Régression en grande dimension

Julien JACQUES

24/09/2018

Les data

En régression, on cherche à **expliquer et prédire une variable quantitative**

$$Y = (y_1, \ldots, y_n)^t$$

à partir de p variables explicatives, que l'on supposera quantitative (*les variables catégorielles seront binarisées*) :

$$\begin{pmatrix} x_{11} & x_{12} & \ldots & x_{1p} \\ x_{21} & x_{22} & \ldots & x_{2p} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ x_{n1} & x_{n2} & \ldots & x_{np} \end{pmatrix}$$

Le modèle linéaire

Le modèle de régression linéaire s'écrit

$$y_i = \beta_0 + \sum_{j=1}^{p} \beta_j x_{ij} + \epsilon_i$$

où :

- β_0 est l'intercept
- β_j sont les coefficients de régression
- ϵ_i est le résidu, la part de y_i que l'on n'arrive pas à expliquer à partir des x_{ij}
- les ϵ_i sont supposés i.i.d (indépendants et identiquement distribués $\epsilon_i \sim \mathcal{N}(0, \sigma^2)$)

Estimation

L'estimation de $\beta = (\beta_0, \beta_1, \ldots, \beta_p)$ peut être réalisée par **maximum de vraisemblance** (sous l'hypothèse $\epsilon_i \sim \mathcal{N}(0, \sigma^2)$) ou de façon équivalente par **moindre carrés**:

$$\hat{\beta} = argmin_\beta \sum_{i=1}^{n} (y_i - (\beta_0 + \sum_{j=1}^{p} \beta_j x_{ij}))^2 = argmin_\beta \sum_{i=1}^{n} \epsilon_i^2$$

La solution est alors (sous la contrainte $p < n$, sinon il n'existe pas de solution unique) :

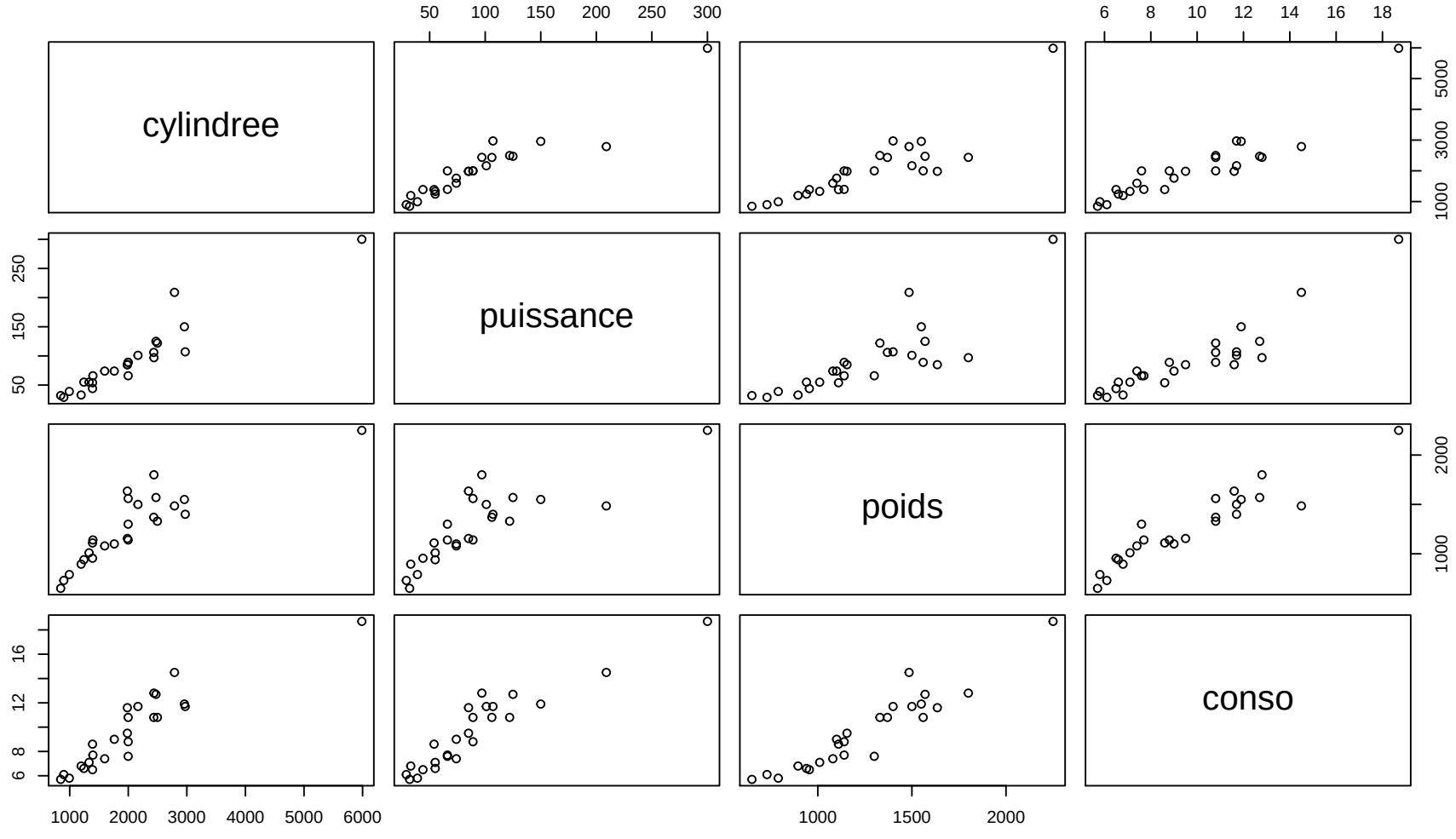
$$\hat{\beta} = (X^t X)^{-1} X^t Y$$

où

$$X = \begin{pmatrix} 1 & x_{11} & x_{12} & \ldots & x_{1p} \\ 1 & x_{21} & x_{22} & \ldots & x_{2p} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \\ 1 & x_{n1} & x_{n2} & \ldots & x_{np} \end{pmatrix}$$

Exemple (data)

```
auto=read.table('vehicules.txt',header=TRUE)
plot(auto[,2:5])
```



Les 3 variables semblent corrélées positivement à la consommation.

Exemple (modèle)

```
modele=lm(conso~cylindree+puissance+poids,data=auto)
```

```
summary(modele)
##
## Call:
## lm(formula = conso ~ cylindree + puissance + poids, data = auto)
##
## Residuals:
##     Min      1Q  Median      3Q     Max
## -1.5120 -0.4868  0.1639  0.5513  1.2886
##
## Coefficients:
##               Estimate Std. Error t value Pr(>|t|)
## (Intercept)  1.2998368  0.6140732   2.117 0.046391 *
## cylindree   -0.0004740  0.0004972  -0.953 0.351305
## puissance    0.0302691  0.0074708   4.052 0.000574 ***
## poids        0.0052011  0.0008067   6.447 2.17e-06 ***
## ---
## Signif. codes:  0 '***' 0.001 '**' 0.01 '*' 0.05 '.' 0.1 ' ' 1
##
## Residual standard error: 0.7006 on 21 degrees of freedom
## Multiple R-squared:  0.9567, Adjusted R-squared:  0.9505
## F-statistic: 154.7 on 3 and 21 DF,  p-value: 1.787e-14
```

La régression indique que la variable cylindree n'est pas significative dans le modèle.

Exemple (modèle)

Par contre, en enlevant la variable puissance elle devient significative. La corrélation entre les variables explicatives brouille le message. . .

```
#auto=as.data.frame(scale(auto[,2:5]))
modele=lm(conso~cylindree+poids,data=auto)
summary(modele)
```

```
##
## Call:
## lm(formula = conso ~ cylindree + poids, data = auto)
##
## Residuals:
##      Min       1Q   Median       3Q      Max
## -2.23095 -0.44033  0.01671  0.47117  2.77739
##
## Coefficients:
##              Estimate Std. Error t value Pr(>|t|)
## (Intercept) 0.7307901  0.7795958   0.937  0.35873
## cylindree   0.0011776  0.0003713   3.171  0.00442 **
## poids       0.0051903  0.0010520   4.934 6.19e-05 ***
## ---
## Signif. codes:  0 '***' 0.001 '**' 0.01 '*' 0.05 '.' 0.1 ' ' 1
##
## Residual standard error: 0.9137 on 22 degrees of freedom
## Multiple R-squared:  0.9229, Adjusted R-squared:  0.9158
## F-statistic: 131.6 on 2 and 22 DF,  p-value: 5.757e-13
```

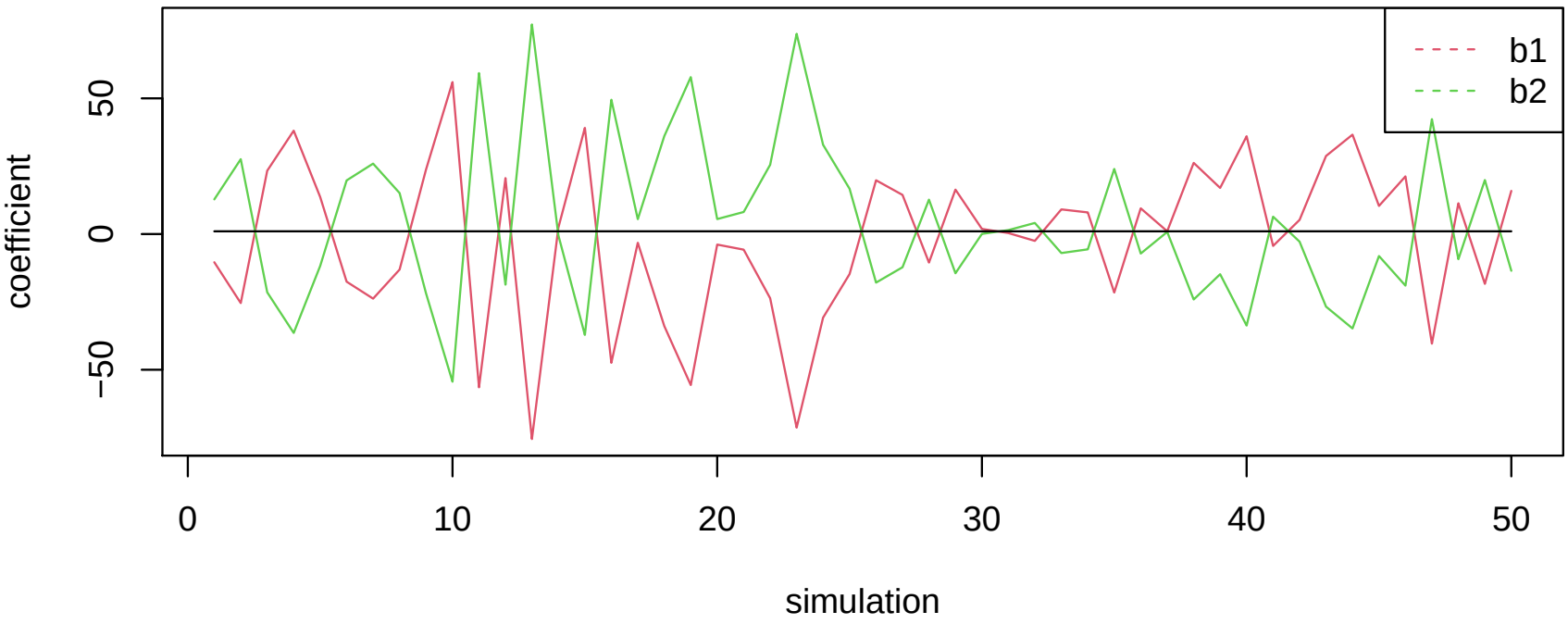
Influence de la corrélation

Soit le modèle

$$y_i = 3 + x_{1i} + x_{2i} + \epsilon_i$$

avec (x_1, x_2) très corrélées : $x_1 \sim \mathcal{N}(0, 1)$, $x_2 | x_1 \sim \mathcal{N}(x_1, .01^2)$.

Sur 50 simulations on obtient les estimations de β_1 et β_2 suivantes :



Influence de la corrélation

L'estimation de la variance de l'estimateur $\hat{\beta}_j$ de β_j est :

$$\widehat{Var}(\hat{\beta}_j) = \frac{s^2}{(n-1)\widehat{Var}(X_j)} \frac{1}{1-R_j^2}$$

où :

- R_j^2 est le coefficient de détermination de la variable X_j sur tous les autres prédicteurs X_ℓ $(\ell \neq j)$
- $\frac{1}{1-R_j^2}$ est le **VIF (facteur d'inflation de la variance)**
- un VIF supérieur à 10 indiquera un problème de colinéarité
- $s^2 = \frac{1}{n-p} \sum_{i=1}^{p} \hat{\epsilon}_i^2$

Ainsi :

- si les variables sont fortement liées linéarement, R_j^2 est proche de 1, donc $\widehat{Var}(\hat{\beta}_j)$ explose
- si $p < n$ mais $p \simeq n$, s^2 explose

Influence de la corrélation (VIF)

Avec la librarire car

```
modele=lm(conso~cylindree+puissance+poids,data=auto)
library(car)
vif(modele)
```

```
## cylindree puissance     poids
## 12.992577  9.696485  4.260911
```

Influence de la corrélation (VIF)

Avec la librairie `mctest`

```
modele=lm(conso~cylindree+puissance+poids,data=auto)
library(mctest)
imcdiag(modele)
```

Régression en présence de corrélation et/ou en grande dimension

Trois solutions sont possibles :

- séléctionner des variables (forward, stepwise...) :
  - interprétation aisée mais lourd en calcul, parfois grande variance
- créer de nouvelles variables non corrélées synthétisant l'information : régression sur composantes principales (PCR), régression PLS
  - bonne capacité de prédiction mais faible en interpétation
- contraindre l'estimation des paramètres : régressions pénalisées (ridge, LASSO, ElasticNet...)
  - bonne capacité de prédiction et interprétation aisée

Choix de modèles en régression

Décomposition biais-variance

Pour un nouvel x^*, la prédiction par le modèle linéaire s'écrit

$$\hat{y}_i^* = \beta_0 + \sum_{j=1}^{p} \beta_j x_{ij}^*$$

La qualité de la prédiction $E[(y_i^* - \hat{y}_i^*)^2]$ peut se décomposer en

$$E[(y_i^* - \hat{y}_i^*)^2] = \sigma^2 + \underbrace{(E[\hat{y}_i^*] - y_i^*)^2}_{\textit{biais}} + \underbrace{E[(E[\hat{y}_i^*] - \hat{y}_i^*)^2]}_{\textit{variance}}$$

où

- σ^2 : erreur incompressible. Variance de la cible Y
- $E[\hat{y}_i^*] - y_i^*$: **biais** : écart entre l'espérance de la prédiction et la vraie valeur. Indique les insuffisances intrinsèques du modèle (variables explicatives manquantes, ou forme de la relation non captée, etc.).
- $E[(\hat{y}_i^* - y_i^*)^2]$: **variance** : dispersion de la prédiction autour de sa propre espérance. Témoigne de l'instabilité du modèle, sa dépendance aux fluctuations de l'échantillon d'apprentissage.

Analyse de variance de la régression et R^2

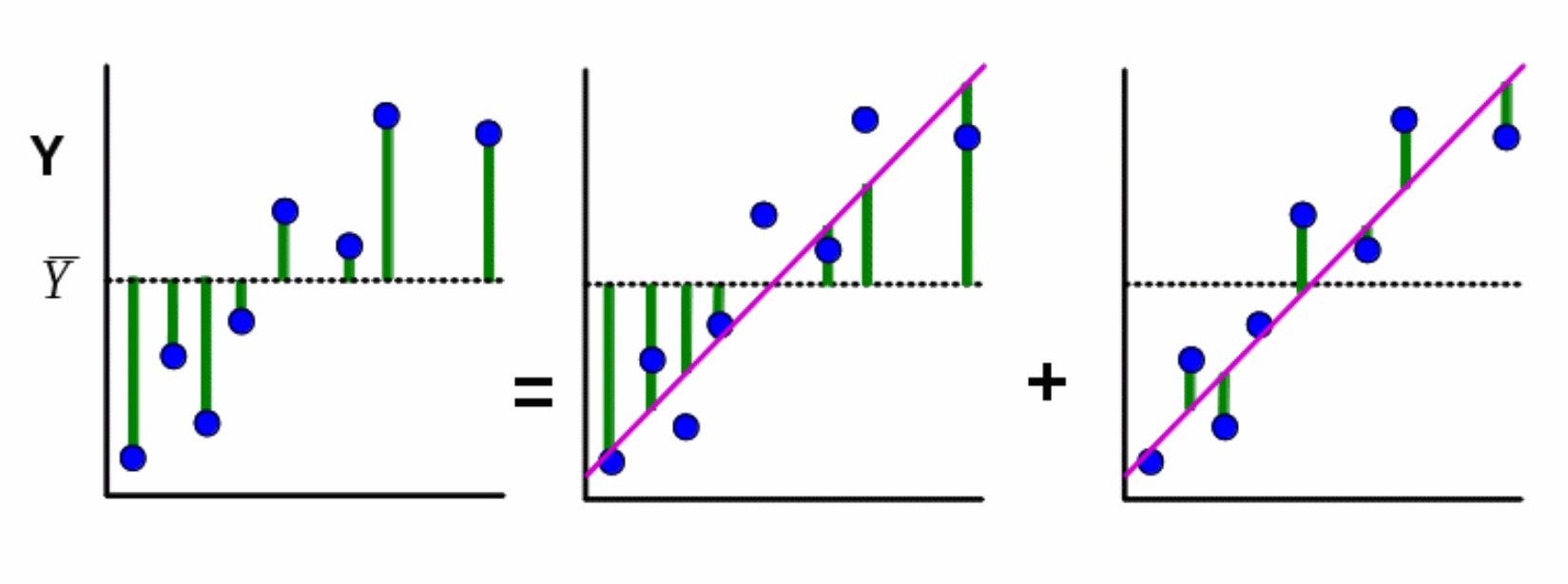


Figure 1: Source http://www.wikistat.fr

SST (variance totale)	=	SSReg (variance expliquée)	+	SSR (variance résiduelle)

Analyse de variance de la régression et R^2

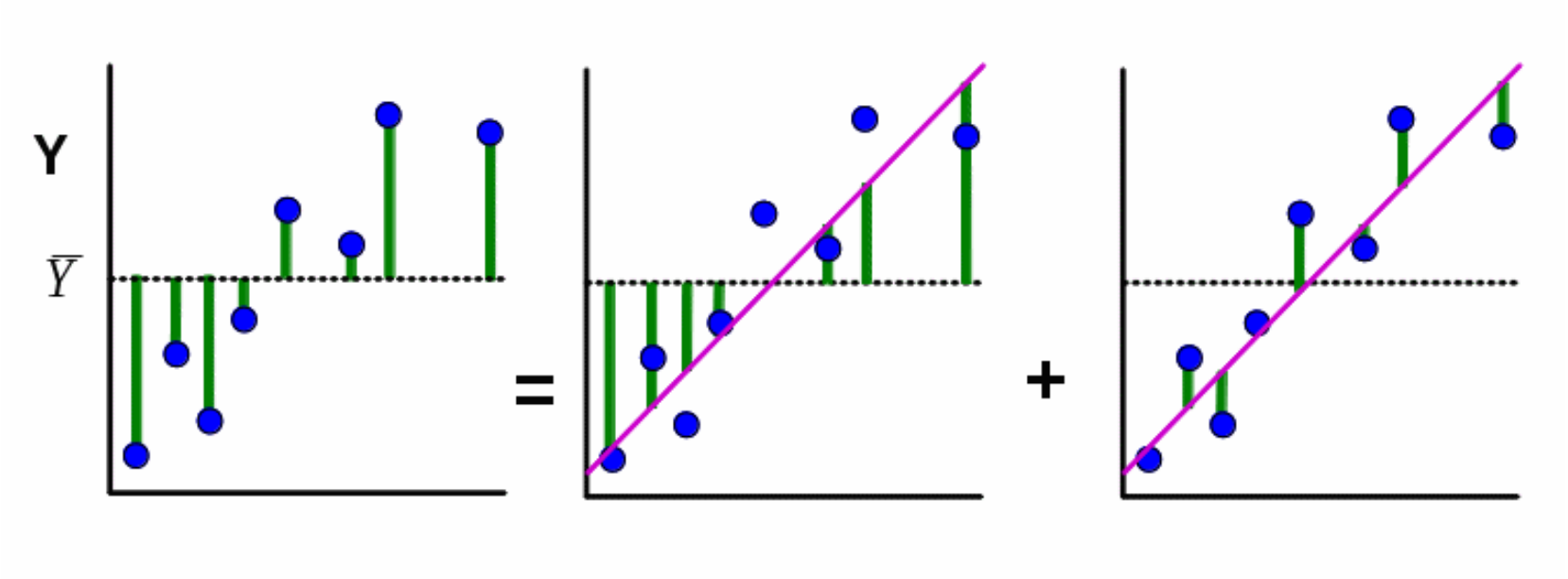


Figure 1: Source http://www.wikistat.fr

SST	=	SSReg	+	SSR
(variance totale)		(variance expliquée)		(variance résiduelle)

Le **coefficient de détermination** indique la qualité de la régression :

$$R^2 = \frac{SSReg}{SST}$$

Coefficients de détermination

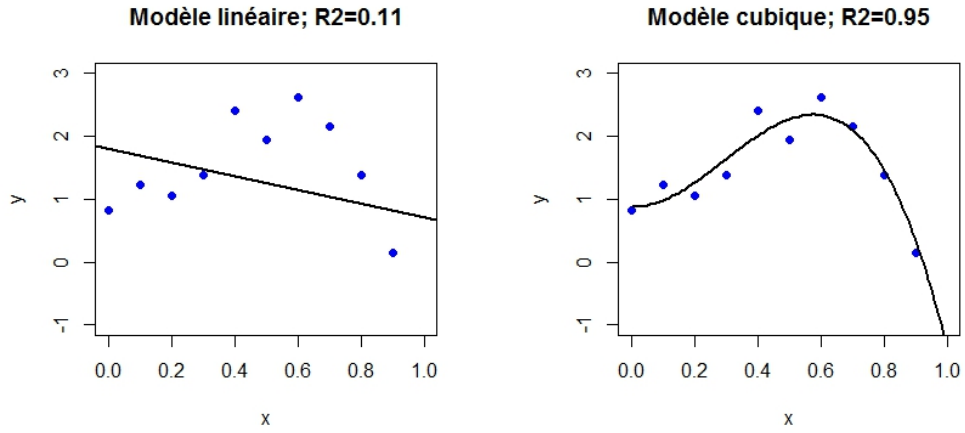


FIGURE 1 – Régression polynomiale : ajustement par, à gauche, $y = \beta_0 + \beta_1 x + \epsilon$, et à droite, $y = \beta_0 + \beta_1 x + \beta_2 x^2 + \beta_3 x^3 + \epsilon$

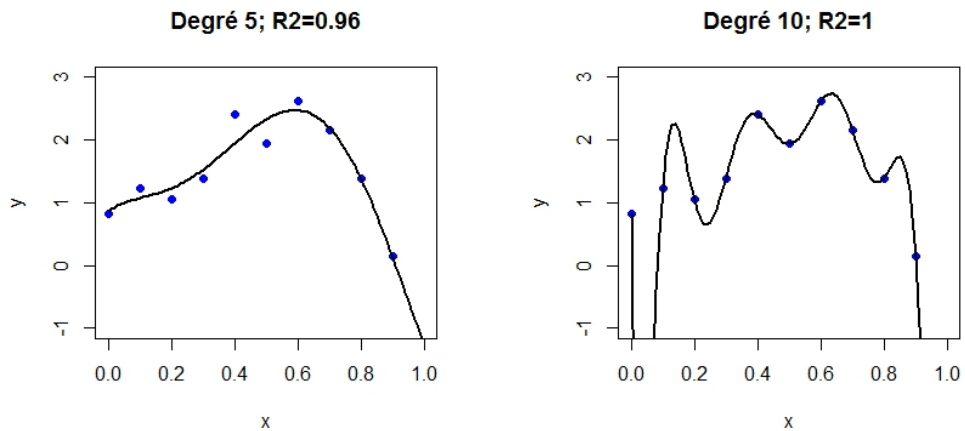


FIGURE 2 – Régression polynomiale : ajustement par, à gauche : $y = \beta_0 + \beta_1 x + \ldots + \beta_5 x^5 + \epsilon$, et à droite, $y = \beta_0 + \beta_1 x + \ldots + \beta_{10} x^{10} + \epsilon$.

Choix de modèles en régression

Le R^2 n'est pas un bon indicateur pour comparer des modèles, il choisira toujours les modèles les plus complexes (ayant le plus de paramètres).

Nous utiliserons plutôt :

- la Root Mean Square Error (RMSE) : $\sqrt{\frac{1}{n}\sum_i(\hat{y}_i - y_i)^2)}$ évaluée sur des données **indépendantes** :
  - sur un échantillon test : $1/3$ des données disponibles sont mis de cotés pour pouvoir *tester* la qualité des modèles
  - par validation croisée Leave One Out (LOO) : $\hat{y}_i$ est estimé en utilisant toutes les données sauf la i-ème
  - par validation croisée K-fold : les données disponibles sont découpées en K groupes, chacun des groupes servant tour à tour d'échantillon test

Choix de modèles en régression

Tout comme le R^2, la vraisemblance $\mathcal{L}$ n'est pas non plus un bon indicateur pour comparer des modèles, elle choisira toujours les modèles les plus complexes (ayant le plus de paramètres).

Nous utiliserons plutôt :

- des indicateurs de **vraisemblances pénalisées** :
  - $BIC = -2 \ln \mathcal{L} + k \ln n$ où k est le nombre de paramètres du modèle
  - $AIC = -2 \ln \mathcal{L} + 2k$

On pourra également utilisé le :

- R^2 ajusté : $R^2_{adj} = 1 - \left(\frac{(1-R^2)(n-1)}{n-k-1} \right)$

Sélection de variables en régression

Sélection de variables en régression

Le nombre de sous-ensembles de variables parmi les p covariables est énorme $\sum_{j=0}^{p} C_p^j = 2^p$.

Par exemple pour $p = 10$:

```
nb=0
for (j in 0:10) nb=nb+ncol(combn(10,j))
cat('Nb de sous-ensembles = ',nb)
```

```
## Nb de sous-ensembles =  1024
```

Sélection de variables en régression

Le nombre de sous-ensembles de variables parmi les p covariables est énorme $\sum_{j=0}^{p} C_p^j = 2^p$.

Par exemple pour $p = 10$:

```
nb=0
for (j in 0:10) nb=nb+ncol(combn(10,j))
cat('Nb de sous-ensembles = ',nb)
```

```
## Nb de sous-ensembles =  1024
```

Il nous faut une stratégie pour n'explorer qu'un **nombre restreint** de ces sous-ensembles

Sélection de variables en régression

- Méthode ascendante : **forward**
  - on part du modèle constant sans covariable
  - on ajoute la covariable qui apporte le plus selon un certain critère (ex : plus forte augmentation du R^2 / diminution du AIC)
  - puis on ajoute une seconde variable selon le même critère, sans remettre en question celles déjà introduite,
  - etc jusqu'à ce que toutes les variables soient dans le modèle
- Méthode descendante : **backward**
  - on part du modèle complet (possible si $p < n$)
  - on enlève la variable qui apporte la plus faible diminution du R^2 / augmentation du AIC
  - puis on enlève une seconde variable selon le même critère, sans remettre en question celles déjà supprimées,
  - etc jusqu'à ce qu'il n'y ait plus de variable dans le modèle
- on choisira parmi les p modèles avec les critères habituels :
  - RMSE par CV ou aprentissage/test
  - AIC

Sélection de variables en régression sous R

- Méthode **stepwise / both**
  - recherche ascendante ou descendante
  - on ajoute un test de significativité des variables inclues dans le modèle à chaque étape, et suppression de celles non significatives
  - on s'arrète quand on ne peut plus ni supprimer ni ajouter de variables

Le modèle à conserver est le dernier obtenu.

Sélection de variables en régression

```
modele=lm(conso~cylindree+puissance+poids,data=auto)
library(MASS)
stepAIC(modele,direction='both',trace=FALSE)
```

```
##
## Call:
## lm(formula = conso ~ puissance + poids, data = auto)
##
## Coefficients:
## (Intercept)    puissance        poids
##    1.359305     0.024431     0.004814
```

Rq : on peut aussi utiliser la fonction *step*

Sélection de variables en régression

Les algorithmes de sélection de variables sont particulièrement intéressants lorsqu'on a un nombre réduit de variables, sinon le temps de calcul peut-être long, et ils peuvent être relativement sensibles aux fluctuations d'échantillonnage.

Exercice

Estimer un modèle de régression avec sélection de variables sur les données **vehicles** du package **plsdepot**

```
library(plsdepot)
data(vehicles)
str(vehicles)
```

```
## 'data.frame':    30 obs. of  16 variables:
##  $ diesel      : int  0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 ...
##  $ turbo       : int  0 0 0 0 1 0 0 0 0 0 ...
##  $ two.doors   : int  1 0 1 0 1 0 1 0 0 0 ...
##  $ hatchback   : int  1 0 0 0 1 1 1 0 0 0 ...
##  $ wheel.base  : num  94.5 105.8 101.2 94.5 93.7 ...
##  $ length      : num  171 193 177 159 157 ...
##  $ width       : num  65.5 71.4 64.8 63.6 63.8 63.8 64 65
##  $ height      : num  52.4 55.7 54.3 52 50.8 50.6 52.6 54
##  $ curb.weight: int  2823 2844 2395 1909 2128 1967 1956
##  $ eng.size    : int  152 136 108 90 98 90 92 110 111 258
##  $ horsepower : int  154 110 101 70 102 68 76 86 78 176
```

Régression PCR

Régression PCR

La régression sur composantes principales (PCR) consiste à :

- réaliser une ACP sur les prédicteurs X
- réaliser une régression sur les composantes principales issues de l'ACP

Le choix du nombre de composantes principales pourra se faire :

- soit par des techniques classiques d'ACP,
- ou mieux en fonction de la qualité du modèle de régression obtenu

Régression PCR sous R

```
library(pls)
modele=pcr(conso~cylindree+puissance+poids,data=auto,
           validation='LOO')
summary(modele)
```

```
## Data:    X dimension: 25 3
##  Y dimension: 25 1
## Fit method: svdpc
## Number of components considered: 3
##
## VALIDATION: RMSEP
## Cross-validated using 25 leave-one-out segments.
##        (Intercept)  1 comps  2 comps  3 comps
## CV           3.215    1.509    1.050   0.8866
## adjCV        3.215    1.501    1.045   0.8806
##
## TRAINING: % variance explained
##        1 comps  2 comps  3 comps
## X        97.61    99.97   100.00
## conso    86.23    92.30    95.67
```

Exercice

Estimer un modèle de régression avec sélection de variables sur les données **vehicles** du package **plsdepot**

```
library(plsdepot)
data(vehicles)
str(vehicles)
```

```
## 'data.frame':    30 obs. of  16 variables:
##  $ diesel      : int  0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 ...
##  $ turbo       : int  0 0 0 0 1 0 0 0 0 0 ...
##  $ two.doors   : int  1 0 1 0 1 0 1 0 0 0 ...
##  $ hatchback   : int  1 0 0 0 1 1 1 0 0 0 ...
##  $ wheel.base  : num  94.5 105.8 101.2 94.5 93.7 ...
##  $ length      : num  171 193 177 159 157 ...
##  $ width       : num  65.5 71.4 64.8 63.6 63.8 63.8 64 65
##  $ height      : num  52.4 55.7 54.3 52 50.8 50.6 52.6 54
##  $ curb.weight: int  2823 2844 2395 1909 2128 1967 1956
##  $ eng.size    : int  152 136 108 90 98 90 92 110 111 258
##  $ horsepower : int  154 110 101 70 102 68 76 86 78 176
```

Régression PLS

Régression PLS

La régression sur composantes principales permet de solutionner à la fois les problèmes de corrélation entre covariables et les problèmes de dimension.

Par contre rien n'assure que les composantes principales construites, retraçant un maximum de variabilité contenue dans X, soient intéressantes pour prédire Y.

La **régression PLS (Partial Least Square)** consiste à construire de nouvelles variables (composante PLS) avec comme critère d'être fortement corrélées à Y.

Régression PLS

Recherche des composantes PLS (algorithme NIPALS)

- normalisation des covariables (moyenne 0 et variance 1)
- 1ère composante PLS : on recherche $Z_1 = \sum_{j=1}^{p} \rho_{j1} X_j$ qui maximise $cov(Z_1, Y)$. La solution est $\rho_j \propto corr(Y, X_j)$
- on estime $Y = \beta_1 Z_1 + \epsilon_1$
- 2ème composante PLS : on recherche $Z_2 = \sum_{j=1}^{p} \rho_{j2} X_j$ qui maximise $cov(\epsilon_1, Z_2)$
- on estime $Y = \beta_1 Z_1 + \beta_2 Z_2 + \epsilon_2$
- et ainsi de suite

Sélection du nombre de composantes

- on s'arrête généralement avant que le critère $Q_h^2 = 1 - \frac{PRESS_h}{RSS_{h-1}} < 0.0975$ (!) où
  - $RSS_h = \sum_{i=1}^{n} (y_i - \sum_{j=1}^{h} \rho_{jh} z_{ih})^2$
  - $PRESS_h$ est la même chose que RSS_h mais évalué par validation croisée leave-one-out

Régression PLS

Importance de la variable X_j dans le modèle des m composantes :

$$VIP_{jm} = \sqrt{\frac{p}{\sum_{h=1}^{m} R^2(Y, Z_h)} \sum_{h=1}^{m} R^2(Y, Z_h)\rho_{jh}^2}$$

Régression PLS sous R avec package *pls*

```
library(pls)
modele=plsr(conso~cylindree+puissance+poids,data=auto,
            validation='LOO')
summary(modele)
```

```
## Data:    X dimension: 25 3
##  Y dimension: 25 1
## Fit method: kernelpls
## Number of components considered: 3
##
## VALIDATION: RMSEP
## Cross-validated using 25 leave-one-out segments.
##        (Intercept)  1 comps  2 comps  3 comps
## CV           3.215    1.491    1.043   0.8866
## adjCV        3.215    1.482    1.038   0.8806
##
## TRAINING: % variance explained
##        1 comps  2 comps  3 comps
## X        97.60    99.97   100.00
## conso    86.52    92.39    95.67
```

Exercice

Estimer un modèle de régression avec sélection de variables sur les données **vehicles** du package **plsdepot**

```
library(plsdepot)
data(vehicles)
str(vehicles)
```

```
## 'data.frame':    30 obs. of  16 variables:
##  $ diesel      : int  0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 ...
##  $ turbo       : int  0 0 0 0 1 0 0 0 0 0 ...
##  $ two.doors   : int  1 0 1 0 1 0 1 0 0 0 ...
##  $ hatchback   : int  1 0 0 0 1 1 1 0 0 0 ...
##  $ wheel.base  : num  94.5 105.8 101.2 94.5 93.7 ...
##  $ length      : num  171 193 177 159 157 ...
##  $ width       : num  65.5 71.4 64.8 63.6 63.8 63.8 64 65
##  $ height      : num  52.4 55.7 54.3 52 50.8 50.6 52.6 54
##  $ curb.weight: int  2823 2844 2395 1909 2128 1967 1956
##  $ eng.size    : int  152 136 108 90 98 90 92 110 111 258
##  $ horsepower : int  154 110 101 70 102 68 76 86 78 176
```

Régression PLS sous R avec package *plsdepot*

Le package **plsdepot** propose également des sorties graphiques type ACP. Examinons ce que cela donne sur les données **vehicles**

Il faut mettre la variable à predire (prix) dans la derniere colonne

```
cars = vehicles[ ,c(1:12,14:16,13)]
```

Choisissons dans un premier temps un large nombre de composantes (5), puis nous examinerons les Q_h^2 pour selectionner le bon nombre

```
tmp=plsreg1(cars[,1:15],cars[,16,drop=F],comps=5,crosval=T)
print(tmp$Q2)
```

```
##       PRESS       RSS          Q2  LimQ2     Q2cum
## 1 11.438988 29.000000   0.6055521 0.0975 0.6055521
## 2  7.251166  8.562281   0.1531268 0.0975 0.6659527
## 3  3.184087  5.166929   0.3837563 0.0975 0.7941454
## 4  2.781568  2.304000  -0.2072780 0.0975 0.7514763
## 5  2.513616  1.938508  -0.2966756 0.0975 0.6777454
```

On choisit 3 composantes car Q_h^2 passe en dessous de la limite

Régression PLS sous R

Le modèle avec 3 composantes donne

```
pls1=plsreg1(cars[,1:15],cars[,16,drop=F],comps=3)
```

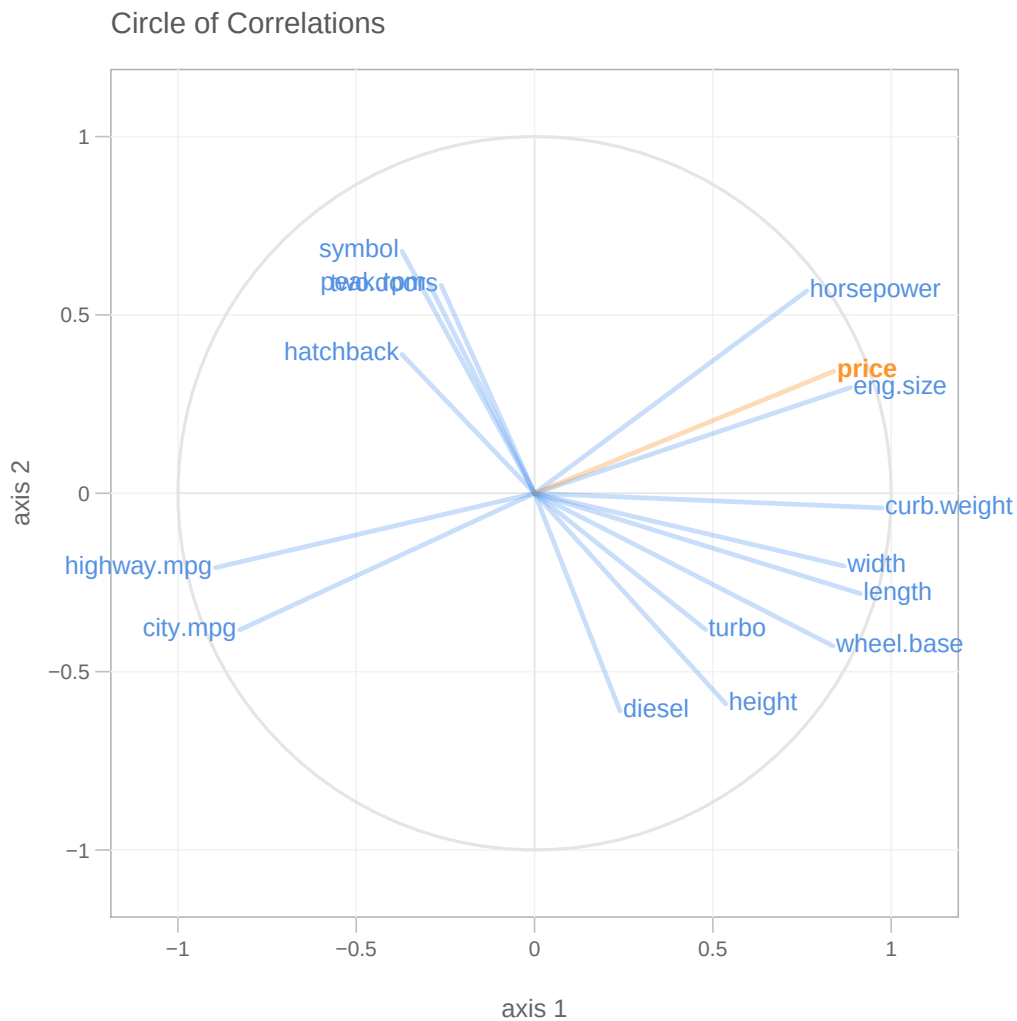
La sortie du modèle contient les objets suivants

```
##
## PLS Regression 1
## ----------------------------------------
## $x.scores     X-scores (T-components)
## $x.loads      X-loadings
## $y.scores     Y-scores (U-components)
## $y.loads      Y-loadings
## $cor.xyt      score correlations
## $raw.wgs      raw weights
## $mod.wgs      modified weights
## $std.coefs    standard coefficients
## $reg.coefs    regular coefficients
## $R2           R-squared
## $R2Xy         explained variance of X-y by T
## $y.pred       y-predicted
## $resid        residuals
## $T2           T2 hotelling
## $Q2           Q2 cross validation
## ----------------------------------------
```

Résultats de la PLS

Traçons le cercle des corrélations pour observer les liens entre variables initiales et composantes PLS :

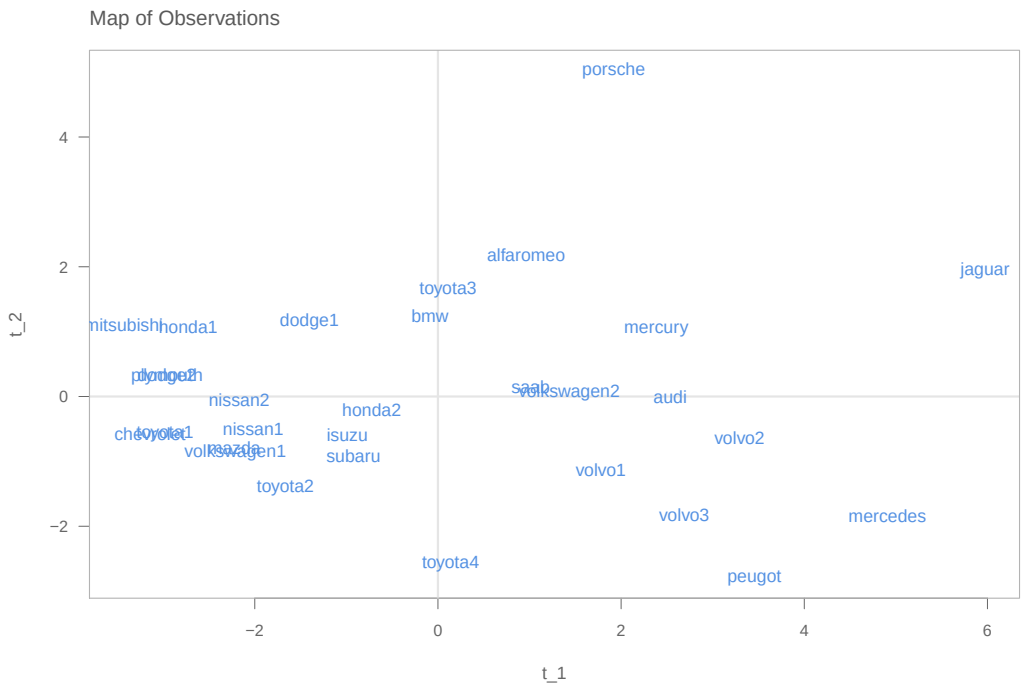
```
plot(pls1,what='variables',comps=c(1,2))
```



Résultats de la PLS

On peut representer les observations egalement

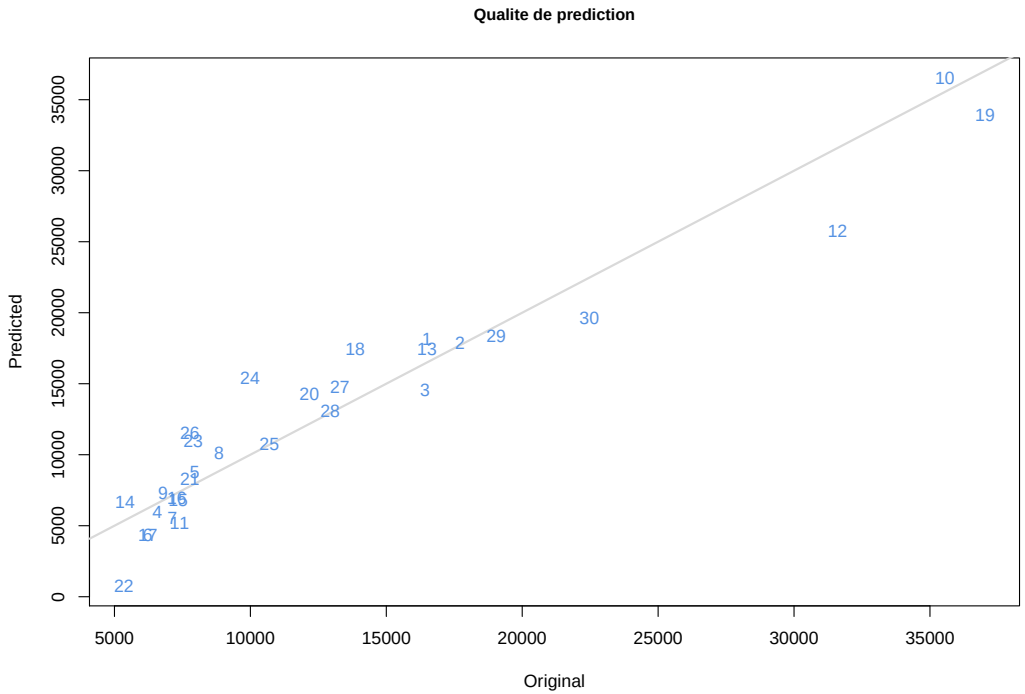
```
plot(pls1,what='observations',comps=c(1,2),show.names=T)
```



Résultats de la PLS

On peut également illustrer la qualité de prediciton les valeurs prédites en fonction des valeurs rélles

```
plot(cars$price,pls1$y.pred,type='n',xlab='Original',ylab=
title('Qualite de prediction', cex.main = 0.9)
abline(a = 0, b = 1, col = 'gray85', lwd = 2)
text(cars$price, pls1$y.pred, col = '#5592e3')
```



Importance des variables en PLS

Les VIPs ne sont pas implémentés dans ce package, on peut les calculer à la main

Un VIP>.8 est généralement signe que la variable a une importance sur la prediction

```
##                  [,1]      [,2]      [,3]
## diesel      0.2784769 0.2857481 0.8227674
## turbo       0.5073281 0.5693036 0.5412825
## two.doors   0.0913152 0.4670275 0.4650202
## hatchback   0.5526105 0.5117730 0.7878440
## wheel.base  0.9967898 1.0027557 0.9475462
## length      1.1619058 1.1211620 1.0633458
## width       1.2033004 1.1241463 1.0646373
## height      0.3698322 0.7443507 0.7294240
## curb.weight 1.4859406 1.3766264 1.3079641
## eng.size    1.6230848 1.5698906 1.5150749
## horsepower  1.4730322 1.4542874 1.3747565
## peak.rpm    0.1165452 0.5088424 0.4886079
## symbol      0.1537610 0.6316262 0.5975477
## city.mpg    1.2893546 1.1965327 1.2307053
## highway.mpg 1.3080983 1.2123358 1.2216591
```

Régression pénalisée

Régression pénalisée

En présence de corrélation entre covariables, ou lorsque p est proche de n (ce qui induit naturellement de la corrélation ou quasi-colinéarité), la variance de la prédiction est très grande.

Le principe de la régression pénalisée est de **contraindre les valeurs des paramètres** de régression β_j, qui peuvent prendre des valeurs erratique en présence de corrélation ou quasi co-linéarité, et ainsi **réduire la variance**, quitte à induire une légère **augmentation du biais**.

Régression ridge

La régression ridge (Hoerl & Kennard, 1970) consiste à contraindre les β_j à ne pas prendre de valeur trop grandes

$$\hat{\beta}^{ridge} = argmin_\beta \{\sum_{i=1}^{n}(y_i - \beta_0 - \sum_{j=1}^{p}\beta_j x_{ij})^2\} \text{ subject to } \sum_{j=1}^{p}\beta_j^2 < t_\lambda$$

Ce problème s'écrit de façon équivalente :

$$\hat{\beta}^{ridge} = argmin_\beta \{\sum_{i=1}^{n}(y_i - \beta_0 - \sum_{j=1}^{p}\beta_j x_{ij})^2 + \lambda\sum_{j=1}^{p}\beta_j^2\}$$

La solution de ce problème est

$$\hat{\beta}^{ridge} = (X^t X + \lambda I)^{-1} X^t Y$$

L'inverse instable de $X^t X$ est régularisée en ajoutant un terme constant sur la diagonale.

Propriétées de la régression ridge

Attention : on normalisera les prédicteurs (centrage réduction) pour éviter que des variables à forte variance n'aient trop d'influence.

Propriétés :

- les coefficients de régression sont *shrinkés* vers 0
- plus grand est λ, plus le shrinkage est important
- si les covariables sont orthogonales, on a $\hat{\beta}^{ridge} = \frac{1}{1+\lambda}\hat{\beta}^{OLS}$

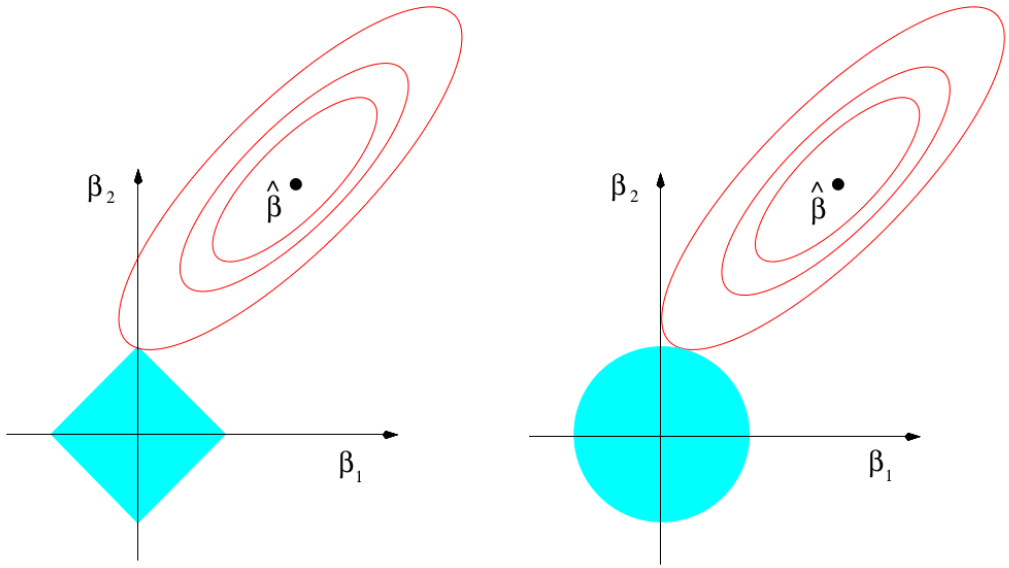
Le choix du paramètre de shrinkage λ pourra être fait par validation croisée

Régression LASSO

Le principe est le même que la régression ridge, sauf que l'on change la pénilisation L_2 par une pénilisation L_1 :

$$\hat{\beta}^{ridge} = argmin_\beta \{\sum_{i=1}^{n}(y_i - \beta_0 - \sum_{j=1}^{p}\beta_j x_{ij})^2\} \text{ subject to } \sum_{j=1}^{p}|\beta_j| < t_\lambda$$

Contrairement à la norme L_2, les *coins* de la norme L_1 tendent à obtenir des solutions avec un certains nombre de $\hat{\beta}_j$ nul: la régression LASSO premet de réaliser une **sélection de variables**



Régression LASSO

L'estimation des coefficients du LASSO nécessite un algorithme itératif, **Least Angle Regression** (LAR-LASSO), qui fonctionne de la façon suivante :

1. on commence avec tous les $\beta_j = 0$
2. on choisit la variable X_k la plus corrélée avec Y, et on fait évoluer petit à petit le coefficient β_k en direction du β_k^{OLS}, jusqu'à ce qu'une autre variable X_ℓ devienne plus corrélée avec les résidus de la régression de Y sur X_k
3. on fait alors évoluer à la fois β_k et β_ℓ en direction de leur solution OLS, ... et ainsi de suite
4. lorsqu'un coefficient β_j heurte 0, on enlève alors la variable correspondante des variables actives et on continue

On obtient alors des scénarios de solutions (LASSO path) à mesure que $||\beta||_1$ augmente.

Ainsi, toutes les solutions pour toutes valeurs de λ sont obtenues en une seule fois avec cet algorithme.

Exemple de LASSO path

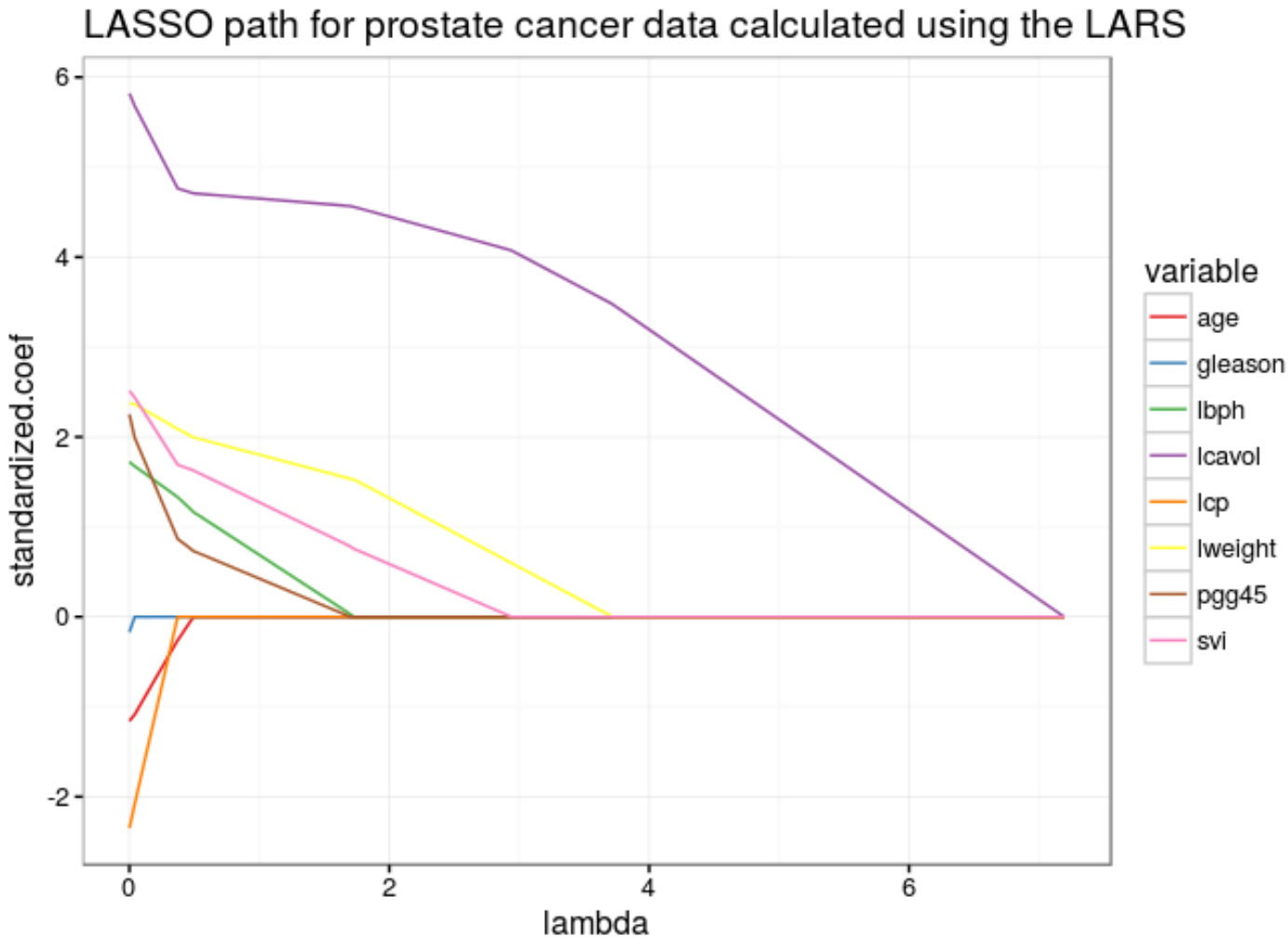


Figure 3: Exemple de chemin LASSO

Régression Elastic-Net

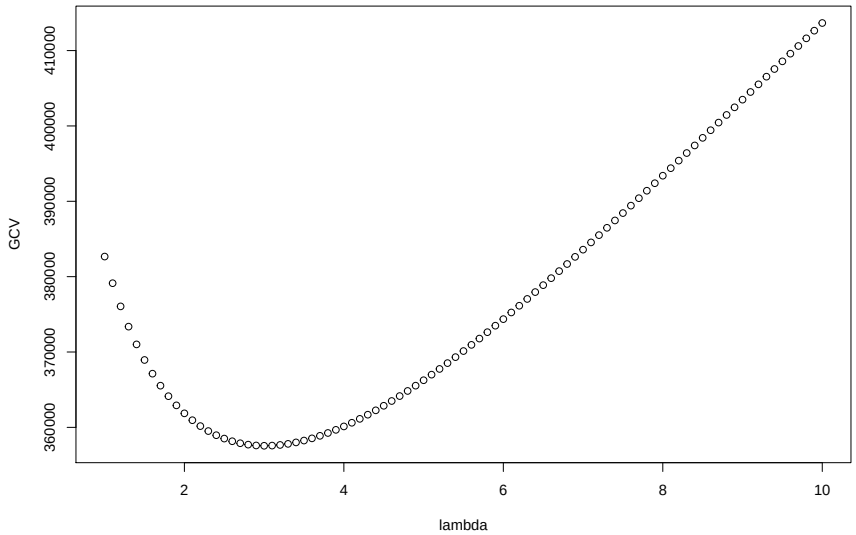
La régression **Elastic-Net** est un mélange entre une régression ridge et une régression LASSO

$$\hat{\beta}^{ridge} = argmin_{\beta}\{\sum_{i=1}^{n}(y_i - \beta_0 - \sum_{j=1}^{p}\beta_j x_{ij})^2 + \lambda_1 \sum_{j=1}^{p}|\beta_j| + \lambda_2 \sum_{j=1}^{p}\beta_j^2\}$$

Régression ridge sous R

Effectuons une régression ridge sur les données cars

```
library(MASS)
model_ridge <- lm.ridge(price~.,data=cars,lambda=seq(1,10,0.1))
plot(seq(1,10,0.1),model_ridge$GCV,xlab='lambda',ylab='GCV')
```



Le lambda minimisant l'erreur GCV est

```
print(model_ridge$lambda[which.min(model_ridge$GCV)])
```

```
## [1] 3
```

Régression ridge sous R

Les valeurs des coefficients de régression sont alors

```
model_ridge <- lm.ridge(price~.,data=cars,lambda=3)
print(model_ridge$coef)
```

```
##      diesel       turbo   two.doors   hatchback  wheel.base      length
##  1319.07847   322.30923   403.06638 -1924.13998   286.84161  -573.16314
##       width      height curb.weight    eng.size  horsepower    peak.rpm
##  1196.52729 -1349.51087  1827.72607  3242.42975  2381.26372  1205.24651
##      symbol    city.mpg highway.mpg
##   792.42010   -57.75644   -35.31223
```

que l'on peut comparer aux coefficients de la régression moindres carrés classiques

```
model_ols <- lm.ridge(price~.,data=cars,lambda=0)
print(model_ols$coef)
```

```
##      diesel       turbo   two.doors   hatchback  wheel.base      length
##    538.0448    652.7103    253.2335  -3262.8088    204.0221  -5139.8544
##       width      height curb.weight    eng.size  horsepower    peak.rpm
##   2349.8250   -972.9552   5813.5268   3124.1172   1595.1574   1086.3392
##      symbol    city.mpg highway.mpg
##   1305.1569   -570.1281    839.4466
```

Prédiction avec ridge

Il n'existe pas de méthode *predict* associé à la fonction *lm.ridge*.

Il nous faut le construire la prédiction à la main (pour l'exemple on le fait sur toutes les données, en pratique il faudrait séparer échantillons d'apprentissage et de test):

- on commence par centrer et réduire les données test avec les moyennes et variances de l'échantillon d'apprentissage :

```
x.test=scale(cars[,-16],center=model_ridge$xm,
             scale=model_ridge$scales)
```

Attention : dans cars le prix est la variable 16 (réorganisé précédemment pour PLS)

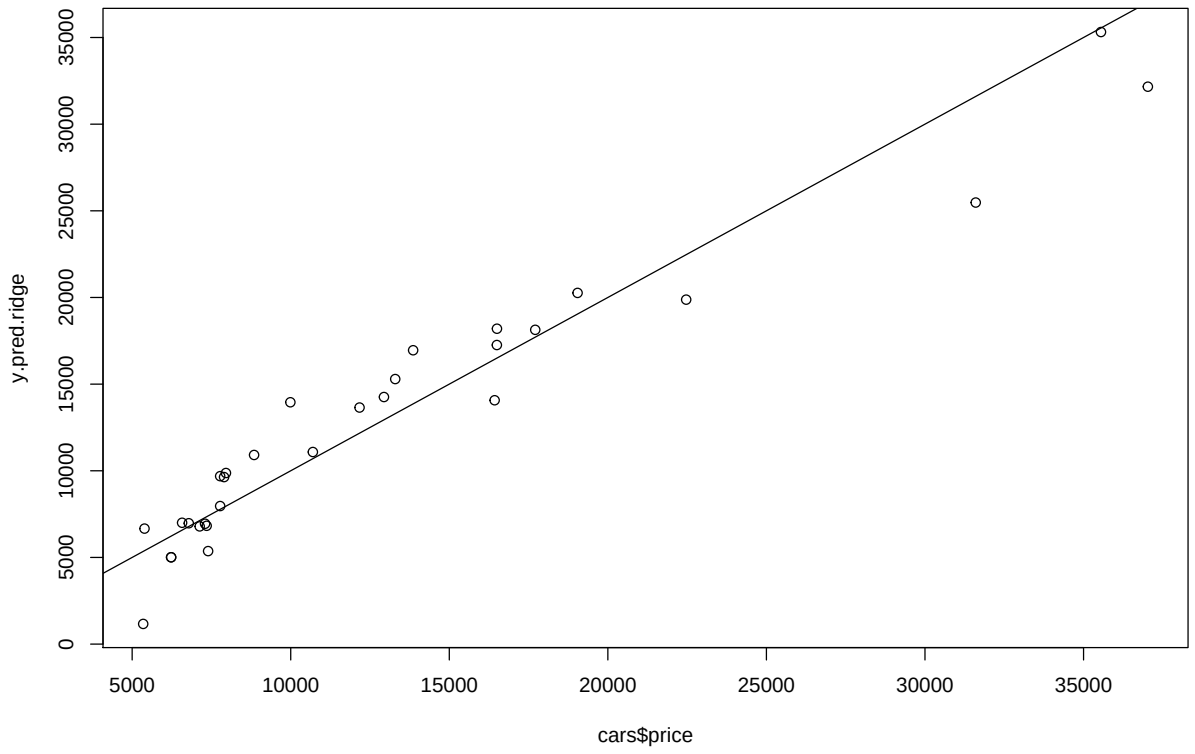
- puis on reconstruit la prédiction :

```
y.pred.ridge = x.test%*% model_ridge$coef + model_ridge$ym
```

Prédiction avec ridge

On peut vérifier la qualité de la prédiction

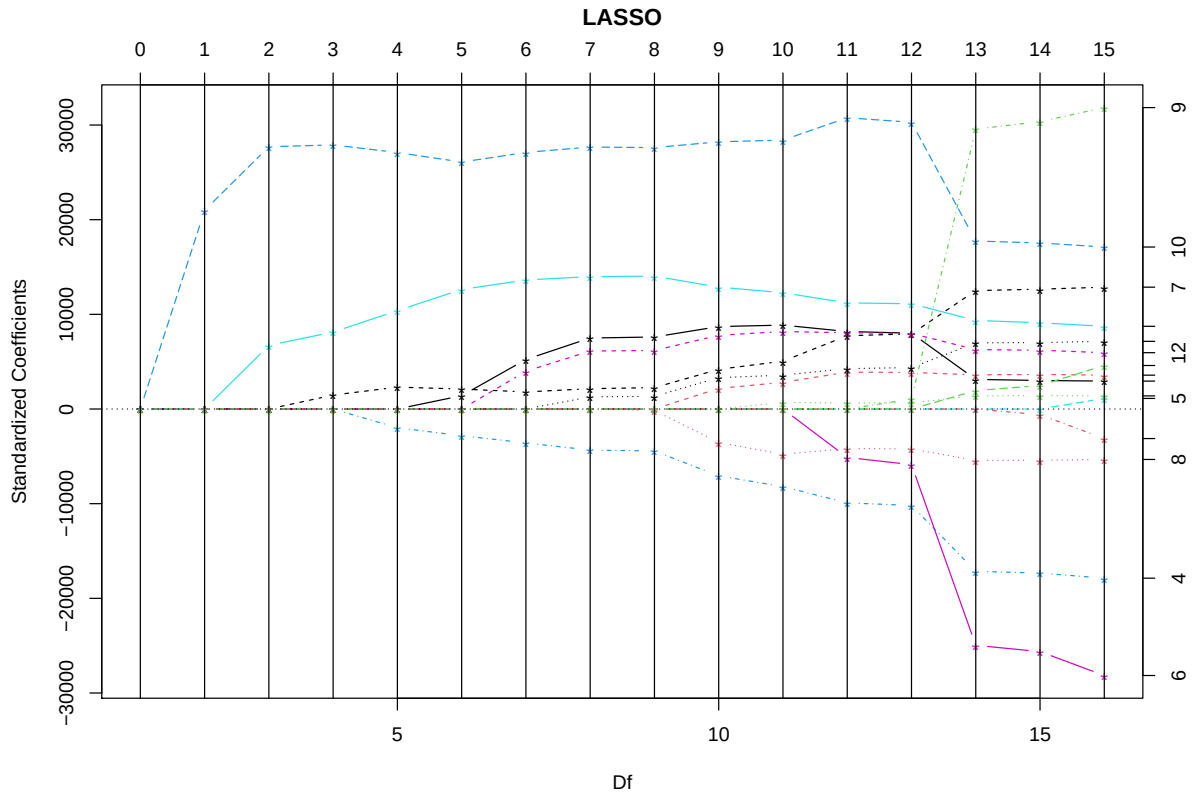
```
plot(cars$price,y.pred.ridge);abline(a=0,b=1)
```



Régression LASSO sous R

Effectuons une régression LASSO sur les données cars

```
model_lasso=lars(as.matrix(cars[,1:15]),cars$price,type="lasso",
                 trace=F,normalize=TRUE)
plot(model_lasso,xvar='df', plottype='coeff')
```



Régression LASSO sous R

On peut afficher les valeurs des coefficients à chaque étape de notre algorithme LARS-LASSO

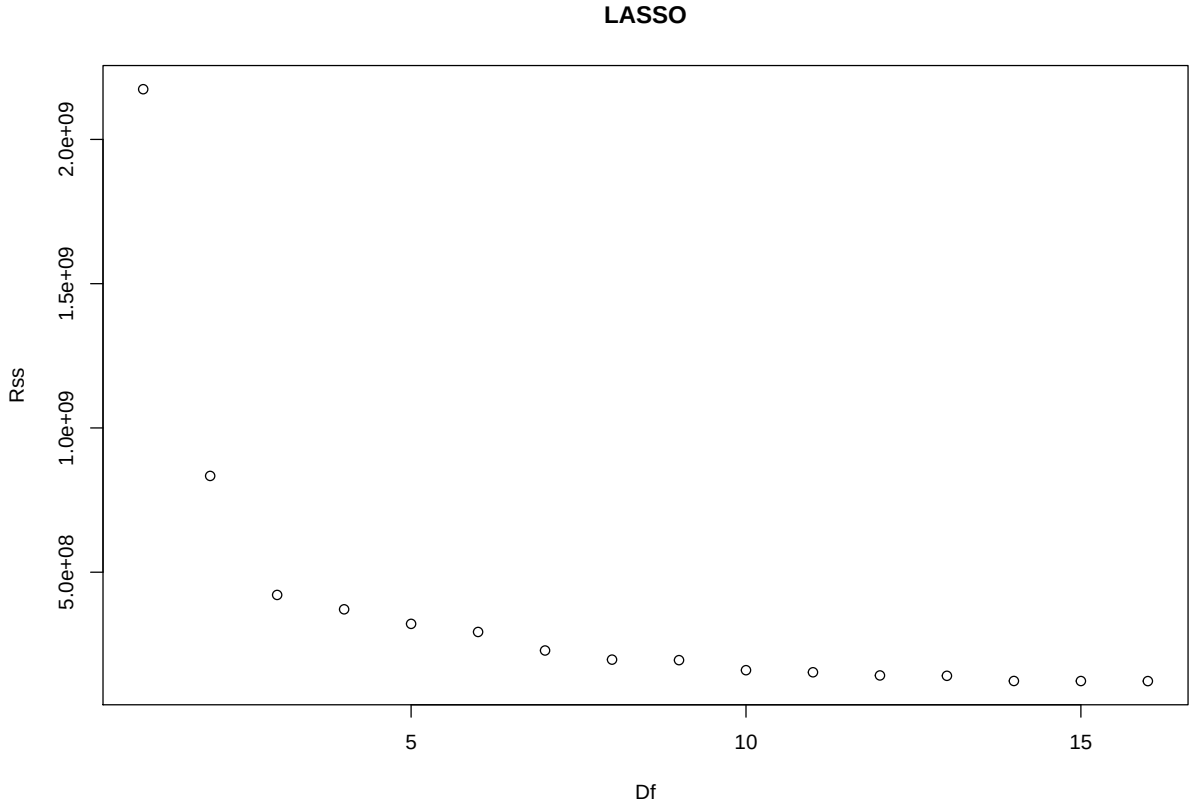
```
print(model_lasso$beta)
```

```
##       diesel    turbo two.doors  hatchback wheel.base     length    width
## 0     0.0000    0.000    0.0000     0.0000    0.00000    0.00000   0.0000
## 1     0.0000    0.000    0.0000     0.0000    0.00000    0.00000   0.0000
## 2     0.0000    0.000    0.0000     0.0000    0.00000    0.00000   0.0000
## 3     0.0000    0.000    0.0000     0.0000    0.00000    0.00000 111.8724
## 4     0.0000    0.000    0.0000  -789.5347    0.00000    0.00000 176.0849
## 5   642.1658    0.000    0.0000 -1122.8677    0.00000    0.00000 160.5224
## 6  2387.3986    0.000    0.0000 -1427.4690    0.00000    0.00000 137.3243
## 7  3423.5014    0.000    0.0000 -1728.8728    0.00000    0.00000 163.5281
## 8  3472.4719    0.000    0.0000 -1767.6045    0.00000    0.00000 171.9324
## 9  3975.5130  938.967    0.0000 -2811.9448    0.00000    0.00000 318.9629
## 10 4045.6870 1215.831  261.5374 -3266.8182    0.00000    0.00000 384.6408
## 11 3736.2192 1678.544  240.2845 -3949.4488    0.00000  -67.50439 589.2773
## 12 3657.0753 1669.712  252.9974 -4059.3016    0.00000  -77.54383 604.0831
## 13 1428.5408 1556.148  526.2831 -6832.0639    0.00000 -329.40365 952.2763
## 14 1375.3582 1576.617  536.1358 -6903.9045    0.00000 -338.20113 963.4281
## 15 1345.1121 1543.223  525.4958 -7120.0325   29.73835 -371.48374 979.5767
##       height curb.weight  eng.size horsepower peak.rpm    symbol  city.mpg
## 0     0.0000   0.0000000   0.00000    0.00000 0.000000    0.0000   0.00000
## 1     0.0000   0.0000000 102.74446    0.00000 0.000000    0.0000   0.00000
## 2     0.0000   0.0000000 135.63204   31.44918 0.000000    0.0000   0.00000
## 3     0.0000   0.0000000 136.59424   38.06575 0.000000    0.0000   0.00000
## 4     0.0000   0.0000000 132.65883   48.68140 0.000000    0.0000   0.00000
## 5     0.0000   0.0000000 127.72535   59.12405 0.000000    0.0000   0.00000
## 6     0.0000   0.0000000 132.71437   63.81603 1.515639    0.0000   0.00000
## 7     0.0000   0.0000000 135.49894   65.48059 2.330967  210.4033   0.00000
## 8   -14.0585   0.0000000 135.19833   65.71291 2.352341  219.4773   0.00000
## 9  -327.4630   0.0000000 138.20365   60.28710 2.964816  543.0628   0.00000
## 10 -443.1169   0.0000000 139.05942   57.51567 3.114888  586.6742   0.00000
## 11 -386.5205   0.0000000 150.64756   52.49213 3.066809  700.1839   0.00000
```

Régression LASSO sous R

On peut représenter la valeur du RSS en fonction de nombre de variables actives

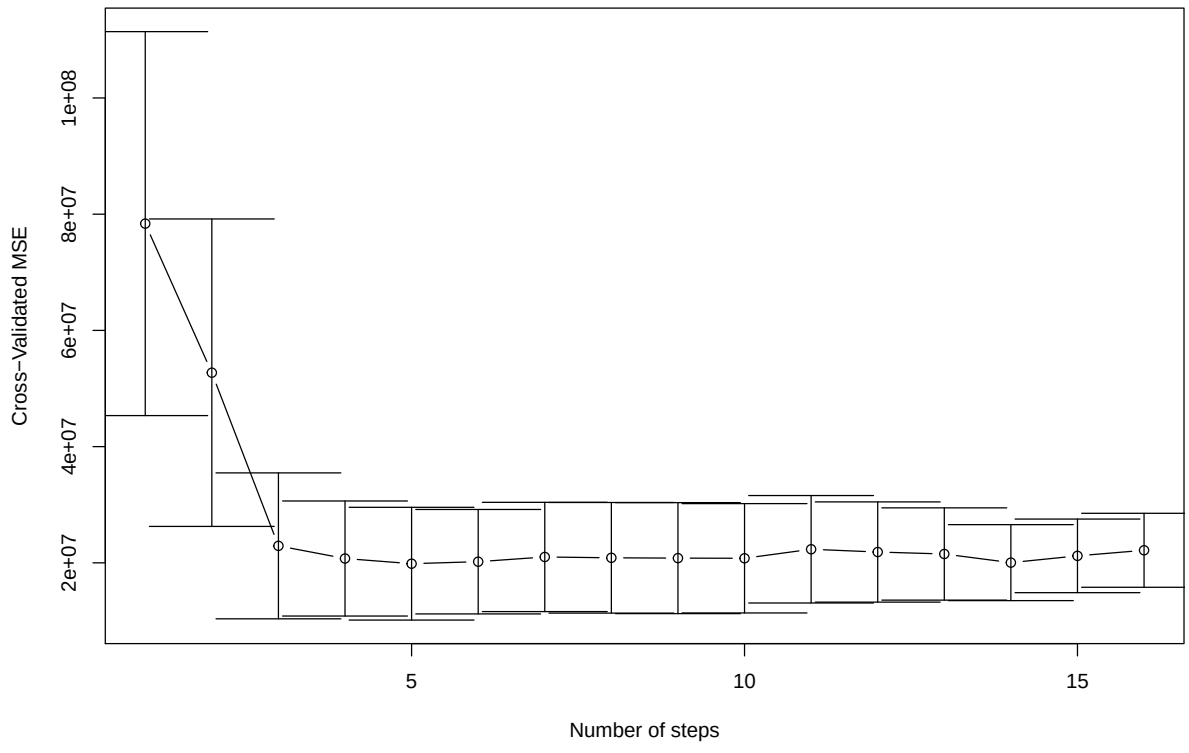
```
plot(summary(model_lasso)$Df,summary(model_lasso)$Rss,
     xlab='Df',ylab='Rss',main='LASSO')
```



Régression LASSO sous R

On peut aussi calculer l'erreur quadratique moyenne (MSE) par validation croisée (10-fold ici)

```
cv=cv.lars(as.matrix(cars[,1:15]),cars$price,K=10,trace=F,
           plot.it=T,se=T,type=c("lasso"),mode='step')
```



Régression LASSO sous R

On peut afficher le lambda à l'étape minimisant la CV-MSE (ici 5 ?) et les coefficients correspondants

```
print(model_lasso$lambda[5])
```

```
## [1] 4825.556
```

```
print(model_lasso$beta[5,])
```

```
##      diesel       turbo   two.doors   hatchback  wheel.base
##      0.0000      0.0000      0.0000   -789.5347      0.0000
##       width      height curb.weight    eng.size  horsepower
##    176.0849      0.0000      0.0000    132.6588     48.6814
##      symbol    city.mpg highway.mpg
##      0.0000      0.0000      0.0000
```

Régression LASSO sous R

La régression LASSO doit être utilisée comme une méthode de sélection de variables. Pour interpréter le modèle, il est préférable de ré-estimer un modèle de régression classique sur les variables sélectionnées par le LASSO

```
model_final<- lm(price~hatchback+width+eng.size+horsepower,data=cars)
summary(model_final)
```

```
##
## Call:
## lm(formula = price ~ hatchback + width + eng.size + horsepower,
##     data = cars)
##
## Residuals:
##    Min     1Q Median     3Q    Max
##  -5007  -2193   -136   1458   7036
##
## Coefficients:
##              Estimate Std. Error t value Pr(>|t|)
## (Intercept) -30165.10   21380.17  -1.411  0.17060
## hatchback    -2605.64    1459.52  -1.785  0.08636 .
## width          323.79     348.33   0.930  0.36149
## eng.size       123.61      33.46   3.694  0.00108 **
## horsepower      73.10      28.02   2.609  0.01512 *
## ---
## Signif. codes:  0 '***' 0.001 '**' 0.01 '*' 0.05 '.' 0.1 ' ' 1
##
## Residual standard error: 3307 on 25 degrees of freedom
## Multiple R-squared:  0.8743, Adjusted R-squared:  0.8541
## F-statistic: 43.45 on 4 and 25 DF,  p-value: 6.612e-11
```

Régression LASSO sous R

La variable width n'est pas significative, je l'enlève et ré-estime le modèle

```
model_final<- lm(price~hatchback+eng.size+horsepower,data=cars)
summary(model_final)
```

```
##
## Call:
## lm(formula = price ~ hatchback + eng.size + horsepower, data = cars)
##
## Residuals:
##     Min      1Q  Median      3Q     Max
## -5198.3 -2209.3  -506.5  1490.0  7968.7
##
## Coefficients:
##              Estimate Std. Error t value Pr(>|t|)
## (Intercept) -10410.41    2332.58  -4.463 0.000139 ***
## hatchback    -2866.14    1428.61  -2.006 0.055337 .
## eng.size       136.94      30.15   4.542 0.000113 ***
## horsepower      73.03      27.95   2.613 0.014726 *
## ---
## Signif. codes:  0 '***' 0.001 '**' 0.01 '*' 0.05 '.' 0.1 ' ' 1
##
## Residual standard error: 3298 on 26 degrees of freedom
## Multiple R-squared:  0.8699, Adjusted R-squared:  0.8549
## F-statistic: 57.95 on 3 and 26 DF,  p-value: 1.2e-11
```

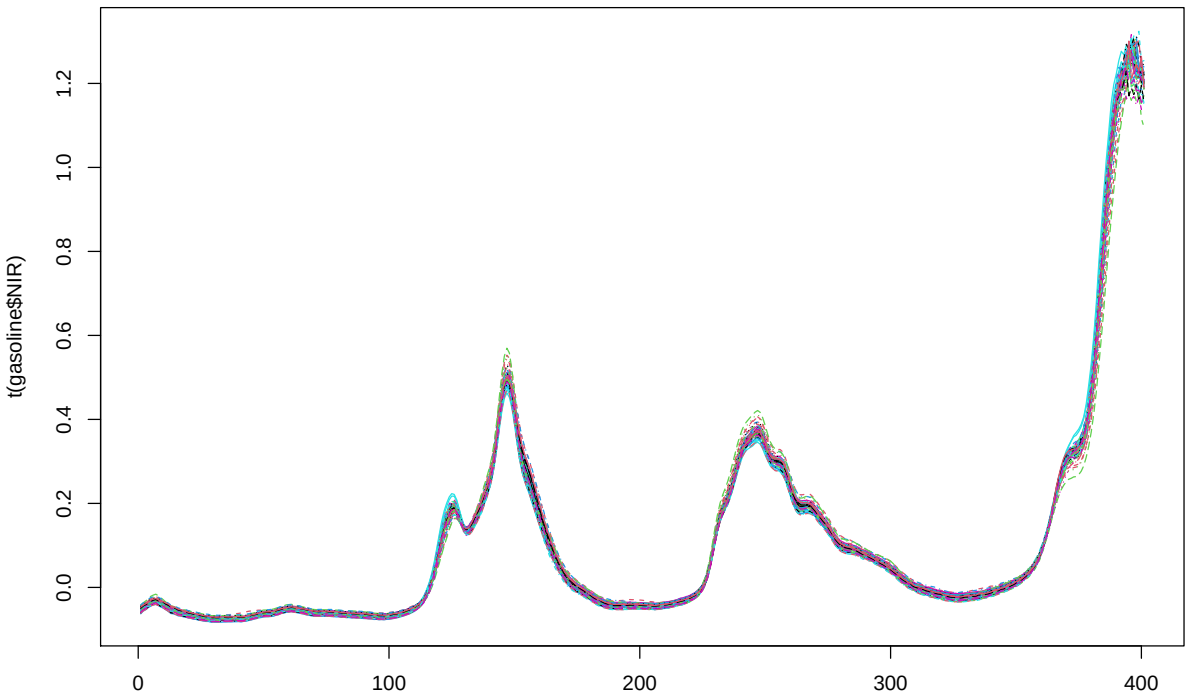
Cette fois les variables sélectionnées sont toutes significatives

Exercices

Données gasoline

Chercher le meulleur modèle de régression pour prédire l'indice d'octane à partir des spectres NIR du data set gasoline

```
library(pls)
data("gasoline")
matplot(t(gasoline$NIR),type='l')
```



Données criminalité

Chercher le meilleur modèle de régression pour prédire le taux de crimes violents aux Etats-Unis (*ViolentCrimesPerPop*) du dataset :

https://archive.ics.uci.edu/ml/datasets/Communities+and+Crime+Unnormalized

Les modèles seront comparés sur la base de la RMSE évaluée par 10-fold CV