/Ridge : exemple



Comparaison Lasso/Ridge



An Introduction to Statistical Learning with Applications in R. James, Witten, Hastie, Tibshirani (Springer 2013)