# IntRoduction générale

Techniques avancées en programmation statistique R

Patrick Fournier

Automne 2020

Université du Québec à Montréal

Un peu d'histoire

→ Fondé en 1925 par la American Telephone & Telegraph Company (AT&T).

- → Fondé en 1925 par la American Telephone & Telegraph Company (AT&T).
- → Mecque du développement technologique au 20 siècle.

- → Fondé en 1925 par la American Telephone & Telegraph Company (AT&T).
- → Mecque du développement technologique au 20 siècle.
- $\rightsquigarrow$  9 prix nobels et 4 prix Turing [2].

- → Fondé en 1925 par la American Telephone & Telegraph Company (AT&T).
- → Mecque du développement technologique au 20 siècle.
- → 9 prix nobels et 4 prix Turing [2].
- → Y ont été développés (entre autres) [8]

- → Fondé en 1925 par la American Telephone & Telegraph Company (AT&T).
- → Mecque du développement technologique au 20 siècle.
- → 9 prix nobels et 4 prix Turing [2].
- → Y ont été développés (entre autres) [8]
  - → ordinateur binaire (1939)

- → Fondé en 1925 par la American Telephone & Telegraph Company (AT&T).
- → Mecque du développement technologique au 20 siècle.
- → 9 prix nobels et 4 prix Turing [2].
- → Y ont été développés (entre autres) [8]
  - → ordinateur binaire (1939)
  - → transistor (1947)

- → Fondé en 1925 par la American Telephone & Telegraph Company (AT&T).
- → Mecque du développement technologique au 20 siècle.
- → 9 prix nobels et 4 prix Turing [2].
- → Y ont été développés (entre autres) [8]
  - → ordinateur binaire (1939)

  - → téléphonie cellulaire (1947)

- → Fondé en 1925 par la American Telephone & Telegraph Company (AT&T).
- → Mecque du développement technologique au 20 siècle.
- → 9 prix nobels et 4 prix Turing [2].
- → Y ont été développés (entre autres) [8]
  - → ordinateur binaire (1954) (1939)

  - → téléphonie cellulaire (1947)

- → Fondé en 1925 par la American Telephone & Telegraph Company (AT&T).
- → Mecque du développement technologique au 20 siècle.
- → 9 prix nobels et 4 prix Turing [2].
- → Y ont été développés (entre autres) [8]
  - → ordinateur binaire (1954)
     (1939)
     → laser (1957)

  - → téléphonie cellulaire (1947)

- → Fondé en 1925 par la American Telephone & Telegraph Company (AT&T).
- → Mecque du développement technologique au 20 siècle.
- → 9 prix nobels et 4 prix Turing [2].
- → Y ont été développés (entre autres) [8]
  - → ordinateur binaire (1939)
  - → transistor (1947)
  - → téléphonie cellulaire (1947)

- (1954)
- → laser (1957)
- → satellite de communication (1962)

- → Fondé en 1925 par la American Telephone & Telegraph Company (AT&T).
- → Mecque du développement technologique au 20 siècle.
- → 9 prix nobels et 4 prix Turing [2].
- → Y ont été développés (entre autres) [8]
  - → ordinateur binaire (1939)

  - → téléphonie cellulaire (1947)

- (1954)
- → laser (1957)
- → satellite de communication (1962)
- → Unix, C (1969 1972)

- → Fondé en 1925 par la American Telephone & Telegraph Company (AT&T).
- → Mecque du développement technologique au 20 siècle.
- → 9 prix nobels et 4 prix Turing [2].
- → Y ont été développés (entre autres) [8]
  - → ordinateur binaire (1939)
  - → transistor (1947)
  - → téléphonie cellulaire (1947)

- (1954)
- → laser (1957)
- → satellite de communication (1962)
- → Unix, C (1969 1972)

→ Inventé par John Chambers au sein des Bell labs dans la seconde moitié des années '70.

- → Inventé par John Chambers au sein des Bell labs dans la seconde moitié des années '70.
- → Développé spécifiquement à des fins de programmation statistique.

- → Inventé par John Chambers au sein des Bell labs dans la seconde moitié des années '70.
- → Développé spécifiquement à des fins de programmation statistique.
  - → Auparavant, les procédures étaient implémentées en Fortran.

- → Inventé par John Chambers au sein des Bell labs dans la seconde moitié des années '70.
- → Développé spécifiquement à des fins de programmation statistique.
  - → Auparavant, les procédures étaient implémentées en Fortran.
- → Objectif [4]: "to turn ideas into software, quickly and faithfully."

#### Avant S: Fortran

```
CALL FIT B(TAG C)
   C INITIAL ESTIMATES OF PARAMETERS
3 100 IF(.NOT.FIT AQ(TAG C)) GO TO 150
   C TEST FOR ASSESSMENT ON THIS STEP
         CALL FIT A(TAG C)
   C REPORT ON CURRENT MODEL
   150 IF(.NOT.FIT CQ(TAG C)) GO TO 200
   C TEST FOR COMPLETION OF ITERATION
         CALL FIT C(TAG C)
   C FINAL REPORT
         RETURN
11
12 200 CALL FIT S(TAG C)
   C TAKE NEXT STEP IN ITERATION
13
         GO TO 100
14
```

**Listing 1 :** Sous-programme d'optimisation du système FIT, John Chambers, 1969 [3].

# programmation?

Qu'est-ce qu'un langage de



**Figure 1 :** Platon et Aristote, probablement en train de débattre du meilleur langage de programmation entre R et SAS, Raphaël, *L'École d'Athènes*, 1512.

# Langage machine

→ Couture à l'aiguille.

# Langage machine

- → Couture à l'aiguille.
- → Directement exécuté par la machine ⇒ aucune abstraction.

# Langage machine

- → Couture à l'aiguille.
- → Directement exécuté par la machine ⇒ aucune abstraction.

#### Langage machine

- → Directement exécuté par la machine ⇒ aucune abstraction.
- → Très difficile à comprendre pour un humain.

Exemple : Calcul d'un nombre de Fibonacci sur x86 [6] :

8B542408 83FA0077 06B80000 0000C383 FA027706 B8010000 00C353BB 01000000 B9010000 008D0419 83FA0376 078BD989 C14AEBF1 5BC3

#### Langage assembleur

→ Couture à l'aiguille, mais avec un dé à coudre.

### Langage assembleur

- → Couture à l'aiguille, mais avec un dé à coudre.

#### Langage assembleur

- → Couture à l'aiguille, mais avec un dé à coudre.
- → Très près du langage machine, mais "compréhensible" par un "humain".

#### Langage assembleur

- → Couture à l'aiguille, mais avec un dé à coudre.
- → Très près du langage machine, mais "compréhensible" par un "humain".
- → Exemples: voir assembleur.ipynb

# Typologie<sup>1</sup>

# Langage de bas niveau

→ Machine à coudre.

- → Machine à coudre.
- → Relativement éloigné du langage machine ⇒ bon niveau d'abstraction.

- → Machine à coudre.
- → Relativement éloigné du langage machine ⇒ bon niveau d'abstraction.
  - Nécessite une véritable phase de compilation.

- → Machine à coudre.
- → Relativement éloigné du langage machine ⇒ bon niveau d'abstraction.
  - → Nécessite une véritable phase de compilation.
- Relativement près du langage naturel tout en reposant sur des opérations de bas niveau (ex. arithmétique des pointeurs).

- → Machine à coudre.
- → Relativement éloigné du langage machine ⇒ bon niveau d'abstraction.
  - → Nécessite une véritable phase de compilation.
- Relativement près du langage naturel tout en reposant sur des opérations de bas niveau (ex. arithmétique des pointeurs).
- → Exemples: voir c.ipynb

# Langage de haut niveau

→ Machine à coudre électrique.

#### Langage de haut niveau

- → Machine à coudre électrique.
- → Éloigné du langage machine, voir n'a presque aucun lien avec celui-ci.

# Typologie

### Langage de haut niveau

- → Machine à coudre électrique.
- Éloigné du langage machine, voir n'a presque aucun lien avec celui-ci.
- Conçu pour être indépendant de l'architecture sur lequel il est implémenté et faciliter la vie du programmeur.

## Typologie

### Langage de haut niveau

Exemple : Addition de polynômes en Haskell [1] :

```
type Poly = [(Int,Int)]

addPoly :: Poly -> Poly -> Poly

addPoly [] ys = ys

addPoly xs [] = xs

addPoly ((a,b):xs) ((c,d):ys)

| a == c = ((a,b+d):(addPoly xs ys))
| a < c = ((a,b):(addPoly xs ((c,d):ys)))
| a > c = ((c,d):(addPoly ((a,b):xs) ys))
```

Ordinateur ≠ magie; ultimement, machine qui n'accomplit qu'une unique tâche : exécution de code machine.

- Ordinateur ≠ magie; ultimement, machine qui n'accomplit qu'une unique tâche : exécution de code machine.
- → Tout langage autre ne peut être exécuté par un ordinateur ⇒ compilation ou iterprétation.

- Ordinateur ≠ magie; ultimement, machine qui n'accomplit qu'une unique tâche : exécution de code machine.
- → Tout langage autre ne peut être exécuté par un ordinateur
   ⇒ compilation ou iterprétation.

### Compilation

"Traduction" en langage machine (éventuellement, optimisations).

- → Ordinateur ≠ magie; ultimement, machine qui n'accomplit qu'une unique tâche : exécution de code machine.
- → Tout langage autre ne peut être exécuté par un ordinateur
   ⇒ compilation ou iterprétation.

### Compilation

"Traduction" en langage machine (éventuellement, optimisations).

### Interprétation

Exécution du code par un programme, l'interpréteur.

Qu'est-ce qu'un langage de programmation?

→ Premiers ordinateurs modernes : années '40.

- → Premiers ordinateurs modernes : années '40.
  - ∼→ Contraintes de performances ⇒ programmes écrits en language <u>assembleur</u> ou <u>machine</u>.

- → Premiers ordinateurs modernes : années '40.
  - ∼→ Contraintes de performances ⇒ programmes écrits en language <u>assembleur</u> ou <u>machine</u>.
  - → Spécification et implémentation se confondent.

- → Premiers ordinateurs modernes : années '40.
  - ∼→ Contraintes de performances ⇒ programmes écrits en language <u>assembleur</u> ou <u>machine</u>.
  - → Spécification et implémentation se confondent.
- → En 1948, Konrad Zuse publie une spécification d'un des premiers langage de plus haut niveau, le Plankalkül [10].

- → Premiers ordinateurs modernes : années '40.
  - ∼ Contraintes de performances ⇒ programmes écrits en language assembleur ou machine.
  - → Spécification et implémentation se confondent.
- → En 1948, Konrad Zuse publie une spécification d'un des premiers langage de plus haut niveau, le Plankalkül [10].
  - → Malgré cela, le Plankalkül ne sera pas implémenté avant 1975, soit 27 ans plus tard!

R

## Qu'est-ce que R?

R est...

#### un langage de haut niveau

Implémente des *concepts mathématiques abstraits*; le programmeur ne se soucie pas de détails d'implémentation.

## Qu'est-ce que R?

R est...

#### un langage de haut niveau

Implémente des concepts mathématiques abstraits; le programmeur ne se soucie pas de détails d'implémentation.

### un langage interprété

Code exécuté par l'interpréteur R.

## Qu'est-ce que R?

R est...

#### un langage de haut niveau

Implémente des concepts mathématiques abstraits; le programmeur ne se soucie pas de détails d'implémentation.

## un langage interprété

Code exécuté par l'interpréteur R.

### une implémentation de S [5]

Tout comme le "vieux S" et le "nouveau S", R implémente les spécifications du langage S.

→ R est fortement influencé par une famille de langages extrêmement importante dans l'histoire de l'informatique : Lisp.

- → R est fortement influencé par une famille de langages extrêmement importante dans l'histoire de l'informatique : Lisp.
- → Dialecte important de Lisp : Common Lisp.

- → R est fortement influencé par une famille de langages extrêmement importante dans l'histoire de l'informatique : Lisp.
- → Dialecte important de Lisp : Common Lisp.
  - → Programmation orientée objet (CLOS).

- R est fortement influencé par une famille de langages extrêmement importante dans l'histoire de l'informatique : Lisp.
- → Dialecte important de Lisp : Common Lisp.
  - → Programmation orientée objet (CLOS).
  - → Réflectivité.

- R est fortement influencé par une famille de langages extrêmement importante dans l'histoire de l'informatique : Lisp.
- → Dialecte important de Lisp : Common Lisp.
  - → Programmation orientée objet (CLOS).
  - → Réflectivité.
  - → Programmation fonctionnelle (& array programming).

- R est fortement influencé par une famille de langages extrêmement importante dans l'histoire de l'informatique : Lisp.
- → Dialecte important de Lisp : Common Lisp.
  - → Programmation orientée objet (CLOS).
  - → Réflectivité.
  - → Programmation fonctionnelle (& array programming).
- → Influence plus récente : XLispStat; basé sur XLisp qui étend Scheme, un dialecte minimaliste de Lisp.

- R est fortement influencé par une famille de langages extrêmement importante dans l'histoire de l'informatique : Lisp.
- → Dialecte important de Lisp : Common Lisp.
  - → Programmation orientée objet (CLOS).
  - → Réflectivité.
  - → Programmation fonctionnelle (& array programming).
- → Influence plus récente : XLispStat; basé sur XLisp qui étend Scheme, un dialecte minimaliste de Lisp.
  - → Procédures statistiques de haut niveau (régressions, modèles linéaires généralisés, ...).

- R est fortement influencé par une famille de langages extrêmement importante dans l'histoire de l'informatique : Lisp.
- → Dialecte important de Lisp : Common Lisp.
  - → Programmation orientée objet (CLOS).
  - → Réflectivité.
  - → Programmation fonctionnelle (& array programming).
- → Influence plus récente : XLispStat; basé sur XLisp qui étend Scheme, un dialecte minimaliste de Lisp.
  - → Procédures statistiques de haut niveau (régressions, modèles linéaires généralisés, ...).
  - → Visualisation de données (statique et même dynamique, voir exemple).

# Une influence importante : Lisp



Figure 2 : John McCarthy, concepteur de Lisp et pionnier de l'intelligence artificielle, ≈ 1967.



Figure 3 : Lisp machine, ordinateur conçu pour l'exécution directe de code Lisp, années '70.

15

# Une influence importante : XLispStat

**Figure 4 :** Programme XLispStat et sa sortie graphique dynamique, Luke Tierney, 1989 [9].

Dalue

21

R est multi-paradigmes:

### Programmation impérative

Programme  $\simeq$  modifications successives de son propre état.

R est multi-paradigmes :

### Programmation impérative

Programme  $\simeq$  modifications successives de son propre état.

### Programmation procédurale

Possibilité de faire appel à des procédures (fonctions).

#### R est multi-paradigmes :

### Programmation impérative

Programme  $\simeq$  modifications successives de son propre état.

### Programmation procédurale

Possibilité de faire appel à des procédures (fonctions).

### Programmation fonctionnelle (Purrr)

Programme  $\simeq$  application de fonctions.

#### R est multi-paradigmes :

### Programmation impérative

Programme  $\simeq$  modifications successives de son propre état.

### Programmation procédurale

Possibilité de faire appel à des procédures (fonctions).

### Programmation fonctionnelle (Purrr)

Programme  $\simeq$  application de fonctions.

## Programmation réflective

Un programme peut examiner et modifier sa structure.

R est multi-paradigmes :

Programmation orientée objet (OOP)

Le concept d'objet joue un rôle central.

R est multi-paradigmes :

Programmation orientée objet (OOP)

Le concept d'objet joue un rôle central.

Array programming

Opérations sur des ensembles de valeurs.

R est multi-paradigmes :

### Programmation orientée objet (OOP)

Le concept d'objet joue un rôle central.

### Array programming

Opérations sur des ensembles de valeurs.

### Programmation lettrée (Knittr & Sweave)

Explications du programmes données en conjonction avec le code source.

## Exemple: impératif vs. déclaratif

## Prolog (déclaratif)

```
car(X) := toyota(X).
    car(X) :- honda(X).
3
    toyota(prius) :- true.
    toyota(patrick) :- false.
    honda(patrick) :- false.
6
    humain(X) :- not(car(X)).
8
9
    ?- car(prius).
10
    true
11
12
    ?- car(patrick).
13
    false.
14
15
    ?- humain(patrick).
16
    true.
17
```

# Exemple: impératif vs. déclaratif

R (impératif) Voir r.ipynb

## Exemple: impératif vs. fonctionnel

## Pascal (impératif)

```
Program autoCor1;
2
   var
        uniforms, uniforms1: array [1..10000] of Real;
3
        kk: Integer:
        avg, prod, sumSq, res: Real;
6
   begin
        avg := 0; prod := 0; sumSq := 0;
7
        for kk := 1 to 10000 do uniforms[kk] := random;
8
        for kk := 1 to 10000 do avg := avg + uniforms[kk] / 10000;
        for kk := 1 to 10000 do uniforms[kk] := uniforms[kk] - avg;
10
        for kk := 2 to 10000 do uniforms1[kk - 1] := uniforms[kk];
11
        uniforms1[10000] := uniforms[1];
12
13
        for kk := 1 to 10000 do
14
            prod := prod + uniforms[kk] * uniforms1[kk];
15
        for kk := 1 to 10000 do
16
            sumSq := sumSq + uniforms[kk] * uniforms[kk];
17
18
        res := prod / sumSq
19
   end.
20
```

# Exemple: impératif vs. fonctionnel

R (fonctionnel) Voir r.ipynb

## Exemple: scalar vs. array

## Pascal (scalar)

```
Program autoCor1;
2
   var
        uniforms, uniforms1: array [1..10000] of Real;
        kk: Integer;
        avg, prod, sumSq, res: Real;
6
   begin
        avg := 0; prod := 0; sumSg := 0;
7
        for kk := 1 to 10000 do uniforms[kk] := random;
8
        for kk := 1 to 10000 do avg := avg + uniforms[kk] / 10000;
        for kk := 1 to 10000 do uniforms[kk] := uniforms[kk] - avg;
10
        for kk := 2 to 10000 do uniforms1[kk - 1] := uniforms[kk];
11
        uniforms1[10000] := uniforms[1]:
12
13
        for kk := 1 to 10000 do
14
            prod := prod + uniforms[kk] * uniforms1[kk];
15
        for kk := 1 to 10000 do
16
            sumSq := sumSq + uniforms[kk] * uniforms[kk];
17
18
        res := prod / sumSq
19
   end.
20
```

## Exemple: scalar vs. array

R (array) Voir r.ipynb

Mathématiques appliquées?

### Définition

Utilisation des mathématiques pour résoudre des problèmes provenant d'autre domaines.

### Définition

Utilisation des mathématiques pour résoudre des problèmes provenant d'autre domaines.

### Définition

Utilisation des mathématiques pour résoudre des problèmes provenant d'autre domaines.

Discipline faisant face à un ensemble distinct de problèmes.

→ Contraintes d'implémentation.

### Définition

Utilisation des mathématiques pour résoudre des problèmes provenant d'autre domaines.

- → Contraintes d'implémentation.
- → Précision

### Définition

Utilisation des mathématiques pour résoudre des problèmes provenant d'autre domaines.

- → Contraintes d'implémentation.
- → Précision
- → Efficacité

### Définition

Utilisation des mathématiques pour résoudre des problèmes provenant d'autre domaines.

- → Contraintes d'implémentation.
- → Précision
- → Efficacité
  - → Temporelle

### Définition

Utilisation des mathématiques pour résoudre des problèmes provenant d'autre domaines.

- → Contraintes d'implémentation.
- → Précision
- → Efficacité
  - → Temporelle
  - → Spatiale

#### Contexte

### Problème

Étant donné  $y_n$  : réponse aléatoire,  $X_{n \times p}$  : prédicteurs, n > p trouver  $\beta$  tel que

$$y = X\beta$$

#### Contexte

### Problème

Étant donné  $y_n$  : réponse aléatoire,  $X_{n \times p}$  : prédicteurs, n > p trouver  $\beta$  tel que

$$y = X\beta$$

Habituellement, erreurs de mesure ⇒ système indéterminé.

#### Contexte

### Problème

Étant donné  $y_n$  : réponse aléatoire,  $X_{n \times p}$  : prédicteurs, n > p trouver  $\beta$  tel que

$$y = X\beta$$

Habituellement, erreurs de mesure ⇒ système indéterminé.

### Outils

#### Contexte

### Problème

Étant donné  $y_n$  : réponse aléatoire,  $X_{n \times p}$  : prédicteurs, n > p trouver  $\beta$  tel que

$$y = X\beta$$

Habituellement, erreurs de mesure ⇒ système indéterminé.

#### Outils

→ Méthode des moindres carrés.

#### Contexte

### Problème

Étant donné  $y_n$  : réponse aléatoire,  $X_{n \times p}$  : prédicteurs, n > p trouver  $\beta$  tel que

$$y = X\beta$$

Habituellement, erreurs de mesure ⇒ système indéterminé.

#### Outils

- → Méthode des moindres carrés.
- → Maximum de vraisemblance.

#### Contexte

### Problème

Étant donné  $y_n$ : réponse aléatoire,  $X_{n \times p}$ : prédicteurs, n > p trouver  $\beta$  tel que

$$y = X\beta$$

Habituellement, erreurs de mesure ⇒ système indéterminé.

#### Outils

- → Méthode des moindres carrés.
- → Maximum de vraisemblance.
- → ????

### Méthode des moindres carrés

→ Développée par nul autre que Carl Friedrich Gauss (et Adrien-Marie Legendre de manière indépendante) en 1795, publiée en 1805.

### Méthode des moindres carrés

- → Développée par nul autre que Carl Friedrich Gauss (et Adrien-Marie Legendre de manière indépendante) en 1795, publiée en 1805.
- → Estimateur:

$$\hat{\beta} = \arg\max_{\beta} ||y - X\beta||^2 = (X^{\mathsf{T}}X)^{-1}X^{\mathsf{T}}y$$

### Maximum de vraisemblance

→ Histoire plus alambiquée [7].

### Maximum de vraisemblance

- → Histoire plus alambiquée [7].
- $\rightarrow$  Idée : on suppose que *y* suit une certaine distribution puis on maximise la vraisemblance comme fonction de  $\beta$ .

### Maximum de vraisemblance

- → Histoire plus alambiquée [7].
- $\sim$  Idée : on suppose que y suit une certaine distribution puis on maximise la vraisemblance comme fonction de  $\beta$ .
- → Il est bien connu que

$$y \sim \mathcal{N} \Rightarrow \hat{\beta} = (X^{\mathsf{T}}X)^{-1}X^{\mathsf{T}}y$$

### Maximum de vraisemblance

- → Histoire plus alambiquée [7].
- $\sim$  Idée : on suppose que y suit une certaine distribution puis on maximise la vraisemblance comme fonction de  $\beta$ .
- → Il est bien connu que

$$y \sim \mathcal{N} \Rightarrow \hat{\beta} = (X^{\mathsf{T}}X)^{-1}X^{\mathsf{T}}y$$

Donc, ces deux méthodes nécessitent une inversion de matrice.

### Inversion de matrice

Sur un ordinateur standard, l'inversion de matrice est

### Inversion de matrice

Sur un ordinateur standard, l'inversion de matrice est

## **Imprécise**

Perte de précision due à l'encodage des nombres à virgule flottante.

### Inversion de matrice

Sur un ordinateur standard, l'inversion de matrice est

## **Imprécise**

Perte de précision due à l'encodage des nombres à virgule flottante.

### Inefficace

### Inversion de matrice

Sur un ordinateur standard, l'inversion de matrice est

## **Imprécise**

Perte de précision due à l'encodage des nombres à virgule flottante.

#### Inefficace

 $\rightarrow$  Méthodes gaussiennes :  $\mathcal{O}(n^3)$ 

### Inversion de matrice

Sur un ordinateur standard, l'inversion de matrice est

## **Imprécise**

Perte de précision due à l'encodage des nombres à virgule flottante.

### Inefficace

- $\rightarrow$  Méthodes gaussiennes :  $\mathcal{O}(n^3)$
- $\rightarrow$  Meilleures méthodes :  $\mathcal{O}(>n^{2.3})$

## Décomposition QR

Toute matrice X peut se décomposer en une matrice Q orthogonale et R triangulaire supérieure de sorte que

$$X = QR$$
.

## Décomposition QR

Toute matrice X peut se décomposer en une matrice Q orthogonale et R triangulaire supérieure de sorte que

$$X = QR$$
.

#### **Précis**

Perte de précision moindre que l'inversion de matrice.

## Décomposition QR

Toute matrice X peut se décomposer en une matrice Q orthogonale et R triangulaire supérieure de sorte que

$$X = QR$$
.

#### **Précis**

Perte de précision moindre que l'inversion de matrice.

### Efficace

Multiple optimisation possible (entre autre, pas besoin de calculer explicitement *Q*).

Estimation et décomposition QR En posant X = QR, on obtient.

## Estimation et décomposition QR

En posant X = QR, on obtient.

$$X^{\mathsf{T}}X\beta = X^{\mathsf{T}}y$$

### Estimation et décomposition QR

En posant X = QR, on obtient.

$$X^{\mathsf{T}}X\beta = X^{\mathsf{T}}y$$

$$\Leftrightarrow R^{\mathsf{T}}R\beta = R^{\mathsf{T}}Q^{\mathsf{T}}y$$

### Estimation et décomposition QR

En posant X = QR, on obtient.

$$X^{\mathsf{T}}X\beta = X^{\mathsf{T}}y$$
 
$$\Leftrightarrow R^{\mathsf{T}}R\beta = R^{\mathsf{T}}Q^{\mathsf{T}}y$$
 
$$\Leftrightarrow R\beta = Q^{\mathsf{T}}y.$$

### Estimation et décomposition QR

En posant X = QR, on obtient.

$$X^{\mathsf{T}}X\beta = X^{\mathsf{T}}y$$

$$\Leftrightarrow R^{\mathsf{T}}R\beta = R^{\mathsf{T}}Q^{\mathsf{T}}y$$

$$\Leftrightarrow R\beta = Q^{\mathsf{T}}y.$$

→ On a transformé un problème surdéterminé en problème déterminé!

#### Estimation et décomposition QR

En posant X = QR, on obtient.

$$X^{\mathsf{T}}X\beta = X^{\mathsf{T}}y$$

$$\Leftrightarrow R^{\mathsf{T}}R\beta = R^{\mathsf{T}}Q^{\mathsf{T}}y$$

$$\Leftrightarrow R\beta = Q^{\mathsf{T}}y.$$

- → On a transformé un problème surdéterminé en problème déterminé!
- → Le système d'équations est échelonné.

#### Estimation et décomposition QR

En posant X = QR, on obtient.

$$X^{\mathsf{T}}X\beta = X^{\mathsf{T}}y$$

$$\Leftrightarrow R^{\mathsf{T}}R\beta = R^{\mathsf{T}}Q^{\mathsf{T}}y$$

$$\Leftrightarrow R\beta = Q^{\mathsf{T}}y.$$

- → On a transformé un problème surdéterminé en problème déterminé!
- → Le système d'équations est échelonné.
- → Seules les p premières lignes de R sont non nulles.

#### Estimation et décomposition QR

En posant X = QR, on obtient.

$$X^{\mathsf{T}}X\beta = X^{\mathsf{T}}y$$

$$\Leftrightarrow R^{\mathsf{T}}R\beta = R^{\mathsf{T}}Q^{\mathsf{T}}y$$

$$\Leftrightarrow R\beta = Q^{\mathsf{T}}y.$$

- → On a transformé un problème surdéterminé en problème déterminé!
- → Le système d'équations est échelonné.
- $\rightsquigarrow$  Seules les p premières lignes de R sont non nulles.
- $\rightarrow$  Donc, on peut résoudre ce système d'équations directement par backsolving  $(\mathcal{O}(m^2))$ .

## Variance de $\hat{\beta}$

 $\rightsquigarrow$  On sait que  $\hat{\mathbf{V}}[\hat{\beta}] = s^2(X^TX)^{-1}$ .

#### Variance de $\hat{\beta}$

- $\rightarrow$  On sait que  $\hat{\mathbf{V}}[\hat{\beta}] = s^2(X^TX)^{-1}$ .
- → Toutefois, on peut faire mieux que d'inverser XTX!

### Variance de $\hat{\beta}$

- $\rightsquigarrow$  On sait que  $\hat{\mathbf{V}}[\hat{\beta}] = s^2(X^TX)^{-1}$ .
- → Toutefois, on peut faire mieux que d'inverser XTX!
- $\rightsquigarrow$  Si X = QR, on a que

$$\hat{\mathbf{V}}[\hat{\beta}] = \mathbf{S}^2 (R^{\mathsf{T}} R)^{-1}.$$

#### Variance de $\hat{\beta}$

- $\rightsquigarrow$  On sait que  $\hat{\mathbf{V}}[\hat{\beta}] = s^2(X^TX)^{-1}$ .
- → Toutefois, on peut faire mieux que d'inverser XTX!
- $\rightsquigarrow$  Si X = QR, on a que

$$\hat{\mathbf{V}}[\hat{\beta}] = \mathbf{S}^2 (R^{\mathsf{T}} R)^{-1}.$$

On remarque que R<sup>T</sup> est une matrice triangulaire inférieure de sorte que R<sup>T</sup>R est la décomposition de Cholesky de X<sup>T</sup>X!

#### Variance de $\hat{eta}$

- $\rightarrow$  On sait que  $\hat{\mathbf{V}}[\hat{\beta}] = s^2(X^{\mathsf{T}}X)^{-1}$ .
- → Toutefois, on peut faire mieux que d'inverser XTX!
- $\rightsquigarrow$  Si X = QR, on a que

$$\hat{\mathbf{V}}[\hat{\beta}] = \mathbf{S}^2 (R^{\mathsf{T}} R)^{-1}.$$

- On remarque que R<sup>T</sup> est une matrice triangulaire inférieure de sorte que R<sup>T</sup>R est la décomposition de Cholesky de X<sup>T</sup>X!
- Il existe des algorithmes efficaces (analogue au backsolving) pour l'inversion d'une matrice dont on possède la décomposition de Cholesky.

$$\mathbf{M} = \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$$

→ Soit

$$\mathbf{M} = \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$$

 $\sim$  On peut montrer que le  $n^{\rm e}$  nombre de Fibonacci,  $n=0,1,\ldots$ , est l'entrée supérieure gauche de  $M^n$ .

→ Soit

$$\mathbf{M} = \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$$

- $\sim$  On peut montrer que le  $n^e$  nombre de Fibonacci,  $n=0,1,\ldots$ , est l'entrée supérieure gauche de  $M^n$ .
- → Il n'est pas nécessaire de calculer explicitement les puissances de M.

 $\leadsto$  Les valeurs propres de M sont  $\varphi$  et  $-\varphi^{-1}$  où  $\varphi=\frac{1+\sqrt{5}}{2}$  est le nombre d'or.

- Les valeurs propres de M sont  $\varphi$  et  $-\varphi^{-1}$  où  $\varphi = \frac{1+\sqrt{5}}{2}$  est le nombre d'or.
- → De plus, des vecteurs propres de M sont

$$u_1 = \begin{pmatrix} \varphi \\ 1 \end{pmatrix}, \quad u_2 = \begin{pmatrix} -\varphi^{-1} \\ 1 \end{pmatrix}.$$

- Les valeurs propres de M sont  $\varphi$  et  $-\varphi^{-1}$  où  $\varphi = \frac{1+\sqrt{5}}{2}$  est le nombre d'or.
- → De plus, des vecteurs propres de M sont

$$u_1 = \begin{pmatrix} \varphi \\ 1 \end{pmatrix}, \quad u_2 = \begin{pmatrix} -\varphi^{-1} \\ 1 \end{pmatrix}.$$

→ On obtient la décomposition spectrale suivante :

$$M = UDU^{-1} = \frac{1}{\sqrt{5}} \begin{pmatrix} \varphi & -\varphi^{-1} \\ 1 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \varphi & 0 \\ 0 & -\varphi^{-1} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & \varphi^{-1} \\ -1 & \varphi \end{pmatrix}.$$

 $\rightsquigarrow$  La puissance n de M peut alors se calculer efficacement :

$$M^n = UD^nU^{-1}$$

 $\rightarrow$  La puissance *n* de *M* peut alors se calculer efficacement :

$$M^n = UD^nU^{-1}$$

→ En fait, comme on n'a besoin que de l'entrée supérieure
gauche de M, on a que le ne nombre de Fibonacci est

$$\frac{1}{\sqrt{5}} \left( \varphi^{n+1} \quad (-\varphi)^{-(n+1)} \right) \begin{pmatrix} 1 \\ -1 \end{pmatrix} = \frac{\varphi^{n+1} - (-\varphi)^{-(n+1)}}{\sqrt{5}}$$

 $\rightarrow$  La puissance *n* de *M* peut alors se calculer efficacement :

$$M^n = UD^nU^{-1}$$

→ En fait, comme on n'a besoin que de l'entrée supérieure
gauche de M, on a que le ne nombre de Fibonacci est

$$\frac{1}{\sqrt{5}} \left( \varphi^{n+1} \quad (-\varphi)^{-(n+1)} \right) \begin{pmatrix} 1 \\ -1 \end{pmatrix} = \frac{\varphi^{n+1} - (-\varphi)^{-(n+1)}}{\sqrt{5}}$$

On peut donc calculer les nombres de Fibonacci directement : pas besoin d'algorithme dynamiques, si sophistiqués soient-ils!

#### Références

- [1] Add polynomials. Engilsh. Mai 2009. URL: https://wiki.haskell.org/Add\_polynomials.
- [2] Bell Labs. en. Page Version ID: 908476575. Juil. 2019. URL: https://en.wikipedia.org/w/index.php? title=Bell\_Labs&oldid=908476575.
- [3] John M CHAMBERS. "A computer system for fitting models to data". In: Journal of the Royal Statistical Society:

  Series C (Applied Statistics) 18.3 (1969), p. 249-263.
- [4] John M CHAMBERS. Programming with data: A guide to the S language. Springer Science & Business Media, 1998.

- [5] Kurt HORNIK. R FAQ What are the differences between R and S? English. Oct. 2018. URL: https://cran.r-project.org/doc/FAQ/R-FAQ.html#What-are-the-differences-between-R-and-S\_003f.
- [6] Low-level programming language Wikipedia. URL: https://en.wikipedia.org/wiki/Low-level\_programming\_language#Machine\_code.
- [7] Stephen M. STIGLER. "The Epic Story of Maximum Likelihood". EN. In: Statistical Science 22.4 (nov. 2007), p. 598-620. ISSN: 0883-4237, 2168-8745. DOI: 10.1214/07-STS249. URL: https://projecteuclid.org/euclid.ss/1207580174.

[8] The Top Bell Labs Innovations - Part I: The Game-Changers. en-US. URL: http://blog.tmcnet.com/next-generationcommunications/,%20http: //blog.tmcnet.com/next-generationcommunications/2011/08/the-top-bell-labsinnovations---part-i-the-gamechangers.html.

- [9] Luke TIERNEY. XLISP-STAT A Statistical Environment Based on the XLISP Language (Version 2.0). English. Technical Report 528. Minnesota, United States of America: University of Minnesota, School of Statistics, juil. 1989. URL:
  - https://homepage.divms.uiowa.edu/~luke/xls/tutorial/techreport/techreport.html.
- [10] Konrad Zuse. "Über den Allgemeinen Plankalkül als Mittel zur Formulierung schematisch-kombinativer Aufgaben". de. In: Archiv der Mathematik 1.6 (nov. 1948), p. 441-449. ISSN: 1420-8938. DOI: 10.1007/BF02038459. URL: https://doi.org/10.1007/BF02038459.