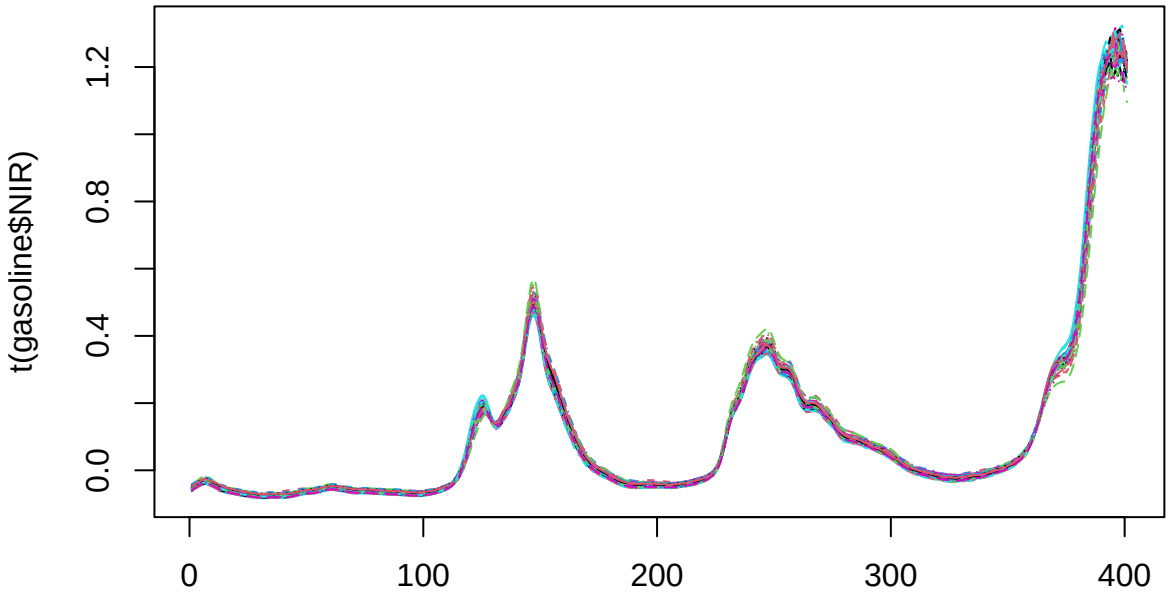
Regression HD sur les données gasoline

Julien JACQUES

08/02/2024

Chargeons les données gasolines (spectres NIR de 60 essences)

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



Régression linéaire

Commençons par une régression linéaire classique, sur l'ensemble des variables.

```
model1=lm(octane~NIR,data=gasoline)
print(anova(model1))
```

```
## Warning in anova.lm(model1): ANOVA F-tests on an essentially perfect fit are
## unreliable
```

```
## Analysis of Variance Table
##
## Response: octane
##           Df Sum Sq Mean Sq F value Pr(>F)
## NIR       59 138.13  2.3411     NaN    NaN
## Residuals  0   0.00     NaN
```

Comme il y a plus de variables (401) que d'individus (60), la régression linéaire classique n'est pas estimable. Attention, R par défaut présente tout de même des estimations obtenues en coupant arbitrairement les 59

premières variables. Mais cette solution n'est pas viable.

Régression linéaire avec selection forward

Comme on ne peut pas estimer le modèle avec l'ensemble des variables, les techniques de régression de type backward ne sont pas possible. On va réaliser une régression forward. Pour cela, il faut indiquer le modèle minimal de départ (avec juste une constante) et de le modèle complet (avec l'ensemble de variable), sachant qu'on ne peut pas estimer ce modèle complet (il faut juste lui passer la *formule* correspondante).

```
x=cbind(gasoline$NIR,gasoline$octane)
data=data.frame(octane=x[,402],x[,1:401])
min.model <- lm(octane ~ 1, data=data)
formuletmp="~"
for (n in seq(900,1700,2)) formuletmp=paste(formuletmp,' + X',n,'.nm',sep='')
model1b <- step(min.model, direction = "forward", scope = (formuletmp),steps=50,trace = F)
summary(model1b)
```

```
##
## Call:
## lm(formula = octane ~ X1208.nm + X1196.nm + X976.nm + X1692.nm +
##     X970.nm + X1206.nm + X1056.nm + X1074.nm + X1098.nm + X1686.nm +
##     X1700.nm + X1544.nm + X1546.nm + X1094.nm + X1552.nm + X1274.nm +
##     X926.nm + X1342.nm + X940.nm + X918.nm + X1026.nm + X1064.nm +
##     X1600.nm + X1280.nm + X1278.nm + X960.nm + X1104.nm + X1320.nm +
##     X1588.nm + X900.nm + X1084.nm + X1080.nm + X1622.nm + X1076.nm +
##     X1318.nm + X1590.nm + X1550.nm + X1680.nm + X1072.nm + X1628.nm +
##     X1570.nm + X932.nm + X1562.nm + X1240.nm + X1328.nm + X1338.nm +
##     X938.nm + X912.nm + X1304.nm + X914.nm, data = data)
##
## Residuals:
##        Min         1Q     Median         3Q        Max
## -2.403e-03 -6.654e-04 -2.852e-05  5.119e-04  2.370e-03
##
## Coefficients:
##               Estimate Std. Error  t value Pr(>|t|)
## (Intercept)   93.95791    0.41417  226.858  < 2e-16 ***
## X1208.nm      58.68357    2.70155   21.722 4.38e-09 ***
## X1196.nm      43.82832    0.70867   61.846 3.81e-13 ***
## X976.nm      282.47025    5.95384   47.443 4.11e-12 ***
## X1692.nm      -6.35868    0.04774 -133.201 3.85e-16 ***
## X970.nm     -145.20891   12.06119  -12.039 7.49e-07 ***
## X1206.nm    -112.98103    2.58944  -43.632 8.72e-12 ***
## X1056.nm    -147.86160    8.71903  -16.958 3.87e-08 ***
## X1074.nm     188.69706    8.22859   22.932 2.71e-09 ***
## X1098.nm     608.35982    9.63038   63.171 3.15e-13 ***
## X1686.nm      -9.57912    0.09472 -101.134 4.58e-15 ***
## X1700.nm       9.54631    0.11672   81.791 3.09e-14 ***
## X1544.nm     -67.11382    5.52940  -12.138 6.99e-07 ***
## X1546.nm     378.07592    5.24191   72.126 9.57e-14 ***
## X1094.nm    -616.08611    8.23124  -74.847 6.86e-14 ***
## X1552.nm    -262.06898    5.00999  -52.309 1.71e-12 ***
## X1274.nm    -282.47975    4.85978  -58.126 6.65e-13 ***
## X926.nm     -187.76911    4.16957  -45.033 6.56e-12 ***
## X1342.nm     273.65088    7.37360   37.112 3.71e-11 ***
```

```
## X940.nm      448.88799    8.05103   55.755 9.66e-13 ***
## X918.nm     -278.77900    2.45958 -113.344 1.64e-15 ***
## X1026.nm     195.02443    5.76319   33.840 8.47e-11 ***
## X1064.nm     496.40355    8.11150   61.198 4.19e-13 ***
## X1600.nm    -236.19192    2.87998  -82.012 3.02e-14 ***
## X1280.nm     132.07732    6.18331   21.360 5.08e-09 ***
## X1278.nm     -58.43611    5.26078  -11.108 1.48e-06 ***
## X960.nm     -262.43222    6.08237  -43.146 9.63e-12 ***
## X1104.nm    -270.86228   10.56058  -25.648 1.00e-09 ***
## X1320.nm    -339.27261    6.40133  -53.000 1.52e-12 ***
## X1588.nm      84.75666    4.49798   18.843 1.53e-08 ***
## X900.nm      -29.28231    1.92112  -15.242 9.81e-08 ***
## X1084.nm    -133.30216   13.11668  -10.163 3.13e-06 ***
## X1080.nm     233.95072    6.78697   34.471 7.19e-11 ***
## X1622.nm      93.24525    1.87888   49.628 2.75e-12 ***
## X1076.nm    -519.53341   14.91602  -34.831 6.55e-11 ***
## X1318.nm     249.64750    7.82555   31.902 1.44e-10 ***
## X1590.nm     105.94648    4.65838   22.743 2.91e-09 ***
## X1550.nm     -87.44534    6.33800  -13.797 2.33e-07 ***
## X1680.nm      -1.27874    0.07273  -17.583 2.82e-08 ***
## X1072.nm     176.73360    6.80680   25.964 8.99e-10 ***
## X1628.nm     -31.18749    0.75996  -41.038 1.51e-11 ***
## X1570.nm     -60.26094    2.22769  -27.051 6.24e-10 ***
## X932.nm      -44.19893    7.69392   -5.745 0.000278 ***
## X1562.nm      63.49092    4.97996   12.749 4.59e-07 ***
## X1240.nm     -32.14533    2.11160  -15.223 9.92e-08 ***
## X1328.nm      86.97972    5.65207   15.389 9.03e-08 ***
## X1338.nm     -65.47727    4.90213  -13.357 3.08e-07 ***
## X938.nm       23.74105    5.77676    4.110 0.002638 **
## X912.nm       33.19357    3.40430    9.750 4.41e-06 ***
## X1304.nm      25.86886    6.14606    4.209 0.002276 **
## X914.nm      -14.72095    4.00124   -3.679 0.005083 **
## ---
## Signif. codes:  0 '***' 0.001 '**' 0.01 '*' 0.05 '.' 0.1 ' ' 1
##
## Residual standard error: 0.002377 on 9 degrees of freedom
## Multiple R-squared:      1,  Adjusted R-squared:      1
## F-statistic: 4.891e+05 on 50 and 9 DF,  p-value: < 2.2e-16
```

On autorise au maximum 50 étapes (donc 50 variables dans le modèle) étant donné qu'on n'a que 60 individus. On pourrait théoriquement autoriser quelques variables de plus, mais cela n'a pas vraiment un grand intérêt. On note que la sélection stepwise a tendance à prendre le maximum de variables autorisées... certainement une signe d'overfitting.

Régression PCR

Effectuons désormais une régression sur composante principale

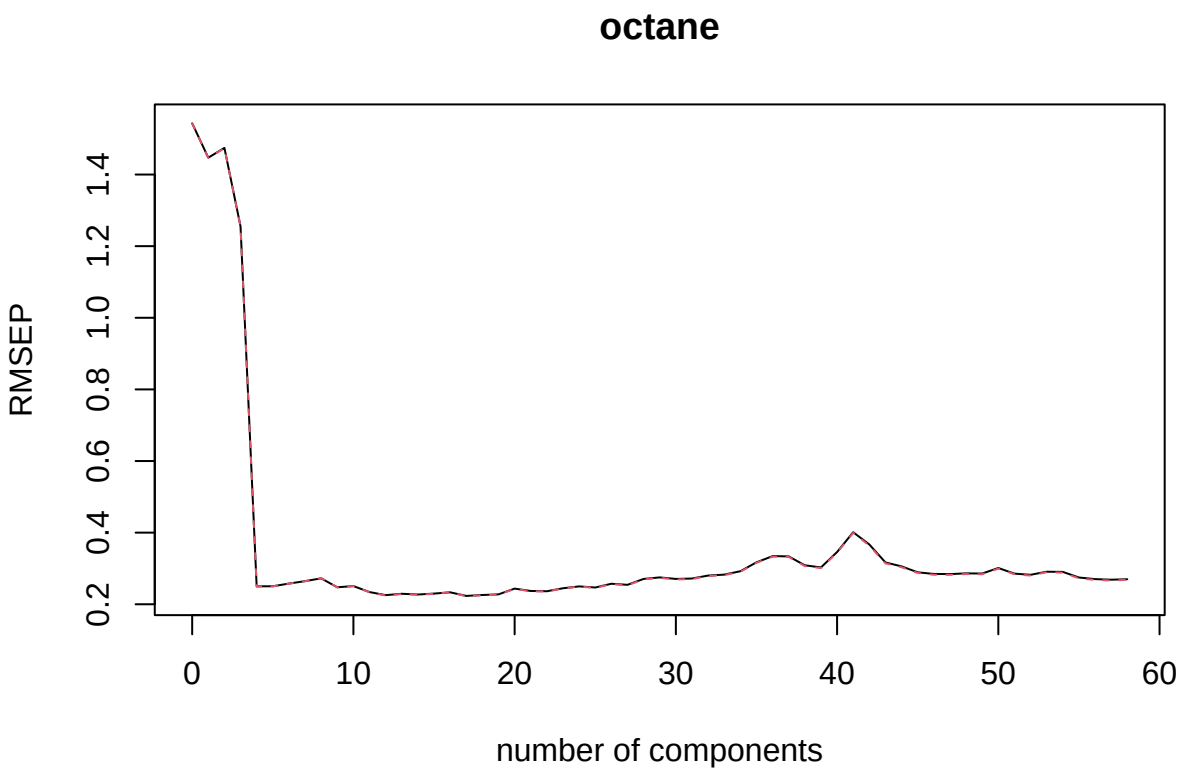
```
library(pls)
model2=pcr(octane~NIR,data=gasoline,validation='LOO')
summary(model2)
```

```
## Data:    X dimension: 60 401
##  Y dimension: 60 1
## Fit method: svdpc
```

```
## Number of components considered: 58
##
## VALIDATION: RMSEP
## Cross-validated using 60 leave-one-out segments.
##        (Intercept)  1 comps  2 comps  3 comps  4 comps  5 comps  6 comps
## CV           1.543    1.447    1.474    1.255   0.2501   0.2503   0.2578
## adjCV        1.543    1.446    1.474    1.255   0.2496   0.2500   0.2575
##        7 comps  8 comps  9 comps  10 comps  11 comps  12 comps  13 comps
## CV      0.2646   0.2724   0.2474    0.2508    0.2340    0.2255    0.2293
## adjCV   0.2643   0.2733   0.2471    0.2508    0.2336    0.2244    0.2286
##        14 comps  15 comps  16 comps  17 comps  18 comps  19 comps  20 comps
## CV       0.2272    0.2298    0.2334    0.2233    0.2259    0.2276    0.2437
## adjCV    0.2266    0.2292    0.2337    0.2225    0.2252    0.2270    0.2430
##        21 comps  22 comps  23 comps  24 comps  25 comps  26 comps  27 comps
## CV       0.2371    0.2364    0.2447    0.2499    0.2468    0.2573    0.2543
## adjCV    0.2363    0.2356    0.2439    0.2495    0.2457    0.2565    0.2531
##        28 comps  29 comps  30 comps  31 comps  32 comps  33 comps  34 comps
## CV       0.2707    0.2750    0.2707    0.2719    0.2802    0.2828    0.2922
## adjCV    0.2696    0.2738    0.2693    0.2704    0.2787    0.2813    0.2908
##        35 comps  36 comps  37 comps  38 comps  39 comps  40 comps  41 comps
## CV       0.3171    0.3345    0.3337    0.3088    0.3029    0.3459    0.4011
## adjCV    0.3157    0.3329    0.3322    0.3066    0.3009    0.3441    0.3994
##        42 comps  43 comps  44 comps  45 comps  46 comps  47 comps  48 comps
## CV       0.3670    0.3169    0.3058    0.2892    0.2847    0.2842    0.2863
## adjCV    0.3639    0.3143    0.3033    0.2873    0.2824    0.2822    0.2844
##        49 comps  50 comps  51 comps  52 comps  53 comps  54 comps  55 comps
## CV       0.2858    0.3013    0.2855    0.2823    0.2908    0.2904    0.2747
## adjCV    0.2839    0.2995    0.2840    0.2801    0.2896    0.2883    0.2724
##        56 comps  57 comps  58 comps
## CV       0.2702    0.2686    0.2699
## adjCV    0.2681    0.2664    0.2682
##
## TRAINING: % variance explained
##         1 comps  2 comps  3 comps  4 comps  5 comps  6 comps  7 comps  8 comps
## X         72.57    83.90    90.86    95.46    96.70    97.66    98.16    98.52
## octane    18.99    19.62    46.50    97.69    97.78    97.79    97.79    97.79
##         9 comps  10 comps  11 comps  12 comps  13 comps  14 comps  15 comps
## X         98.85     99.09     99.29     99.40     99.51     99.60     99.68
## octane    98.33     98.38     98.72     98.86     98.87     98.89     98.93
##         16 comps  17 comps  18 comps  19 comps  20 comps  21 comps  22 comps
## X          99.73     99.79     99.84     99.86     99.89     99.90     99.92
## octane     98.93     99.03     99.03     99.03     99.05     99.08     99.10
##         23 comps  24 comps  25 comps  26 comps  27 comps  28 comps  29 comps
## X          99.93     99.94     99.95     99.96     99.96     99.97     99.97
## octane     99.12     99.13     99.22     99.24     99.31     99.31     99.34
##         30 comps  31 comps  32 comps  33 comps  34 comps  35 comps  36 comps
## X          99.98     99.98     99.98     99.98     99.99     99.99     99.99
## octane     99.40     99.41     99.41     99.42     99.42     99.43     99.47
##         37 comps  38 comps  39 comps  40 comps  41 comps  42 comps  43 comps
## X          99.99     99.99     99.99     99.99     99.99     99.99    100.00
## octane     99.53     99.61     99.63     99.63     99.66     99.81     99.83
##         44 comps  45 comps  46 comps  47 comps  48 comps  49 comps  50 comps
## X         100.00    100.00    100.00    100.00    100.00    100.00    100.00
## octane     99.84     99.85     99.87     99.87     99.87     99.88     99.88
```

```
##         51 comps  52 comps  53 comps  54 comps  55 comps  56 comps  57 comps
## X         100.00    100.00    100.00    100.00    100.00    100.00    100.00
## octane     99.91     99.93     99.94     99.97     99.98     99.98     99.99
##         58 comps
## X         100.00
## octane     99.99
```

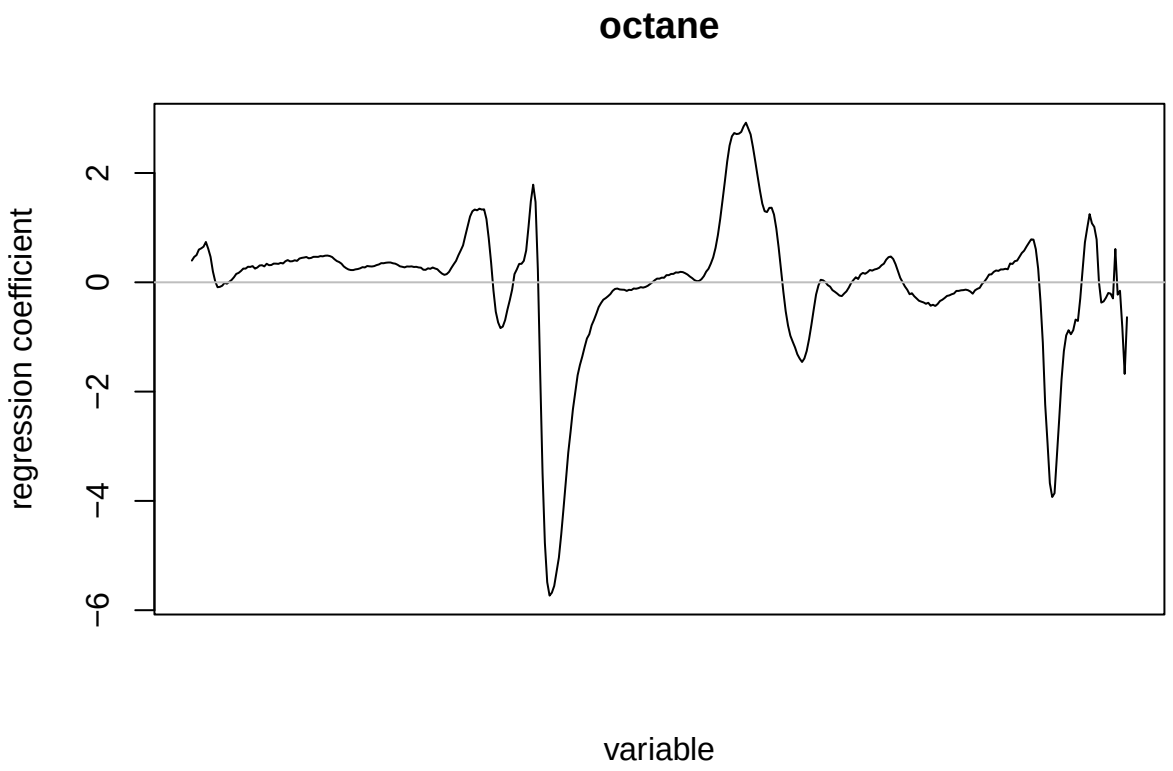
```
plot(RMSEP(model2))
```



Visuellement, 4 composantes semblent le plus efficaces, même si l'erreur par Cross Validation peut quelque peu réduire pour un nombre de composantes plus grand, mais la différence est très faible. Restons sur un modèel parcimonieux à 4 composantes principales.

Le modèle linéaire étant une combinaison linéaire des composantes principales, elles mêmes étant des combinaisons linéaires des variables initiales, on peut remonter aux coefficients des variables initiales. Le fonction suivante permet de les tracer :

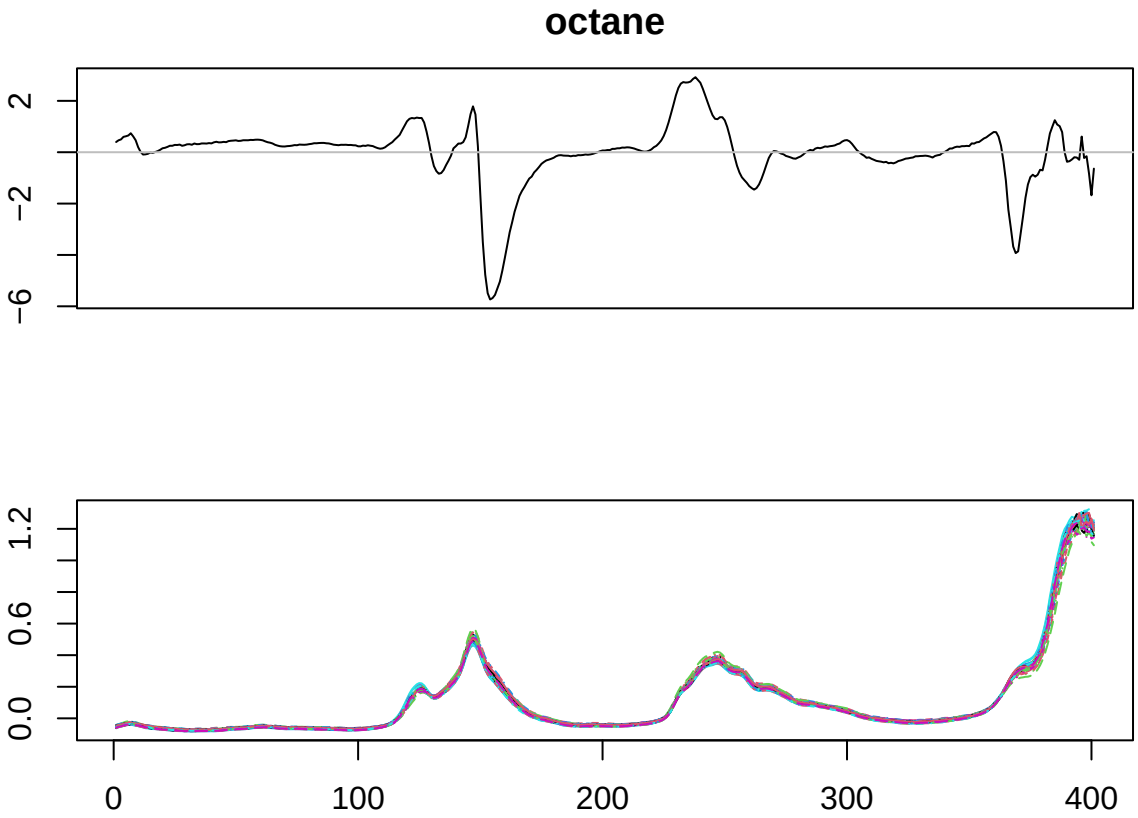
```
plot(model2, plottype = "coef", ncomp=4,xaxt='n')
```



A noter que ce qui diffère par rapport à un modèle sur l'ensemble des variables, est que les coefficients ne sont pas estimés par moindres carrés (maximum de vraisemblance).

On remarque que certains longueurs d'onde ont des coefficients relativement importants.

```
par(mfrow=c(2,1),mai=c(.5,.5,.5,.5))
plot(model2, plottype = "coef", ncomp=4,xaxt='n')
matplot(t(gasoline$NIR),type='l')
```



Régression PLS

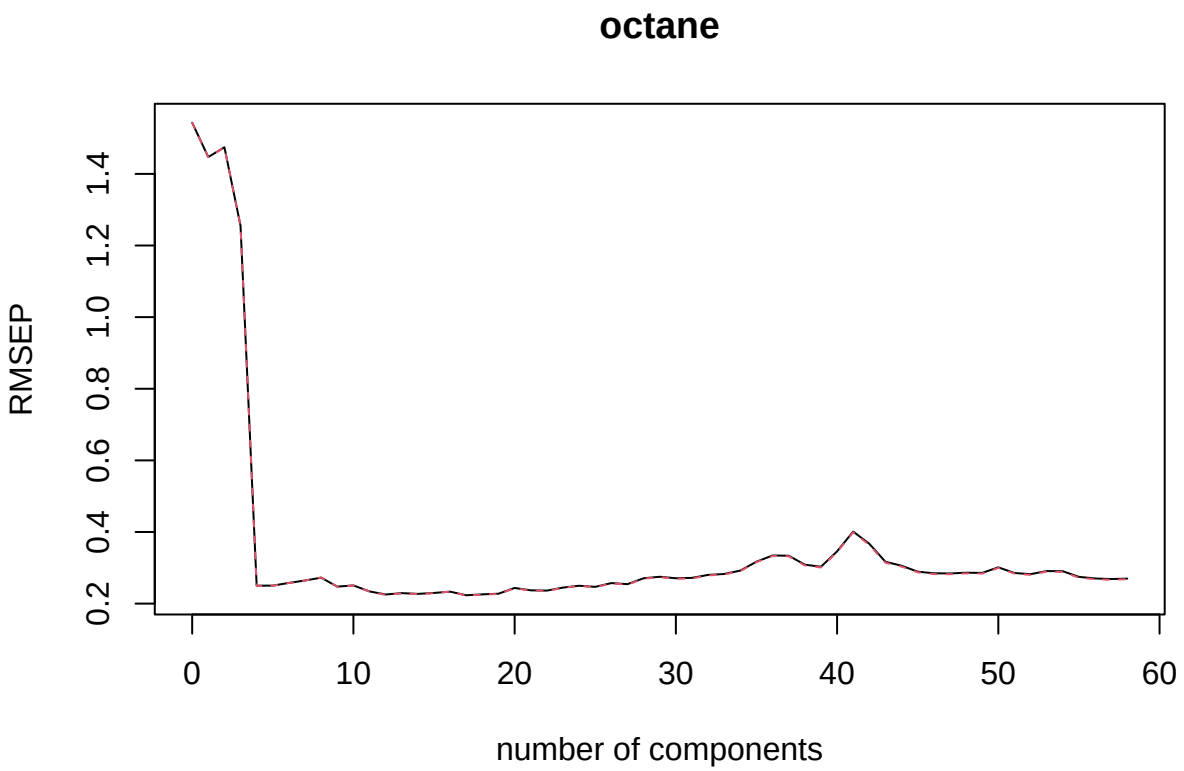
Faisons de même avec une régression PLS

```
library(pls)
model2=pcr(octane~NIR,data=gasoline,validation='LOO')
summary(model2)
```

```
## Data:    X dimension: 60 401
##  Y dimension: 60 1
## Fit method: svdpc
## Number of components considered: 58
##
## VALIDATION: RMSEP
## Cross-validated using 60 leave-one-out segments.
##        (Intercept)  1 comps  2 comps  3 comps  4 comps  5 comps  6 comps
## CV           1.543    1.447    1.474    1.255   0.2501   0.2503   0.2578
## adjCV        1.543    1.446    1.474    1.255   0.2496   0.2500   0.2575
##        7 comps  8 comps  9 comps  10 comps  11 comps  12 comps  13 comps
## CV      0.2646   0.2724   0.2474    0.2508    0.2340    0.2255    0.2293
## adjCV   0.2643   0.2733   0.2471    0.2508    0.2336    0.2244    0.2286
##        14 comps  15 comps  16 comps  17 comps  18 comps  19 comps  20 comps
## CV       0.2272    0.2298    0.2334    0.2233    0.2259    0.2276    0.2437
## adjCV    0.2266    0.2292    0.2337    0.2225    0.2252    0.2270    0.2430
##        21 comps  22 comps  23 comps  24 comps  25 comps  26 comps  27 comps
## CV       0.2371    0.2364    0.2447    0.2499    0.2468    0.2573    0.2543
## adjCV    0.2363    0.2356    0.2439    0.2495    0.2457    0.2565    0.2531
##        28 comps  29 comps  30 comps  31 comps  32 comps  33 comps  34 comps
```

```
## CV       0.2707    0.2750    0.2707    0.2719    0.2802    0.2828    0.2922
## adjCV    0.2696    0.2738    0.2693    0.2704    0.2787    0.2813    0.2908
##        35 comps  36 comps  37 comps  38 comps  39 comps  40 comps  41 comps
## CV       0.3171    0.3345    0.3337    0.3088    0.3029    0.3459    0.4011
## adjCV    0.3157    0.3329    0.3322    0.3066    0.3009    0.3441    0.3994
##        42 comps  43 comps  44 comps  45 comps  46 comps  47 comps  48 comps
## CV       0.3670    0.3169    0.3058    0.2892    0.2847    0.2842    0.2863
## adjCV    0.3639    0.3143    0.3033    0.2873    0.2824    0.2822    0.2844
##        49 comps  50 comps  51 comps  52 comps  53 comps  54 comps  55 comps
## CV       0.2858    0.3013    0.2855    0.2823    0.2908    0.2904    0.2747
## adjCV    0.2839    0.2995    0.2840    0.2801    0.2896    0.2883    0.2724
##        56 comps  57 comps  58 comps
## CV       0.2702    0.2686    0.2699
## adjCV    0.2681    0.2664    0.2682
##
## TRAINING: % variance explained
##         1 comps  2 comps  3 comps  4 comps  5 comps  6 comps  7 comps  8 comps
## X         72.57    83.90    90.86    95.46    96.70    97.66    98.16    98.52
## octane    18.99    19.62    46.50    97.69    97.78    97.79    97.79    97.79
##         9 comps  10 comps  11 comps  12 comps  13 comps  14 comps  15 comps
## X         98.85     99.09     99.29     99.40     99.51     99.60     99.68
## octane    98.33     98.38     98.72     98.86     98.87     98.89     98.93
##         16 comps  17 comps  18 comps  19 comps  20 comps  21 comps  22 comps
## X          99.73     99.79     99.84     99.86     99.89     99.90     99.92
## octane     98.93     99.03     99.03     99.03     99.05     99.08     99.10
##         23 comps  24 comps  25 comps  26 comps  27 comps  28 comps  29 comps
## X          99.93     99.94     99.95     99.96     99.96     99.97     99.97
## octane     99.12     99.13     99.22     99.24     99.31     99.31     99.34
##         30 comps  31 comps  32 comps  33 comps  34 comps  35 comps  36 comps
## X          99.98     99.98     99.98     99.98     99.99     99.99     99.99
## octane     99.40     99.41     99.41     99.42     99.42     99.43     99.47
##         37 comps  38 comps  39 comps  40 comps  41 comps  42 comps  43 comps
## X          99.99     99.99     99.99     99.99     99.99     99.99    100.00
## octane     99.53     99.61     99.63     99.63     99.66     99.81     99.83
##         44 comps  45 comps  46 comps  47 comps  48 comps  49 comps  50 comps
## X         100.00    100.00    100.00    100.00    100.00    100.00    100.00
## octane     99.84     99.85     99.87     99.87     99.87     99.88     99.88
##         51 comps  52 comps  53 comps  54 comps  55 comps  56 comps  57 comps
## X         100.00    100.00    100.00    100.00    100.00    100.00    100.00
## octane     99.91     99.93     99.94     99.97     99.98     99.98     99.99
##         58 comps
## X         100.00
## octane     99.99
```

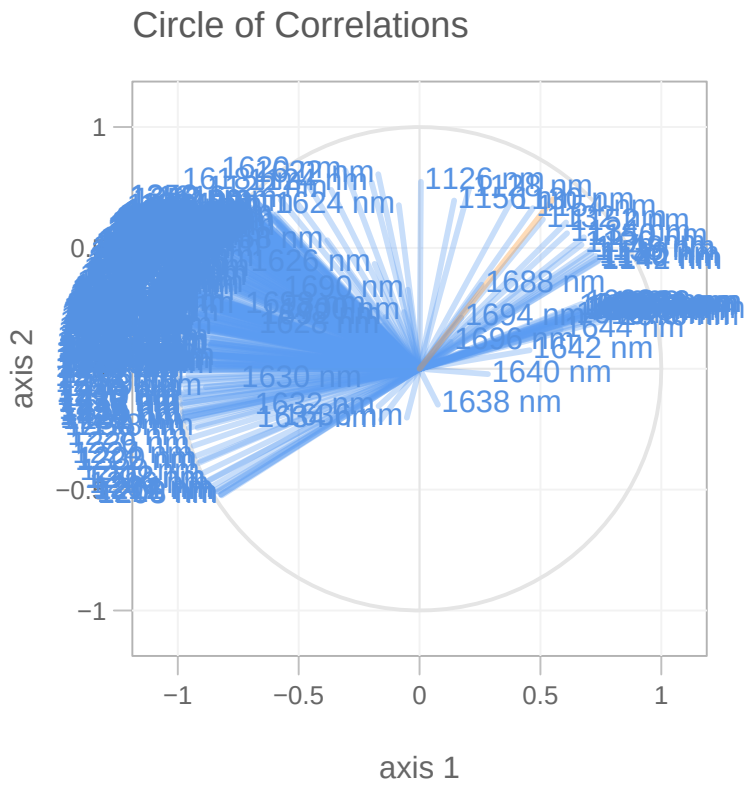
```
plot(RMSEP(model2))
```



Là encore 4 composantes semble être le meilleur choix.

On peut aussi utiliser la fonction suivante pour estimer le modèle PLS, qui a l'avantage de permettre des sorties graphiques de type cerles des correlations :

```
library(plsdepot)
model2=plsreg1(x[,1:401],x[,402,drop=F],comps=4,crosval=T)
plot(model2,what='variables',comps=c(1,2))
```



Néanmoins, on ne voit pas grand chose vu le grand nombre de variables, même si on voit que certaines sont corrélées positivement et d'autres négativement avec la première composante PLS.

calcul des VIP

Un indicateur d'importance des variables est les VIPs, qui ne sont pas implémentés dans ce package, mais on peut les calculer à la main

```
VIP=matrix(0,401,4)
for (j in 1:401){
  for (h in 1:4){
    VIP[j,h]=sqrt(401/sum(model2$R2[1:h])*sum(model2$R2[1:h]*(model2$raw.wgs[j,1:h]^2)))
  }
}
rownames(VIP)=colnames(x)[1:401]
```

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

```
vip4=VIP[,4]
print(sort(vip4,decreasing = T)[1:50])
```

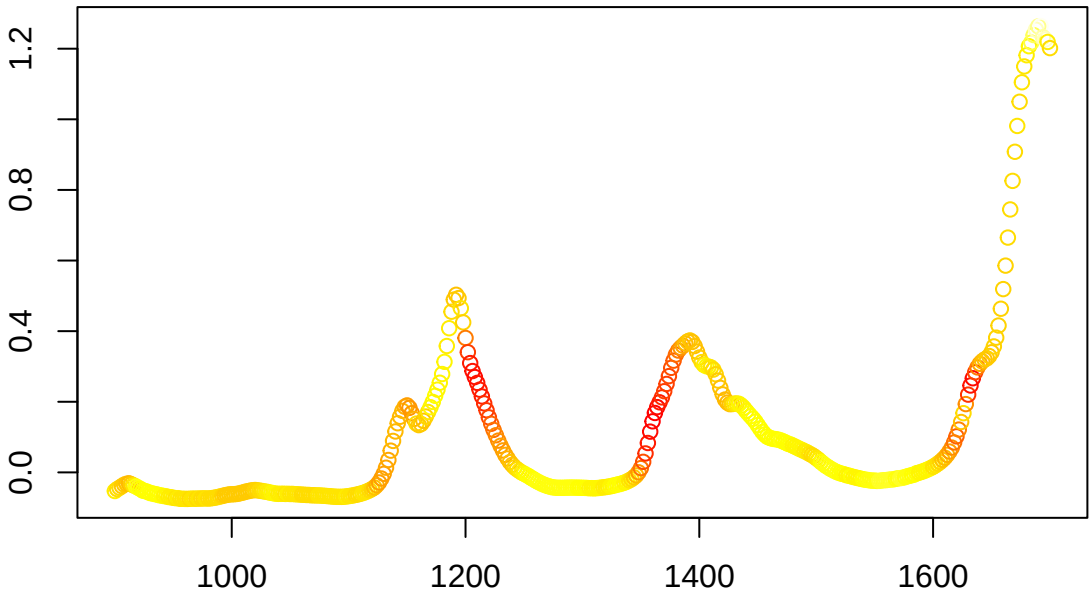
```
##  1634 nm  1636 nm  1362 nm  1360 nm  1358 nm  1364 nm  1638 nm  1208 nm
## 1.985829 1.980566 1.936412 1.932841 1.903980 1.898295 1.884544 1.868716
##  1632 nm  1206 nm  1210 nm  1212 nm  1356 nm  1366 nm  1214 nm  1204 nm
## 1.865649 1.861631 1.856096 1.815856 1.808414 1.807100 1.800141 1.794316
##  1216 nm  1368 nm  1354 nm  1630 nm  1218 nm  1370 nm  1202 nm  1372 nm
## 1.739823 1.726476 1.724275 1.701620 1.673683 1.665877 1.641676 1.634949
##  1640 nm  1374 nm  1220 nm  1352 nm  1376 nm  1378 nm  1222 nm  1620 nm
## 1.625818 1.616627 1.590649 1.579743 1.569869 1.525431 1.491178 1.475534
##  1380 nm  1350 nm  1224 nm  1618 nm  1642 nm  1382 nm  1200 nm  1226 nm
## 1.465370 1.424073 1.421166 1.394524 1.366641 1.357942 1.355780 1.327466
```

```
##  1622 nm  1616 nm  1628 nm  1228 nm  1384 nm  1154 nm  1348 nm  1152 nm
## 1.327063 1.291812 1.274749 1.270759 1.253825 1.244840 1.241136 1.238701
##  1128 nm  1130 nm
## 1.226337 1.218781
```

Beaucoup de variables ont des VIP importants.

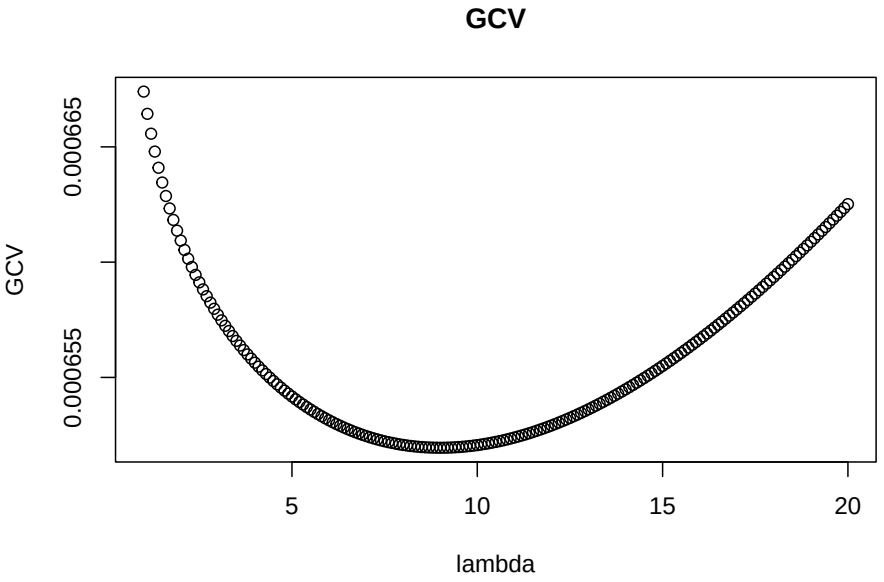
Pour ce type de données spectrales, on peut représenter graphiquement la courbe moyenne en mettant en couleur plus ou moins chaude suivant si le VIP est important (rouge = variables importantes)

```
vip4_normalises=(vip4-min(vip4))/(max(vip4)-min(vip4))
plot(seq(900,1700,2),colMeans(gasoline$NIR),col=heat.colors(40)[40*(1-vip4_normalises)],
     xlab="",ylab="")
```



Régression ridge

Effectuons désormais une régression ridge et cherchons le meilleur lambda suivant l'indicateur de validation croisée (généralisée, GCV)




```
## [1] 9
```

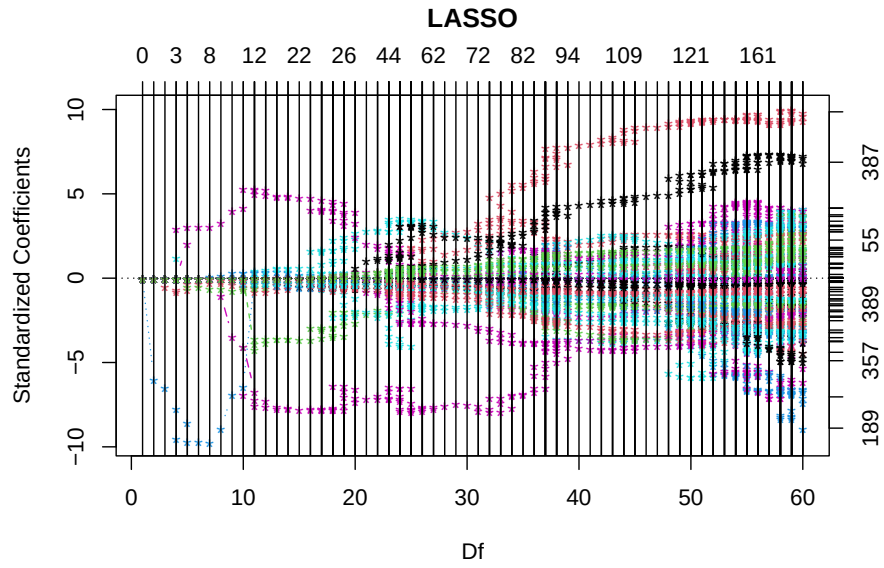
```
## [1] 0.0006519503
```

D'après l'indice de validation croisée généralisée (GCV), le labmbda optimal est 9. Ré-éstimons alors le modèle.

```
model_ridge <- lm.ridge(octane~NIR,data=gasoline,lambda=9)
```

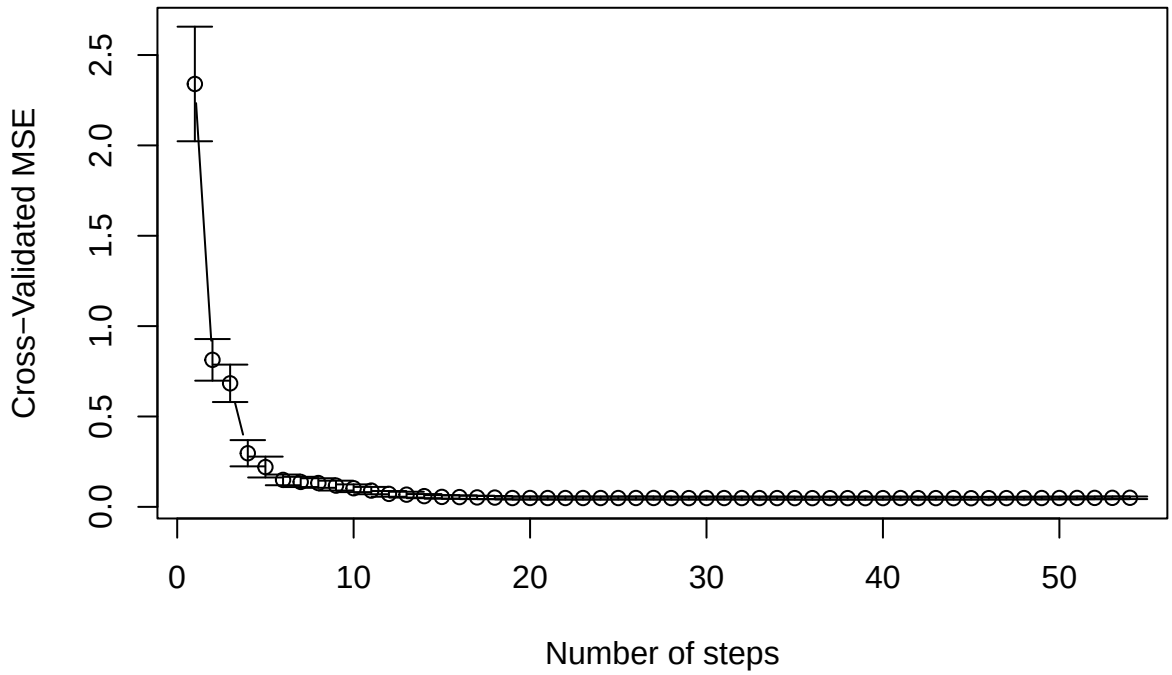
Régression lasso

Effectuons désormais une régressoin LASSO



Cherchons le lambda optimal

```
cv=cv.lars(gasoline$NIR,gasoline$octane, K = 10,trace = FALSE, plot.it = TRUE,
           se = TRUE,type = c("lasso"),mode='step')
```



On peut afficher l'étapte à laquelle le CVMSE est minisiée

```
print(which.min(cv$cv))
```

```
## [1] 45
```

Pour avoir une solution plus parcimonieuse, on prendra plutôt l'étape qui conduit à la solution la plus parcimonieuse (avec le moins de variables actives, c'est-à-dire le Df (degree of freedom) le plus petit) avec une erreur inférieur à l'erreur minimal + l'erreur d'estimation de cette erreur :

```
tmp=which.min(cv$cv)
step_opt=min(which(cv$cv < cv$cv[tmp]+cv$cv.error[tmp]))
print(step_opt)
```

```
## [1] 16
```

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

```
##      900 nm      902 nm      904 nm      906 nm      908 nm      910 nm
##   0.0000000   0.0000000   0.0000000   0.0000000   0.0000000   0.0000000
##      912 nm      914 nm      916 nm      918 nm      920 nm      922 nm
##  10.2291862   0.0000000   0.0000000   0.0000000   0.0000000   0.0000000
##      924 nm      926 nm      928 nm      930 nm      932 nm      934 nm
##   0.0000000   0.0000000   0.0000000   0.0000000   0.0000000   0.0000000
##      936 nm      938 nm      940 nm      942 nm      944 nm      946 nm
##   0.0000000   0.0000000   0.0000000   0.0000000   0.0000000   0.0000000
##      948 nm      950 nm      952 nm      954 nm      956 nm      958 nm
##   0.0000000   0.0000000   0.0000000   0.0000000   0.0000000   0.0000000
##      960 nm      962 nm      964 nm      966 nm      968 nm      970 nm
##   0.0000000   0.0000000   0.0000000   0.0000000   0.0000000   0.0000000
##      972 nm      974 nm      976 nm      978 nm      980 nm      982 nm
##   0.0000000   0.0000000   0.0000000   0.0000000   0.0000000   0.0000000
##      984 nm      986 nm      988 nm      990 nm      992 nm      994 nm
##   0.0000000   0.0000000   0.0000000   0.0000000   0.0000000   0.0000000
##      996 nm      998 nm     1000 nm     1002 nm     1004 nm     1006 nm
```

```
##   0.0000000   0.0000000   0.0000000   0.0000000   0.0000000   0.0000000
##     1008 nm     1010 nm     1012 nm     1014 nm     1016 nm     1018 nm
##   0.0000000   0.0000000   0.0000000   0.0000000   0.0000000   0.0000000
##     1020 nm     1022 nm     1024 nm     1026 nm     1028 nm     1030 nm
##   0.0000000   0.0000000   0.0000000   0.0000000   0.0000000   0.0000000
##     1032 nm     1034 nm     1036 nm     1038 nm     1040 nm     1042 nm
##   0.0000000   0.0000000   0.0000000   0.0000000   0.0000000   0.0000000
##     1044 nm     1046 nm     1048 nm     1050 nm     1052 nm     1054 nm
##   0.0000000   0.0000000   0.0000000   0.0000000   0.0000000   0.0000000
##     1056 nm     1058 nm     1060 nm     1062 nm     1064 nm     1066 nm
##   0.0000000   0.0000000   0.0000000   0.0000000   0.0000000   0.0000000
##     1068 nm     1070 nm     1072 nm     1074 nm     1076 nm     1078 nm
##   0.0000000   0.0000000   0.0000000   0.0000000   0.0000000   0.0000000
##     1080 nm     1082 nm     1084 nm     1086 nm     1088 nm     1090 nm
##   0.0000000   0.0000000   0.0000000   0.0000000   0.0000000   0.0000000
##     1092 nm     1094 nm     1096 nm     1098 nm     1100 nm     1102 nm
##   0.0000000   0.0000000   0.0000000   0.0000000   0.0000000   0.0000000
##     1104 nm     1106 nm     1108 nm     1110 nm     1112 nm     1114 nm
##   0.0000000   0.0000000   0.0000000   0.0000000   0.0000000   0.0000000
##     1116 nm     1118 nm     1120 nm     1122 nm     1124 nm     1126 nm
##   0.0000000   0.0000000   0.0000000   0.0000000   0.0000000   0.0000000
##     1128 nm     1130 nm     1132 nm     1134 nm     1136 nm     1138 nm
##   0.0000000   0.0000000   0.0000000   0.0000000   0.0000000   0.0000000
##     1140 nm     1142 nm     1144 nm     1146 nm     1148 nm     1150 nm
##   0.0000000   0.0000000   0.0000000   0.0000000   0.0000000   0.0000000
##     1152 nm     1154 nm     1156 nm     1158 nm     1160 nm     1162 nm
##   0.0000000   0.0000000   0.0000000   0.0000000   0.0000000   0.0000000
##     1164 nm     1166 nm     1168 nm     1170 nm     1172 nm     1174 nm
##   0.0000000   0.0000000   0.0000000   0.0000000   0.0000000   0.0000000
##     1176 nm     1178 nm     1180 nm     1182 nm     1184 nm     1186 nm
##   0.0000000   0.0000000   0.0000000   0.0000000   0.0000000   0.0000000
##     1188 nm     1190 nm     1192 nm     1194 nm     1196 nm     1198 nm
##   0.0000000   0.0000000   0.0000000   0.0000000   0.0000000   0.0000000
##     1200 nm     1202 nm     1204 nm     1206 nm     1208 nm     1210 nm
##   0.0000000   0.0000000   0.0000000 -24.0397772   0.0000000   0.0000000
##     1212 nm     1214 nm     1216 nm     1218 nm     1220 nm     1222 nm
##   0.0000000   0.0000000   0.0000000   0.0000000   0.0000000   0.0000000
##     1224 nm     1226 nm     1228 nm     1230 nm     1232 nm     1234 nm
## -66.9748088   0.0000000   0.0000000   0.0000000   0.0000000   0.0000000
##     1236 nm     1238 nm     1240 nm     1242 nm     1244 nm     1246 nm
##   0.0000000   0.0000000   0.0000000   0.0000000   0.0000000   0.0000000
##     1248 nm     1250 nm     1252 nm     1254 nm     1256 nm     1258 nm
##   0.0000000   0.0000000   0.0000000   0.0000000   0.0000000   0.0000000
##     1260 nm     1262 nm     1264 nm     1266 nm     1268 nm     1270 nm
##   0.0000000   0.0000000   0.0000000   0.0000000   0.0000000   0.0000000
##     1272 nm     1274 nm     1276 nm     1278 nm     1280 nm     1282 nm
##   0.0000000   0.0000000   0.0000000   0.0000000   0.0000000   0.0000000
##     1284 nm     1286 nm     1288 nm     1290 nm     1292 nm     1294 nm
##   0.0000000   0.0000000   0.0000000   0.0000000   0.0000000   0.0000000
##     1296 nm     1298 nm     1300 nm     1302 nm     1304 nm     1306 nm
##   0.0000000   0.0000000   0.0000000   0.0000000   0.0000000   0.0000000
##     1308 nm     1310 nm     1312 nm     1314 nm     1316 nm     1318 nm
##   0.0000000   0.0000000   0.0000000   0.0000000   0.0000000   0.0000000
##     1320 nm     1322 nm     1324 nm     1326 nm     1328 nm     1330 nm
```

```
##   0.0000000   0.0000000   0.0000000   0.0000000   0.0000000   0.0000000
##     1332 nm     1334 nm     1336 nm     1338 nm     1340 nm     1342 nm
##   0.0000000   0.0000000   0.0000000   0.0000000   0.0000000   0.0000000
##     1344 nm     1346 nm     1348 nm     1350 nm     1352 nm     1354 nm
##   0.0000000   0.0000000   0.0000000   0.0000000   0.0000000   0.0000000
##     1356 nm     1358 nm     1360 nm     1362 nm     1364 nm     1366 nm
##   0.0000000   0.0000000   2.8561530  72.5753620   0.0000000   0.0000000
##     1368 nm     1370 nm     1372 nm     1374 nm     1376 nm     1378 nm
##   0.0000000   0.0000000   0.0000000   0.0000000   0.0000000   0.0000000
##     1380 nm     1382 nm     1384 nm     1386 nm     1388 nm     1390 nm
##   0.0000000   0.0000000   0.0000000   0.0000000   0.0000000   0.0000000
##     1392 nm     1394 nm     1396 nm     1398 nm     1400 nm     1402 nm
##   0.0000000   0.0000000   0.0000000   0.0000000   0.0000000   0.0000000
##     1404 nm     1406 nm     1408 nm     1410 nm     1412 nm     1414 nm
##   0.0000000   0.0000000   0.0000000   0.0000000   0.0000000   0.0000000
##     1416 nm     1418 nm     1420 nm     1422 nm     1424 nm     1426 nm
##   0.0000000   0.0000000   0.0000000   0.0000000   0.0000000   0.0000000
##     1428 nm     1430 nm     1432 nm     1434 nm     1436 nm     1438 nm
##   0.0000000   0.0000000   0.0000000   0.0000000   0.0000000   0.0000000
##     1440 nm     1442 nm     1444 nm     1446 nm     1448 nm     1450 nm
##   0.0000000   0.0000000   0.0000000   0.0000000   0.0000000   0.0000000
##     1452 nm     1454 nm     1456 nm     1458 nm     1460 nm     1462 nm
##   0.0000000   0.0000000   0.0000000   0.0000000   0.0000000   0.0000000
##     1464 nm     1466 nm     1468 nm     1470 nm     1472 nm     1474 nm
##   0.0000000   0.0000000   0.0000000   0.0000000   0.0000000   0.0000000
##     1476 nm     1478 nm     1480 nm     1482 nm     1484 nm     1486 nm
##   0.0000000   0.0000000   0.0000000   0.0000000   0.0000000   0.0000000
##     1488 nm     1490 nm     1492 nm     1494 nm     1496 nm     1498 nm
##   0.0000000   0.0000000   0.0000000   0.0000000   0.0000000   0.0000000
##     1500 nm     1502 nm     1504 nm     1506 nm     1508 nm     1510 nm
##   0.0000000   0.0000000   0.0000000   0.0000000   0.0000000   0.0000000
##     1512 nm     1514 nm     1516 nm     1518 nm     1520 nm     1522 nm
##   0.0000000   0.0000000   0.0000000   0.0000000   0.0000000   0.0000000
##     1524 nm     1526 nm     1528 nm     1530 nm     1532 nm     1534 nm
##   0.0000000   0.0000000   0.0000000   0.0000000   0.0000000   0.0000000
##     1536 nm     1538 nm     1540 nm     1542 nm     1544 nm     1546 nm
##   0.0000000   0.0000000   0.0000000   0.0000000   0.0000000   0.0000000
##     1548 nm     1550 nm     1552 nm     1554 nm     1556 nm     1558 nm
##   0.0000000   0.0000000   0.0000000   0.0000000   0.0000000   0.0000000
##     1560 nm     1562 nm     1564 nm     1566 nm     1568 nm     1570 nm
##   0.0000000   0.0000000   0.0000000   0.0000000   0.0000000   0.0000000
##     1572 nm     1574 nm     1576 nm     1578 nm     1580 nm     1582 nm
##   0.0000000   0.0000000   0.0000000   0.0000000   0.0000000   0.0000000
##     1584 nm     1586 nm     1588 nm     1590 nm     1592 nm     1594 nm
##   0.0000000   0.0000000   0.0000000   0.0000000   0.0000000   0.0000000
##     1596 nm     1598 nm     1600 nm     1602 nm     1604 nm     1606 nm
##   0.0000000   0.0000000   0.0000000   0.0000000   0.0000000   0.0000000
##     1608 nm     1610 nm     1612 nm     1614 nm     1616 nm     1618 nm
##   0.0000000   0.0000000   0.0000000   0.0000000   0.0000000   0.0000000
##     1620 nm     1622 nm     1624 nm     1626 nm     1628 nm     1630 nm
##   0.0000000   0.0000000   0.0000000   0.0000000   0.0000000   0.0000000
##     1632 nm     1634 nm     1636 nm     1638 nm     1640 nm     1642 nm
##   0.0000000  -6.7811728  -4.8987665   0.0000000   0.0000000   0.0000000
##     1644 nm     1646 nm     1648 nm     1650 nm     1652 nm     1654 nm
```

```
##   0.0000000   0.0000000   0.0000000   0.0000000   0.0000000   0.0000000
##      1656 nm     1658 nm     1660 nm     1662 nm     1664 nm     1666 nm
##   0.0000000   0.0000000   0.0000000   0.0000000   0.0000000   0.0000000
##      1668 nm     1670 nm     1672 nm     1674 nm     1676 nm     1678 nm
##   0.0000000   0.0000000   0.0000000   0.0000000   0.0000000   0.0000000
##      1680 nm     1682 nm     1684 nm     1686 nm     1688 nm     1690 nm
##   0.0000000   0.0000000   0.0000000  -0.1074286   0.0000000  -1.0479162
##      1692 nm     1694 nm     1696 nm     1698 nm     1700 nm
##  -0.6456974   0.0000000   0.0000000   0.0000000   0.0000000
```

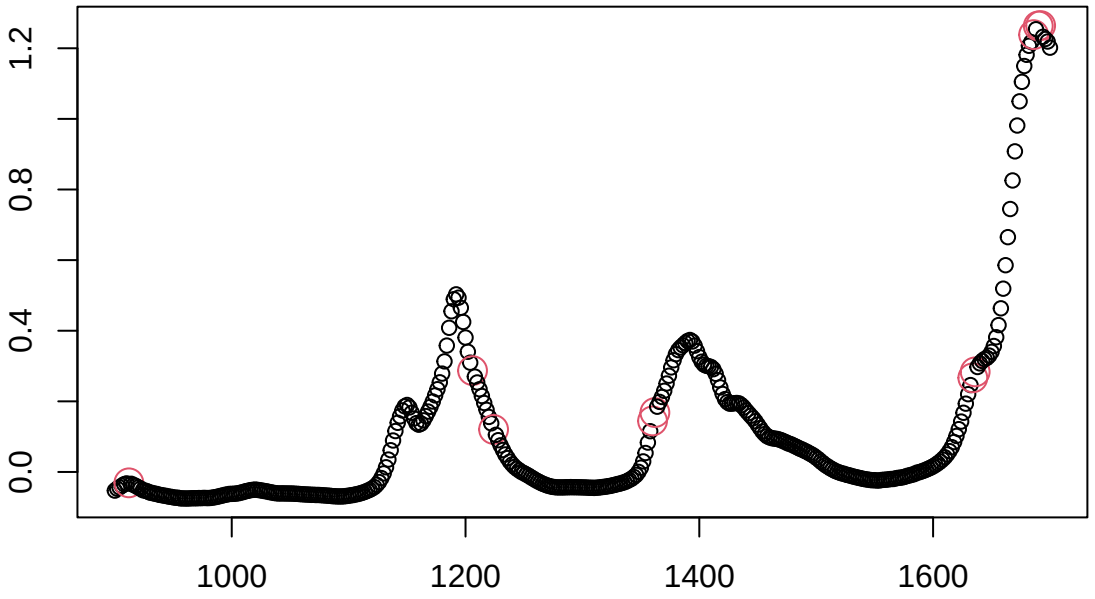
Les variables conservées sur les 401 initiales sont:

```
which(abs(model_lasso$beta[step_opt,])>0)
```

```
##  912 nm 1206 nm 1224 nm 1360 nm 1362 nm 1634 nm 1636 nm 1686 nm 1690 nm 1692 nm
##       7      154      163      231      232      368      369      394      396      397
```

On peut les représenter graphiquement

```
plot(seq(900,1700,2),colMeans(gasoline$NIR),col=(abs(model_lasso$beta[step_opt,])>0)+1,
     cex=(abs(model_lasso$beta[step_opt,])>0)+1,xlab="",ylab="")
```



Comparaison des méthodes

Comme les erreurs GCV et CV-MSE ne sont pas comparables directement, on va implémenter à la main une 10-fold CV pour comparer les différents modèles. Pour la PLS, nous utilisons la fonction pour la fonction *plsr* du package *pls* qui comporte une fonction perdict associé contrairement à la fonction *plsreg1* que l'on a utilisé jusqu'à maintenant.

Pour la régression PLS et PCR, nous gardons les 4 composants sélectionnées sur l'ensemble du data set. Idéalement, il faudrait choisir ce nombre de composantes au sein de chaque fold, mais comme nous l'avons fait visuellement ce n'est pas si simple que cela à implémenter. Pour Ridge et LASSO, nous sélectionnons le lambda au sein de chaque fold, comme fait plus faut. Enfin pour la sélection forward, là encore la sélection de variables est faite au sein de chaque fold

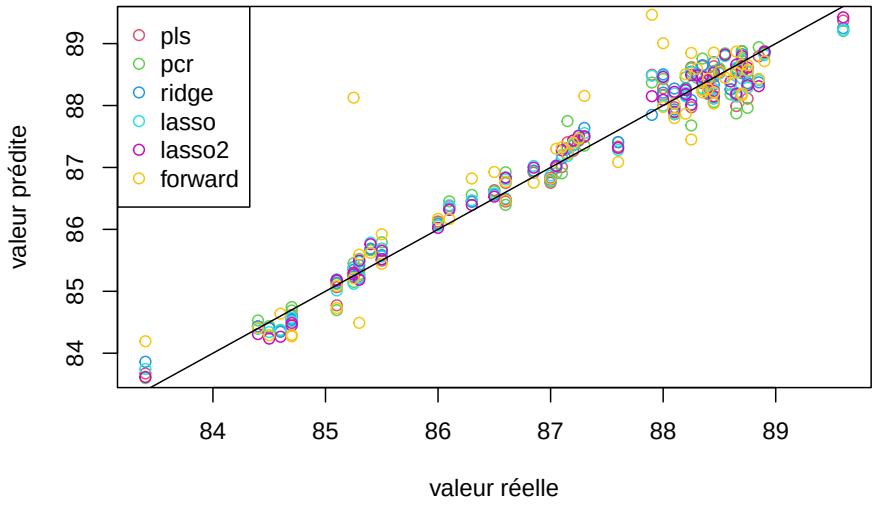
```
library('pls')
x=cbind(gasoline$NIR,gasoline$octane)
```

```
fold=sample(1:10,nrow(gasoline),replace=T)
pred=matrix(0,nrow(gasoline),6)
for (i in 1:10){
  # pls
  model_pls=plsr(octane~NIR,data=data.frame(gasoline[-which(fold==i),]),scale=T,ncomp=4)
  tmp=predict(model_pls,newdata=data.frame(gasoline[which(fold==i),]))
  pred[which(fold==i),1]=tmp[,,4]
  # pcr
  model_pcr=pcr(octane~NIR,data=data.frame(gasoline[-which(fold==i),]),scale=T,ncomp=4)
  tmp=predict(model_pcr,newdata=data.frame(gasoline[which(fold==i),]))
  pred[which(fold==i),2]=tmp[,,4]
  # ridge
  tmp <- lm.ridge(octane~NIR,data=data.frame(gasoline[-which(fold==i),]),lambda=seq(1,20,0.1))
  model_ridge <- lm.ridge(octane~NIR,data=data.frame(gasoline[-which(fold==i),]),
                          lambda=tmp$lambda[which.min(tmp$GCV)])
  tmp= scale(gasoline$NIR[which(fold==i),], center = model_ridge$xm,
             scale = model_ridge$scales) %*% model_ridge$coef + model_ridge$ym
  pred[which(fold==i),3]=tmp
  # lasso
  cv=cv.lars(gasoline$NIR[-which(fold==i),],gasoline$octane[-which(fold==i)], K = 10,
             trace=F, plot.it=F, se=T,type = c("lasso"),mode='step')
  tmp=which.min(cv$cv)
  step_opt=min(which(cv$cv < cv$cv[tmp]+cv$cv.error[tmp]))
  model_lasso=lars(gasoline$NIR[-which(fold==i),],gasoline$octane[-which(fold==i)],type="lasso",
                   trace=F,normalize=T)
  tmp=predict(model_lasso,gasoline$NIR[which(fold==i),],mode="step",s=step_opt)
  pred[which(fold==i),4]=tmp$fit
  # lasso 2 = regression linéaire sur les variables sélectionnées
  varindex=which((abs(model_lasso$beta[step_opt,])>0))
  data2=data.frame(octane=gasoline$octane[-which(fold==i)],NIRs=gasoline$NIR[-which(fold==i)
                                                                             ,varindex])
  newdata2=data.frame(octane=gasoline$octane[which(fold==i)],NIRs=gasoline$NIR[which(fold==i)
                                                                               ,varindex])
  model_lasso2=lm(octane~NIRs,data=data2)
  tmp=predict(model_lasso2,newdata2)
  pred[which(fold==i),5]=tmp
  # forward
  x=cbind(gasoline$NIR,gasoline$octane)
  data=data.frame(octane=x[,402],x[,1:401])
  min.model <- lm(octane ~ 1, data=data[-which(fold==i),])
  model1b <- step(min.model, direction = "forward", scope = (formuletmp),steps=40,trace = F)
  tmp=predict(model1b,data[which(fold==i),])
  pred[which(fold==i),6]=tmp
}
```

On peut représenter graphiquement les prédictions en fonctions des valeurs réelles, toutes sont très bonnes, si ce n'est la régression forward qui a tendance à faire de l'overfitting comme préssenti.

```
plot(gasoline$octane,pred[,1],col=2,xlab="valeur réelle",ylab="valeur prédite")
points(gasoline$octane,pred[,2],col=3)
points(gasoline$octane,pred[,3],col=4)
points(gasoline$octane,pred[,4],col=5)
points(gasoline$octane,pred[,5],col=6)
points(gasoline$octane,pred[,6],col=7)
```

```
abline(coef = c(0,1))
legend("topleft",legend=c('pls','pcr','ridge','lasso','lasso2','forward'),col=2:7,pch=1)
```



On peut calculer l'erreur quadratique moyenne, mais les trois méthodes sont très proches

```
colnames(pred)=c('pls','pcr','ridge','lasso','lasso2','forward')
colMeans((pred-gasoline$octane)^2)
```

```
##        pls        pcr      ridge      lasso     lasso2    forward
## 0.05295362 0.07997870 0.04656524 0.05109635 0.04289684 0.30783047
```