

# Ridge

**Nicolas Verzelen, Joseph Salmon**

INRA / Université de Montpellier



# Plan

## Définitions de l'estimateur Ridge

- Point de vue par SVD

- Point de vue par pénalisation

Choix du paramètre de régularisation

Algorithmes et aspects computationnels

# Rappel

$$\mathbf{y} = X\boldsymbol{\beta}^* + \boldsymbol{\varepsilon}$$

- ▶  $\mathbf{y} \in \mathbb{R}^n$  est le vecteur des observations
- ▶  $X \in \mathbb{R}^{n \times p}$  est la matrice des variables explicatives
- ▶  $\boldsymbol{\beta}^* \in \mathbb{R}^p$  est le **vrai** paramètre du modèle que l'on veut retrouver.
- ▶  $\boldsymbol{\varepsilon} \in \mathbb{R}^n$  est le bruit

Rem: possiblement une variable supplémentaire pour la constante

# La décomposition en valeur singulières

## Théorème : Golub et Van Loan (2013)

Pour toute matrice  $X \in \mathbb{R}^{n \times p}$ , il existe deux matrices orthogonales  $U = [\mathbf{u}_1, \dots, \mathbf{u}_n] \in \mathbb{R}^{n \times n}$  et  $V = [\mathbf{v}_1, \dots, \mathbf{v}_p] \in \mathbb{R}^{p \times p}$ , telles que

$$U^\top X V = \text{diag}(s_1, \dots, s_{\text{rg}(X)}) = \Sigma \in \mathbb{R}^{n \times p}$$

avec  $s_1 \geq s_2 \geq \dots \geq s_{\text{rg}(X)} > 0$ , avec  $\text{rg}(X) = \text{rang}(X)$ .

$$X = U \Sigma V^\top \Leftrightarrow X = \sum_{i=1}^{\text{rg}(X)} s_i \mathbf{u}_i \mathbf{v}_i^\top$$

**Une** solution des moindres carrés est alors :

$$\hat{\beta}^{\text{MCO}} = X^+ \mathbf{y} = \sum_{i=1}^{\text{rg}(X)} \frac{1}{s_i} \mathbf{v}_i \mathbf{u}_i^\top \mathbf{y}$$

## Retour sur les problèmes numériques

$$\hat{\beta}^{\text{MCO}} = X^+ \mathbf{y} = \sum_{i=1}^{\text{rg}(X)} \frac{1}{s_i} \mathbf{v}_i \mathbf{u}_i^\top \mathbf{y}$$

Si les plus petites valeurs singulières  $s_i$  s'approchent de zéro alors la solution numérique de la SVD n'est pas stable !

Rem: le défaut n'est pas propre aux moindres carrés, mais inhérent aux problèmes difficiles (on dit aussi “mal posé” en analyse numérique et en traitement du signal)

# Les équations normales

Une solution  $\beta$  des moindres carrés doit vérifier :

$$X^{\top} X \beta = X^{\top} \mathbf{y} \Leftrightarrow V \Sigma^{\top} \Sigma V^{\top} \beta = V \Sigma^{\top} U^{\top} \mathbf{y}$$

et si l'on fait le changement de variable  $\tilde{\beta} = V \beta$ , c'est équivalent à

$$\Sigma^{\top} \Sigma \tilde{\beta} = \Sigma^{\top} U^{\top} \mathbf{y}$$

$\Sigma^{\top} \Sigma$  diagonale avec  $r = \text{rang}(X)$  éléments non nuls qui sont les  $s_i^2$

$$\Sigma^{\top} \Sigma = \left[ \begin{array}{cc|c} s_1^2 & & 0 \\ & \ddots & \\ 0 & & s_r^2 \\ \hline & 0 & \end{array} \right] \in \mathbb{R}^{p \times p}$$

## Les équations normales (suite)

Alternative régularisée : résoudre les équations normales

$$\left[ \begin{array}{ccc|c} s_1^2 & & 0 & 0 \\ & \ddots & & \\ 0 & & s_r^2 & 0 \\ \hline & 0 & & 0 \end{array} \right] \text{ remplacé par } \left[ \begin{array}{ccc|c} s_1^2 & & 0 & 0 \\ & \ddots & & \\ 0 & & s_r^2 & 0 \\ \hline & 0 & & 0 \end{array} \right] + \lambda \text{Id}_p$$

De manière synthétique cela s'écrit :  $(\lambda \text{Id}_p + \Sigma^\top \Sigma) \tilde{\beta} = \Sigma^\top U^\top \mathbf{y}$

*i.e.*, on ajoute à toutes les valeurs propres de  $X^\top X$  un terme  $\lambda > 0$  “petit”,  $\lambda$  est nommé **paramètre de régularisation**

$$\tilde{\beta} = (\lambda \text{Id}_p + \Sigma^\top \Sigma)^{-1} \Sigma^\top U^\top \mathbf{y}$$

et donc

$$\beta = V(\lambda \text{Id}_p + \Sigma^\top \Sigma)^{-1} \Sigma^\top U^\top \mathbf{y}$$

## Ridge forme explicite

Avec la SVD, l'équation suivante se simplifie :

$$\beta = V(\lambda \text{Id}_p + \Sigma^\top \Sigma)^{-1} \Sigma^\top U^\top \mathbf{y}$$

Cela donne une première forme de l'estimateur *Ridge*

$$\hat{\beta}_\lambda^{\text{rdg}} = (\lambda \text{Id}_p + X^\top X)^{-1} X^\top \mathbf{y}$$


Rappel : sous l'hypothèse de plein rang  $\hat{\beta}^{\text{MCO}} = (X^\top X)^{-1} X^\top \mathbf{y}$

Rem:

$$\lim_{\lambda \rightarrow 0^+} \hat{\beta}_\lambda^{\text{rdg}} = \hat{\beta}^{\text{MCO}}$$
$$\lim_{\lambda \rightarrow +\infty} \hat{\beta}_\lambda^{\text{rdg}} = 0 \in \mathbb{R}^p$$



## Astuce du noyau

*Astuce du noyau* ( : *Kernel trick*) : Selon si  $n > p$  ou  $n \leq p$ , une méthode qui cherche à trouver une solution de Ridge par inversion peut préférer l'une des deux formulations suivantes :

$$X^{\top}(XX^{\top} + \lambda \text{Id}_n)^{-1}\mathbf{y} = (X^{\top}X + \lambda \text{Id}_p)^{-1}X^{\top}\mathbf{y}$$

- ▶ membre de gauche : on résout un système  $n \times n$
- ▶ membre de droite : on résout un système  $p \times p$

Rem: cette propriété est aussi très utile pour les méthodes à noyaux de type SVM

---

**Exercise:** Démontrer la propriété précédente avec la SVD

---

## Ridge / Tikhonov : la définition pénalisée

$$\hat{\beta}_{\lambda}^{\text{rdg}} = \arg \min_{\beta \in \mathbb{R}^p} \left( \underbrace{\|\mathbf{y} - X\beta\|_2^2}_{\text{attache aux données}} + \underbrace{\lambda \|\beta\|_2^2}_{\text{régularisation}} \right)$$

- Noter que l'estimateur *Ridge* est **unique** pour un  $\lambda$  fixé
- On retrouve de nouveau les cas limites :

$$\lim_{\lambda \rightarrow 0} \hat{\beta}_{\lambda}^{\text{rdg}} = \hat{\beta}^{\text{MCO}} \text{ (solution de norme } \|\cdot\|_2 \text{ minimale)}$$

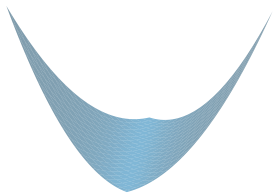
$$\lim_{\lambda \rightarrow +\infty} \hat{\beta}_{\lambda}^{\text{rdg}} = 0 \in \mathbb{R}^p$$

- Lien des deux formulations par les CNO : pour

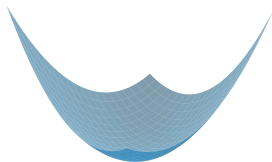
$$f(\beta) = \frac{\|\mathbf{y} - X\beta\|_2^2}{2} + \frac{\lambda \|\beta\|_2^2}{2}$$

$$\nabla f(\beta) = X^{\top}(X\beta - \mathbf{y}) + \lambda\beta = 0 \Leftrightarrow (X^{\top}X + \lambda \text{Id}_p)\beta = X^{\top}\mathbf{y}$$

# Motivation



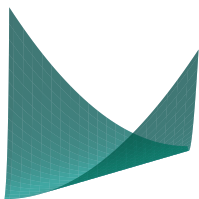
OLS



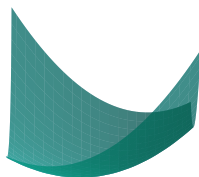
Ridge

Régulariser : simplifie le problème quand il est mal conditionné

# Motivation



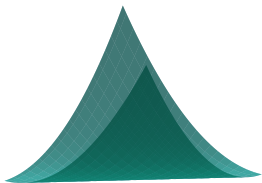
OLS



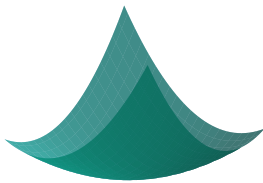
Ridge

Régulariser : simplifie le problème quand il est mal conditionné

# Motivation



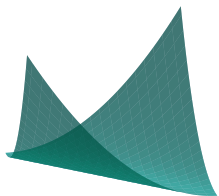
OLS



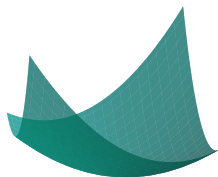
Ridge

Régulariser : simplifie le problème quand il est mal conditionné

# Motivation



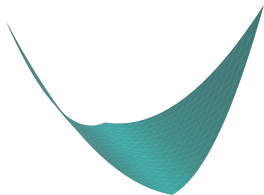
OLS



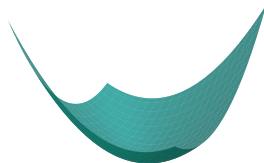
Ridge

Régulariser : simplifie le problème quand il est mal conditionné

# Motivation



OLS



Ridge

Régulariser : simplifie le problème quand il est mal conditionné

# Interprétation contrainte

Un problème de la forme “Lagrangienne” suivante :

$$\arg \min_{\beta \in \mathbb{R}^p} \left( \underbrace{\frac{1}{2} \|\mathbf{y} - X\beta\|_2^2}_{\text{attache aux données}} + \underbrace{\frac{\lambda}{2} \|\beta\|_2^2}_{\text{régularisation}} \right)$$

admet pour un certain  $T > 0$  la même solution que :

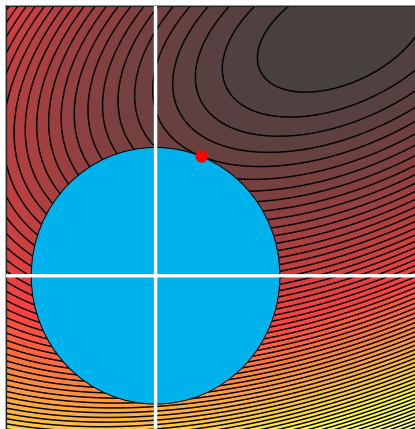
$$\begin{cases} \arg \min_{\beta \in \mathbb{R}^p} \|\mathbf{y} - X\beta\|_2^2 \\ \text{t.q. } \|\beta\|_2^2 \leq T \end{cases}$$

Rem: le lien  $T \leftrightarrow \lambda$  n'est pas explicite !

- ▶ Si  $T \rightarrow 0$  on retrouve le vecteur nul :  $0 \in \mathbb{R}^p$
- ▶ Si  $T \rightarrow \infty$  on retrouve  $\hat{\beta}^{\text{MCO}}$  (non contraint)



# Lignes de niveau et ensemble de contraintes



Optimisation sous contraintes  $\ell_2$

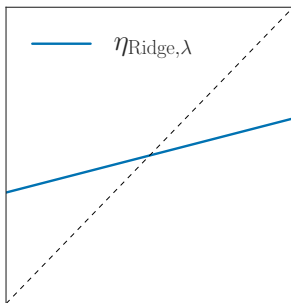
## Le cas orthogonal

Retour sur un cas simple  $X^\top X = X X^\top = \text{Id}_p$

$$\hat{\beta}_\lambda^{\text{rdg}} = (\lambda \text{Id}_p + X^\top X)^{-1} X^\top \mathbf{y}$$

$$\hat{\beta}_\lambda^{\text{rdg}} = (\lambda \text{Id}_p + \text{Id}_p)^{-1} X^\top \mathbf{y} = \frac{1}{\lambda + 1} X^\top \mathbf{y}$$

$$\hat{\mathbf{y}} = X \hat{\beta}_\lambda^{\text{rdg}} = \frac{1}{\lambda + 1} \mathbf{y} = (\eta_{\text{rdg}, \lambda}(\mathbf{y}_i))_{i=1, \dots, n}$$



Rem: cas classique en traitement du signal (peu fréquent en statistique)

Rem: la fonction réelle  $\eta_{\text{rdg}, \lambda}$  est une contraction linéaire (🇬🇧 : *shrinkage*)

## Prédiction associée


Partant du coefficient *Ridge* :

$$\hat{\beta}_{\lambda}^{\text{rdg}} = (\lambda \text{Id}_p + X^{\top} X)^{-1} X^{\top} \mathbf{y}$$

la prédiction associée s'obtient ainsi :

$$\hat{\mathbf{y}} = X \hat{\beta}_{\lambda}^{\text{rdg}} = X(\lambda \text{Id}_p + X^{\top} X)^{-1} X^{\top} \mathbf{y}$$

Rem: l'estimateur  $\hat{\mathbf{y}}$  est toujours linéaire en  $\mathbf{y}$

Rem: l'équivalent de la matrice chapeau ( : *hat matrix*) est


$$H_{\lambda} = X(\lambda \text{Id}_p + X^{\top} X)^{-1} X^{\top} = \sum_{j=1}^{\text{rg}(X)} \frac{s_j^2}{s_j^2 + \lambda} \mathbf{u}_j \mathbf{u}_j^{\top}$$

Attention : si  $\lambda \neq 0$ , on n'a plus  $H_{\lambda}^2 = H_{\lambda} = \sum_{j=1}^{\text{rg}(X)} \mathbf{u}_j \mathbf{u}_j^{\top}$ , i.e.,  $H_{\lambda}$

n'est donc pas un projecteur

## Point normalisation et centrage

Rappel : normaliser les  $p$  variables de la même manière pour que la pénalisation contraigne de manière similaire toutes les variables

- ▶ centrer l'observation et les variables explicatives  $\Rightarrow$  pas de coefficient pour la variable constante (donc pas de contrainte)
- ▶ ne pas centrer les variables explicatives  $\Rightarrow$  ne pas mettre de contrainte sur la variable constante ( : *bias/intercept*),

$$\hat{\beta}_{\lambda}^{\text{rdg}} = \arg \min_{\beta \in \mathbb{R}^p} \|\mathbf{y} - X\beta - \beta_0 \mathbf{1}_n\|^2 + \lambda \sum_{j=1}^p \beta_j^2$$

Alternative (si l'on n'a pas normalisé) : changer la pénalité en

$$\arg \min_{\beta \in \mathbb{R}^p} \|\mathbf{y} - X\beta\|^2 + \lambda \sum_{j=1}^p \alpha_j \beta_j^2 \quad (\text{e.g., } \alpha_j = \|\mathbf{x}_j\|^2)$$

Rem: pour la validation croisée on utilisera plus naturellement  $\frac{\|\mathbf{y} - X\beta\|^2}{2n}$  que  $\frac{\|\mathbf{y} - X\beta\|^2}{2}$  pour conserver l'amplitude de  $\lambda$

## Point normalisation et centrage (bis)

Ici  $X = [\frac{1_{a_1}}{\sqrt{n_1}}, \dots, \frac{1_{a_K}}{\sqrt{n_K}}]$  ( $\mathbf{x}_k = \frac{1_{a_j}}{\sqrt{n_k}}, i.e., \text{on } \cdot$ ), avec

$$\hat{\mu}_k = \frac{1}{n_k} \sum_{x_i=a_k} y_i \text{ et } n_k = \#\{x_i = a_k\}$$

L'estimateur Ridge (sans pénalité sur la constante) est solution de

$$(\hat{\beta}_0, \hat{\beta}_1, \dots, \hat{\beta}_K)^\top = (\hat{\beta}_0, \tilde{\boldsymbol{\beta}})^\top \in \arg \min_{\beta_0, \dots, \beta_p} f(\beta_0, \dots, \beta_p)$$

$$\text{avec } f(\beta_0, \dots, \beta_K) = \left\| \mathbf{y} - \beta_0 \mathbf{1}_n - \sum_{j=1}^K \beta_j \mathbf{x}_j \right\|^2 + \lambda \sum_{j=1}^K \beta_j^2$$

Partant de  $X^\top X = \text{Id}_K$  et  $X^\top \mathbf{y} = (\sqrt{n_1} \hat{\mu}_1, \dots, \sqrt{n_K} \hat{\mu}_K)$ , on a :

$$\tilde{\boldsymbol{\beta}} = (X^\top X + \lambda \text{Id}_K)^{-1} X^\top (\mathbf{y} - \hat{\beta}_0 \mathbf{1}_n) = \frac{1}{1 + \lambda} \begin{pmatrix} \sqrt{n_1}(\hat{\mu}_1 - \hat{\beta}_0) \\ \vdots \\ \sqrt{n_K}(\hat{\mu}_K - \hat{\beta}_0) \end{pmatrix}$$

## Suite

$$\text{CNO de Ridge : } \begin{cases} \hat{\beta}_0 = \frac{1}{n} \langle \mathbf{1}_n, \mathbf{y} - X\tilde{\beta} \rangle & (1) \\ \tilde{\beta} = \frac{1}{\lambda} X^\top (\mathbf{y} - X\tilde{\beta} - \mathbf{1}_n \hat{\beta}_0) & (2) \end{cases}$$

Avec  $e = (\sqrt{n_1}, \dots, \sqrt{n_K})$ , alors  $Xe = \mathbf{1}_n$  et  $\mathbf{1}_n^\top X = e^\top$ . Avec (2)

$$\langle e, \tilde{\beta} \rangle = \frac{1}{1+\lambda} e^\top X^\top (\mathbf{y} - \mathbf{1}_n \hat{\beta}_0 - X\tilde{\beta}) = \frac{1}{1+\lambda} \mathbf{1}_n^\top (\mathbf{y} - X\tilde{\beta} - \mathbf{1}_n \hat{\beta}_0)$$
$$\langle e, \tilde{\beta} \rangle = \frac{1}{1+\lambda} (n\hat{\beta}_0 - n\hat{\beta}_0) = 0$$

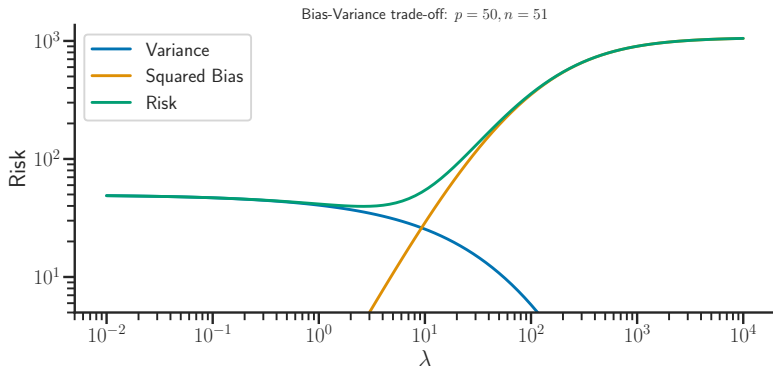
Avec (1) on déduit que :  $\hat{\beta}_0 = \bar{y}_n$  puis que pour une nouvelle observation  $x_{n+1} = a_k$  on a :

$$y_{n+1} = \frac{1}{1+\lambda} (\lambda \bar{y}_n + \hat{\mu}_k)$$

Rem:  $\lambda$  permet d'osciller entre le prédicateur globale ( $\bar{y}_n$ , si  $\lambda = +\infty$ ) et le prédicateur par modalité ( $\hat{\mu}_k$ , si  $\lambda = 0$ )

Rem: si l'on ne prend pas en compte la constante,  $y_{n+1} = \frac{1}{1+\lambda} \hat{\mu}_k$ , et donc pour  $\lambda$  grand on prédit 0!!!

# Biais / Variance : exemple de simulation



$$X \in \mathbb{R}^{50 \times 51}, \beta^* = (2, 2, 2, 2, 2, 0, \dots, 0)^\top$$

# Plan

Définitions de l'estimateur Ridge

Choix du paramètre de régularisation

Notion de chemin de régularisation

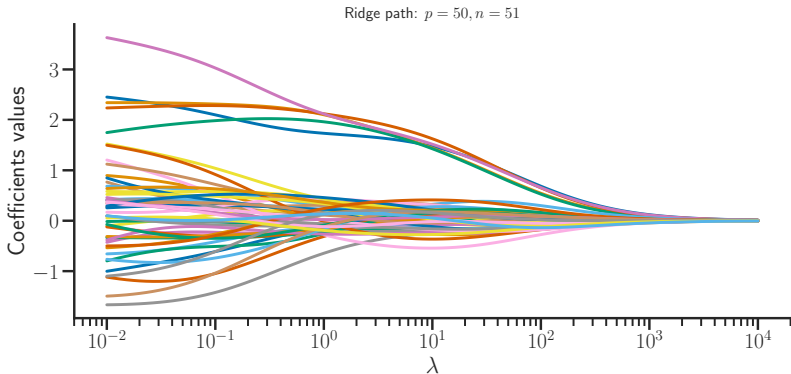
Validation Croisée (CV)

Algorithmes et aspects computationnels



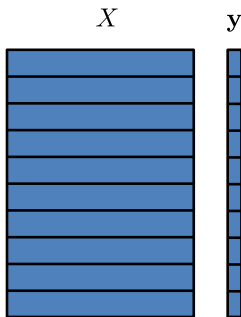
# Choix de $\lambda$

```
n_features = 50; n_samples = 51
X = np.random.randn(n_samples, n_features)
beta_true = np.zeros([n_features, ])
beta_true[0:5] = 2.
y_true = np.dot(X, beta_true)
y = y_true + 1. * np.random.rand(n_samples,)
```



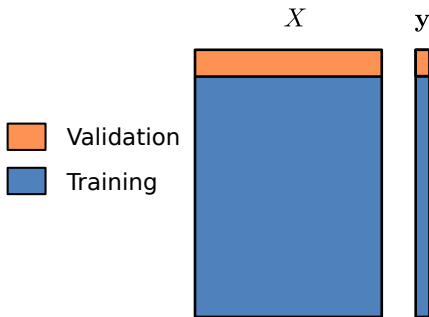
## Validation croisée $K$ -fold ( $K = 10$ )

- ▶ Choisir une grille de taille  $r$  de  $\lambda$  à tester :  $\lambda_1, \dots, \lambda_r$
- ▶ Diviser  $(X, y)$  selon les observations en  $K$  blocs (🇬🇧 : *fold*) :



## Validation croisée $K$ -fold ( $K = 10$ )

- ▶ Choisir une grille de taille  $r$  de  $\lambda$  à tester :  $\lambda_1, \dots, \lambda_r$
- ▶ Diviser  $(X, y)$  selon les observations en  $K$  blocs (🇬🇧 : *fold*) :

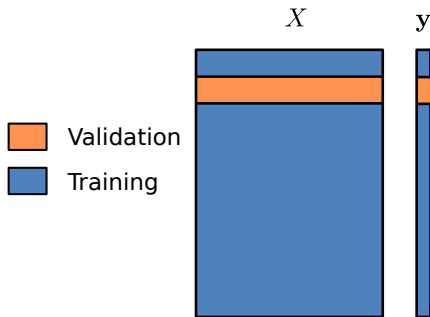


$k = 1$

1. Calculer avec les données d'entraînement les estimateurs pour  $\lambda_1, \dots, \lambda_r$  :  $\hat{\beta}^{\lambda_1}, \dots, \hat{\beta}^{\lambda_r}$
2. Calculer les erreurs de prédiction  $\text{Error}_1^k, \dots, \text{Error}_r^k$  sur l'ensemble de validation,

## Validation croisée $K$ -fold ( $K = 10$ )

- ▶ Choisir une grille de taille  $r$  de  $\lambda$  à tester :  $\lambda_1, \dots, \lambda_r$
- ▶ Diviser  $(X, y)$  selon les observations en  $K$  blocs (🇬🇧 : *fold*) :

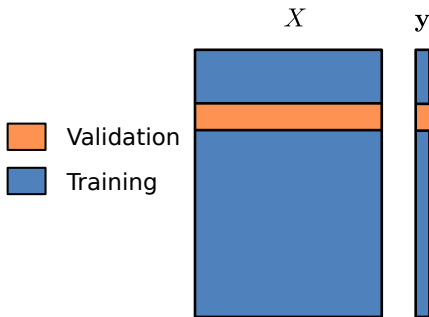


$k = 2$

1. Calculer avec les données d'entraînement les estimateurs pour  $\lambda_1, \dots, \lambda_r$  :  $\hat{\beta}^{\lambda_1}, \dots, \hat{\beta}^{\lambda_r}$
2. Calculer les erreurs de prédiction  $\text{Error}_1^k, \dots, \text{Error}_r^k$  sur l'ensemble de validation,

## Validation croisée $K$ -fold ( $K = 10$ )

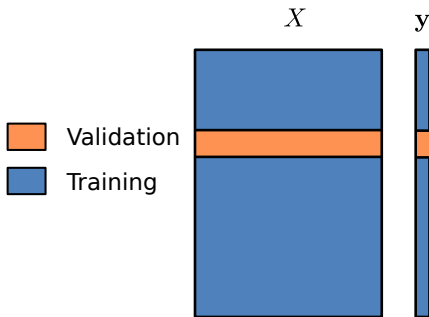
- ▶ Choisir une grille de taille  $r$  de  $\lambda$  à tester :  $\lambda_1, \dots, \lambda_r$
- ▶ Diviser  $(X, y)$  selon les observations en  $K$  blocs (🇬🇧 : *fold*) :



- $k = 3$
1. Calculer avec les données d'entraînement les estimateurs pour  $\lambda_1, \dots, \lambda_r$  :  $\hat{\beta}^{\lambda_1}, \dots, \hat{\beta}^{\lambda_r}$
  2. Calculer les erreurs de prédiction  $\text{Error}_1^k, \dots, \text{Error}_r^k$  sur l'ensemble de validation,

## Validation croisée $K$ -fold ( $K = 10$ )

- ▶ Choisir une grille de taille  $r$  de  $\lambda$  à tester :  $\lambda_1, \dots, \lambda_r$
- ▶ Diviser  $(X, y)$  selon les observations en  $K$  blocs (🇬🇧 : *fold*) :

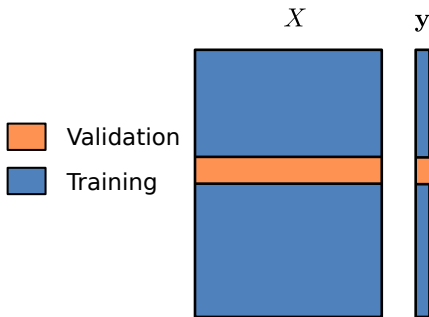


$k = 4$

1. Calculer avec les données d'entraînement les estimateurs pour  $\lambda_1, \dots, \lambda_r$  :  $\hat{\beta}^{\lambda_1}, \dots, \hat{\beta}^{\lambda_r}$
2. Calculer les erreurs de prédiction  $\text{Error}_1^k, \dots, \text{Error}_r^k$  sur l'ensemble de validation,

## Validation croisée $K$ -fold ( $K = 10$ )

- ▶ Choisir une grille de taille  $r$  de  $\lambda$  à tester :  $\lambda_1, \dots, \lambda_r$
- ▶ Diviser  $(X, y)$  selon les observations en  $K$  blocs (🇬🇧 : *fold*) :

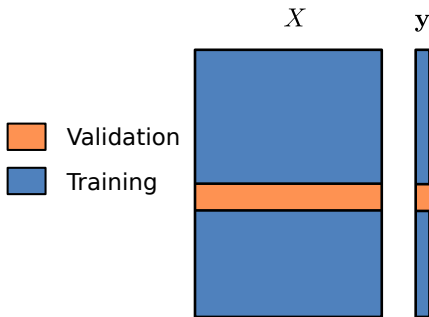


$k = 5$

1. Calculer avec les données d'entraînement les estimateurs pour  $\lambda_1, \dots, \lambda_r$  :  $\hat{\beta}^{\lambda_1}, \dots, \hat{\beta}^{\lambda_r}$
2. Calculer les erreurs de prédiction  $\text{Error}_1^k, \dots, \text{Error}_r^k$  sur l'ensemble de validation,

## Validation croisée $K$ -fold ( $K = 10$ )

- ▶ Choisir une grille de taille  $r$  de  $\lambda$  à tester :  $\lambda_1, \dots, \lambda_r$
- ▶ Diviser  $(X, y)$  selon les observations en  $K$  blocs (🇬🇧 : *fold*) :



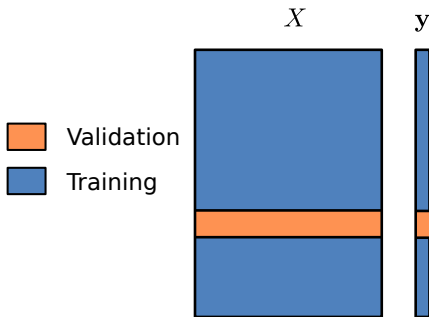
$k = 6$

1. Calculer avec les données d'entraînement les estimateurs pour  $\lambda_1, \dots, \lambda_r$  :  $\hat{\beta}^{\lambda_1}, \dots, \hat{\beta}^{\lambda_r}$
2. Calculer les erreurs de prédiction  $\text{Error}_1^k, \dots, \text{Error}_r^k$  sur l'ensemble de validation,



## Validation croisée $K$ -fold ( $K = 10$ )

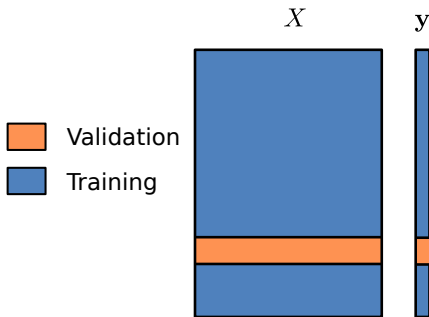
- ▶ Choisir une grille de taille  $r$  de  $\lambda$  à tester :  $\lambda_1, \dots, \lambda_r$
- ▶ Diviser  $(X, y)$  selon les observations en  $K$  blocs (🇬🇧 : *fold*) :



1. Calculer avec les données d'entraînement les estimateurs pour  $\lambda_1, \dots, \lambda_r$  :  $\hat{\beta}^{\lambda_1}, \dots, \hat{\beta}^{\lambda_r}$
2. Calculer les erreurs de prédiction  $\text{Error}_1^k, \dots, \text{Error}_r^k$  sur l'ensemble de validation,

## Validation croisée $K$ -fold ( $K = 10$ )

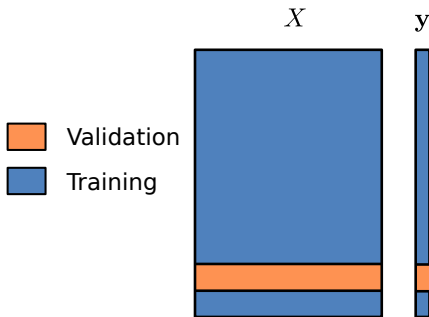
- ▶ Choisir une grille de taille  $r$  de  $\lambda$  à tester :  $\lambda_1, \dots, \lambda_r$
- ▶ Diviser  $(X, y)$  selon les observations en  $K$  blocs (🇬🇧 : *fold*) :



1. Calculer avec les données d'entraînement les estimateurs pour  $\lambda_1, \dots, \lambda_r$  :  $\hat{\beta}^{\lambda_1}, \dots, \hat{\beta}^{\lambda_r}$
2. Calculer les erreurs de prédiction  $\text{Error}_1^k, \dots, \text{Error}_r^k$  sur l'ensemble de validation,

## Validation croisée $K$ -fold ( $K = 10$ )

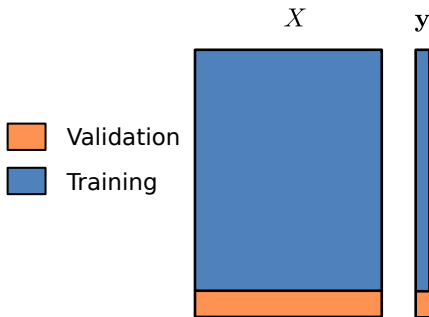
- ▶ Choisir une grille de taille  $r$  de  $\lambda$  à tester :  $\lambda_1, \dots, \lambda_r$
- ▶ Diviser  $(X, y)$  selon les observations en  $K$  blocs (🇬🇧 : *fold*) :



- $k = 9$
1. Calculer avec les données d'entraînement les estimateurs pour  $\lambda_1, \dots, \lambda_r$  :  $\hat{\beta}^{\lambda_1}, \dots, \hat{\beta}^{\lambda_r}$
  2. Calculer les erreurs de prédiction  $\text{Error}_1^k, \dots, \text{Error}_r^k$  sur l'ensemble de validation,

## Validation croisée $K$ -fold ( $K = 10$ )

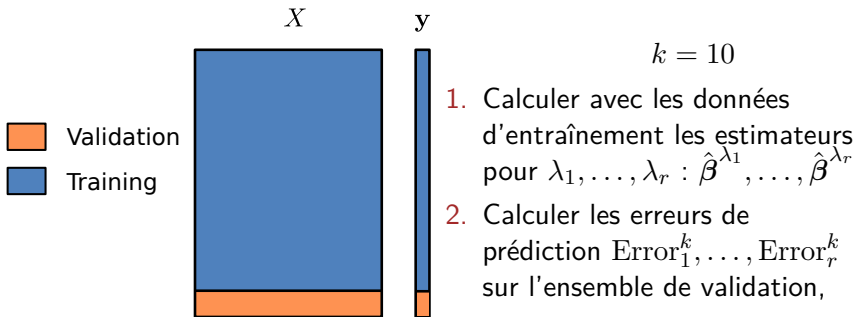
- ▶ Choisir une grille de taille  $r$  de  $\lambda$  à tester :  $\lambda_1, \dots, \lambda_r$
- ▶ Diviser  $(X, y)$  selon les observations en  $K$  blocs (🇬🇧 : *fold*) :



1. Calculer avec les données d'entraînement les estimateurs pour  $\lambda_1, \dots, \lambda_r$  :  $\hat{\beta}^{\lambda_1}, \dots, \hat{\beta}^{\lambda_r}$
2. Calculer les erreurs de prédiction  $\text{Error}_1^k, \dots, \text{Error}_r^k$  sur l'ensemble de validation,

## Validation croisée $K$ -fold ( $K = 10$ )

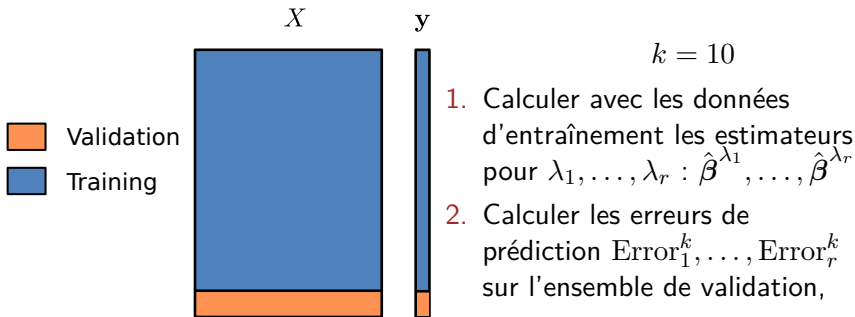
- ▶ Choisir une grille de taille  $r$  de  $\lambda$  à tester :  $\lambda_1, \dots, \lambda_r$
- ▶ Diviser  $(X, y)$  selon les observations en  $K$  blocs (🇬🇧 : *fold*) :



**Choix du paramètre** : calculer  $\widehat{\text{Error}}_1, \dots, \widehat{\text{Error}}_r$ , moyennes des erreurs et choisir  $\hat{i}^{\text{CV}} \in \llbracket 1, r \rrbracket$  atteignant la plus petite

## Validation croisée $K$ -fold ( $K = 10$ )


- ▶ Choisir une grille de taille  $r$  de  $\lambda$  à tester :  $\lambda_1, \dots, \lambda_r$
- ▶ Diviser  $(X, y)$  selon les observations en  $K$  blocs (🇬🇧 : *fold*) :



**Choix du paramètre** : calculer  $\widehat{\text{Error}}_1, \dots, \widehat{\text{Error}}_r$ , moyennes des erreurs et choisir  $\hat{i}^{\text{CV}} \in \llbracket 1, r \rrbracket$  atteignant la plus petite

**Re-calibration** : calculer  $\hat{\beta}^{\lambda_{\hat{i}^{\text{CV}}}}$  sur toutes les observations  $(X, y)$

# CV en pratique

Cas extrême de validation croisée ( : *cross-validation*)

- ▶  $K = 1$  : impossible, au moins  $K = 2$
- ▶  $K = n$  : stratégie “*leave-one-out*” (cf. **Jackknife**) : autant de blocs que de variables

Rem:  $K = n$  : calcul efficace pour Ridge mais assez instable

Conseils pratiques :

- ▶ “randomiser les observations” : observations dans un ordre aléatoire, évite des blocs de données trop similaires (chaque sous-bloc doit être représentatif de l'ensemble)
- ▶ choix habituels :  $K = 5, 10$

Rem: en prédiction on peut aussi moyenner les meilleurs estimateurs obtenus plutôt que de re-calibrer sur toutes les données

# Variantes de CV et sklearn

## Alternatives classiques :

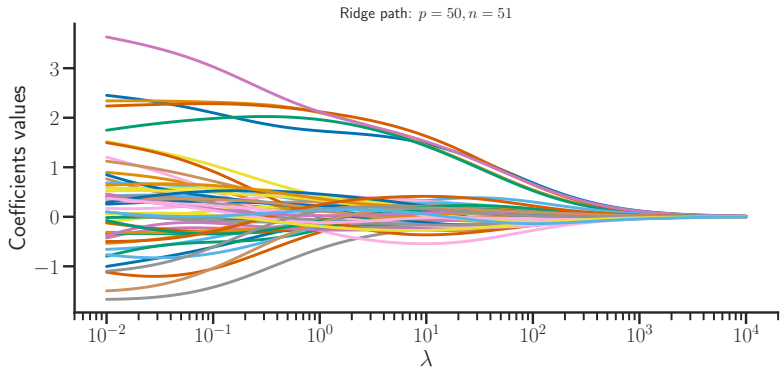
- ▶ partition aléatoire entre ensemble d'apprentissage et validation ( $K = 2$  en gros, cf. `train_test_split`)
- ▶ variante pour séries temporelles : `TimeSeriesSplit`
- ▶ variante pour la classification et pour les cas avec classes déséquilibrées `StratifiedKFold`

Plus de détails :

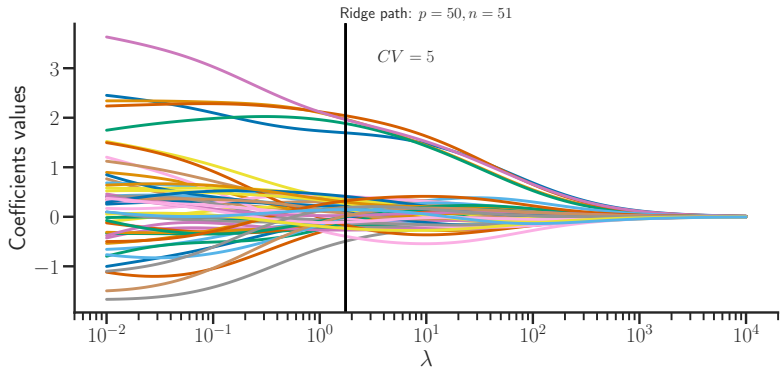
[http://scikit-learn.org/stable/modules/cross\\_validation.html](http://scikit-learn.org/stable/modules/cross_validation.html)



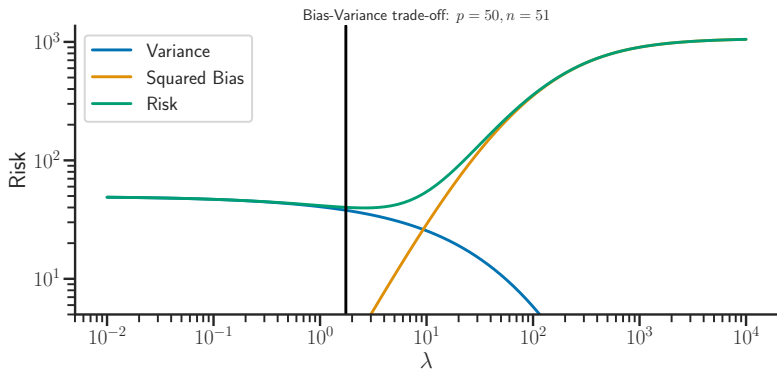
## Choix de $\lambda$ : exemple avec $CV = 5$ (I)



## Choix de $\lambda$ : exemple avec $CV = 5$ (I)



# Choix de $\lambda$ : exemple avec $CV = 5$ (I)



# Plan

Définitions de l'estimateur Ridge

Choix du paramètre de régularisation

Algorithmes et aspects computationnels

# Régularisation et colonne de zéro




: utilisation de CV avec des données catégorielles  
En effet : si on enlève toute les occurrences d'une modalité de la partie apprentissage, on crée une colonne de zéro (les MCO se comportent alors bizarrement...)

Remèdes :

- ▶ “régularisation” : on peut obtenir une unique solution
- ▶ faire une séparation apprentissage/test plus poussée pour équilibrer les *folds*

# Algorithmes pour la méthode *Ridge*

- ▶ 'svd' : méthode la plus stable, avantageuse pour calculer plusieurs  $\lambda$  car on ne "paye" la SVD qu'une fois
- ▶ 'cholesky' : décomposition matricielle proposant une formule fermée `scipy.linalg.solve`
- ▶ 'sparse\_cg' : gradient conjugué utile dans les cas creux ( : *sparse*) et de grande dimension (baisser `tol/max_iter`)
- ▶ approche de type gradient stochastique si  $n$  est très grand

cf. le code des fonctions `Ridge`, `ridge_path`, `RidgeCV` dans le module `linear_model` de `sklearn`

Rem: on calcule rarement l'estimateur *Ridge* pour un  $\lambda$ , en général on en calcule plusieurs (10, 100, ...) et on cherche le meilleur

Rem: enjeu crucial de calculer des SVD de grandes tailles

# Références

- GOLUB, G. H. et C. F. VAN LOAN. *Matrix computations*. Fourth. Johns Hopkins University Press, Baltimore, MD, 2013, p. xiv+756.