Jérémie Cabessa Laboratoire DAVID, UVSQ

# Modèles linéaires

- Les modèles linéaires sont les plus simples, mais également les plus rapides et parmi les plus utiles.

# Modèles linéaires

- Les modèles linéaires sont les plus simples, mais également les plus rapides et parmi les plus utiles.
- Une approche linéaire devrait toujours être envisagée avant de passer à des modèles plus complexes.

Introduction

0

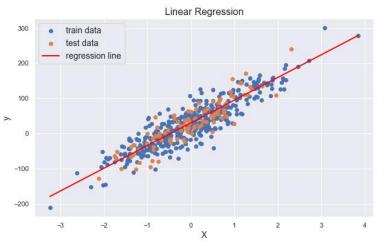


Figure 2 taken from [James et al., 2013]

Introduction

0

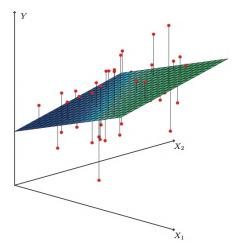


Figure 2 taken from [James et al., 2013]

- Soient  $X_1, \ldots, X_p$  des variables explicatives et Y une variable réponse.

$$Y = \beta_0 + \beta_1 X_1 + \dots + \beta_p X_p + \epsilon$$
$$= \beta_0 + \sum_{i=1}^p \beta_i X_i + \epsilon$$
(1)

Introduction

- Soient  $X_1, \ldots, X_p$  des variables explicatives et Y une variable réponse.
- ▶ **Hypothèse forte**: on suppose que la "vraie" relation entre  $X_1, \ldots, X_p$  et Y est de la forme linéaire suivante:

$$Y = \beta_0 + \beta_1 X_1 + \dots + \beta_p X_p + \epsilon$$
$$= \beta_0 + \sum_{i=1}^p \beta_i X_i + \epsilon$$
(1)

où  $\epsilon$  est un bruit tel que  $\mathbb{E}(\epsilon)=0$ .

▶ Interprétation: chaque  $\beta_i$   $(i=1,\ldots,p)$  représente l'effet moyen sur Y de l'accroissement d'une unité de  $X_i$ , si tous les autres  $X_i$  restent fixes.

Introduction

- Soient  $X_1, \ldots, X_p$  des variables explicatives et Y une variable réponse.
- ▶ **Hypothèse forte**: on suppose que la "vraie" relation entre  $X_1, \ldots, X_p$  et Y est de la forme linéaire suivante:

$$Y = \beta_0 + \beta_1 X_1 + \dots + \beta_p X_p + \epsilon$$
$$= \beta_0 + \sum_{i=1}^p \beta_i X_i + \epsilon$$
(1)

où  $\epsilon$  est un bruit tel que  $\mathbb{E}(\epsilon) = 0$ .

▶ Interprétation: chaque  $\beta_i$  (i = 1,...,p) représente l'effet moyen sur Y de l'accroissement d'une unité de  $X_i$ , si tous les autres  $X_j$  restent fixes.

- Les "vrais" paramètres  $\beta_0, \ldots, \beta_p$  sont inconnus. On aimerait donc obtenir des estimateurs  $\hat{\beta}_0, \ldots, \hat{\beta}_p$  des ces paramètres.
- ▶ Une fois les estimateurs obtenus, la **prédiction** associée à toute observation  $\boldsymbol{x} = (x_1, \dots, x_p)$  est donnée par

$$\hat{y} = \hat{\beta}_0 + \hat{\beta}_1 x_1 + \dots + \hat{\beta}_p x_p = \boldsymbol{x}^T \hat{\boldsymbol{\beta}}$$
 (2)

- où  $\hat{\beta}=(\hat{\beta}_0,\ldots,\hat{\beta}_p)$  et  $x=(1,x_1,\ldots,x_p)$  (on a rajouté la composante 1).
- Pour obtenir les estimateurs  $\hat{\beta} = (\hat{\beta}_0, \dots, \hat{\beta}_p)$  des paramètres on dispose d'observations (ou de data).

Introduction

- lacksquare Les "vrais" paramètres  $eta_0,\ldots,eta_p$  sont inconnus. On aimerait donc obtenir des estimateurs  $\hat{\beta}_0, \dots, \hat{\beta}_n$  des ces paramètres.
- Une fois les estimateurs obtenus, la prédiction associée à toute observation  $\boldsymbol{x}=(x_1,\ldots,x_p)$  est donnée par

$$\hat{y} = \hat{\beta}_0 + \hat{\beta}_1 x_1 + \dots + \hat{\beta}_p x_p = \boldsymbol{x}^T \hat{\boldsymbol{\beta}}$$
 (2)

où  $\hat{\beta} = (\hat{\beta}_0, \dots, \hat{\beta}_p)$  et  $x = (1, x_1, \dots, x_p)$  (on a rajouté la composante 1).

Introduction

- Les "vrais" paramètres  $\beta_0, \ldots, \beta_p$  sont inconnus. On aimerait donc obtenir des estimateurs  $\hat{\beta}_0, \ldots, \hat{\beta}_p$  des ces paramètres.
- Une fois les estimateurs obtenus, la **prédiction** associée à toute observation  $\boldsymbol{x}=(x_1,\dots,x_p)$  est donnée par

$$\hat{y} = \hat{\beta}_0 + \hat{\beta}_1 x_1 + \dots + \hat{\beta}_p x_p = \boldsymbol{x}^T \hat{\boldsymbol{\beta}}$$
 (2)

où  $\hat{\beta}=(\hat{\beta}_0,\ldots,\hat{\beta}_p)$  et  $\boldsymbol{x}=(1,x_1,\ldots,x_p)$  (on a rajouté la composante 1).

Pour obtenir les estimateurs  $\hat{\beta} = (\hat{\beta}_0, \dots, \hat{\beta}_p)$  des paramètres, on dispose d'observations (ou de data).

INTRODUCTION

ightharpoonup Soit un training set formé de N observations:

$$S_{\text{train}} = \{(\boldsymbol{x_1}, y_1), \dots, (\boldsymbol{x_N}, y_N)\}.$$

On définit les matrice et vecteur:

$$\boldsymbol{X} = \begin{pmatrix} 1 & \boldsymbol{x_1}^T \\ \vdots & & \\ 1 & \boldsymbol{x_N}^T \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & x_{11} & \cdots & x_{1p} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 1 & x_{N1} & \cdots & x_{Np} \end{pmatrix} \quad \text{et} \quad \boldsymbol{y} = \begin{pmatrix} y_1 \\ \vdots \\ y_N \end{pmatrix}$$

INTRODUCTION

 $\blacktriangleright$  Soit un training set formé de N observations:

$$S_{\text{train}} = \{(x_1, y_1), \dots, (x_N, y_N)\}.$$

On définit les matrice et vecteur:

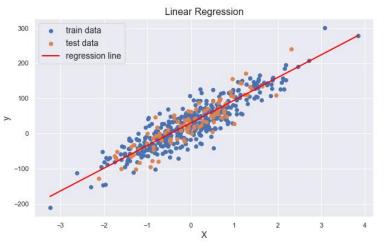
$$m{X} = egin{pmatrix} 1 & m{x_1}^T \\ \vdots & & \\ 1 & m{x_N}^T \end{pmatrix} = egin{pmatrix} 1 & x_{11} & \cdots & x_{1p} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 1 & x_{N1} & \cdots & x_{Np} \end{pmatrix} \quad ext{et} \quad m{y} = egin{pmatrix} y_1 \\ \vdots \\ y_N \end{pmatrix}$$

- On choisit les estimateurs  $\hat{\beta} = (\hat{\beta}_0, \dots, \hat{\beta}_p)$  qui minimisent une fonction de coût (loss function)  $\mathcal{L}(X, y; \beta)$ .
- On minimise la somme des erreur quadratiques (residual sum of squares (RSS), i.e., distances entre prédictions et réponses:

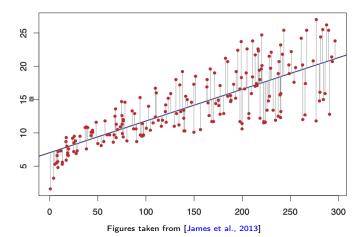
$$RSS(\boldsymbol{\beta}) = \sum_{i=1}^{N} (\hat{y}_i - y_i)^2$$
$$= \sum_{i=1}^{N} (\boldsymbol{x_i}^T \boldsymbol{\beta} - y_i)^2 = \|\boldsymbol{X}\boldsymbol{\beta} - \boldsymbol{y}\|^2$$

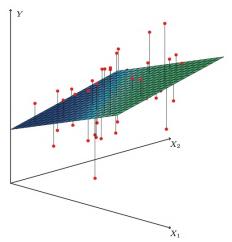
- On choisit les estimateurs  $\hat{\beta} = (\hat{\beta}_0, \dots, \hat{\beta}_p)$  qui minimisent une fonction de coût (loss function)  $\mathcal{L}(X, y; \beta)$ .
- On minimise la somme des erreur quadratiques (residual sum of squares (RSS), i.e., distances entre prédictions et réponses:

$$RSS(\boldsymbol{\beta}) = \sum_{i=1}^{N} (\hat{y}_i - y_i)^2$$
$$= \sum_{i=1}^{N} (\boldsymbol{x_i}^T \boldsymbol{\beta} - y_i)^2 = \|\boldsymbol{X}\boldsymbol{\beta} - \boldsymbol{y}\|^2$$



Figures taken from [James et al., 2013]





Figures taken from [James et al., 2013]

LASSO

# APARTÉ: QUELQUES RAPPELS

00000000000

- lacktriangle La norme au carrée d'un vecteur  $oldsymbol{v}$  vaut  $\|oldsymbol{v}\|^2 = oldsymbol{v}^Toldsymbol{v}.$

$$\frac{\partial r}{\partial \boldsymbol{\beta}} = \begin{pmatrix} \frac{\partial r}{\partial \beta_0} \\ \vdots \\ \frac{\partial r}{\partial \beta_p} \end{pmatrix}$$

$$\frac{\partial \left( \mathbf{y}^T \mathbf{y} \right)}{\partial \boldsymbol{\beta}} = \mathbf{0}$$
 (vecteur nul

- lackbox La norme au carrée d'un vecteur  $oldsymbol{v}$  vaut  $\|oldsymbol{v}\|^2 = oldsymbol{v}^Toldsymbol{v}$  .
- ▶ Si r est un scalaire et  $\beta = (\beta_0, ..., \beta_p)$  un vecteur (r dépend potentiellement de  $\beta$ ), on a le vecteur **gradient**:

$$\frac{\partial r}{\partial \boldsymbol{\beta}} = \begin{pmatrix} \frac{\partial r}{\partial \beta_0} \\ \vdots \\ \frac{\partial r}{\partial \beta_p} \end{pmatrix}$$

On a les résultats de dérivations suivants (à vérifier!):

$$\frac{\partial \left(y^T y\right)}{\partial \beta} = 0$$
 (vecteur nul)

lacktriangle La norme au carrée d'un vecteur  $oldsymbol{v}$  vaut  $\|oldsymbol{v}\|^2 = oldsymbol{v}^Toldsymbol{v}.$ 

RIDGE

ightharpoonup Si r est un scalaire et  $\beta = (\beta_0, \dots, \beta_p)$  un vecteur (r dépend potentiellement de  $\beta$ ), on a le vecteur gradient:

$$\frac{\partial r}{\partial \boldsymbol{\beta}} = \begin{pmatrix} \frac{\partial r}{\partial \beta_0} \\ \vdots \\ \frac{\partial r}{\partial \beta_p} \end{pmatrix}$$

On a les résultats de dérivations suivants (à vérifier!):

$$\begin{array}{lcl} \frac{\partial \left( \boldsymbol{y}^T \boldsymbol{y} \right)}{\partial \boldsymbol{\beta}} & = & \boldsymbol{0} \text{ (vecteur nul)} \\ \\ \frac{\partial \left( \boldsymbol{y}^T \boldsymbol{X} \boldsymbol{\beta} \right)}{\partial \boldsymbol{\beta}} & = & \left( \boldsymbol{y}^T \boldsymbol{X} \right)^T = \boldsymbol{X}^T \boldsymbol{y} \quad \text{et} \quad \frac{\partial \left( \boldsymbol{\beta}^T \boldsymbol{X}^T \boldsymbol{y} \right)}{\partial \boldsymbol{\beta}} = \boldsymbol{X}^T \boldsymbol{y} \\ \\ \frac{\partial^T \boldsymbol{X}^T \boldsymbol{X} \boldsymbol{\beta}}{\partial \boldsymbol{\beta}} & = & 2 \boldsymbol{X}^T \boldsymbol{X} \boldsymbol{\beta} \end{array}$$

lacktriangle La norme au carrée d'un vecteur  $oldsymbol{v}$  vaut  $\|oldsymbol{v}\|^2 = oldsymbol{v}^Toldsymbol{v}.$ 

RIDGE

ightharpoonup Si r est un scalaire et  $\beta = (\beta_0, \dots, \beta_p)$  un vecteur (r dépend potentiellement de  $\beta$ ), on a le vecteur gradient:

$$\frac{\partial r}{\partial \boldsymbol{\beta}} = \begin{pmatrix} \frac{\partial r}{\partial \beta_0} \\ \vdots \\ \frac{\partial r}{\partial \beta_p} \end{pmatrix}$$

On a les résultats de dérivations suivants (à vérifier!):

$$\begin{array}{lcl} \frac{\partial \left( \boldsymbol{y}^T \boldsymbol{y} \right)}{\partial \boldsymbol{\beta}} & = & \mathbf{0} \ \, \text{(vecteur nul)} \\ \\ \frac{\partial \left( \boldsymbol{y}^T \boldsymbol{X} \boldsymbol{\beta} \right)}{\partial \boldsymbol{\beta}} & = & \left( \boldsymbol{y}^T \boldsymbol{X} \right)^T = \boldsymbol{X}^T \boldsymbol{y} \quad \text{et} \quad \frac{\partial \left( \boldsymbol{\beta}^T \boldsymbol{X}^T \boldsymbol{y} \right)}{\partial \boldsymbol{\beta}} = \boldsymbol{X}^T \boldsymbol{y} \\ \\ \frac{\partial^T \boldsymbol{X}^T \boldsymbol{X} \boldsymbol{\beta}}{\partial \boldsymbol{\beta}} & = & 2 \boldsymbol{X}^T \boldsymbol{X} \boldsymbol{\beta} \end{array}$$

- lacktriangle La norme au carrée d'un vecteur  $oldsymbol{v}$  vaut  $\|oldsymbol{v}\|^2 = oldsymbol{v}^Toldsymbol{v}.$
- ightharpoonup Si r est un scalaire et  $\beta = (\beta_0, \dots, \beta_p)$  un vecteur (r dépend potentiellement de  $\beta$ ), on a le vecteur gradient:

$$\frac{\partial r}{\partial \boldsymbol{\beta}} = \begin{pmatrix} \frac{\partial r}{\partial \beta_0} \\ \vdots \\ \frac{\partial r}{\partial \beta_p} \end{pmatrix}$$

On a les résultats de dérivations suivants (à vérifier!):

$$\begin{array}{lll} \frac{\partial \left( \boldsymbol{y}^T \boldsymbol{y} \right)}{\partial \boldsymbol{\beta}} & = & \boldsymbol{0} \; \; (\text{vecteur nul}) \\ \\ \frac{\partial \left( \boldsymbol{y}^T \boldsymbol{X} \boldsymbol{\beta} \right)}{\partial \boldsymbol{\beta}} & = & \left( \boldsymbol{y}^T \boldsymbol{X} \right)^T = \boldsymbol{X}^T \boldsymbol{y} \quad \text{et} \quad \frac{\partial \left( \boldsymbol{\beta}^T \boldsymbol{X}^T \boldsymbol{y} \right)}{\partial \boldsymbol{\beta}} = \boldsymbol{X}^T \boldsymbol{y} \\ \\ \frac{\beta^T \boldsymbol{X}^T \boldsymbol{X} \boldsymbol{\beta}}{\partial \boldsymbol{\beta}} & = & 2 \boldsymbol{X}^T \boldsymbol{X} \boldsymbol{\beta} \end{array}$$

La norme au carrée d'un vecteur  $oldsymbol{v}$  vaut  $\|oldsymbol{v}\|^2 = oldsymbol{v}^Toldsymbol{v}$  .

RIDGE

▶ Si r est un scalaire et  $\beta = (\beta_0, \dots, \beta_p)$  un vecteur (r dépend potentiellement de  $\beta$ ), on a le vecteur **gradient**:

$$\frac{\partial r}{\partial \boldsymbol{\beta}} = \begin{pmatrix} \frac{\partial r}{\partial \beta_0} \\ \vdots \\ \frac{\partial r}{\partial \beta_p} \end{pmatrix}$$

On a les résultats de dérivations suivants (à vérifier!):

$$\begin{array}{cccc} \frac{\partial \left( \boldsymbol{y}^T \boldsymbol{y} \right)}{\partial \boldsymbol{\beta}} & = & \mathbf{0} \ \, \text{(vecteur nul)} \\ \\ \frac{\partial \left( \boldsymbol{y}^T \boldsymbol{X} \boldsymbol{\beta} \right)}{\partial \boldsymbol{\beta}} & = & \left( \boldsymbol{y}^T \boldsymbol{X} \right)^T = \boldsymbol{X}^T \boldsymbol{y} \quad \text{et} \quad \frac{\partial \left( \boldsymbol{\beta}^T \boldsymbol{X}^T \boldsymbol{y} \right)}{\partial \boldsymbol{\beta}} = \boldsymbol{X}^T \boldsymbol{y} \\ \\ \frac{\partial \left( \boldsymbol{\beta}^T \boldsymbol{X}^T \boldsymbol{X} \boldsymbol{\beta} \right)}{\partial \boldsymbol{\beta}} & = & 2 \boldsymbol{X}^T \boldsymbol{X} \boldsymbol{\beta} \end{array}$$

► On a alors:

Introduction

$$\hat{\boldsymbol{\beta}} = \operatorname*{arg\,min}_{oldsymbol{eta}} \operatorname{RSS}(oldsymbol{eta}) = \operatorname*{arg\,min}_{oldsymbol{eta}} \|oldsymbol{X}oldsymbol{eta} - oldsymbol{y}\|^2$$

On a alors:

$$\hat{oldsymbol{eta}} = \mathop{rg\min}_{oldsymbol{eta}} \mathop{\mathrm{RSS}}_{oldsymbol{eta}}(oldsymbol{eta}) = \mathop{rg\min}_{oldsymbol{eta}} \left\| oldsymbol{X} oldsymbol{eta} - oldsymbol{y} 
ight\|^2$$

$$\frac{\partial \text{RSS}(\boldsymbol{\beta})}{\partial \boldsymbol{\beta}} = \frac{\partial \left( \|\boldsymbol{X}\boldsymbol{\beta} - \boldsymbol{y}\|^2 \right)}{\partial \boldsymbol{\beta}} = \frac{\partial \left( (\boldsymbol{X}\boldsymbol{\beta} - \boldsymbol{y})^T (\boldsymbol{X}\boldsymbol{\beta} - \boldsymbol{y}) \right)}{\partial \boldsymbol{\beta}}$$

$$= \frac{\partial \left( \boldsymbol{\beta}^T \boldsymbol{X}^T \boldsymbol{X} \boldsymbol{\beta} - \boldsymbol{\beta}^T \boldsymbol{X}^T \boldsymbol{y} - \boldsymbol{y}^T \boldsymbol{X} \boldsymbol{\beta} + \boldsymbol{y}^T \boldsymbol{y} \right)}{\partial \boldsymbol{\beta}}$$

$$= 2\boldsymbol{X}^T \boldsymbol{X} \boldsymbol{\beta} - 2\boldsymbol{X}^T \boldsymbol{y}$$

$$\frac{\partial \text{RSS}(\boldsymbol{\beta})}{\partial \boldsymbol{\beta}} = 0 \quad \text{ssi} \quad \boldsymbol{X}^T \boldsymbol{X} \boldsymbol{\beta} = \boldsymbol{X}^T \boldsymbol{y}$$

$$\text{ssi} \quad \hat{\boldsymbol{\beta}} = (\boldsymbol{X}^T \boldsymbol{X})^{-1} \boldsymbol{X}^T \boldsymbol{y}$$

Elastic-Net

#### On a alors:

Introduction

$$\hat{\boldsymbol{\beta}} = \operatorname*{arg\,min}_{\boldsymbol{\beta}} \ \mathrm{RSS}(\boldsymbol{\beta}) = \operatorname*{arg\,min}_{\boldsymbol{\beta}} \| \boldsymbol{X} \boldsymbol{\beta} - \boldsymbol{y} \|^2$$

$$\frac{\partial \text{RSS}(\boldsymbol{\beta})}{\partial \boldsymbol{\beta}} = \frac{\partial \left( \|\boldsymbol{X}\boldsymbol{\beta} - \boldsymbol{y}\|^2 \right)}{\partial \boldsymbol{\beta}} = \frac{\partial \left( (\boldsymbol{X}\boldsymbol{\beta} - \boldsymbol{y})^T (\boldsymbol{X}\boldsymbol{\beta} - \boldsymbol{y}) \right)}{\partial \boldsymbol{\beta}}$$

$$= \frac{\partial \left( \boldsymbol{\beta}^T \boldsymbol{X}^T \boldsymbol{X} \boldsymbol{\beta} - \boldsymbol{\beta}^T \boldsymbol{X}^T \boldsymbol{y} - \boldsymbol{y}^T \boldsymbol{X} \boldsymbol{\beta} + \boldsymbol{y}^T \boldsymbol{y} \right)}{\partial \boldsymbol{\beta}}$$

$$= 2\boldsymbol{X}^T \boldsymbol{X} \boldsymbol{\beta} - 2\boldsymbol{X}^T \boldsymbol{y}$$

$$\frac{\partial \text{RSS}(\boldsymbol{\beta})}{\partial \boldsymbol{\beta}} = 0 \quad \text{ssi} \quad \boldsymbol{X}^T \boldsymbol{X} \boldsymbol{\beta} = \boldsymbol{X}^T \boldsymbol{y}$$

$$\text{ssi} \quad \hat{\boldsymbol{\beta}} = (\boldsymbol{X}^T \boldsymbol{X})^{-1} \boldsymbol{X}^T \boldsymbol{y}$$

On a alors:

Introduction

$$\hat{\boldsymbol{\beta}} = \operatorname*{arg\,min}_{oldsymbol{eta}} \operatorname{RSS}(oldsymbol{eta}) = \operatorname*{arg\,min}_{oldsymbol{eta}} \|oldsymbol{X}oldsymbol{eta} - oldsymbol{y}\|^2$$

$$\frac{\partial \text{RSS}(\boldsymbol{\beta})}{\partial \boldsymbol{\beta}} = \frac{\partial \left( \|\boldsymbol{X}\boldsymbol{\beta} - \boldsymbol{y}\|^2 \right)}{\partial \boldsymbol{\beta}} = \frac{\partial \left( (\boldsymbol{X}\boldsymbol{\beta} - \boldsymbol{y})^T (\boldsymbol{X}\boldsymbol{\beta} - \boldsymbol{y}) \right)}{\partial \boldsymbol{\beta}}$$

$$= \frac{\partial \left( \boldsymbol{\beta}^T \boldsymbol{X}^T \boldsymbol{X} \boldsymbol{\beta} - \boldsymbol{\beta}^T \boldsymbol{X}^T \boldsymbol{y} - \boldsymbol{y}^T \boldsymbol{X} \boldsymbol{\beta} + \boldsymbol{y}^T \boldsymbol{y} \right)}{\partial \boldsymbol{\beta}}$$

$$= 2\boldsymbol{X}^T \boldsymbol{X} \boldsymbol{\beta} - 2\boldsymbol{X}^T \boldsymbol{y}$$

$$\frac{\partial \text{RSS}(\boldsymbol{\beta})}{\partial \boldsymbol{\beta}} = 0 \quad \text{ssi} \quad \boldsymbol{X}^T \boldsymbol{X} \boldsymbol{\beta} = \boldsymbol{X}^T \boldsymbol{y}$$

$$\text{ssi} \quad \hat{\boldsymbol{\beta}} = (\boldsymbol{X}^T \boldsymbol{X})^{-1} \boldsymbol{X}^T \boldsymbol{y}$$

On a alors:

Introduction

$$\hat{\boldsymbol{\beta}} = \operatorname*{arg\,min}_{\boldsymbol{\beta}} \ \operatorname{RSS}(\boldsymbol{\beta}) = \operatorname*{arg\,min}_{\boldsymbol{\beta}} \| \boldsymbol{X} \boldsymbol{\beta} - \boldsymbol{y} \|^2$$

$$\frac{\partial \text{RSS}(\boldsymbol{\beta})}{\partial \boldsymbol{\beta}} = \frac{\partial \left( \|\boldsymbol{X}\boldsymbol{\beta} - \boldsymbol{y}\|^2 \right)}{\partial \boldsymbol{\beta}} = \frac{\partial \left( (\boldsymbol{X}\boldsymbol{\beta} - \boldsymbol{y})^T (\boldsymbol{X}\boldsymbol{\beta} - \boldsymbol{y}) \right)}{\partial \boldsymbol{\beta}}$$

$$= \frac{\partial \left( \boldsymbol{\beta}^T \boldsymbol{X}^T \boldsymbol{X} \boldsymbol{\beta} - \boldsymbol{\beta}^T \boldsymbol{X}^T \boldsymbol{y} - \boldsymbol{y}^T \boldsymbol{X} \boldsymbol{\beta} + \boldsymbol{y}^T \boldsymbol{y} \right)}{\partial \boldsymbol{\beta}}$$

$$= 2\boldsymbol{X}^T \boldsymbol{X} \boldsymbol{\beta} - 2\boldsymbol{X}^T \boldsymbol{y}$$

$$\frac{\partial \text{RSS}(\boldsymbol{\beta})}{\partial \boldsymbol{\beta}} = 0 \quad \text{ssi} \quad \boldsymbol{X}^T \boldsymbol{X} \boldsymbol{\beta} = \boldsymbol{X}^T \boldsymbol{y}$$

On a alors:

Introduction

$$\hat{\boldsymbol{\beta}} = \operatorname*{arg\,min}_{\boldsymbol{\beta}} \ \operatorname{RSS}(\boldsymbol{\beta}) = \operatorname*{arg\,min}_{\boldsymbol{\beta}} \| \boldsymbol{X} \boldsymbol{\beta} - \boldsymbol{y} \|^2$$

$$\frac{\partial \text{RSS}(\boldsymbol{\beta})}{\partial \boldsymbol{\beta}} = \frac{\partial \left( \|\boldsymbol{X}\boldsymbol{\beta} - \boldsymbol{y}\|^2 \right)}{\partial \boldsymbol{\beta}} = \frac{\partial \left( (\boldsymbol{X}\boldsymbol{\beta} - \boldsymbol{y})^T (\boldsymbol{X}\boldsymbol{\beta} - \boldsymbol{y}) \right)}{\partial \boldsymbol{\beta}}$$
$$= \frac{\partial \left( \boldsymbol{\beta}^T \boldsymbol{X}^T \boldsymbol{X} \boldsymbol{\beta} - \boldsymbol{\beta}^T \boldsymbol{X}^T \boldsymbol{y} - \boldsymbol{y}^T \boldsymbol{X} \boldsymbol{\beta} + \boldsymbol{y}^T \boldsymbol{y} \right)}{\partial \boldsymbol{\beta}}$$
$$= 2\boldsymbol{X}^T \boldsymbol{X} \boldsymbol{\beta} - 2\boldsymbol{X}^T \boldsymbol{y}$$

$$rac{\partial ext{RSS}(oldsymbol{eta})}{\partial oldsymbol{eta}} = 0 \hspace{0.5cm} ext{ssi} \hspace{0.5cm} oldsymbol{X}^T oldsymbol{X} oldsymbol{eta} = oldsymbol{X}^T oldsymbol{Y}$$

On a alors:

Introduction

$$\hat{\boldsymbol{\beta}} = \operatorname*{arg\,min}_{\boldsymbol{\beta}} \ \operatorname{RSS}(\boldsymbol{\beta}) = \operatorname*{arg\,min}_{\boldsymbol{\beta}} \| \boldsymbol{X} \boldsymbol{\beta} - \boldsymbol{y} \|^2$$

$$\frac{\partial \text{RSS}(\boldsymbol{\beta})}{\partial \boldsymbol{\beta}} = \frac{\partial \left( \|\boldsymbol{X}\boldsymbol{\beta} - \boldsymbol{y}\|^2 \right)}{\partial \boldsymbol{\beta}} = \frac{\partial \left( (\boldsymbol{X}\boldsymbol{\beta} - \boldsymbol{y})^T (\boldsymbol{X}\boldsymbol{\beta} - \boldsymbol{y}) \right)}{\partial \boldsymbol{\beta}}$$

$$= \frac{\partial \left( \boldsymbol{\beta}^T \boldsymbol{X}^T \boldsymbol{X} \boldsymbol{\beta} - \boldsymbol{\beta}^T \boldsymbol{X}^T \boldsymbol{y} - \boldsymbol{y}^T \boldsymbol{X} \boldsymbol{\beta} + \boldsymbol{y}^T \boldsymbol{y} \right)}{\partial \boldsymbol{\beta}}$$

$$= 2\boldsymbol{X}^T \boldsymbol{X} \boldsymbol{\beta} - 2\boldsymbol{X}^T \boldsymbol{y}$$

$$\frac{\partial \text{RSS}(\boldsymbol{\beta})}{\partial \boldsymbol{\beta}} = 0 \quad \text{ssi} \quad \boldsymbol{X}^T \boldsymbol{X} \boldsymbol{\beta} = \boldsymbol{X}^T \boldsymbol{y}$$

On a alors:

Introduction

$$\hat{\boldsymbol{\beta}} = \operatorname*{arg\,min}_{\boldsymbol{\beta}} \ \mathrm{RSS}(\boldsymbol{\beta}) = \operatorname*{arg\,min}_{\boldsymbol{\beta}} \| \boldsymbol{X} \boldsymbol{\beta} - \boldsymbol{y} \|^2$$

$$\frac{\partial \text{RSS}(\boldsymbol{\beta})}{\partial \boldsymbol{\beta}} = \frac{\partial \left( \|\boldsymbol{X}\boldsymbol{\beta} - \boldsymbol{y}\|^2 \right)}{\partial \boldsymbol{\beta}} = \frac{\partial \left( (\boldsymbol{X}\boldsymbol{\beta} - \boldsymbol{y})^T (\boldsymbol{X}\boldsymbol{\beta} - \boldsymbol{y}) \right)}{\partial \boldsymbol{\beta}}$$
$$= \frac{\partial \left( \boldsymbol{\beta}^T \boldsymbol{X}^T \boldsymbol{X} \boldsymbol{\beta} - \boldsymbol{\beta}^T \boldsymbol{X}^T \boldsymbol{y} - \boldsymbol{y}^T \boldsymbol{X} \boldsymbol{\beta} + \boldsymbol{y}^T \boldsymbol{y} \right)}{\partial \boldsymbol{\beta}}$$
$$= 2\boldsymbol{X}^T \boldsymbol{X} \boldsymbol{\beta} - 2\boldsymbol{X}^T \boldsymbol{y}$$

$$\frac{\partial \mathrm{RSS}(\boldsymbol{\beta})}{\partial \boldsymbol{\beta}} = 0$$
 ssi  $\boldsymbol{X}^T \boldsymbol{X} \boldsymbol{\beta} = \boldsymbol{X}^T \boldsymbol{y}$  ssi  $\hat{\boldsymbol{\beta}} = (\boldsymbol{X}^T \boldsymbol{X})^{-1} \boldsymbol{X}^T \boldsymbol{y}$ 

On a alors:

Introduction

$$\hat{\boldsymbol{\beta}} = \operatorname*{arg\,min}_{\boldsymbol{\beta}} \ \mathrm{RSS}(\boldsymbol{\beta}) = \operatorname*{arg\,min}_{\boldsymbol{\beta}} \| \boldsymbol{X} \boldsymbol{\beta} - \boldsymbol{y} \|^2$$

$$\frac{\partial \text{RSS}(\boldsymbol{\beta})}{\partial \boldsymbol{\beta}} = \frac{\partial \left( \|\boldsymbol{X}\boldsymbol{\beta} - \boldsymbol{y}\|^2 \right)}{\partial \boldsymbol{\beta}} = \frac{\partial \left( (\boldsymbol{X}\boldsymbol{\beta} - \boldsymbol{y})^T (\boldsymbol{X}\boldsymbol{\beta} - \boldsymbol{y}) \right)}{\partial \boldsymbol{\beta}}$$

$$= \frac{\partial \left( \boldsymbol{\beta}^T \boldsymbol{X}^T \boldsymbol{X} \boldsymbol{\beta} - \boldsymbol{\beta}^T \boldsymbol{X}^T \boldsymbol{y} - \boldsymbol{y}^T \boldsymbol{X} \boldsymbol{\beta} + \boldsymbol{y}^T \boldsymbol{y} \right)}{\partial \boldsymbol{\beta}}$$

$$= 2\boldsymbol{X}^T \boldsymbol{X} \boldsymbol{\beta} - 2\boldsymbol{X}^T \boldsymbol{y}$$

$$\frac{\partial \text{RSS}(\boldsymbol{\beta})}{\partial \boldsymbol{\beta}} = 0 \quad \text{ssi} \quad \boldsymbol{X}^T \boldsymbol{X} \boldsymbol{\beta} = \boldsymbol{X}^T \boldsymbol{y}$$

$$\text{ssi} \quad \hat{\boldsymbol{\beta}} = (\boldsymbol{X}^T \boldsymbol{X})^{-1} \boldsymbol{X}^T \boldsymbol{y}$$

On a alors:

$$\hat{\boldsymbol{\beta}} = \operatorname*{arg\,min}_{oldsymbol{eta}} \operatorname{RSS}(oldsymbol{eta}) = \operatorname*{arg\,min}_{oldsymbol{eta}} \|oldsymbol{X}oldsymbol{eta} - oldsymbol{y}\|^2$$

$$\frac{\partial \text{RSS}(\boldsymbol{\beta})}{\partial \boldsymbol{\beta}} = \frac{\partial \left( \|\boldsymbol{X}\boldsymbol{\beta} - \boldsymbol{y}\|^2 \right)}{\partial \boldsymbol{\beta}} = \frac{\partial \left( (\boldsymbol{X}\boldsymbol{\beta} - \boldsymbol{y})^T (\boldsymbol{X}\boldsymbol{\beta} - \boldsymbol{y}) \right)}{\partial \boldsymbol{\beta}}$$

$$= \frac{\partial \left( \boldsymbol{\beta}^T \boldsymbol{X}^T \boldsymbol{X} \boldsymbol{\beta} - \boldsymbol{\beta}^T \boldsymbol{X}^T \boldsymbol{y} - \boldsymbol{y}^T \boldsymbol{X} \boldsymbol{\beta} + \boldsymbol{y}^T \boldsymbol{y} \right)}{\partial \boldsymbol{\beta}}$$

$$= 2\boldsymbol{X}^T \boldsymbol{X} \boldsymbol{\beta} - 2\boldsymbol{X}^T \boldsymbol{y}$$

$$\frac{\partial \text{RSS}(\boldsymbol{\beta})}{\partial \boldsymbol{\beta}} = 0 \quad \text{ssi} \quad \boldsymbol{X}^T \boldsymbol{X} \boldsymbol{\beta} = \boldsymbol{X}^T \boldsymbol{y}$$

$$\text{ssi} \quad \hat{\boldsymbol{\beta}} = (\boldsymbol{X}^T \boldsymbol{X})^{-1} \boldsymbol{X}^T \boldsymbol{y}$$

INTRODUCTION

Soit un test set formé de M observations:

$$S_{\text{test}} = \{ (x_1, y_1), \dots, (x_{N'}, y_M) \}.$$

$$\hat{y}_i = \boldsymbol{x_i}^T \hat{\boldsymbol{\beta}} \text{ pour } i = 1, \dots, M, \text{ i.e.}$$

Introduction

▶ Soit un **test set** formé de *M* observations:

$$S_{\text{test}} = \left\{ \left( \boldsymbol{x_1}, y_1 \right), \dots, \left( \boldsymbol{x_{N'}}, y_M \right) \right\}.$$

▶ Une fois les estimateurs  $\hat{\boldsymbol{\beta}} = (\boldsymbol{X}^T\boldsymbol{X})^{-1}\boldsymbol{X}^T\boldsymbol{y}$  obtenus, les prédictions  $\hat{\boldsymbol{y}}$  associés aux data  $\boldsymbol{X}$  sont données par:

$$\hat{y}_i = x_i^T \hat{\beta} \text{ pour } i = 1, ..., M, \text{ i.e.,}$$
 $\hat{y} = X \hat{\beta} \text{ (forme vectorielle)}$ 

# RÉGRESSION LINÉAIRE

Introduction

▶ Soit un **test set** formé de *M* observations:

$$S_{\text{test}} = \left\{ \left( \boldsymbol{x_1}, y_1 \right), \dots, \left( \boldsymbol{x_{N'}}, y_M \right) \right\}.$$

▶ Une fois les estimateurs  $\hat{\boldsymbol{\beta}} = (\boldsymbol{X}^T\boldsymbol{X})^{-1}\boldsymbol{X}^T\boldsymbol{y}$  obtenus, les prédictions  $\hat{\boldsymbol{y}}$  associés aux data  $\boldsymbol{X}$  sont données par:

$$\hat{y}_i = x_i^T \hat{\beta} \text{ pour } i = 1, ..., M, i.e.,$$
  
 $\hat{y} = X \hat{\beta} \text{ (forme vectorielle)}$ 

# RÉGRESSION LINÉAIRE

Introduction

Soit un test set formé de M observations:

$$S_{\text{test}} = \{(x_1, y_1), \dots, (x_{N'}, y_M)\}.$$

• Une fois les estimateurs  $\hat{\boldsymbol{\beta}} = (\boldsymbol{X}^T \boldsymbol{X})^{-1} \boldsymbol{X}^T \boldsymbol{y}$  obtenus, les prédictions  $\hat{y}$  associés aux data X sont données par:

$$\hat{y}_i = x_i^T \hat{\boldsymbol{\beta}} \text{ pour } i = 1, ..., M, \text{ i.e.,}$$
 $\hat{\boldsymbol{y}} = X \hat{\boldsymbol{\beta}} \text{ (forme vectorielle)}$ 

- ► Il existe bien d'autres méthodes non-linéaires qui généralisent la régression linéaire simple.
- Par exemple, pour modéliser la relation entre un seul prédicteur X et la réponse Y, on a:
  - Polynomial regression
  - Step functions
  - Basis functions
  - Regression splines
  - > Smoothing solines
  - Local regression
- On ne présentera pas ces méthodes en détail ici...

- ► Il existe bien d'autres méthodes non-linéaires qui généralisent la régression linéaire simple.
- Par exemple, pour modéliser la relation entre un seul prédicteur X et la réponse Y, on a:
  - Polynomial regression
  - Step functions
  - Basis functions
  - Regression splines
  - Smoothing splines
  - Local regression
- ▶ On ne présentera pas ces méthodes en détail ici..

- ► Il existe bien d'autres méthodes non-linéaires qui généralisent la régression linéaire simple.
- Par exemple, pour modéliser la relation entre un seul prédicteur X et la réponse Y, on a:
  - Polynomial regression
  - Step functions
  - Basis functions
  - Regression splines
  - Smoothing splines
  - Local regression
- On ne présentera pas ces méthodes en détail ici...

- ► Il existe bien d'autres méthodes non-linéaires qui généralisent la régression linéaire simple.
- Par exemple, pour modéliser la relation entre un seul prédicteur X et la réponse Y, on a:
  - Polynomial regression
  - Step functions
  - Basis functions
  - Regression splines
  - Smoothing splines
  - Local regression
- ▶ On ne présentera pas ces méthodes en détail ici..

- ► Il existe bien d'autres méthodes non-linéaires qui généralisent la régression linéaire simple.
- Par exemple, pour modéliser la relation entre un seul prédicteur X et la réponse Y, on a:
  - Polynomial regression
  - Step functions
  - Basis functions
  - Regression splines
  - Smoothing splines
  - Local regression
- ▶ On ne présentera pas ces méthodes en détail ici..

- ► Il existe bien d'autres méthodes non-linéaires qui généralisent la régression linéaire simple.
- ▶ Par exemple, pour modéliser la relation entre un seul prédicteur X et la réponse Y, on a:
  - Polynomial regression
  - Step functions
  - Basis functions
  - Regression splines
  - Smoothing splines
  - Local regression
- ▶ On ne présentera pas ces méthodes en détail ici..

- ► Il existe bien d'autres méthodes non-linéaires qui généralisent la régression linéaire simple.
- Par exemple, pour modéliser la relation entre un seul prédicteur X et la réponse Y, on a:
  - Polynomial regression
  - Step functions
  - Basis functions
  - Regression splines
  - Smoothing splines
  - Local regression
- On ne présentera pas ces méthodes en détail ici...

- Il existe bien d'autres méthodes non-linéaires qui généralisent la régression linéaire simple.
- Par exemple, pour modéliser la relation entre un seul prédicteur X et la réponse Y, on a:
  - Polynomial regression
  - Step functions
  - Basis functions
  - Regression splines
  - Smoothing splines
  - ► Local regression
- On ne présentera pas ces méthodes en détail ici..

- ► Il existe bien d'autres méthodes non-linéaires qui généralisent la régression linéaire simple.
- Par exemple, pour modéliser la relation entre un seul prédicteur X et la réponse Y, on a:
  - Polynomial regression
  - Step functions
  - Basis functions
  - Regression splines
  - Smoothing splines
  - Local regression
- On ne présentera pas ces méthodes en détail ici...

INTRODUCTION

Rappel: on suppose que la vraie relation entre les variables explicatives et la réponse est de la forme suivante:

$$Y = \beta_0 + \beta_1 X_1 + \dots + \beta_p X_p + \epsilon$$

INTRODUCTION

► Rappel: on suppose que la vraie relation entre les variables explicatives et la réponse est de la forme suivante:

$$Y = \beta_0 + \beta_1 X_1 + \dots + \beta_p X_p + \epsilon$$

- ▶ Il se peut que certaines des variables  $X_i$  soient peu ou pas du tout associées avec la réponse  $Y_i$ .
- Inclure ces variables accroît la complexité du modèle, affecte sa performance, et réduit son interprétabilité.
- Il existe alors des méthodes de réduction et/ou sélection des variables les plus significatives: shrinkage et feature selection.

Introduction

Rappel: on suppose que la vraie relation entre les variables explicatives et la réponse est de la forme suivante:

$$Y = \beta_0 + \beta_1 X_1 + \dots + \beta_p X_p + \epsilon$$

- $\triangleright$  Il se peut que certaines des variables  $X_i$  soient peu ou pas du tout associées avec la réponse  $Y_i$ .
- Inclure ces variables accroît la complexité du modèle, affecte sa performance, et réduit son interprétabilité.

Introduction

► Rappel: on suppose que la vraie relation entre les variables explicatives et la réponse est de la forme suivante:

$$Y = \beta_0 + \beta_1 X_1 + \dots + \beta_p X_p + \epsilon$$

- ▶ Il se peut que certaines des variables  $X_i$  soient peu ou pas du tout associées avec la réponse  $Y_i$ .
- Inclure ces variables accroît la complexité du modèle, affecte sa performance, et réduit son interprétabilité.
- ► Il existe alors des méthodes de réduction et/ou sélection des variables les plus significatives: shrinkage et feature selection.

Introduction

- Subset selection methods:

Introduction

- Subset selection methods:
  - best subset selection
  - forward stepwise selection
  - backward stepwise selection
- Regularization methods
  - Ridge regression (shrinkage)
     LASSO (factors selection)
- On s'intéresse ici aux Ridge regression et LASSO.

Introduction

- Subset selection methods:
  - best subset selection
  - forward stepwise selection
  - backward stepwise selection
- Regularization methods
- ➤ LASSO (feature selection)
- On s'intéresse ici aux Ridge regression et LASSO.

Introduction

#### Parmi ces méthodes, on a:

- Subset selection methods:
  - best subset selection
  - forward stepwise selection
  - backward stepwise selection
- Regularization methods
  - Ridge regression (shrinkage)
- ► On s'intéresse ici aux Ridge regression et LASSO.

ELASTIC-NET

#### INTRODUCTION

# RÉGULARISATION

- Subset selection methods:
  - best subset selection
  - forward stepwise selection
  - backward stepwise selection
- Regularization methods:

INTRODUCTION

- Subset selection methods:
  - best subset selection
  - forward stepwise selection
  - backward stepwise selection
- Regularization methods:
  - Ridge regression (shrinkage)
  - ► LASSO (feature selection)
- On s'intéresse ici aux Ridge regression et LASSO.

INTRODUCTION

- Subset selection methods:
  - best subset selection
  - forward stepwise selection
  - backward stepwise selection
- Regularization methods:
  - Ridge regression (shrinkage)
  - ► LASSO (feature selection)
- On s'intéresse ici aux Ridge regression et LASSO.

ELASTIC-NET

- Subset selection methods:
  - best subset selection
  - forward stepwise selection
  - backward stepwise selection
- Regularization methods:
  - Ridge regression (shrinkage)
  - LASSO (feature selection)
- On s'intéresse ici aux Ridge regression et LASSO.

INTRODUCTION

On suppose que la vraie relation entre les variables explicatives et la réponse est de la forme suivante:

$$Y = \beta_0 + \beta_1 X_1 + \dots + \beta_p X_p + \epsilon$$

Introduction

On suppose que la vraie relation entre les variables explicatives et la réponse est de la forme suivante:

$$Y = \beta_0 + \beta_1 X_1 + \dots + \beta_p X_p + \epsilon$$

- Le but est d'obtenir des estimateurs  $\hat{\beta}=(\hat{\beta}_0,\ldots,\hat{\beta}_p)$  des paramètres  $\beta=(\beta_0,\ldots,\beta_p)$ .
- ▶ La régression Ridge permet de forcer les estimateurs à ne pas exploser, ce qui a comme effet positif de réduire la variance du modèle.
- ▶ En gros, les variables  $X_i$  les moins significatives ont leur estimateurs associés  $\hat{\beta}_i$  qui convergent vers 0 (shrinkage method).

Introduction

On suppose que la vraie relation entre les variables explicatives et la réponse est de la forme suivante:

$$Y = \beta_0 + \beta_1 X_1 + \dots + \beta_p X_p + \epsilon$$

- Le but est d'obtenir des estimateurs  $\hat{\beta} = (\hat{\beta}_0, \dots, \hat{\beta}_p)$  des paramètres  $\beta = (\beta_0, \dots, \beta_p)$ .
- ▶ La régression Ridge permet de forcer les estimateurs à ne pas exploser, ce qui a comme effet positif de réduire la variance du modèle.
- En gros, les variables  $X_i$  les moins significatives ont leur estimateurs associés  $\hat{\beta}_i$  qui convergent vers 0 (shrinkage method).

Introduction

 On suppose que la vraie relation entre les variables explicatives et la réponse est de la forme suivante:

RIDGE

$$Y = \beta_0 + \beta_1 X_1 + \dots + \beta_p X_p + \epsilon$$

- ▶ Le but est d'obtenir des estimateurs  $\hat{\beta} = (\hat{\beta}_0, \dots, \hat{\beta}_p)$  des paramètres  $\beta = (\beta_0, \dots, \beta_n)$ .
- La régression Ridge permet de forcer les estimateurs à ne pas exploser, ce qui a comme effet positif de réduire la variance du modèle.
- $\triangleright$  En gros, les variables  $X_i$  les moins significatives ont leur estimateurs associés  $\hat{\beta}_i$  qui convergent vers 0 (shrinkage method).

Introduction

**Régression Ridge:** on choisit les estimateurs  $\hat{\beta}$  qui minimisent une version *régularisée* la **residual sum of squares** (RSS)

$$RSS(\boldsymbol{\beta}) = \sum_{i=1}^{N} (\boldsymbol{x_i}^T \boldsymbol{\beta} - y_i)^2 + \lambda \sum_{i=1}^{p} \beta_i^2$$
$$= \|\boldsymbol{X}\boldsymbol{\beta} - y\|_2^2 + \lambda \|\boldsymbol{\beta}\|_2^2$$

ightharpoonup où  $\lambda$  est le paramètre de régularisation

 $\triangleright$  Le terme  $\lambda \|\beta\|_{2}^{2}$  est une pénalité la (la penalty).

Introduction

**Régression Ridge:** on choisit les estimateurs  $\hat{\beta}$  qui minimisent une version *régularisée* la **residual sum of squares** (RSS)

$$RSS(\boldsymbol{\beta}) = \sum_{i=1}^{N} (\boldsymbol{x_i}^T \boldsymbol{\beta} - y_i)^2 + \lambda \sum_{i=1}^{p} \beta_i^2$$
$$= \|\boldsymbol{X}\boldsymbol{\beta} - y\|_2^2 + \lambda \|\boldsymbol{\beta}\|_2^2$$

- ightharpoonup où  $\lambda$  est le paramètre de régularisation
- ▶ Le terme  $\lambda \|\beta\|_2^2$  est une *pénalité*  $l_2$  ( $l_2$  penalty)

Introduction

**Régression Ridge:** on choisit les estimateurs  $\hat{\beta}$  qui minimisent une version *régularisée* la **residual sum of squares** (RSS)

$$RSS(\boldsymbol{\beta}) = \sum_{i=1}^{N} (\boldsymbol{x_i}^T \boldsymbol{\beta} - y_i)^2 + \lambda \sum_{i=1}^{p} \beta_i^2$$
$$= \|\boldsymbol{X}\boldsymbol{\beta} - \boldsymbol{y}\|_2^2 + \lambda \|\boldsymbol{\beta}\|_2^2$$

- ightharpoonup où  $\lambda$  est le paramètre de régularisation.
- ▶ Le terme  $\lambda \|\beta\|_2^2$  est une *pénalité*  $l_2$  ( $l_2$  penalty).

Introduction

**Régression Ridge:** on choisit les estimateurs  $\hat{\beta}$  qui minimisent une version *régularisée* la **residual sum of squares (RSS)** 

$$RSS(\boldsymbol{\beta}) = \sum_{i=1}^{N} (\boldsymbol{x_i}^T \boldsymbol{\beta} - y_i)^2 + \lambda \sum_{i=1}^{p} \beta_i^2$$
$$= \|\boldsymbol{X}\boldsymbol{\beta} - \boldsymbol{y}\|_2^2 + \lambda \|\boldsymbol{\beta}\|_2^2$$

- ightharpoonup où  $\lambda$  est le paramètre de régularisation.
- Le terme  $\lambda \|\beta\|_2^2$  est une *pénalité*  $l_2$  ( $l_2$  penalty).

On a:

Introduction

$$\hat{\boldsymbol{\beta}} = \operatorname*{arg\,min}_{\boldsymbol{\beta}} \; \mathrm{RSS}(\boldsymbol{\beta}) = \operatorname*{arg\,min}_{\boldsymbol{\beta}} \left( \|\boldsymbol{X}\boldsymbol{\beta} - \boldsymbol{y}\|_2^2 + \lambda \, \|\boldsymbol{\beta}\|_2^2 \right)$$

On a:

Introduction

$$\hat{\boldsymbol{\beta}} = \operatorname*{arg\,min}_{\boldsymbol{\beta}} \, \mathrm{RSS}(\boldsymbol{\beta}) = \operatorname*{arg\,min}_{\boldsymbol{\beta}} \left( \|\boldsymbol{X}\boldsymbol{\beta} - \boldsymbol{y}\|_{2}^{2} + \lambda \, \|\boldsymbol{\beta}\|_{2}^{2} \right)$$

$$\frac{\partial \text{RSS}(\boldsymbol{\beta})}{\partial \boldsymbol{\beta}} = \frac{\partial \left( \|\boldsymbol{X}\boldsymbol{\beta} - \boldsymbol{y}\|^2 + \lambda \|\boldsymbol{\beta}\|^2 \right)}{\partial \boldsymbol{\beta}}$$
$$= 2\boldsymbol{X}^T \boldsymbol{X}\boldsymbol{\beta} - 2\boldsymbol{X}^T \boldsymbol{y} + 2\lambda \boldsymbol{\beta}$$

$$rac{\partial \mathrm{RSS}(oldsymbol{eta})}{\partial oldsymbol{eta}} = 0$$
 ssi  $\left( oldsymbol{X}^T oldsymbol{X} + \lambda oldsymbol{I} 
ight) oldsymbol{eta} = oldsymbol{X}^T oldsymbol{X} + \lambda oldsymbol{I} 
ight)^{-1} oldsymbol{X}^T oldsymbol{X}$ 

On a:

Introduction

$$\hat{\boldsymbol{\beta}} = \operatorname*{arg\,min}_{\boldsymbol{\beta}} \, \mathrm{RSS}(\boldsymbol{\beta}) = \operatorname*{arg\,min}_{\boldsymbol{\beta}} \left( \|\boldsymbol{X}\boldsymbol{\beta} - \boldsymbol{y}\|_{2}^{2} + \lambda \, \|\boldsymbol{\beta}\|_{2}^{2} \right)$$

$$\frac{\partial \text{RSS}(\beta)}{\partial \beta} = \frac{\partial (\|X\beta - y\|^2 + \lambda \|\beta\|^2)}{\partial \beta}$$
$$= 2X^T X \beta - 2X^T y + 2\lambda \beta$$

$$\frac{\partial \text{RSS}(\boldsymbol{\beta})}{\partial \boldsymbol{\beta}} = 0 \quad \text{ssi} \quad (\boldsymbol{X}^T \boldsymbol{X} + \lambda \boldsymbol{I}) \boldsymbol{\beta} = \boldsymbol{X}^T \boldsymbol{y}$$

$$\text{ssi} \quad \hat{\boldsymbol{\beta}} = (\boldsymbol{X}^T \boldsymbol{X} + \lambda \boldsymbol{I})^{-1} \boldsymbol{X}^T$$

On a:

Introduction

$$\hat{\boldsymbol{\beta}} = \operatorname*{arg\,min}_{\boldsymbol{\beta}} \, \mathrm{RSS}(\boldsymbol{\beta}) = \operatorname*{arg\,min}_{\boldsymbol{\beta}} \left( \|\boldsymbol{X}\boldsymbol{\beta} - \boldsymbol{y}\|_{2}^{2} + \lambda \, \|\boldsymbol{\beta}\|_{2}^{2} \right)$$

$$\frac{\partial \text{RSS}(\boldsymbol{\beta})}{\partial \boldsymbol{\beta}} = \frac{\partial \left( \|\boldsymbol{X}\boldsymbol{\beta} - \boldsymbol{y}\|^2 + \lambda \|\boldsymbol{\beta}\|^2 \right)}{\partial \boldsymbol{\beta}}$$
$$= 2\boldsymbol{X}^T \boldsymbol{X}\boldsymbol{\beta} - 2\boldsymbol{X}^T \boldsymbol{y} + 2\lambda \boldsymbol{\beta}$$

$$\frac{\partial \text{RSS}(\boldsymbol{\beta})}{\partial \boldsymbol{\beta}} = 0 \quad \text{ssi} \quad (\boldsymbol{X}^T \boldsymbol{X} + \lambda \boldsymbol{I}) \boldsymbol{\beta} = \boldsymbol{X}^T \boldsymbol{y}$$

$$\text{ssi} \quad \hat{\boldsymbol{\beta}} = (\boldsymbol{X}^T \boldsymbol{X} + \lambda \boldsymbol{I})^{-1} \boldsymbol{X}^T$$

On a:

Introduction

$$\hat{\boldsymbol{\beta}} = \operatorname*{arg\,min}_{\boldsymbol{\beta}} \; \mathrm{RSS}(\boldsymbol{\beta}) = \operatorname*{arg\,min}_{\boldsymbol{\beta}} \left( \|\boldsymbol{X}\boldsymbol{\beta} - \boldsymbol{y}\|_2^2 + \lambda \, \|\boldsymbol{\beta}\|_2^2 \right)$$

$$\frac{\partial \text{RSS}(\boldsymbol{\beta})}{\partial \boldsymbol{\beta}} = \frac{\partial \left( \|\boldsymbol{X}\boldsymbol{\beta} - \boldsymbol{y}\|^2 + \lambda \|\boldsymbol{\beta}\|^2 \right)}{\partial \boldsymbol{\beta}}$$
$$= 2\boldsymbol{X}^T \boldsymbol{X}\boldsymbol{\beta} - 2\boldsymbol{X}^T \boldsymbol{y} + 2\lambda \boldsymbol{\beta}$$

$$\frac{\partial \text{RSS}(\boldsymbol{\beta})}{\partial \boldsymbol{\beta}} = 0 \quad \text{ssi} \quad (\boldsymbol{X}^T \boldsymbol{X} + \lambda \boldsymbol{I}) \boldsymbol{\beta} = \boldsymbol{X}^T \boldsymbol{y}$$

$$\text{ssi} \quad \hat{\boldsymbol{\beta}} = (\boldsymbol{X}^T \boldsymbol{X} + \lambda \boldsymbol{I})^{-1} \boldsymbol{X}^T$$

On a:

Introduction

$$\hat{\boldsymbol{\beta}} = \operatorname*{arg\,min}_{\boldsymbol{\beta}} \, \mathrm{RSS}(\boldsymbol{\beta}) = \operatorname*{arg\,min}_{\boldsymbol{\beta}} \left( \|\boldsymbol{X}\boldsymbol{\beta} - \boldsymbol{y}\|_{2}^{2} + \lambda \, \|\boldsymbol{\beta}\|_{2}^{2} \right)$$

Pour trouver le minimum de  $RSS(\beta)$ , on annule la dérivée de cette fonction par rapport à  $\beta$ :

$$\frac{\partial \text{RSS}(\boldsymbol{\beta})}{\partial \boldsymbol{\beta}} = \frac{\partial \left( \|\boldsymbol{X}\boldsymbol{\beta} - \boldsymbol{y}\|^2 + \lambda \|\boldsymbol{\beta}\|^2 \right)}{\partial \boldsymbol{\beta}}$$
$$= 2\boldsymbol{X}^T \boldsymbol{X} \boldsymbol{\beta} - 2\boldsymbol{X}^T \boldsymbol{y} + 2\lambda \boldsymbol{\beta}$$

$$\frac{\partial \text{RSS}(\boldsymbol{\beta})}{\partial \boldsymbol{\beta}} = 0 \quad \text{ssi} \quad (\boldsymbol{X}^T \boldsymbol{X} + \lambda \boldsymbol{I}) \boldsymbol{\beta} = \boldsymbol{X}^T \boldsymbol{y}$$

ssi  $\hat{\boldsymbol{\beta}} = (\boldsymbol{X}^T \boldsymbol{X} + \lambda \boldsymbol{I})^{-1} \boldsymbol{X}^T \boldsymbol{y}$ 

On a:

Introduction

$$\hat{\boldsymbol{\beta}} = \operatorname*{arg\,min}_{\boldsymbol{\beta}} \, \mathrm{RSS}(\boldsymbol{\beta}) = \operatorname*{arg\,min}_{\boldsymbol{\beta}} \left( \|\boldsymbol{X}\boldsymbol{\beta} - \boldsymbol{y}\|_{2}^{2} + \lambda \, \|\boldsymbol{\beta}\|_{2}^{2} \right)$$

Pour trouver le minimum de  $RSS(\beta)$ , on annule la dérivée de cette fonction par rapport à  $\beta$ :

$$\frac{\partial \text{RSS}(\boldsymbol{\beta})}{\partial \boldsymbol{\beta}} = \frac{\partial \left( \|\boldsymbol{X}\boldsymbol{\beta} - \boldsymbol{y}\|^2 + \lambda \|\boldsymbol{\beta}\|^2 \right)}{\partial \boldsymbol{\beta}}$$
$$= 2\boldsymbol{X}^T \boldsymbol{X}\boldsymbol{\beta} - 2\boldsymbol{X}^T \boldsymbol{y} + 2\lambda \boldsymbol{\beta}$$

$$\frac{\partial \text{RSS}(\boldsymbol{\beta})}{\partial \boldsymbol{\beta}} = 0 \quad \text{ssi} \quad (\boldsymbol{X}^T \boldsymbol{X} + \lambda \boldsymbol{I}) \boldsymbol{\beta} = \boldsymbol{X}^T \boldsymbol{y}$$

$$\text{ssi} \quad \hat{\boldsymbol{\beta}} = (\boldsymbol{X}^T \boldsymbol{X} + \lambda \boldsymbol{I})^{-1} \boldsymbol{X}^T \boldsymbol{y}$$

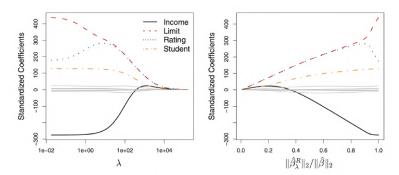
INTRODUCTION

- $\triangleright$   $\lambda$  est un hyperparamètre à optimiser: tester différentes valeurs de  $\lambda$  jusqu'à obtenir les meilleurs résultats sur le test set.

- $\triangleright$   $\lambda$  est un hyperparamètre à optimiser: tester différentes valeurs de  $\lambda$  jusqu'à obtenir les meilleurs résultats sur le test set.
- $\lambda = 0$  correspond au cas de la régression linéaire classique.

- $\triangleright$   $\lambda$  est un hyperparamètre à optimiser: tester différentes valeurs de  $\lambda$  jusqu'à obtenir les meilleurs résultats sur le test set.
- $\lambda = 0$  correspond au cas de la régression linéaire classique.
- $\blacktriangleright$  Lorsque  $\lambda \to \infty$ , la régularisation force les coefficients  $\beta_i$  à converger vers 0.

 $\triangleright$  Lorsque  $\lambda$  augmente, les coefficients diminuent.



**FIGURE 6.4.** The standardized ridge regression coefficients are displayed for the Credit data set, as a function of  $\lambda$  and  $\|\hat{\beta}_{\lambda}^{R}\|_{2}/\|\hat{\beta}\|_{2}$ .

Figures taken from [James et al., 2013]

INTRODUCTION

- La régression Ridge joue sur le bias-variance trade-off: lorsque  $\lambda$  augmente, la variance du modèle diminue, mais son bias augmente.
- Rappel: pour un modèle  $\hat{f}(x)$ , on a:

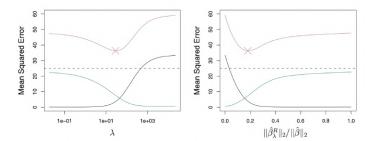
Biais 
$$[\hat{f}(x)] = \mathbb{E}[\hat{f}(x) - f(x)]$$
  

$$\operatorname{Var}[\hat{f}(x)] = \mathbb{E}[(\hat{f}(x) - \mathbb{E}[\hat{f}(x)])^{2}]$$

- La régression Ridge joue sur le bias-variance trade-off: lorsque  $\lambda$  augmente, la variance du modèle diminue, mais son bias augmente.
- Rappel: pour un modèle  $\hat{f}(x)$ , on a:

Biais 
$$[\hat{f}(\boldsymbol{x})] = \mathbb{E}[\hat{f}(\boldsymbol{x}) - f(\boldsymbol{x})]$$
  
Var  $[\hat{f}(\boldsymbol{x})] = \mathbb{E}[(\hat{f}(\boldsymbol{x}) - \mathbb{E}[\hat{f}(\boldsymbol{x})])^2]$ 

Introduction



**FIGURE 6.5.** Squared bias (black), variance (green), and test mean squared error (purple) for the ridge regression predictions on a simulated data set, as a function of  $\lambda$  and  $\|\hat{\beta}_{\lambda}^{R}\|_{2}/\|\hat{\beta}\|_{2}$ . The horizontal dashed lines indicate the minimum possible MSE. The purple crosses indicate the ridge regression models for which the MSE is smallest.

Figures taken from [James et al., 2013]

- La régression Ridge réduit l'impact des prédicteurs  $X_i$  les moins significatifs, en leur assignant des paramètres  $\beta_i$  qui sont petits (shrinkage method).
- Mais elle n'élimine pas ces prédicteurs.
- La régression LASSO permet d'éliminer complètement les prédicteurs les moins significatifs.
- Ainsi, LASSO réalise une sélection des variables les plus pertinentes (feature selection).

- La régression Ridge réduit l'impact des prédicteurs  $X_i$  les moins significatifs, en leur assignant des paramètres  $\beta_i$  qui sont petits (shrinkage method).
- Mais elle n'élimine pas ces prédicteurs.
- La régression LASSO permet d'éliminer complètement les prédicteurs les moins significatifs.
- Ainsi, LASSO réalise une sélection des variables les plus pertinentes (feature selection).

- La régression Ridge réduit l'impact des prédicteurs  $X_i$  les moins significatifs, en leur assignant des paramètres  $\beta_i$  qui sont petits (shrinkage method).
- Mais elle n'élimine pas ces prédicteurs.
- La régression LASSO permet d'éliminer complètement les prédicteurs les moins significatifs.
- Ainsi, LASSO réalise une sélection des variables les plus pertinentes (feature selection).

- La régression Ridge réduit l'impact des prédicteurs  $X_i$  les moins significatifs, en leur assignant des paramètres  $\beta_i$  qui sont petits (shrinkage method).
- Mais elle n'élimine pas ces prédicteurs.
- La régression LASSO permet d'éliminer complètement les prédicteurs les moins significatifs.
- Ainsi, LASSO réalise une sélection des variables les plus pertinentes (feature selection).

INTRODUCTION

➤ On suppose que la vraie relation entre les variables explicatives et la réponse est de la forme suivante:

$$Y = \beta_0 + \beta_1 X_1 + \dots + \beta_p X_p + \epsilon$$

où  $\epsilon$  est un bruit tel que  $\mathbb{E}(\epsilon) = 0$ .

- Le but est d'obtenir des estimateurs  $\hat{\beta} = (\hat{\beta}_0, \dots, \hat{\beta}_p)$  des paramètres  $\beta = (\beta_0, \dots, \beta_p)$ .
- La régression LASSO permet d'éliminer les estimateurs  $X_i$  qui sont le moins significativement associés avec la réponse Y (feature selection).

Introduction

➤ On suppose que la vraie relation entre les variables explicatives et la réponse est de la forme suivante:

$$Y = \beta_0 + \beta_1 X_1 + \dots + \beta_p X_p + \epsilon$$

où  $\epsilon$  est un bruit tel que  $\mathbb{E}(\epsilon) = 0$ .

- Le but est d'obtenir des estimateurs  $\hat{\beta} = (\hat{\beta}_0, \dots, \hat{\beta}_p)$  des paramètres  $\beta = (\beta_0, \dots, \beta_p)$ .
- La régression LASSO permet d'éliminer les estimateurs  $X_i$  qui sont le moins significativement associés avec la réponse Y (feature selection).

Introduction

➤ On suppose que la vraie relation entre les variables explicatives et la réponse est de la forme suivante:

$$Y = \beta_0 + \beta_1 X_1 + \dots + \beta_p X_p + \epsilon$$

où  $\epsilon$  est un bruit tel que  $\mathbb{E}(\epsilon) = 0$ .

- Le but est d'obtenir des estimateurs  $\hat{\beta} = (\hat{\beta}_0, \dots, \hat{\beta}_p)$  des paramètres  $\beta = (\beta_0, \dots, \beta_p)$ .
- La régression LASSO permet d'éliminer les estimateurs  $X_i$  qui sont le moins significativement associés avec la réponse Y (feature selection).

Introduction

▶ Régression LASSO: on choisit les estimateurs  $\hat{\beta}$  qui minimisent une autre version *régularisée* la **residual sum of squares** (RSS)

$$RSS(\boldsymbol{\beta}) = \sum_{i=1}^{N} (\boldsymbol{x_i}^T \boldsymbol{\beta} - y_i)^2 + \lambda \sum_{i=1}^{p} |\beta_i|$$
$$= \|\boldsymbol{X}\boldsymbol{\beta} - y\|_2^2 + \lambda \|\boldsymbol{\beta}\|_1$$

- οù λ est le paramètre de régularisation
- Le terme λ | β | , est une pénalité i, (i, penalty).

Introduction

▶ Régression LASSO: on choisit les estimateurs  $\hat{\beta}$  qui minimisent une autre version *régularisée* la **residual sum of squares** (RSS)

$$RSS(\boldsymbol{\beta}) = \sum_{i=1}^{N} (\boldsymbol{x_i}^T \boldsymbol{\beta} - y_i)^2 + \lambda \sum_{i=1}^{p} |\beta_i|$$
$$= \|\boldsymbol{X}\boldsymbol{\beta} - y\|_2^2 + \lambda \|\boldsymbol{\beta}\|_1$$

- οù λ est le paramètre de régularisation
- Le terme  $\lambda \|\beta\|_1$  est une pénalité  $l_1$  ( $l_1$  penalty)

Introduction

**Régression LASSO:** on choisit les estimateurs  $\hat{\beta}$  qui minimisent une autre version régularisée la residual sum of squares (RSS)

$$RSS(\boldsymbol{\beta}) = \sum_{i=1}^{N} (\boldsymbol{x_i}^T \boldsymbol{\beta} - y_i)^2 + \lambda \sum_{i=1}^{p} |\beta_i|$$
$$= \|\boldsymbol{X}\boldsymbol{\beta} - \boldsymbol{y}\|_2^2 + \lambda \|\boldsymbol{\beta}\|_1$$

- $\triangleright$  où  $\lambda$  est le paramètre de régularisation.

Introduction

▶ Régression LASSO: on choisit les estimateurs  $\hat{\beta}$  qui minimisent une autre version *régularisée* la **residual sum of squares** (RSS)

$$RSS(\boldsymbol{\beta}) = \sum_{i=1}^{N} (\boldsymbol{x_i}^T \boldsymbol{\beta} - y_i)^2 + \lambda \sum_{i=1}^{p} |\beta_i|$$
$$= \|\boldsymbol{X}\boldsymbol{\beta} - \boldsymbol{y}\|_2^2 + \lambda \|\boldsymbol{\beta}\|_1$$

- ightharpoonup où  $\lambda$  est le paramètre de régularisation.
- Le terme  $\lambda \|\beta\|_1$  est une *pénalité*  $l_1$  ( $l_1$  penalty).

On a:

Introduction

$$\hat{\boldsymbol{\beta}} = \operatorname*{arg\,min}_{\boldsymbol{\beta}} \; \mathrm{RSS}(\boldsymbol{\beta}) = \operatorname*{arg\,min}_{\boldsymbol{\beta}} \left( \|\boldsymbol{X}\boldsymbol{\beta} - \boldsymbol{y}\|_{2}^{2} + \lambda \, \|\boldsymbol{\beta}\|_{1} \right)$$

Pour trouver le minimum de  $RSS(\beta)$ , on utilise des méthodes d'optimisation (pas de solution exacte, sauf dans certains cas spécifiques).

On a:

Introduction

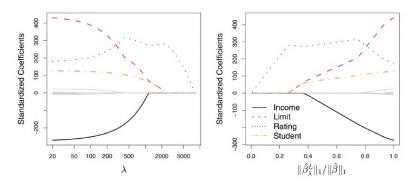
$$\hat{\boldsymbol{\beta}} = \operatorname*{arg\,min}_{\boldsymbol{\beta}} \, \mathrm{RSS}(\boldsymbol{\beta}) = \operatorname*{arg\,min}_{\boldsymbol{\beta}} \left( \|\boldsymbol{X}\boldsymbol{\beta} - \boldsymbol{y}\|_{2}^{2} + \lambda \, \|\boldsymbol{\beta}\|_{1} \right)$$

Pour trouver le minimum de  $RSS(\beta)$ , on utilise des méthodes d'optimisation (pas de solution exacte, sauf dans certains cas spécifiques).

#### LASSO

Introduction

 $\blacktriangleright$  Lorsque  $\lambda$  augmente, certains coefficients deviennent nuls.



**FIGURE 6.6.** The standardized lasso coefficients on the Credit data set are shown as a function of  $\lambda$  and  $\|\hat{\beta}_{\lambda}^{\perp}\|_{1}/\|\hat{\beta}\|_{1}$ .

Figures taken from [James et al., 2013]

#### LASSO

- ► Le fait que la Ridge régression diminue les coefficient alors que la LASSO les annulent est parfaitement explicable.
- ► Il existe une reformulation de ces méthodes en terme de problème d'optimisation sous contrainte et une interprétation parlante qui en découle...

#### LASSO

- ► Le fait que la Ridge régression diminue les coefficient alors que la LASSO les annulent est parfaitement explicable.
- ► Il existe une reformulation de ces méthodes en terme de problème d'optimisation sous contrainte et une interprétation parlante qui en découle...

INTRODUCTION

- ► En combinant les méthodes Ridge et LASSO, on obtient une régression appelée **Elastic-Net**.
- ▶ Dans ce cas, on choisit les estimateurs  $\hat{\beta}$  qui minimisent la version régularisée suivante de la **residual sum of squares (RSS)**

$$RSS(\boldsymbol{\beta}) = \|\boldsymbol{X}\boldsymbol{\beta} - \boldsymbol{y}\|_{2}^{2} + \lambda_{1} \|\boldsymbol{\beta}\|_{1} + \lambda_{2} \|\boldsymbol{\beta}\|_{2}^{2}$$

$$\hat{\boldsymbol{\beta}} = \arg\min_{\boldsymbol{\beta}} (\|\boldsymbol{X}\boldsymbol{\beta} - \boldsymbol{y}\|_2^2 + \lambda_1 \|\boldsymbol{\beta}\|_1 + \lambda_2 \|\boldsymbol{\beta}\|_2^2)$$

- ightharpoonup où  $\lambda_1$  et  $\lambda_2$  sont des *paramètres de régularisation*.
- ▶ On a donc introduit une *pénalité*  $l_1$  et une *pénalité*  $l_2$ .

Introduction

- ► En combinant les méthodes Ridge et LASSO, on obtient une régression appelée **Elastic-Net**.
- Dans ce cas, on choisit les estimateurs  $\hat{\beta}$  qui minimisent la version régularisée suivante de la **residual sum of squares (RSS)**

$$RSS(\boldsymbol{\beta}) = \|\boldsymbol{X}\boldsymbol{\beta} - \boldsymbol{y}\|_{2}^{2} + \lambda_{1} \|\boldsymbol{\beta}\|_{1} + \lambda_{2} \|\boldsymbol{\beta}\|_{2}^{2}$$

$$\hat{\boldsymbol{\beta}} = \arg\min_{\boldsymbol{\beta}} (\|\boldsymbol{X}\boldsymbol{\beta} - \boldsymbol{y}\|_{2}^{2} + \lambda_{1}\|\boldsymbol{\beta}\|_{1} + \lambda_{2}\|\boldsymbol{\beta}\|_{2}^{2})$$

- ightharpoonup où  $\lambda_1$  et  $\lambda_2$  sont des paramètres de régularisation.
- ightharpoonup On a donc introduit une pénalité  $l_1$  et une pénalité  $l_2$

Introduction

- ► En combinant les méthodes Ridge et LASSO, on obtient une régression appelée **Elastic-Net**.
- Dans ce cas, on choisit les estimateurs  $\hat{\beta}$  qui minimisent la version régularisée suivante de la **residual sum of squares (RSS)**

$$RSS(\boldsymbol{\beta}) = \|\boldsymbol{X}\boldsymbol{\beta} - \boldsymbol{y}\|_{2}^{2} + \lambda_{1} \|\boldsymbol{\beta}\|_{1} + \lambda_{2} \|\boldsymbol{\beta}\|_{2}^{2}$$

$$\hat{\boldsymbol{\beta}} = \arg\min_{\boldsymbol{\beta}} (\|\boldsymbol{X}\boldsymbol{\beta} - \boldsymbol{y}\|_{2}^{2} + \lambda_{1}\|\boldsymbol{\beta}\|_{1} + \lambda_{2}\|\boldsymbol{\beta}\|_{2}^{2})$$

- ightharpoonup où  $\lambda_1$  et  $\lambda_2$  sont des paramètres de régularisation.
- lacktriangle On a donc introduit une *pénalité*  $l_1$  et une *pénalité*  $l_2$

Introduction

- En combinant les méthodes Ridge et LASSO, on obtient une régression appelée Elastic-Net.
- ightharpoonup Dans ce cas, on choisit les estimateurs  $\hat{\beta}$  qui minimisent la version régularisée suivante de la residual sum of squares (RSS)

$$RSS(\boldsymbol{\beta}) = \|\boldsymbol{X}\boldsymbol{\beta} - \boldsymbol{y}\|_{2}^{2} + \lambda_{1} \|\boldsymbol{\beta}\|_{1} + \lambda_{2} \|\boldsymbol{\beta}\|_{2}^{2}$$

$$\hat{\boldsymbol{\beta}} = \arg\min_{\boldsymbol{\beta}} (\|\boldsymbol{X}\boldsymbol{\beta} - \boldsymbol{y}\|_{2}^{2} + \lambda_{1}\|\boldsymbol{\beta}\|_{1} + \lambda_{2}\|\boldsymbol{\beta}\|_{2}^{2})$$

- ightharpoonup où  $\lambda_1$  et  $\lambda_2$  sont des paramètres de régularisation.

## ELASTIC-NET

Introduction

- En combinant les méthodes Ridge et LASSO, on obtient une régression appelée Elastic-Net.
- Dans ce cas, on choisit les estimateurs  $\hat{\beta}$  qui minimisent la version régularisée suivante de la **residual sum of squares (RSS)**

$$RSS(\boldsymbol{\beta}) = \|\boldsymbol{X}\boldsymbol{\beta} - \boldsymbol{y}\|_{2}^{2} + \lambda_{1} \|\boldsymbol{\beta}\|_{1} + \lambda_{2} \|\boldsymbol{\beta}\|_{2}^{2}$$

$$\hat{\boldsymbol{\beta}} = \arg\min_{\boldsymbol{\beta}} (\|\boldsymbol{X}\boldsymbol{\beta} - \boldsymbol{y}\|_{2}^{2} + \lambda_{1}\|\boldsymbol{\beta}\|_{1} + \lambda_{2}\|\boldsymbol{\beta}\|_{2}^{2})$$

- où  $\lambda_1$  et  $\lambda_2$  sont des paramètres de régularisation.
- ▶ On a donc introduit une *pénalité*  $l_1$  et une *pénalité*  $l_2$ .

## BIBLIOGRAPHIE



Introduction

James, G., Witten, D., Hastie, T., and Tibshirani, R. (2013).

An Introduction to Statistical Learning: with Applications in R, volume 103 of Springer Texts in Statistics.

Springer, New York.