# MS BGD MDI 720 : Statistiques

#### François Portier et Joseph Salmon

http://josephsalmon.eu Télécom Paristech, Institut Mines-Télécom

#### **Sommaire**

#### Tests d'hypothèses

Définition

Test pour le modèle linéaire

#### Illustration: forward variable selection

base de données "diabetes"

#### Courbe ROC

Présentation

Exemples

#### **Sommaire**

#### Tests d'hypothèses Définition

Test pour le modèle linéaire

### Illustration: forward variable selection

base de données "diabetes"

#### Courbe ROC

Présentation

Exemples

## Tests d'hypothèses pour le "Pile ou face"

- On veut tester une hypothèse sur le paramètre  $\theta$ .
- On l'appelle hypothèse nulle  $\mathcal{H}_0$ Exemple : 'la pièce est non biaisée' :  $\mathcal{H}_0 = \{p = 0.5\}$ . Exemple : 'la pièce est peu biaisée',  $\mathcal{H}_0 = \{0.45 \le p \le 0.55\}$
- L'hypothèse alternative  $\mathcal{H}_1$  est (souvent) le contraire de  $\mathcal{H}_0$ . Exemple:  $\mathcal{H}_1 = \{p \neq 0.5\}$

Exemple:  $\mathcal{H}_1 = \{ p \notin [0.45, 0.55] \}$ 

 « Faire un test » : déterminer si les données permettent de rejeter l'hypothèse  $\mathcal{H}_0$ . On cherche une région R pour laquelle si  $(y_1,\ldots,y_n)\in R$  on rejette l'hypothèse  $\mathcal{H}_0$ . R est la région de **rejet**.

## Rejet ou acceptation?

#### Présomption d'innocence en faveur de $\mathcal{H}_0$

Même si  $\mathcal{H}_0$  n'est pas rejetée par le test, on ne peut en général pas conclure que  $\mathcal{H}_0$  est vraie!

Rejeter  $\mathcal{H}_1$  est souvent impossible car  $\mathcal{H}_1$  est trop générale. e.g.,  $\{p \in [0, 0.5[\cup]0.5, 1]\}$  ne peut pas être rejetée!

- $\mathcal{H}_0$  s'écrit sous la forme  $\{\theta \in \Theta_0\}$ , avec  $\Theta_0 \subset \Theta$
- $\mathcal{H}_1$  s'écrit sous la forme  $\{\theta \in \Theta_1\}$ , avec  $\Theta_1 \subset \Theta$

Rem:  $\{\theta \in \Theta_0\}$  et  $\{\theta \in \Theta_1\}$  sont disjoints.

## Risques de première et de seconde espèce

	$\mathcal{H}_0$	$\mathcal{H}_1$				
Non rejet de $\mathcal{H}_0$	Juste	Faux (acceptation à tort)				
Rejet de $\mathcal{H}_0$	Faux (rejet à tort)	Juste				

- Risque de  $1^{\text{re}}$  espèce : probabilité de rejeter à tord  $\alpha = \sup_{\theta \in \Theta_0} \mathbb{P}_{\theta}((y_1, \dots, y_n) \in R)$
- Risque de  $2^{\mathsf{nde}}$  espèce : probabilité d'accepter à tord  $\sup_{\theta \in \Theta_1} \mathbb{P}_{\theta} \left( (y_1, \dots, y_n) \notin R \right)$

## Niveau/Puissance

#### Niveau du test

 $1 - \alpha = \text{probabilit\'e d'} \cdot \text{accepter } \cdot \text{a raison (si } \mathcal{H}_0 \text{ est valide)}$ 

#### Puissance du test

 $1 - \beta = \text{probabilit\'e de rejeter } \mathcal{H}_0 \text{ à raison (si } \mathcal{H}_1 \text{ est valide)}$ 

En général, lorsqu'on parle de « test à 95% » on parle d'un test de niveau  $1-\alpha\geqslant 95\%$ .

## Statistique de test et région de rejet

#### Objectif classique : construire un test de niveau $1-\alpha$

- On cherche une fonction des données  $T_n(y_1, \ldots, y_n)$  dont on connaît la loi si  $\mathcal{H}_0$  est vraie :  $T_n$  est appelée statistique de test.
- On définit une région de rejet ou région critique de niveau  $\alpha$ , une région R telle que, sous  $\mathcal{H}_0$ ,

$$\mathbb{P}(T_n(y_1,\ldots,y_n)\in R)\leqslant \alpha$$

Règle de rejet de  $\mathcal{H}_0$  : on rejette si  $T_n(y_1,\ldots,y_n)\in R$ 

## Exemple gaussien : nullité de la moyenne

- Modèle :  $\Theta = \mathbb{R}$ ,  $\mathbb{P}_{\theta} = \mathcal{N}(\theta, 1)$ .
- Hypothèse nulle :  $\mathcal{H}_0$  :  $\{\theta = 0\}$
- Sous  $\mathcal{H}_0$ ,  $T_n(y_1,\ldots,y_n)=\frac{1}{\sqrt{n}}\sum_i y_i \sim \mathcal{N}(0,1)$
- Région critique pour  $T_n$ ? Quantiles gaussiens : sous  $H_0$ ,  $\mathbb{P}(T_n \in [-1.96, 1.96]) = 0.95$

On prend 
$$R = [-1.96, 1.96]^C = ]-\infty, -1.96[\cup]1.96, +\infty[.$$

**Exemple numérique** : si  $T_n=1.5$ , on ne rejette **PAS**  $\mathcal{H}_0$  au niveau 95%

#### **Sommaire**

#### Tests d'hypothèses

Définition

Test pour le modèle linéaire

Illustration : forward variable selection

Présentatio
Exemples

## Tester la nullité des coefficients (I)

<u>Rappel</u>: prenons  $X \in \mathbb{R}^{n \times p}$ , alors  $\hat{\sigma}^2 = \|\mathbf{y} - X\hat{\boldsymbol{\theta}}\|_2^2/(n - \operatorname{rg}(X))$  est un estimateur sans biais de la variance. Ainsi

Si 
$$\varepsilon \sim \mathcal{N}(0, \sigma^2 \operatorname{Id}_n)$$
, alors 
$$T_j = \frac{\hat{\theta}_j - \theta_j^*}{\hat{\sigma} \sqrt{(X^\top X)_{j,j}^{-1}}} \sim \mathcal{T}_{n-\operatorname{rg}(X)}$$

où  $\mathcal{T}_{n-\operatorname{rg}(X)}$  est une loi dite de Student (de degré  $n-\operatorname{rg}(X)$ ).

Sa densité, ses quantiles, etc... peuvent être calculés numériquement.

## Tester la nullité des coefficients (I)

 $H_0: \theta_j^* = 0$  ce qui revient à prendre  $\Theta_0 = \{ \boldsymbol{\theta} \in \mathbb{R}^p : \theta_j = 0 \}$ . Sous  $H_0$  on connaît donc la distribution de  $\hat{\theta}_j$ :

t-statiques: 
$$T_j := \frac{\hat{\theta}_j}{\hat{\sigma}\sqrt{(X^\top X)_{j,j}^{-1}}} \sim \mathcal{T}_{n-\operatorname{rg}(X)}$$

Ainsi en choisissant comme région de rejet  $[-t_{1-\alpha/2},t_{1-\alpha/2}]^c$  (en notant  $t_{1-\alpha/2}$  un quantile d'ordre  $1-\alpha/2$  de la loi  $\mathcal{T}_{n-\operatorname{rg}(X)}$ ), on peut former le test (de Student) :

$$\mathbb{1}_{\{|T_j|>t_{1-\alpha/2}\}}$$

c'est-à-dire que l'on rejette  $H_0$  au niveau lpha, si  $|T_j| > t_{1-lpha/2}$ 

cf. Tsybakov (2006) pour plus de détails

#### Lien IC et Test

Rappel (modèle gaussien) :

$$IC_{\alpha} := \left[\hat{\theta}_j - t_{1-\alpha/2}\hat{\sigma}\sqrt{(X^{\top}X)_{j,j}^{-1}}, \hat{\theta}_j + t_{1-\alpha/2}\hat{\sigma}\sqrt{(X^{\top}X)_{j,j}^{-1}}\right]$$

est un IC de niveau  $\alpha$  pour  $\theta_i^*$ . Dire que " $0 \in IC_{\alpha}$ " signifie que

$$|\hat{\theta}_j| \leqslant t_{1-\alpha/2} \hat{\sigma} \sqrt{(X^\top X)_{j,j}^{-1}} \quad \Leftrightarrow \quad \frac{|\hat{\theta}_j|}{\hat{\sigma} \sqrt{(X^\top X)_{j,j}^{-1}}} \leqslant t_{1-\alpha/2}$$

Cela est donc équivalent à accepter l'hypothèse  $\theta_j^*=0$  au niveau  $\alpha$ . Le  $\alpha$  le plus petit telle que  $0\in IC_{\alpha}$  est appelé la p-value.

Rem: On sait que si l'on prend  $\alpha$  très proche de zéro un  $IC_{\alpha}$  va recouvrir l'espace entier, on peut donc trouver (par continuité) un  $\alpha$  qui assure l'égalité dans les équations ci-dessus.

#### **Sommaire**

#### Tests d'hypothèses

Définition

Test pour le modèle linéaire

#### Illustration : forward variable selection

base de données "diabetes"

#### Courbe ROC

Présentation

Exemples

#### Base de données "diabetes"

	age	sex	bmi	bp	Serum measurements				Resp		
patient	x1	x2	×3	x4	x5	×6	x7	x8	x9	×10	у
1	59	2	32.1	101	157	93	38	4	4.9	87	151
2	48	1	21.6	87	183	103	70	3	3.9	69	75
441	36	1	30.0	95	201	125	42	5	5.1	85	220
442	36	1	19.6	71	250	133	97	3	4.6	92	57

n=442 patients diabétiques, p=10 variables "baseline" body mass index, bmi), average blood pressure (bp), etc. ont été mesurées. Objectif : prédire la progression de la maladie un an après les mesures baseline" [EHJT04]

- Chacunes des variables de la base de sklearn a été standardisée préalablement
- On applique une version peu couteuse de la méthode "forward variable selection" (voir par exemple [Zha09])

#### Base de données "diabetes"

• On définit le vecteur des covariables avec intercept  $\tilde{X} = (\mathbf{1}, \mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_{10}).$ 

#### Etape 0

ullet pour chacune des variables  $ilde{X}_k$ ,  $k=1,\ldots,11$ , on considère le modèle

$$\mathbf{y} \simeq \beta_k \mathbf{x}_k$$

on test si son coefficient de régression est nulle, i.e.,

$$H_0: \beta_k = 0$$

via la statistique  $\hat{\beta}_k/\hat{s}_k$  avec  $\hat{s}_k$  l'écart type estimé.

• on compare toutes les p-valeurs, on garde celle ayant la plus petite. On sauvegarde les résidus dans  $\mathbf{r}_0$ .

#### Base de données "diabetes"

#### Etape $\ell$

On a sélectionné  $\ell$  variable(s) :  $\tilde{X}^{(\ell)} \in \mathbb{R}^{\ell}$ . Les autres sont noté  $\tilde{X}^{(-\ell)} \in \mathbb{R}^{p-\ell}$ . On dispose du vecteur des résidus  $\mathbf{r}_{\ell-1}$  calculé à l'étape précédente.

- pour chacune des variables  $\mathbf{x}_k$ , dans  $\tilde{X}^{(-\ell)}$ , on considère le modèle

$$\epsilon_{\ell-1} \simeq \beta_k \mathbf{x}_k$$

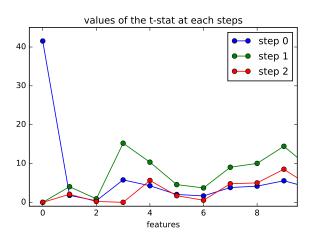
• on test si son coefficient de régression est nulle, i.e.,

$$H_0: \beta_k = 0$$

via la statistique  $\hat{\beta}_k/\hat{s}_k$  avec  $\hat{s}_k$  l'écart type estimé.

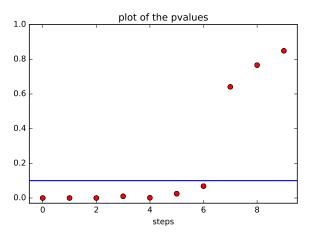
• on compare toutes les p-valeurs, on garde celle ayant la plus petite. On sauvegarde les résidus dans  $\mathbf{r}_{\ell}$ .

## Valeurs de la statistique de test à chaque étape



- ▶ la statistique d'une variable sélectionnée est mise à 0 aux étapes suivantes
- L'intercept est la première variable sélectionnée, ensuite  $x_3...$

## Valeurs de la statistique de test à chaque étape



variables sélectionnées lors d'un test de niveau .1 :

#### **Sommaire**

#### Tests d'hypothèses

Définition

Test pour le modèle linéaire

#### Illustration: forward variable selection

base de données "diabetes"

#### Courbe ROC

Présentation

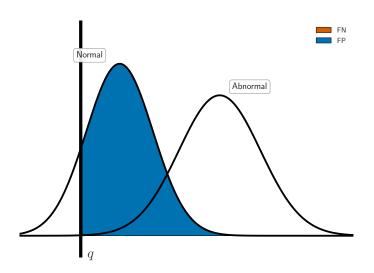
Exemples

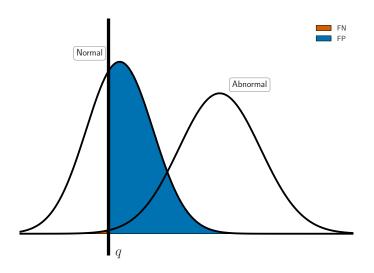
#### Contexte médical

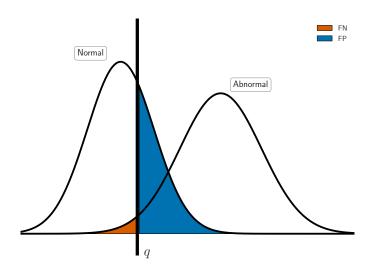
- Un groupe de patients  $i=1,\ldots,n$  est suivi pour un dépistage.
- Pour chaque individu, le test se base sur une variable aléatoire  $X_i \in \mathbb{R}$  et un seuil  $g \in \mathbb{R}$

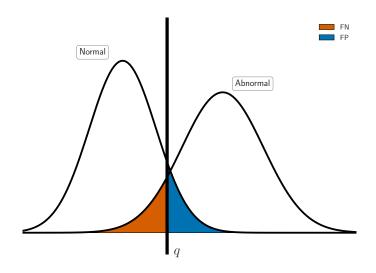
$$\begin{cases} \text{Si } X_i > q & \text{le test est positif} \\ \text{Sinon} & \text{le test est négatif} \end{cases}$$

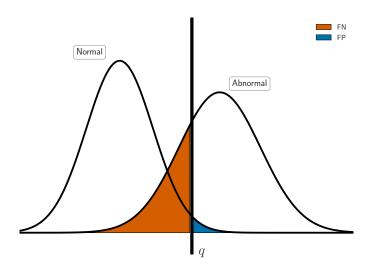
Ensemble des configurations possibles								
Normal $H_0$	Atteint $H_1$							
	ux négatif (FN)							
positif   faux positif (FP)	vrai positif							

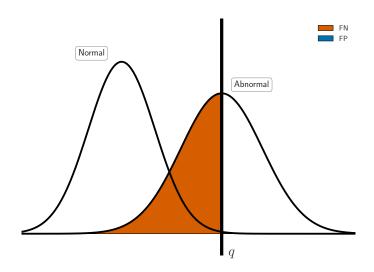


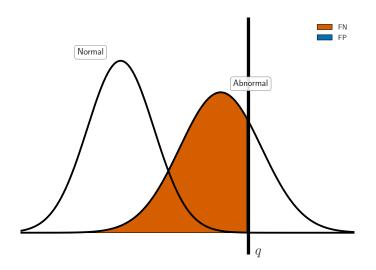


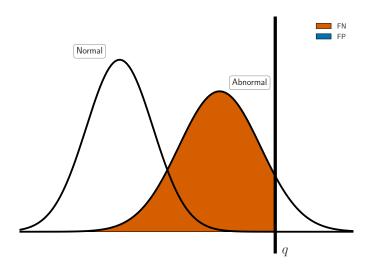


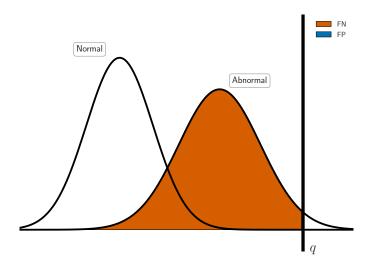












## Sensibilité - Spécificité

- $\,\blacktriangleright\,$  On suppose que les individus normaux ont la même fonction de répartition F

#### Définition

- Sensibilité :  $\mathrm{Se}(q) = 1 - G(q)$  (1- risque de  $2^{\mathrm{nde}}$  espèce)

• Spécificité : Sp(q) = F(q) (1- risque de 1<sup>re</sup> espèce)

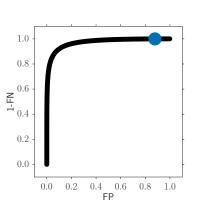
#### Courbe ROC

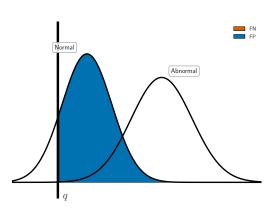
#### Définition

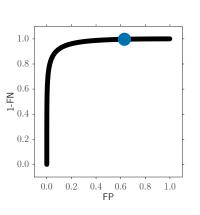
La courbe ROC est la courbe décrite par  $(1 - \operatorname{Sp}(q), \operatorname{Se}(q))$ , quand  $q \in \mathbb{R}$ . C'est donc la fonction  $[0,1] \to [0,1]$ 

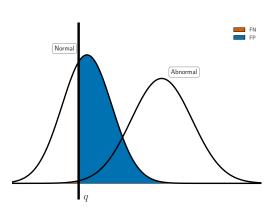
$$ROC(t) = 1 - G(F^{-}(1-t))$$

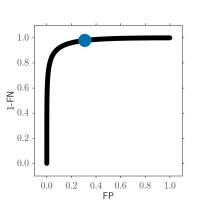
où 
$$F^{-}(1-t) = \inf\{x \in \mathbb{R} : F(x) \ge 1-t\}.$$

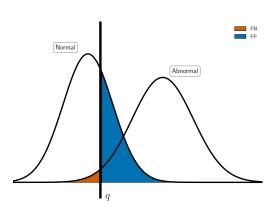


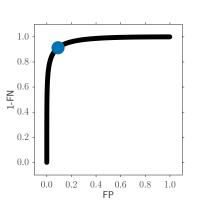


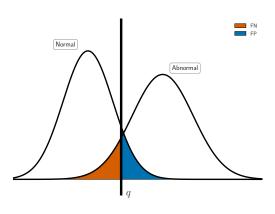


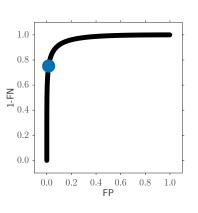


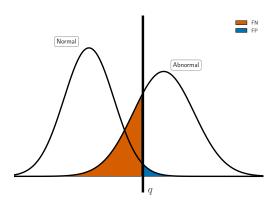


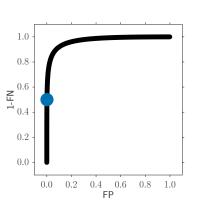


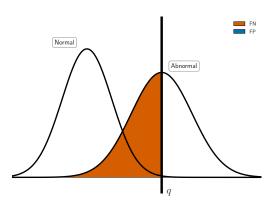


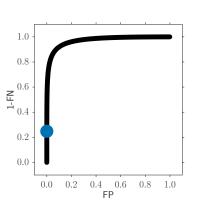


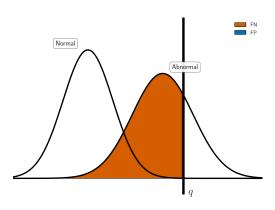


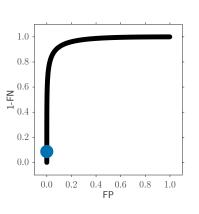


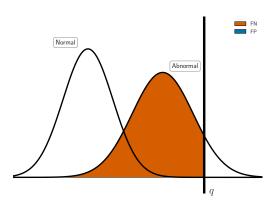


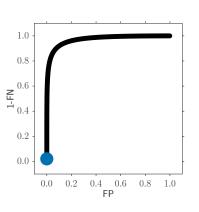


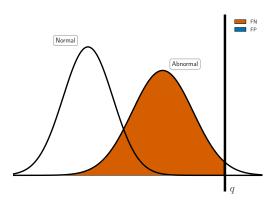












#### **Sommaire**

#### Tests d'hypothèses

Définition

Test pour le modèle linéaire

#### Illustration: forward variable selection

base de données ''diabetes''

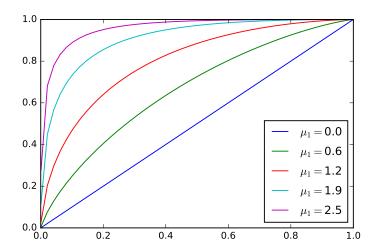
#### Courbe ROC

Présentation

Exemples

#### La courbe ROC dans le cas bi-normal

- ▶ F et G sont des gaussiennes de paramètres  $\mu_0, \sigma_0$  et  $\mu_1, \sigma_1$ , respectivement.
- On spécifie  $\mu_0=0$ ,  $\sigma_0=\sigma_1=1$ , on fait varier  $\mu_1$



### **Estimation**—application

#### Estimation de la courbe ROC

- Maximum de vraisemblance
- Non-paramétrique
- Bayésien avec variable d'état latente
- ► Estimation de l'aire sous la courbe ROC

#### **Application**

- Pour comparer différents tests statistiques
- ► Pour comparer différents algorithmes d'apprentissage supervisé
- ► Pour comparer des méthodes de sélection de support du Lasso

(**\*\***: ROC=Receiver Operating Characteristic)

#### Références I

B. Efron, T. Hastie, I. M. Johnstone, and R. Tibshirani.
 Least angle regression.

Ann. Statist., 32(2):407–499, 2004. With discussion, and a rejoinder by the authors.

A. B. Tsybakov.

Statistique appliquée, 2006.

http://josephsalmon.eu/enseignement/ENSAE/
StatAppli\_tsybakov.pdf.

Tong Zhang.
 Adaptive forward-backward greedy algorithm for sparse learning with linear models.

In Advances in Neural Information Processing Systems, pages 1921–1928, 2009.