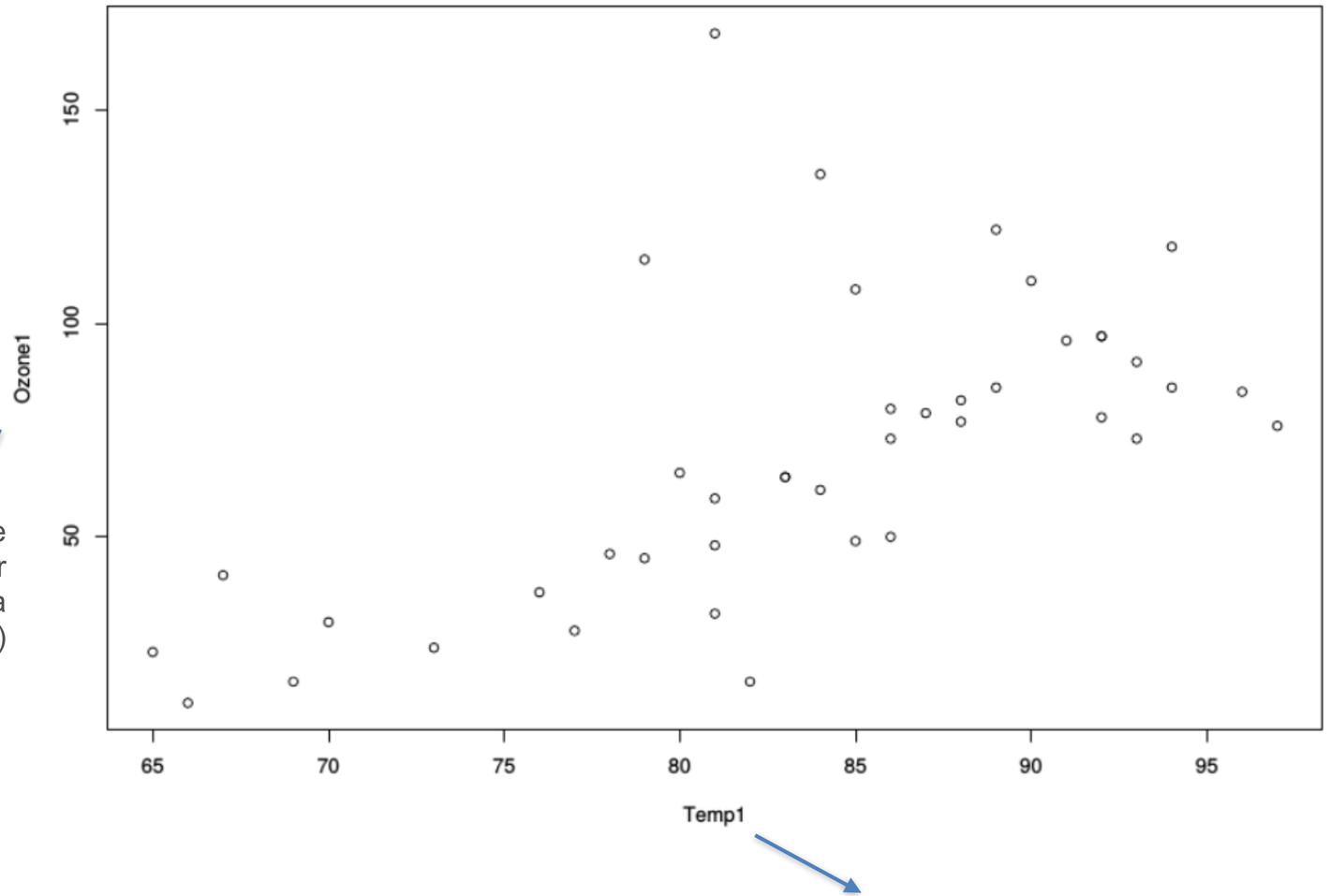
Fondements statistiques de l'apprentissage automatique

Chapitre 2 : Régression linéaire

Laurent Risser (CNRS) — Année 2022/2023

On s’intéresse à l’étude de phénomènes supposés linéaires, par exemple :



Niveau d’Ozone le même jour (très coûteux à obtenir)

Température un jour donné (peu coûteux à obtenir)

On note Y la variable aléatoire réelle à expliquer (ou encore de réponse, dépendante) et X la variable explicative (ou encore déterministe, de contrôle) ou effet fixe ou facteur contrôlé. Le modèle revient à supposer, qu'en moyenne, l'estimation $\mathbb{E}(Y)$, est une fonction affine de X.

$$\mathbb{E}(Y) = f(X) = \beta_0 + \beta_1 X\,.$$

Pour une séquence d'observations aléatoires identiquement distribuées $\{(y_i, x_i)\,, i = 1, \ldots, n\}$, avec $n > 2$ et les x_i non tous égaux, le modèle s'écrit à partir des observations :

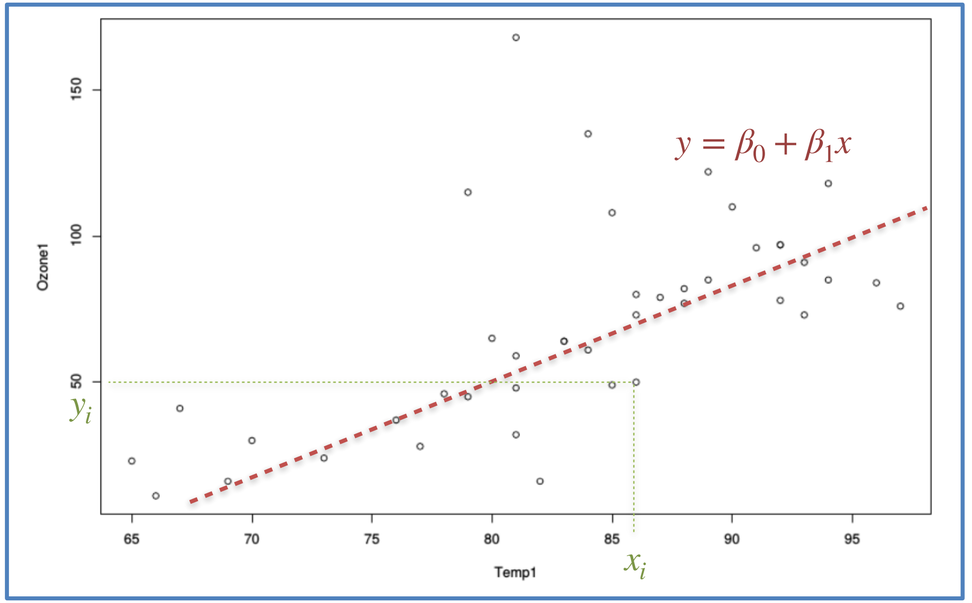
$$y_i = \beta_0 + \beta_1 x_i + u_i\,, i = 1, \ldots, n$$

ou bien sous forme matricielle :

$$\begin{bmatrix} y_1 \\ \vdots \\ y_n \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & x_1 \\ \vdots & \vdots \\ 1 & x_n \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \beta_0 \\ \beta_1 \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} u_1 \\ \vdots \\ u_n \end{bmatrix},$$

$$\mathbf{y} = \mathbf{X}\boldsymbol{\beta} + \mathbf{u}$$

où le vecteur u contient les erreurs.



$$\begin{bmatrix} y_1 \\ \vdots \\ y_n \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & x_1 \\ \vdots & \vdots \\ 1 & x_n \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \beta_0 \\ \beta_1 \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} u_1 \\ \vdots \\ u_n \end{bmatrix},$$
$$\mathbf{y} = \mathbf{X}\boldsymbol{\beta} + \mathbf{u}$$

Les hypothèses relatives à ce modèle sont les suivantes :

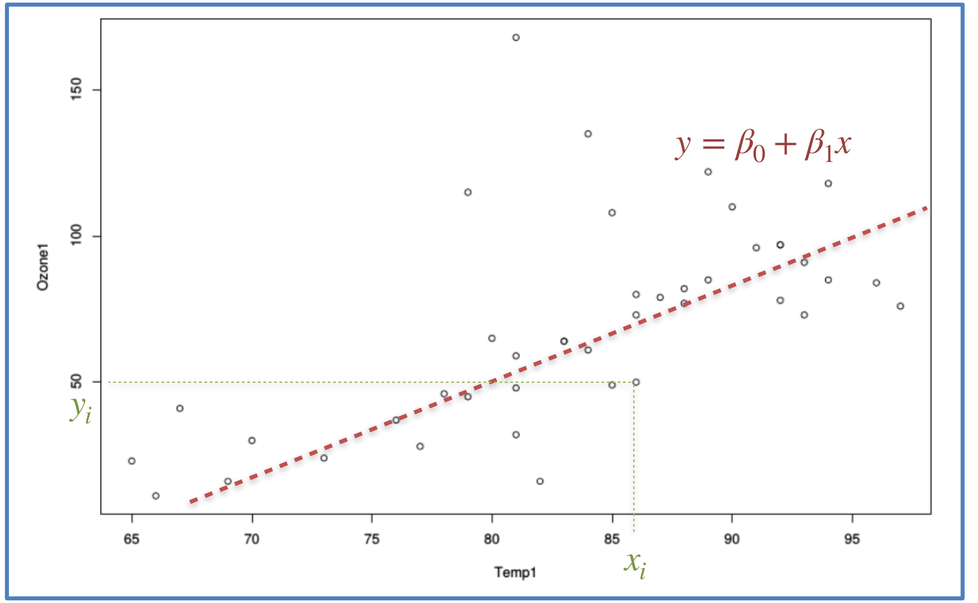
— la distribution de l'erreur $\mathbf{u}$ est indépendante de X ou bien X est fixe.

— l'erreur est centrée et de variance constante (homoscédasticité) :

$$\forall i = 1, \ldots, n : E(u_i) = 0\,, Var(u_i) = \sigma_u^2.$$

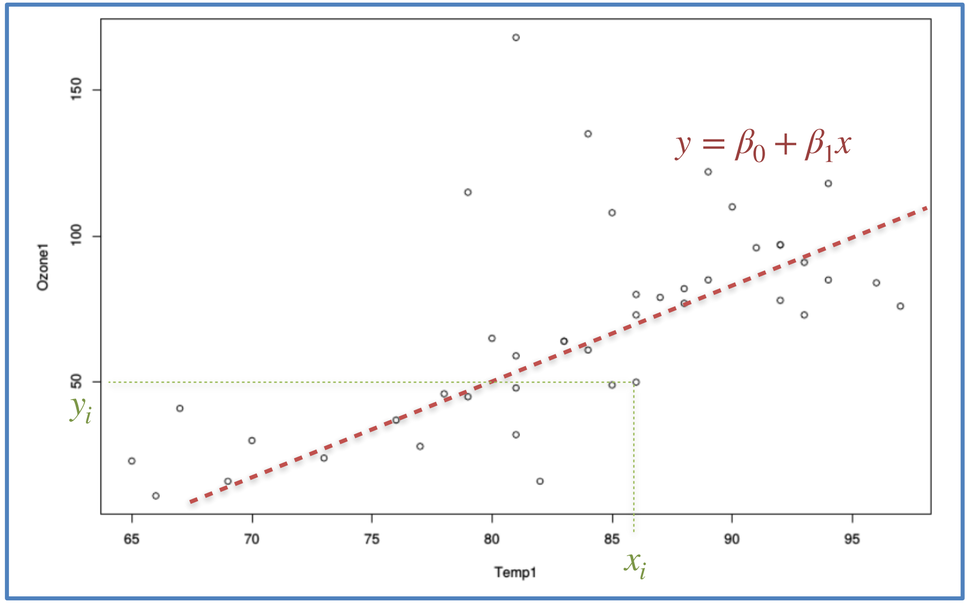
— β_0 et β_1 sont constants, il n'y a pas de rupture du modèle.

— Hypothèse complémentaire pour les inférences : $u \sim \mathcal{N}(0, \sigma_u^2 \mathbf{I}_p)$.



L'estimation des paramètres β_0, β_1, σ_u^2 peut être obtenue en minimisant la somme des carrés des écarts entre observations et modèle (moindres carrés). Pour un jeu de données $\{(y_i, x_i), i = 1, \ldots, n\}$, le critère des moindres carrés s'écrit :

$$\min_{\beta_0, \beta_1} \sum_{i=1}^{n} (y_i - \beta_0 - \beta_1 x_i)^2$$



L'estimation des paramètres β_0, β_1, σ_u^2 peut être obtenue en minimisant la somme des carrés des écarts entre observations et modèle (moindres carrés). Pour un jeu de données $\{(y_i, x_i), i = 1, \ldots, n\}$, le critère des moindres carrés s'écrit :

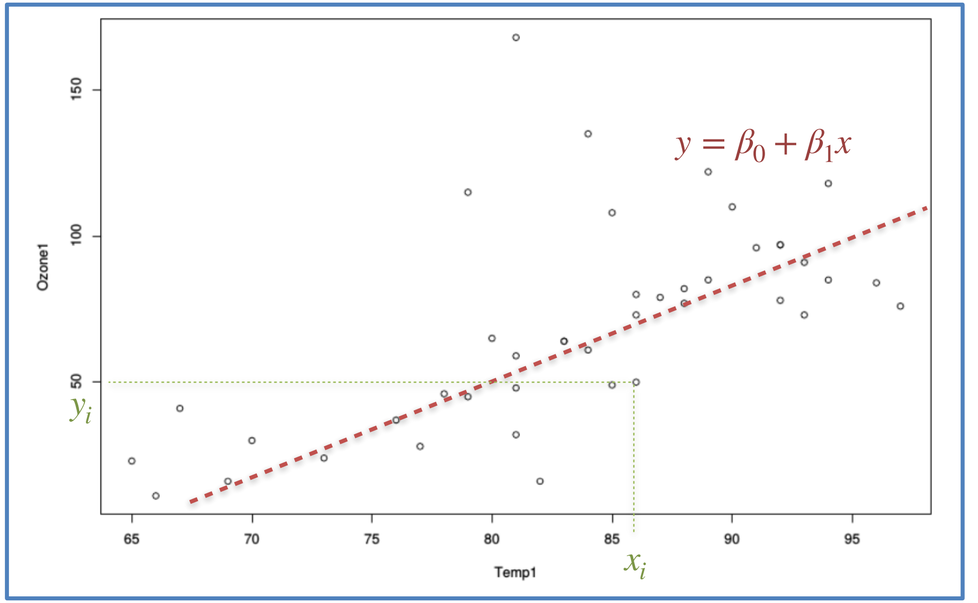
$$\min_{\beta_0,\beta_1} \sum_{i=1}^{n} (y_i - \beta_0 - \beta_1 x_i)^2$$

Pour minimiser ce critère, on pose :

$$\bar{x} = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^{n} x_i \qquad s_y^2 = \frac{1}{n-1} \sum_{i=1}^{n} (y_i - \bar{y})^2$$

$$\bar{y} = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^{n} y_i \qquad s_{xy} = \frac{1}{n-1} \sum_{i=1}^{n} (x_i - \bar{x})(y_i - \bar{y})$$

$$s_x^2 = \frac{1}{n-1} \sum_{i=1}^{n} (x_i - \bar{x})^2 \qquad r = \frac{s_{xy}}{s_x s_y}$$



L'estimation des paramètres β_0, β_1, σ_u^2 peut être obtenue en minimisant la somme des carrés des écarts entre observations et modèle (moindres carrés). Pour un jeu de données $\{(y_i, x_i), i = 1, \ldots, n\}$, le critère des moindres carrés s'écrit :

$$\min_{\beta_0,\beta_1} \sum_{i=1}^{n} (y_i - \beta_0 - \beta_1 x_i)^2$$

Pour minimiser ce critère, on pose :

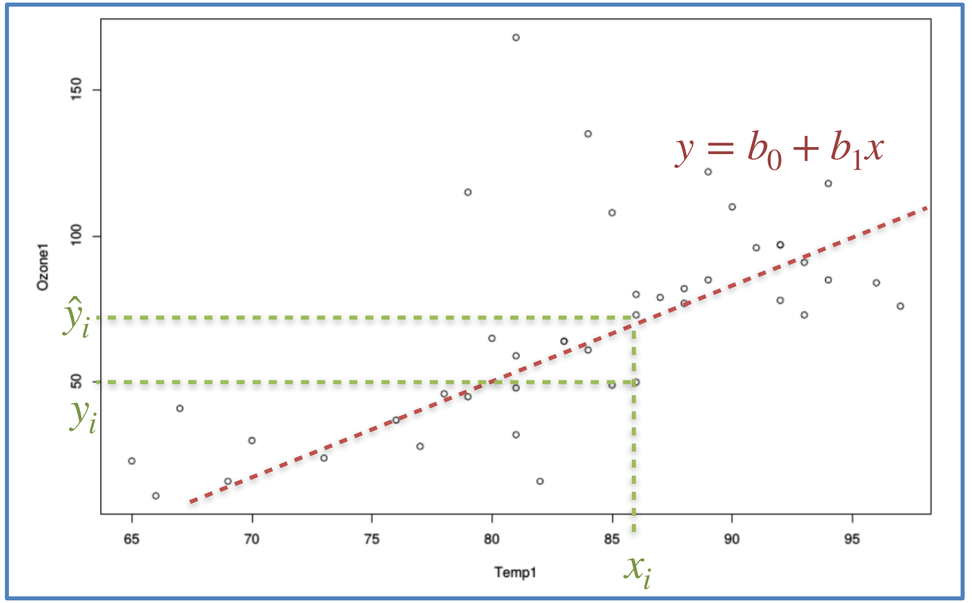
$$\bar{x} = \frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n} x_i \qquad s_y^2 = \frac{1}{n-1}\sum_{i=1}^{n}(y_i - \bar{y})^2$$

$$\bar{y} = \frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n} y_i \qquad s_{xy} = \frac{1}{n-1}\sum_{i=1}^{n}(x_i - \bar{x})(y_i - \bar{y})$$

$$s_x^2 = \frac{1}{n-1}\sum_{i=1}^{n}(x_i - \bar{x})^2 \qquad r = \frac{s_{xy}}{s_x s_y}$$

On peut alors montrer que les estimateurs de β_0 et β_1 au sens des moindres carrés sont :

$$\begin{aligned} b_1 &= \frac{s_{xy}}{s_x^2}, \\ b_0 &= \bar{y} - b_1 \bar{x}. \end{aligned}$$



À chaque valeur x_i de X correspond la valeur estimée (ou prédite, ajustée) de Y : $\hat{y}_i = b_0 + b_1 x_i$ avec $e_i = y_i - \hat{y}_i$

Niveau d'incertitude lié à l'estimation de b_0 et b_1

une hypothese a été faite sur les résidus $e \sim \mathcal{N}(0, \sigma_u^2 \mathbf{I}_p)$

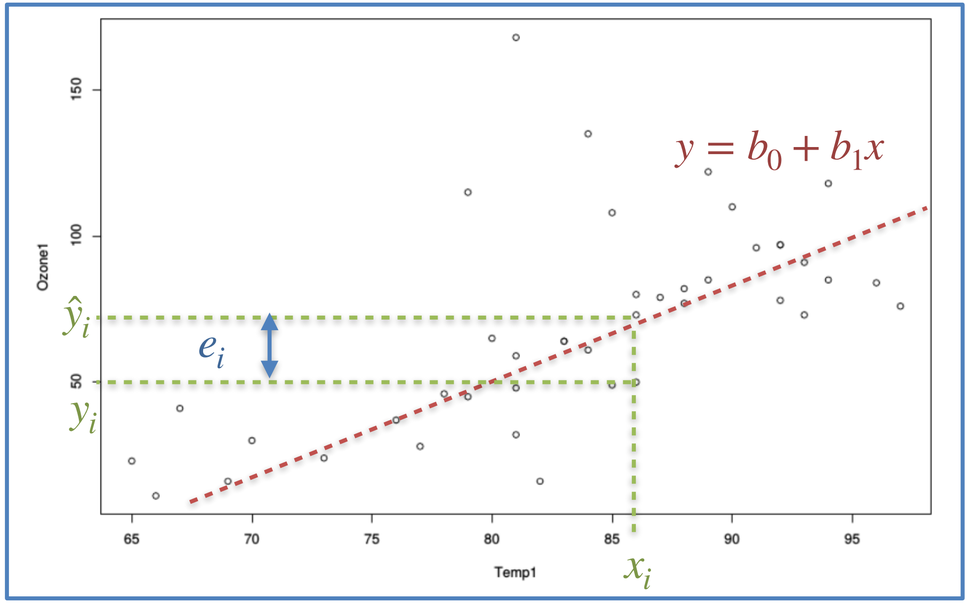
On peut alors montrer que :

$$(b_0 - \beta_0) \Big/ s\left(\frac{1}{n} + \frac{\bar{x}^2}{(n-1)s_x^2}\right)^{1/2}$$

et

$$(b_1 - \beta_1) \Big/ s\left(\frac{1}{(n-1)s_x^2}\right)^{1/2}$$

suivent des lois de Student à $(n-2)$ degrés de liberté. Ceci permet de tester l'hypothèse de nullité d'un de ces paramètres à partir de tests d'hypothèses. On va par exemple tester si le b_1 obtenu est significativement différent de 0, en fonction d'un coefficient α qui représente la probabilité avec laquelle on accepte de se tromper. Typiquement α correspond à 5% de chances de se tromper, ci qui est raisonablement faible (voir le cours de Statistique pour aller plus loin). Notons, que si b_1 est significativement différent de 0, on peut considérer qu'il existe une relation de dépendance entre les x_i et les y_i.



les estimateurs de β_0 et β_1 au sens des moindres sont :

$$\begin{aligned} b_1 &= \frac{s_{xy}}{s_x^2}, \\ b_0 &= \bar{y} - b_1 \bar{x}. \end{aligned}$$

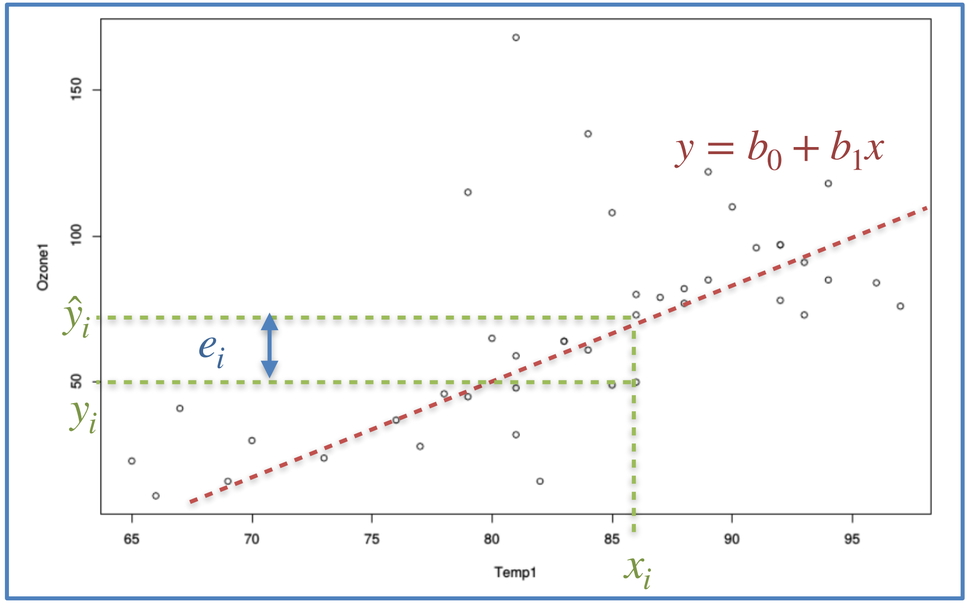
Niveau d'incertitude lié à l'estimation de b_0 et b_1

Il est de même possible de construire des intervalles de confiance pour les valeurs de b_0 et b_1, toujours en fonction d'un niveau de confiance dépendant de α :

$$b_0 \pm s \left(\frac{1}{n} + \frac{\bar{x}^2}{(n-1)s_x^2} \right)^{1/2} t_{n-2}(\alpha/2)$$

$$b_1 \pm s \left(\frac{1}{(n-1)s_x^2} \right)^{1/2} t_{n-2}(\alpha/2)$$

où $t_\nu(\alpha)$ est la distribution de Student à ν degrés de liberté (voir appendice A). En observant bien ces intervales de confiance ainsi que les distributions de Student, il est interessant de noter que plus on a d'observations n, plus les intervales de confiances sont resserés autour des b_0 et b_1 estimés. Plus on dispose d'information, moins le risque d'erreur est en effet grand par rapport aux valeurs réelles.



les estimateurs de β_0 et β_1 au sens des moindres sont :

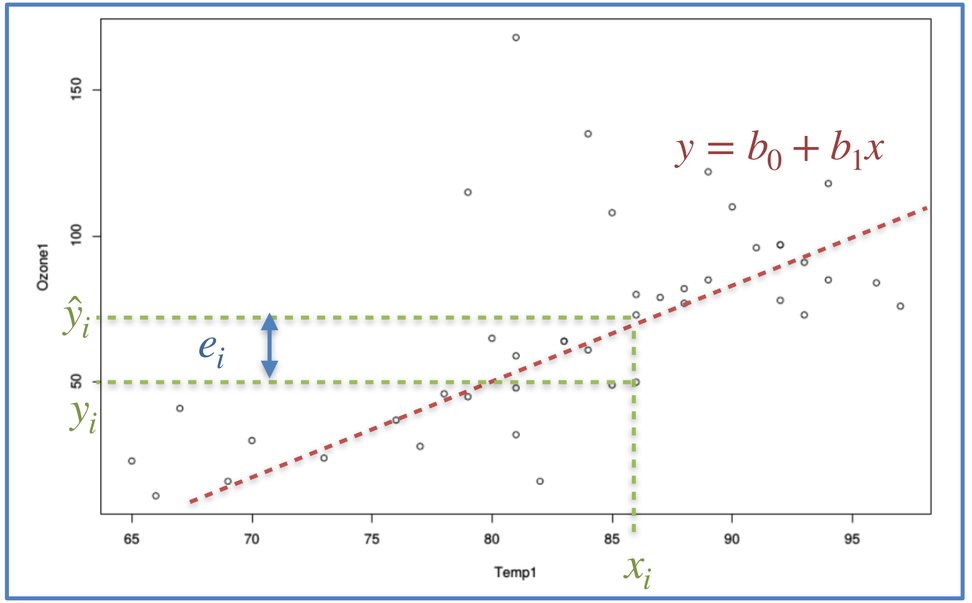
$$\begin{aligned} b_1 &= \frac{s_{xy}}{s_x^2}, \\ b_0 &= \bar{y} - b_1 \bar{x}. \end{aligned}$$

Niveau d'incertitude lié à l'estimation d'un y_0 à partir d'un x_0

Enfin, connaissant une valeur x_0, on définit deux intervalles de confiance de prédiction à partir de la valeur prédite $\hat{y_0} = b_0 + b_1 x_0$. Le premier encadre E(Y) sachant $X = x_0$; le deuxième, encadre y_0 et est plus grand car il tient compte de la variance totale $\sigma_u^2 + Var(\hat{y_0})$:

$$\widehat{y_0} \pm t_{\alpha/2;(n-2)} s \left(\frac{1}{n} + \frac{(x_0 - \bar{x})^2}{(n-1)s_x^2} \right)^{1/2},$$

$$\widehat{y_0} \pm t_{\alpha/2;(n-2)} s \left(1 + \frac{1}{n} + \frac{(x_0 - \bar{x})^2}{(n-1)s_x^2} \right)^{1/2}.$$



les estimateurs de β_0 et β_1 au sens des moindres sont :

$$b_1 = \frac{s_{xy}}{s_x^2},$$
$$b_0 = \bar{y} - b_1 \bar{x}.$$

Qualité d'ajustement

On rappelle que la variance σ_u^2 est estimée par la variation résiduelle :

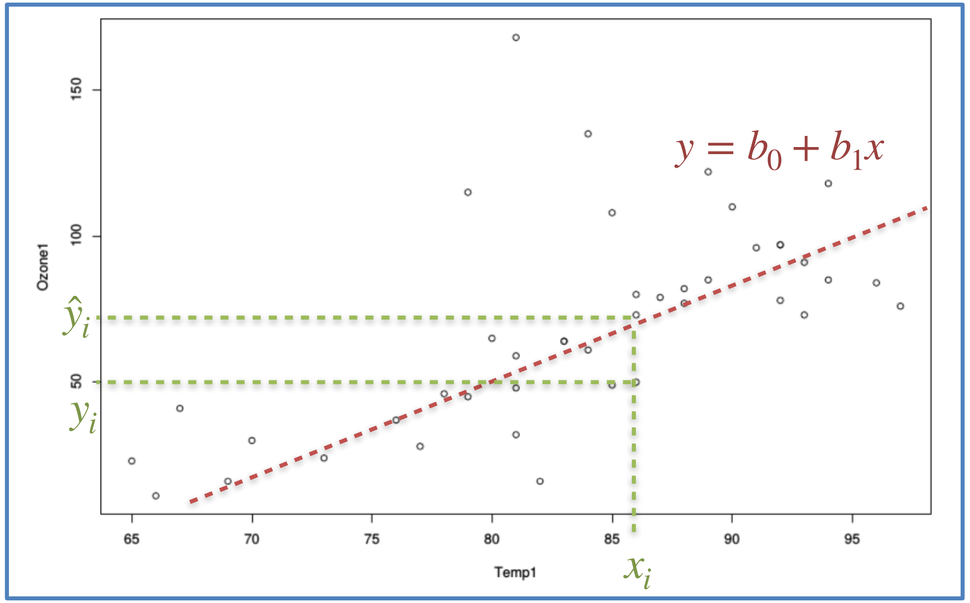
$$s^2 = \frac{1}{n-1}\sum_{i=1}^{n} e_i^2 = \frac{1}{n-1}\sum_{i=1}^{n}(y_i - \hat{y}_i)^2 = \frac{1}{n-1}\sum_{i=1}^{n}(y_i - b_0 + b_1 x_i)^2 \,.$$

et que :

$$s_x^2 = \frac{1}{n-1}\sum_{i=1}^{n}(x_i - \bar{x})^2 = \frac{1}{n-1}\sum_{i=1}^{n}\left(x_i - \left(\frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n} x_i\right)\right)^2$$

$$s_y^2 = \frac{1}{n-1}\sum_{i=1}^{n}(y_i - \bar{y})^2 = \frac{1}{n-1}\sum_{i=1}^{n}\left(y_i - \left(\frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n} y_i\right)\right)^2$$

$$s_{xy} = \frac{1}{n-1}\sum_{i=1}^{n}(x_i - \bar{x})(y_i - \bar{y}) = \frac{1}{n-1}\sum_{i=1}^{n}\left(x_i - \left(\frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n} x_i\right)\right)\left(y_i - \left(\frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n} y_i\right)\right)$$



Dans l'optique de mesurer la qualité d'ajustement du modèle, il est d'usage de décomposer les sommes de carrés des écarts à la moyenne sous la forme ci-dessous :

- Sum of Squares Total : $SST = (n-1)s_y^2$
- Sum of Squares Regression : $SSR = (n-1)\frac{s_{xy}^2}{s_x^2}$
- Sum of Squares Errors : $SST = (n-1)s^2$

On appelle alors *coefficient de détermination* la quantité :

$$R^2 = r^2 = \frac{s_{xy}^2}{s_x^2 s_u^2} = 1 - \frac{s^2}{s_u^2} = \frac{SSR}{SST}$$

qui exprime le rapport entre la variance expliquée par le modèle et la variance totale. En pratique, si R^2 vaut par exemple 0.79, cela signifie que 79% de la variablilité de Y a été capturée par le modèle linéaire et que seulement 21% restent à expliquer.

Détection d'outliers

Effet levier

Une première indication est donnée par l'éloignement de x_i par rapport à la moyenne $\bar{x}$. En effet, écrivons les prédicteurs y_i comme combinaisons linéaires des observations :

$$\hat{y}_i = b_0 + b_1 x_i = \sum_{j=1}^{n} h_{ij} y_j$$

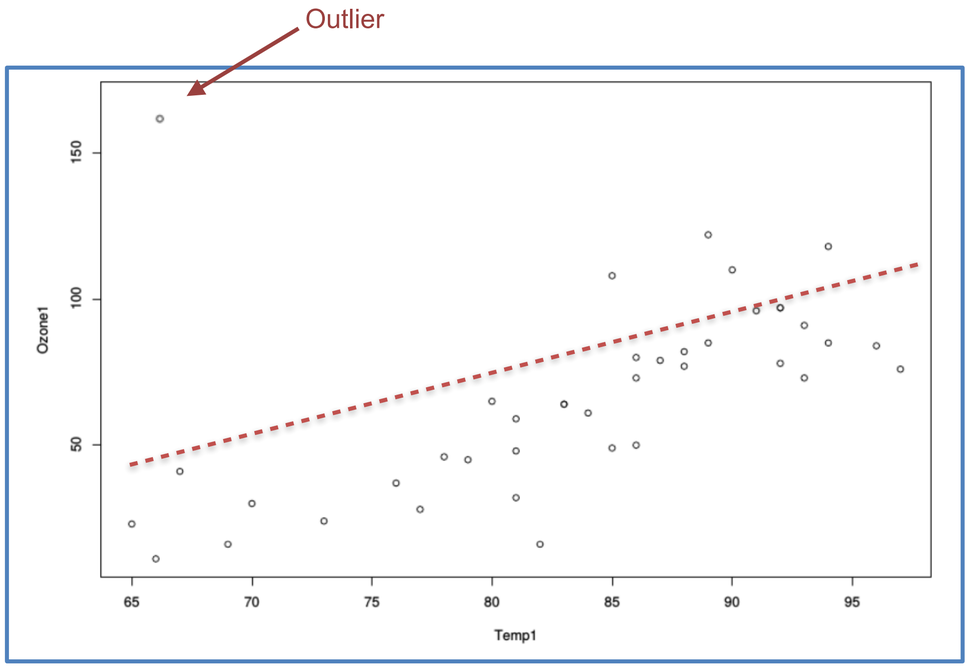
avec

$$h_{ij} = \frac{1}{n} + \frac{(x_i - \bar{x})(x_j - \bar{x})}{\sum_{k=1}^{n} (x_k - \bar{x})^2}$$

en notant $\mathbf{H}$ la matrice (hat matrix) des h_{ij} ceci s'exprime encore matriciellement :

$$\hat{\mathbf{y}} = \mathbf{H}\mathbf{y}$$

Les éléments diagonaux h_{ii} de cette matrice mesurent ainsi l'impact ou l'importance du rôle que joue y_i dans l'estimation de $\hat{y}_i$.



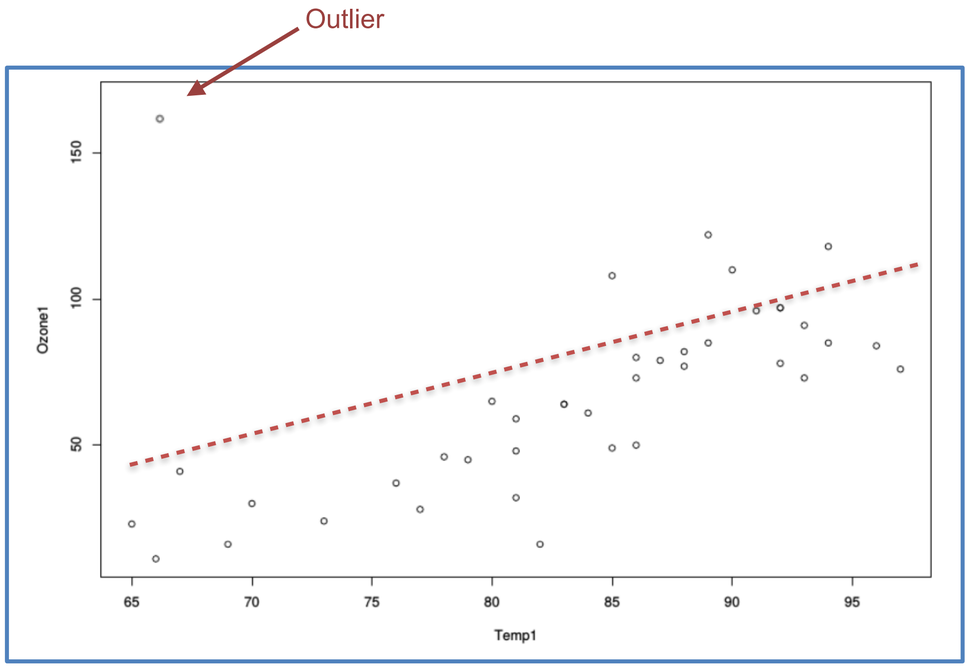
Détection d'outliers

Diagnostics

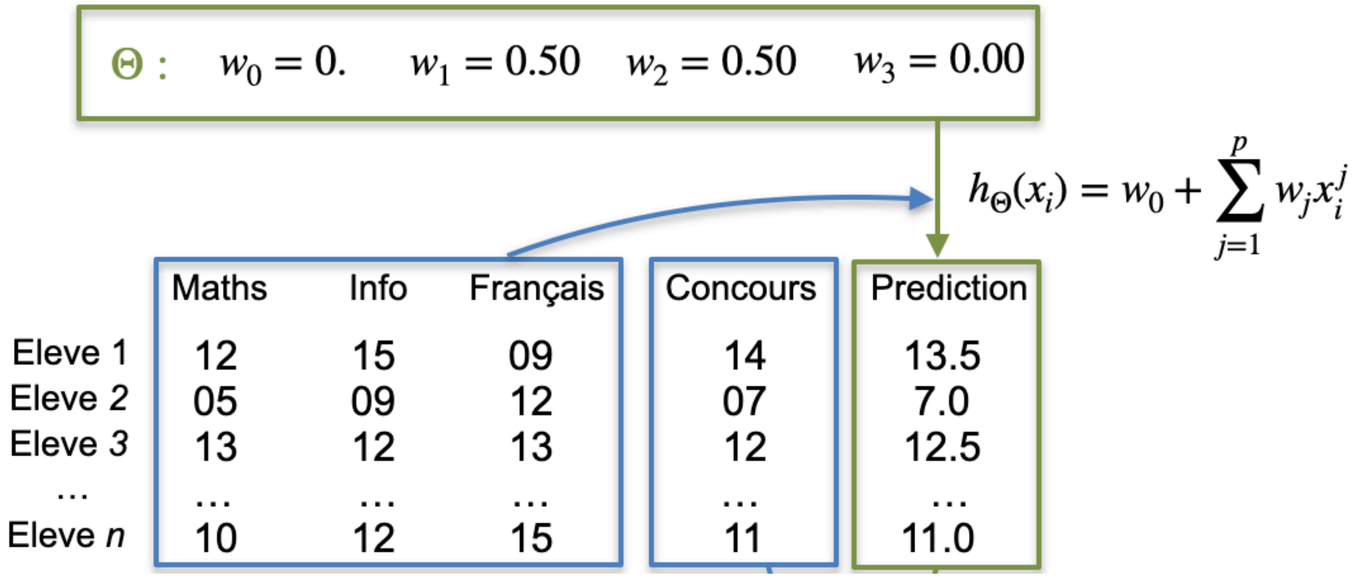
Un dernier indicateur couramment utilisé est la distance de Cook :

$$D_i = \frac{\sum_{j=1}^{n}(\widehat{y_{(i)j}} - \widehat{y_j})^2}{2s^2} = \frac{h_{ii}}{2(1-h_{ii})} r_i^2 \, , \forall i$$

qui mesure l'influence de chaque observation i sur l'ensemble des prévisions en prenant en compte effet levier et importance des résidus.



Les modèles classiques de régession (linéaire, logistique) sont anciens et moins l'occasion de battage médiatique que ceux récents issus de l'apprentissage automatique. Néanmoins, ils présentent un grand intérêt compte tenu de leur robustesse, de leur stabilité face à des fluctuations d'échantillons et de leur capacité à passer à l'échelle pour des données massives. Ils restent ainsi toujours très utilisés en production notamment lorsque la fonction à modéliser est bien linéaire et qu'il serait contre productif de chercher plus compliqué.



Une variable quantitative $\mathbf{Y}$ dite à expliquer (ou encore, réponse, exogène, dépendante) est mise en relation avec p variables quantitatives $\mathbf{X^1}, \ldots, \mathbf{X^p}$ dites explicatives (ou encore de contrôle, endogènes, indépendantes, régresseurs, prédicteurs).

Les données sont supposées provenir d'un échantillon statistique de n observations, chacune étant dans $\mathbb{R}^{(p+1)}$ (avec $n > p+1$) :

$$(x_i^1, \ldots, x_i^j, \ldots, x_i^p, y_i), i = 1, \ldots, n$$

L'écriture du modèle linéaire dans cette situation conduit à supposer que l'espérance de $\mathbf{Y}$ appartient au sous-espace de $\mathbb{R}^n$ engendré par $\{\mathbf{1}, \mathbf{X^1}, \ldots, \mathbf{X^p}\}$ où $\mathbf{1}$ désigne le vecteur de $\mathbb{R}^n$ constitué de 1s. C'est-à-dire que les $(p+1)$ variables aléatoires vérifient :

$$Y_i = \beta_0 + \beta_1 X_i^1 + \beta_2 X_i^2 + \ldots + \beta_p X_i^p + \varepsilon_i, i = 1, 2, \ldots, n$$

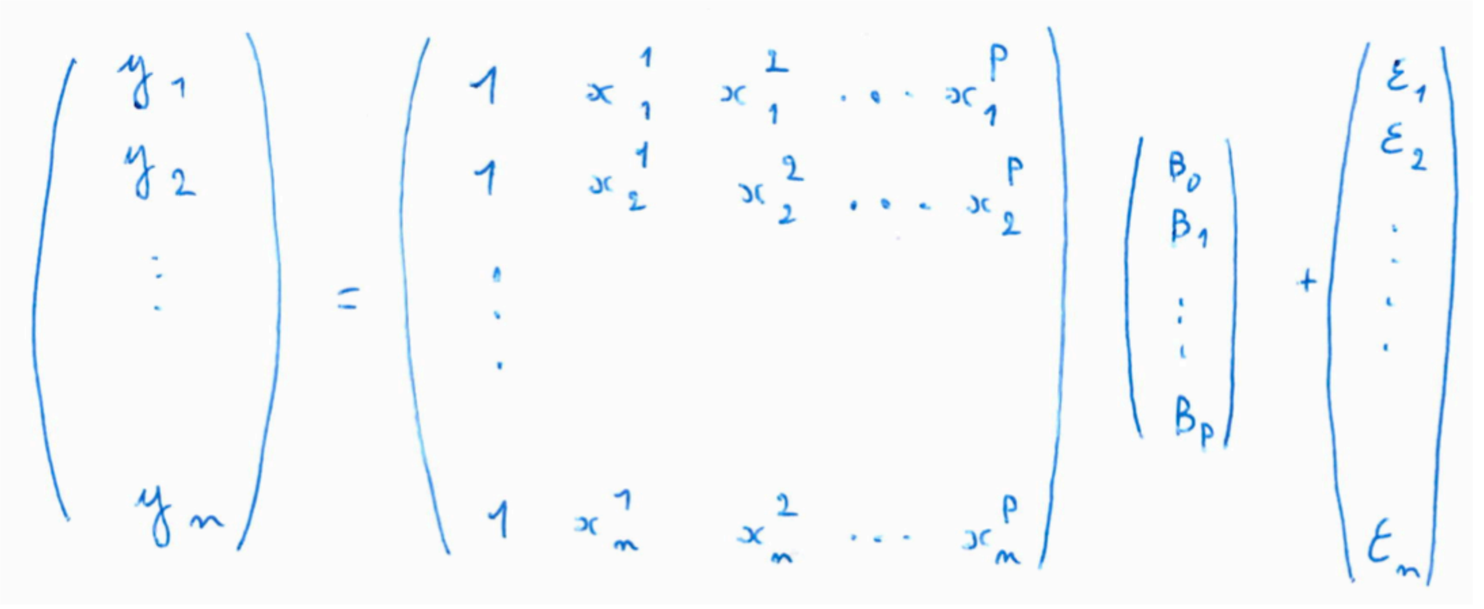
avec les hypothèses suivantes :

- Les ε_i sont des termes d'erreur indépendants et identiquement distribués, *i.e.* $E(\varepsilon_i) = 0$, $Var(\varepsilon) = \sigma^2 \mathbf{I}$.
- Les termes de $\mathbf{X^j}$, *i.e.* du vecteur qui contient les observations de la j^{eme} variable, sont supposés déterministes (facteurs contrôlés). Dans certain contextes, on suppose alternativement que l'erreur ε est indépendante de la distribution conjointe de $\mathbf{X^1}, ..., \mathbf{X^p}$. On écrit dans ce cas que $E(\mathbf{Y}|\mathbf{X^1}, \ldots, \mathbf{X^p}) = \beta_0 + \beta_1 \mathbf{X^1} + \beta_2 \mathbf{X^2} + \ldots + \beta_p \mathbf{X^p}$ et que $Var(Y|\mathbf{X^1}, \ldots, \mathbf{X^p}) = \sigma^2$.
- Les paramètres inconnus $\beta_0, \ldots, \beta_p$ sont supposés constants.
- En option, pour l'étude spécifique des lois des estimateurs, une quatrième hypothèse considère la normalité de la variable d'erreur ε (*i.e.* $\varepsilon \sim \mathcal{N}(0, \sigma^2 \mathbf{I})$). Les ε_i sont alors i.i.d. de loi $\mathcal{N}(0, \sigma^2)$.

Les données sont rangées dans une matrice $\mathbf{X}$ de taille $(n \times (p+1))$ de terme général X_i^j, dont la première colonne contient le vecteur $\mathbf{1}$ (c'est à dire $X_0^i = 1$), et dans un vecteur $\mathbf{Y}$ de terme général Y_i . En notant les vecteurs $\varepsilon = [\varepsilon_1 \dots \varepsilon_n]'$ et $\beta = [\beta_0 \beta_1 \dots \beta_p]'$, le modèle s'écrit matriciellement :

$$\mathbf{Y} = \mathbf{X}\beta + \varepsilon\,.$$

Ce modèle est détaillé ci-dessous :



2.2.2 Estimation

Conditionnellement à la connaissance des valeurs des $\mathbf{X}^j$, les paramètres inconnus du modèle, le vecteur β et le paramètre de nuisance σ^2, sont estimés par minimisation des carrés des écarts (M.C.) ou encore par maximisation de la vraisemblance (M.V.) en considèrant l'hypothèse de la normalité de la variable d'erreur. Les estimateurs ont alors les mêmes expressions, l'hypothèse de normalité et l'utilisation de la vraisemblance conférant à ces derniers des propriétés complémentaires.

Etudions l'estimation par moindres carrés. L'expression à minimiser sur $\beta \in \mathbb{R}^{p+1}$ s'écrit :

$$\sum_{i=1}^{n}(Y_i - \beta_0 - \beta_1 X_i^1 - \ldots - \beta_p X_i^p)^2 = ||\mathbf{Y} - \mathbf{X}\beta\ ||^2 \tag{2.1}$$

$$= \ \mathbf{Y}'\mathbf{Y} - 2\beta'\mathbf{X}'\mathbf{Y} + \beta'\mathbf{X}'\mathbf{X}\beta \tag{2.2}$$

Par dérivation matricielle de la dernière équation on obtient les équations normales :

$$\mathbf{X}'\mathbf{Y} - \mathbf{X}'\mathbf{X}\beta = 0$$

2.2.2 Estimation

Conditionnellement à la connaissance des valeurs des $\mathbf{X}^j$, les paramètres inconnus du modèle, le vecteur β et le paramètre de nuisance σ^2, sont estimés par minimisation des carrés des écarts (M.C.) ou encore par maximisation de la vraisemblance (M.V.) en considèrant l'hypothèse de la normalité de la variable d'erreur. Les estimateurs ont alors les mêmes expressions, l'hypothèse de normalité et l'utilisation de la vraisemblance conférant à ces derniers des propriétés complémentaires.

Etudions l'estimation par moindres carrés. L'expression à minimiser sur $\beta \in \mathbb{R}^{p+1}$ s'écrit :

$$\sum_{i=1}^{n}(Y_i - \beta_0 - \beta_1 X_i^1 - \ldots - \beta_p X_i^p)^2 = ||\mathbf{Y} - \mathbf{X}\beta\ ||^2 \tag{2.1}$$

$$= \ \mathbf{Y}'\mathbf{Y} - 2\beta'\mathbf{X}'\mathbf{Y} + \beta'\mathbf{X}'\mathbf{X}\beta \tag{2.2}$$

Par dérivation matricielle de la dernière équation on obtient les équations normales :

$$\mathbf{X}'\mathbf{Y} - \mathbf{X}'\mathbf{X}\beta = 0$$

Nous faisons l'hypothèse supplémentaire que la matrice $\mathbf{X}'\mathbf{X}$ est inversible, c'est-à-dire que la matrice $\mathbf{X}$ est de rang $(p+1)$ et donc qu'il n'existe pas de colinéarité entre ses colonnes. Si cette hypothèse n'est pas vérifiée, il suffit en principe de supprimer des colonnes de $\mathbf{X}$ et donc des variables du modèle. Une approche de réduction de dimension (régression ridge, Lasso, PLS...) est en pratique à mettre en oeuvre (voir Section 3.3). Alors, l'estimation des paramètres β_j est donnée par :

$$\widehat{\beta} = (\mathbf{X}'\mathbf{X})^{-1}\mathbf{X}'\mathbf{Y}$$

2.2.3 Prévision

Connaissant les valeurs des variables $\mathbf{X}^j$ pour une nouvelle observation : $x_0 = [x_0^1, x_0^2, \ldots, x_0^p]'$ appartenant au domaine dans lequel l'hypothèse de linéarité reste valide, une prévision, notée $\widehat{y_0}$ de $\mathbf{Y}$ ou $E(\mathbf{Y})$ est donnée par :

$$\widehat{y_0} = \widehat{\beta_0} + \widehat{\beta_1} x_0^1 + \cdots + \widehat{\beta_p} x_0^p \,.$$

2.2.3 Prévision

Connaissant les valeurs des variables $\mathbf{X}^j$ pour une nouvelle observation : $x_0 = [x_0^1, x_0^2, \ldots, x_0^p]'$ appartenant au domaine dans lequel l'hypothèse de linéarité reste valide, une prévision, notée $\widehat{y_0}$ de $\mathbf{Y}$ ou $E(\mathbf{Y})$ est donnée par :

$$\widehat{y_0} = \widehat{\beta_0} + \widehat{\beta_1} x_0^1 + \cdots + \widehat{\beta_p} x_0^p \,.$$

Les intervalles de confiance des prévisions de $\mathbf{Y}$ et $E(\mathbf{Y})$, pour une valeur $\mathbf{x}_0 \in \mathbb{R}^p$ et en posant $\mathbf{v}_0 = (1|\mathbf{x}_0')' \in \mathbb{R}^{p+1}$, sont respectivement

$$\begin{aligned} \widehat{y_0} &\pm t_{\alpha/2;(n-p-1)} \widehat{\sigma} (1 + \mathbf{v}_0' (\mathbf{X}'\mathbf{X})^{-1} \mathbf{v}_0)^{1/2}, \\ \widehat{y_0} &\pm t_{\alpha/2;(n-p-1)} \widehat{\sigma} (\mathbf{v}_0' (\mathbf{X}'\mathbf{X})^{-1} \mathbf{v}_0)^{1/2}. \end{aligned}$$

Il est intéressant de remarquer que ces intervalles de confiance dépendent d'une loi de Student à $n-p-1$ degrés de liberté (voir appendice A). A dimension des observations fixée p, plus n est grand, plus les valeurs de la loi de Student seront faible, et ainsi les marges seront réduites. Cependant, plus p est proche de n, plus les marges sont élevées. En parallèle, les variances de ces prévisions, comme celles des estimations des paramètres, dépendent aussi directement du conditionnement de la matrice $\mathbf{X}'\mathbf{X}$ de par le terme $\mathbf{v}_0' (\mathbf{X}'\mathbf{X})^{-1} \mathbf{v}_0$.