Pratique de l'apprentissage statistique

4 Régression spline & Modèle GAM

V. Lefieux

École des Ponts
ParisTech

Plan

Introduction

Généralités sur les splines

Interpolation : splines d'interpolation

Régression : splines de moindres carrés & splines de lissage

Modèle GAM

Plan

Introduction

Généralités sur les splines

Interpolation : splines d'interpolation

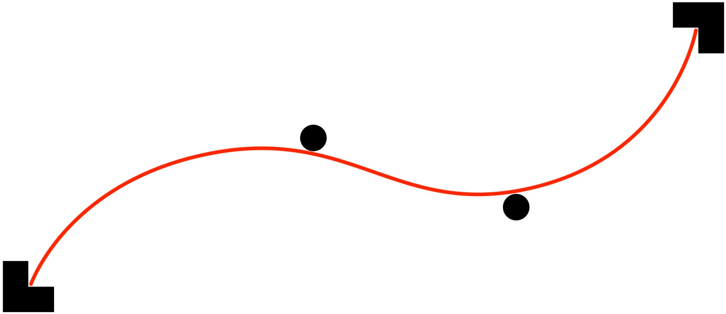
Régression : splines de moindres carrés & splines de lissage

Modèle GAM

Point de vue physique I

- Le terme *spline* (cerce en français) désigne une latte en bois flexible utilisée par les dessinateurs industriels pour matérialiser des lignes à courbure variable passant par des points fixés à priori.
- L'enjeu était d'obtenir des courbes « lisses », d'éventuelles discontinuités pouvant être synonymes de ruptures potentielles à cause d'une faiblesse mécanique.
- Le tracé de la spline minimise l'énergie de déformation de la latte considérée.

Point de vue physique II

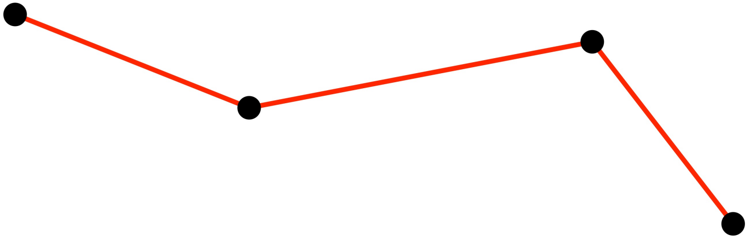


Point de vue mathématique

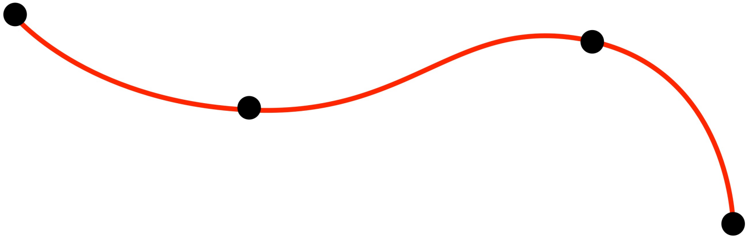
Une spline est une fonction définie par morceaux par des polynômes.

Interpolation : exemple I

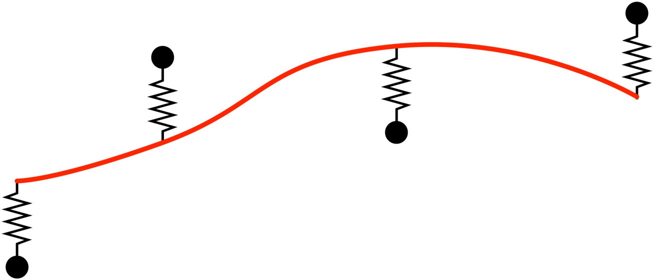
Interpolation : exemple II



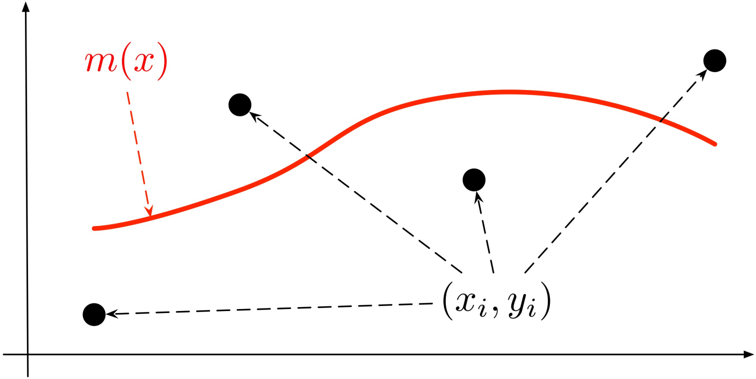
Interpolation : exemple III



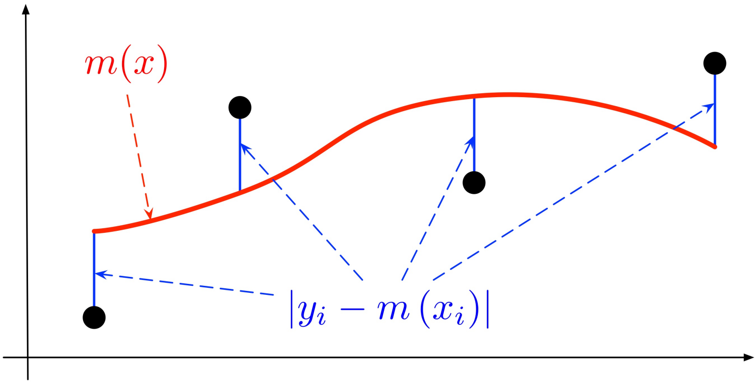
Lissage : point de vue physique I



Lissage : point de vue physique II



Lissage : point de vue physique III



Lissage : point de vue physique IV

- La latte, liée aux points via des ressorts, correspond à une courbe lissée.
- Sa forme est celle qui minimise l'énergie totale de déformation (allongement des ressorts et courbure de la latte) :

$$E(m,\lambda) = \sum_{i=1}^{n} (y_i - m(x_i))^2 + \lambda \int \left[m^{(2)}(x) \right]^2 \mathrm{d}x$$

où $(x_i, y_i)_{i\in\{1,\ldots,n\}}$ est l'ensemble des points, m l'équation de la forme de la latte (avec $m^{(2)}$ comme dérivée seconde) et λ le rapport entre la raideur de la latte et celle des ressorts.

Données considérées dans le cas univarié

- On dispose d'un échantillon de (X, Y) :

$$\mathcal{D}_n = (X_i, Y_i)_{i \in \{1,\dots,n\}}$$

  où $X \in \mathbb{R}$ et $Y \in \mathbb{R}$.

- On note :

$$d_n = (x_i, y_i)_{i \in \{1,\dots,n\}} .$$

Splines d'interpolation, de moindres carrés et de lissage

- Pour l'interpolation, on utilise des splines d'interpolation pour ajuster m telle que :

$$\forall i \in \{1, \ldots, n\} : y_i = m\left(x_i\right) .$$

- Pour le modèle de régression :

$$\forall i \in \{1, \ldots, n\} : Y_i = m\left(X_i\right) + \varepsilon_i ,$$

  on utilise :

  - Des splines de moindres carrés qui minimisent :

$$\sum_{i=1}^{n} \left(y_i - m\left(x_i\right)\right)^2 .$$

  - Des splines de lissage qui minimisent :

$$\sum_{i=1}^{n} \left(y_i - m\left(x_i\right)\right)^2 + \lambda \int \left[m^{(2)}\left(x\right)\right]^2 \mathrm{d}x .$$

Données considérées dans le cas multivarié

- On dispose d'un échantillon de (X, Y) :

$$\mathcal{D}_n = (X_i, Y_i)_{i \in \{1,\ldots,n\}}$$

  où $X = (X_1, \ldots, X_p)^\top \in \mathbb{R}^p$ et $Y \in \mathbb{R}$.

- On note :

$$d_n = (x_i, y_i)_{i \in \{1,\ldots,n\}} \ .$$

Cas de la régression multivariée

Les splines peuvent intervenir dans des modèles multivariés tels que :

- Le modèle MARS (Multivariate Adaptive Regression Splines) : (Friedman, 1991).
- Le modèle GAM (Generalized Additive Models) : (Hastie et Tibshirani, 1986).

Plan

Splines polynomiales d'ordre d

- On considère K nœuds (*knots*) : $(\xi_1, \ldots, \xi_K)$ sur $[a, b]$:

$$a < \xi_1 < \ldots < \xi_K < b \ .$$

- Une spline polynomiale d'ordre $d \in \mathbb{N}^\star$ est une fonction :
  - continûment différentiable jusqu'à l'ordre :
    - $d - 2$ si d>1,
    - 0 si d=1 (simplement continue),
  - constituée de polynômes de degré (inférieur ou égal à) $(d - 1)$ sur les intervalles inter-noeuds $[a, \xi_1]$, $[\xi_1, \xi_2]$,. . . , $[\xi_{K-1}, \xi_K]$, $[\xi_K, b]$.
- On parle de :
  - spline linéaire si $d = 2$,
  - spline cubique si $d = 4$.

Splines linéaires

- On considère K nœuds (*knots*) : $(\xi_1, \ldots, \xi_K)$ sur $[a, b]$:

$$a < \xi_1 < \ldots < \xi_K < b \ .$$

- Une spline linéaire (spline d'ordre 2) est une fonction :
  - continue,
  - constituée de droites sur les intervalles inter-noeuds $[a, \xi_1]$, $[\xi_1, \xi_2]$,..., $[\xi_{K-1}, \xi_K]$, $[\xi_K, b]$.

Splines cubiques

- On considère K nœuds (*knots*) : $(\xi_1, \ldots, \xi_K)$ sur $[a, b]$:

$$a < \xi_1 < \ldots < \xi_K < b \ .$$

- Une spline cubique (spline d'ordre 4) est une fonction :
  - continûment différentiable jusqu'à l'ordre 2,
  - constituée de polynômes de degré (inférieur ou égal à) 3 sur les intervalles inter-noeuds $[a, \xi_1]$, $[\xi_1, \xi_2]$,..., $[\xi_{K-1}, \xi_K]$, $[\xi_K, b]$.

Espace des splines polynomiales d'ordre d

- On note $\mathcal{S}_d\left(\xi_1, \ldots, \xi_K\right)$ l'ensemble des splines polynomiales d'ordre d ayant pour nœuds $\left(\xi_1, \ldots, \xi_K\right)$.

- $\mathcal{S}_d\left(\xi_1, \ldots, \xi_K\right)$ est un sous-espace vectoriel de l'espace des fonctions dérivables jusqu'à l'ordre $(d-2)$ (si $d > 1$, 0 sinon), de dimension $d + K$.

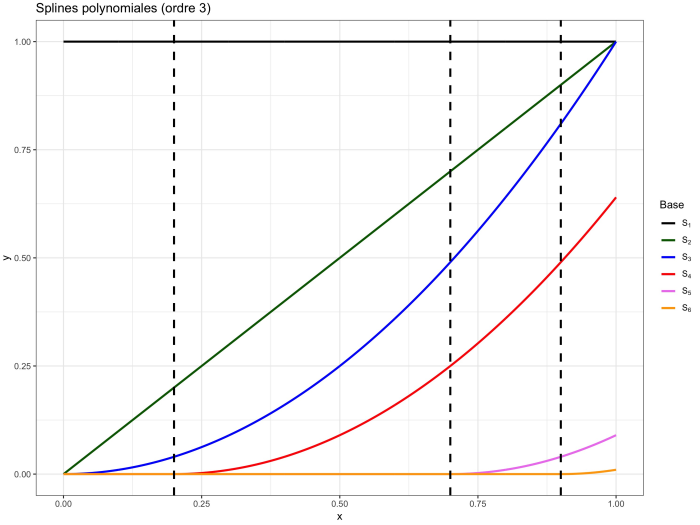
- On peut considérer comme base :

$$
\begin{aligned}
&S_1(x) = 1 \ , \\
&\quad\vdots \\
&S_d(x) = x^{d-1} \ , \\
&\forall k \in \{1, \ldots, K\} : S_{d+k}(x) = \left[(x - \xi_k)_+\right]^{d-1}
\end{aligned}
$$

où :

$$
x_+ = \max(x, 0) = \begin{cases} x & \text{si } x \geq 0 \\ 0 & \text{sinon} \end{cases} \ .
$$

Illustration



Remarques

- On trouve également les splines naturelles d'ordre pair : elles diffèrent des splines d'ordre d au niveau des intervalles $[a, \xi_1]$ et $[\xi_K, b]$ sur lesquels elles coincident avec un polynôme de degré $\frac{d}{2} - 1$.
  Des splines cubiques naturelles coincident donc avec des droites sur le premier et le dernier intervalle.

- La base $(S_1, \ldots, S_{d+K})$ de $\mathcal{S}_d(\xi_1, \ldots, \xi_K)$, définie précédemment, est simple d'un point de vue conceptuel mais est peu utilisée en pratique, à cause du support non compact des fonctions de la base, et des problèmes d'arrondis pouvant apparaitre pour de grandes valeurs de x.

- On lui préfère très souvent la base B-splines dans laquelle chaque fonction de base a un support fini.
  Les B-splines sont une généralisation des courbes de Bézier, et ont été généralisées par les NURBS (Non-Uniform Rational Basis Splines).

B-splines

- On considère K nœuds (*knots*) : $(\xi_1, \ldots, \xi_K)$ sur $[a, b] := [\xi_0, \xi_{K+1}]$:

$$a = \xi_0 \leq \xi_1 \leq \ldots \leq \xi_K \leq b = \xi_{K+1} \ .$$

  Quand les nœuds sont équidistants, on parle de B-splines uniformes.

- On définit de manière récursive la base de B-splines d'ordre $d \in \mathbb{N}^\star$ avec $d \leq K$:

  1. Pour $i \in \{1, \ldots, K-1\}$:

$$B_{i,1}(x) = \begin{cases} 1 & \text{si } x \in [\xi_i, \xi_{i+1}[\\ 0 & \text{sinon} \end{cases} \ .$$

     Si $\xi_i = \xi_{i+1}$, on pose par convention $B_{i,1} = 0$.

  2. Pour $i \in \{1, \ldots, K-d\}$:

$$B_{i,d}(x) = \frac{x - \xi_i}{\xi_{i+d-1} - \xi_i} B_{i,d-1}(x) + \frac{\xi_{i+d} - x}{\xi_{i+d} - \xi_{i+1}} B_{i+1,d-1}(x) \ .$$

     Par convention, une fraction dont le dénominateur est nul, est considérée nulle.

Illustration

Splines naturelles d'ordre d

- On considère K nœuds (*knots*) : $(\xi_1, \ldots, \xi_K)$ sur $[a, b]$:

$$a < \xi_1 < \ldots < \xi_K < b \ .$$

- Une spline naturelle d'ordre $d \in \mathbb{N}^\star$ pair est une fonction :
  - continûment différentiable jusqu'à l'ordre $d - 2$ $(d \geq 2)$,
  - constituée de polynômes de degré :
    - $\frac{d}{2} - 1$ sur les intervalles $[a, \xi_1]$ et $[\xi_K, b]$,
    - (inférieur ou égal à) $(d - 1)$ sur les intervalles inter-noeuds $[\xi_1, \xi_2]$,..., $[\xi_{K-1}, \xi_K]$.

- On parle de spline cubique naturelle si $d = 4$.

Splines cubiques naturelles

- On considère K nœuds (*knots*) : $(\xi_1, \ldots, \xi_K)$ sur $[a, b]$:

$$a < \xi_1 < \ldots < \xi_K < b \ .$$

- Une spline cubique naturelle est une fonction :
  - continûment différentiable jusqu'à l'ordre 2,
  - constituée de polynômes de degré :
    - 1 sur les intervalles $[a, \xi_1]$ et $[\xi_K, b]$,
    - (inférieur ou égal à) 3 sur les intervalles inter-noeuds $[\xi_1, \xi_2]$,. . . , $[\xi_{K-1}, \xi_K]$.

Espace des splines naturelles d'ordre d

- On note $\mathcal{S}_d^{\star}(\xi_1, \ldots, \xi_K)$ l'ensemble des splines naturelles d'ordre d ayant pour nœuds $(\xi_1, \ldots, \xi_K)$.
- $\mathcal{S}_d(\xi_1, \ldots, \xi_K)$ est un sous-espace vectoriel de l'espace des fonctions dérivables jusqu'à l'ordre $(d-2)$, de dimension K.

Plan

Concepts généraux

- On dit qu'une fonction f est absolument continue s'il existe $a \in \mathbb{R}$ et une fonction g intégrable tels que :

$$\forall x \in \mathbb{R} : f(x) = \int_a^x g(y)\, dy \ .$$

- Soit $W^d(a,b)$ l'ensemble des fonctions f définies sur $[a,b]$ telles que :
  - $\left(f^{(0)}, \ldots, f^{(d-1)}\right)$ sont absolument continues et de carré intégrable,
  - $f^{(d)}$ est de carré intégrable.

- La régularité d'une fonction $f \in W^d(a,b)$ peut être mesurée par :

$$\int_a^b \left[f^{(d)}(x)\right]^2 \mathrm{d}x \ .$$

Splines d'interpolation I

- On dispose d'un échantillon de $(X, Y) \in \mathbb{R} \times \mathbb{R}$:

$$d_n = (x_i, y_i)_{i \in \{1,\dots,n\}}$$

tel que les $(x_i)_{i \in \{1,\dots,n\}}$ **sont distincts**.

- Il existe une unique fonction $\widehat{m} \in W^d(a, b)$ vérifiant :

$$\forall i \in \{1, \dots, n\} : y_i = \widehat{m}(x_i) ,$$

$$\widehat{m} = \arg \min_{m \in W^d(a,b)} \int_a^b \left[m^{(d)}(x) \right]^2 \mathrm{d}x .$$

- La fonction $\widehat{m}$ est une spline naturelle d'ordre $2d$ ayant pour nœuds $(x_1, \dots, x_n)$.

Splines d'interpolation II

- Il est possible de relaxer les conditions d'interpolation, notamment dans le cas où les $(x_i)_{i\in\{1,\dots,n\}}$ **ne sont pas distincts**, par :

$$\sum_{i=1}^{n} (y_i - m(x_i))^2 \leq \varepsilon$$

  où $\varepsilon \in \mathbb{R}^\star$ donne le niveau de la relaxation.

- On peut montrer que la fonction $\widehat{m}$ est alors la solution du problème d'optimisation suivant :

$$\widehat{m} = \arg \min_{m \in W^d(a,b)} \sum_{i=1}^{n} (y_i - m(x_i))^2 + \lambda \int_a^b \left[m^{(d)}(x)\right]^2 \mathrm{d}x$$

  où λ dépend de ε (de manière complexe).

Plan

Données considérées

- On dispose d'un échantillon de (X, Y) :

$$\mathcal{D}_n = (X_i, Y_i)_{i \in \{1,\ldots,n\}}$$

  où $X \in \mathbb{R}$ et $Y \in \mathbb{R}$.

- On note :

$$d_n = (x_i, y_i)_{i \in \{1,\ldots,n\}} \ .$$

Splines de moindres carrés I

On appelle spline de moindres carrés d'ordre d ayant comme nœuds $(\xi_1, \ldots, \xi_K)$, la fonction $\widehat{m}$ suivante :

$$\widehat{m} = \arg \min_{m \in \mathcal{S}_d(\xi_1, \ldots, \xi_K)} \sum_{i=1}^{n} (y_i - m(x_i))^2 \ .$$

Splines de moindres carrés II

Si on considère la base $(S_1, \ldots, S_{d+K})$ de $\mathcal{S}_d(\xi_1, \ldots, \xi_K)$, on peut écrire :

$$\widehat{m}(x) = \sum_{j=1}^{d+K} \widehat{\theta}_j \, S_j(x)$$

où $\left(\widehat{\theta}_1, \ldots, \widehat{\theta}_{d+K}\right)^\top \in \mathbb{R}^{d+K}$ minimisent :

$$\sum_{i=1}^{n} \left(y_i - \sum_{j=1}^{d+K} \theta_j \, S_j(x_i) \right)^2 .$$

Splines de moindres carrés III

- On considère les notations suivantes :

$$\mathbf{Y} = (y_1, \ldots, y_n)^\top ,$$
$$\widehat{\mathbf{Y}} = (\widehat{m}(x_1), \ldots, \widehat{m}(x_n))^\top ,$$
$$\theta = (\theta_1, \ldots, \theta_{d+K})^\top ,$$
$$\widehat{\theta} = \left(\widehat{\theta}_1, \ldots, \widehat{\theta}_{d+K}\right)^\top ,$$
$$N = [S_j(x_i)]_{i\in\{1,\ldots,n\}, j\in\{1,\ldots,d+K\}} .$$

- On cherche $\widehat{\theta}$ qui minimise :

$$(\mathbf{Y} - N\theta)^\top (\mathbf{Y} - N\theta) .$$

- La solution est :

$$\widehat{\theta} = \left(N^\top N\right)^{-1} N\,\mathbf{Y} .$$

Splines de moindres carrés IV

On peut écrire :

$$\widehat{\mathbf{Y}} = \mathbb{S}\,\mathbf{Y}$$

où :

$$\mathbb{S} = N\left(N^\top N\right)^{-1} N^\top$$

est la matrice de lissage (*smoothing*).

Splines de moindres carrés V

- Si on considère une base de B-splines, la matrice $N^\top N$ est alors une matrice bande avec $2d-1$ diagonales non nulles.
- On considère usuellement :
  - un ordre $d=4$,
  - un nombre de noeuds $K \in \{0,\ldots,n-d\}$,
  - des nœuds $(\xi_1,\ldots,\xi_K)$ équirépartis ou égaux à des quantiles empiriques de X.
- A d fixé, le nombre de nœuds K est un hyper-paramètre modulant le lissage :
  - $K=0$: l'estimateur correspond à une régression polynomiale de degré $d-1$.
  - $K=n-d$: l'estimateur correspond à une spline d'interpolation.

Des splines de moindres carrés aux splines de lissage

On ajoute une pénalité afin de contrôler les variations de l'estimateur (importantes dans le cas des splines de moindres carrés).

Splines de lissage I

On appelle spline de lissage d'ordre $2d$ ayant comme nœuds $(\xi_1, \ldots, \xi_K)$, la fonction $\widehat{m}$ suivante :

$$\widehat{m} = \arg \min_{m \in W^d(a,b)} \sum_{i=1}^{n} (y_i - m(x_i))^2 + \lambda \int_a^b \left[m^{(d)}(x) \right]^2 \mathrm{d}x$$

où $\lambda \in \mathbb{R}^{+\star}$ caractérise le compromis entre l'ajustement et le caractère lisse de la fonction.

Splines de lissage II

Si on considère la base $(S_1, \ldots, S_n)$ de $\mathcal{S}^{\star}_{2d}(x_1, \ldots, x_n)$ (splines naturelles), on peut alors écrire :

$$\widehat{m}(x) = \sum_{j=1}^{n} \widehat{\theta}_j \, S_j(x)$$

où $\left(\widehat{\theta}_1, \ldots, \widehat{\theta}_n\right) \in \mathbb{R}^n$ minimisent :

$$\sum_{i=1}^{n} \left(y_i - \sum_{j=1}^{n} \theta_j \, S_j(x_i) \right)^2 + \lambda \int_a^b \left(\sum_{j=1}^{n} \theta_j \, S_j^{(d)}(x) \right)^2 \mathrm{d}x \; .$$

Splines de lissage III

- On considère les notations suivantes :

$$\mathbf{Y} = (y_1, \ldots, y_n)^\top ,$$
$$\widehat{\mathbf{Y}} = (\widehat{m}(x_1), \ldots, \widehat{m}(x_n))^\top ,$$
$$\theta = (\theta_1, \ldots, \theta_n)^\top ,$$
$$\widehat{\theta} = \left(\widehat{\theta}_1, \ldots, \widehat{\theta}_n\right)^\top ,$$
$$N = [S_j(x_i)]_{i\in\{1,\ldots,n\}, j\in\{1,\ldots,n\}} ,$$
$$\Omega = \left[\int_a^b S_i^{(d)}(x)\, S_j^{(d)}(x)\, \mathrm{d}x\right]_{i\in\{1,\ldots,n\}, j\in\{1,\ldots,n\}} .$$

- On cherche $\widehat{\theta}$ qui minimise :

$$(\mathbf{Y} - N\theta)^\top (\mathbf{Y} - N\theta) + \lambda\, \theta^\top \Omega\, \theta .$$

- La solution est :

$$\widehat{\theta} = \left(N^\top N + \lambda\,\Omega\right)^{-1} N\,\mathbf{Y} .$$

Splines de lissage IV

On peut écrire :

$$\widehat{\mathbf{Y}} = \mathbb{S}\,\mathbf{Y}$$

où :

$$\mathbb{S} = N\left(N^\top N + \lambda\,\Omega\right)^{-1} N^\top$$

est la matrice de lissage (*smoothing*).

Illustration I

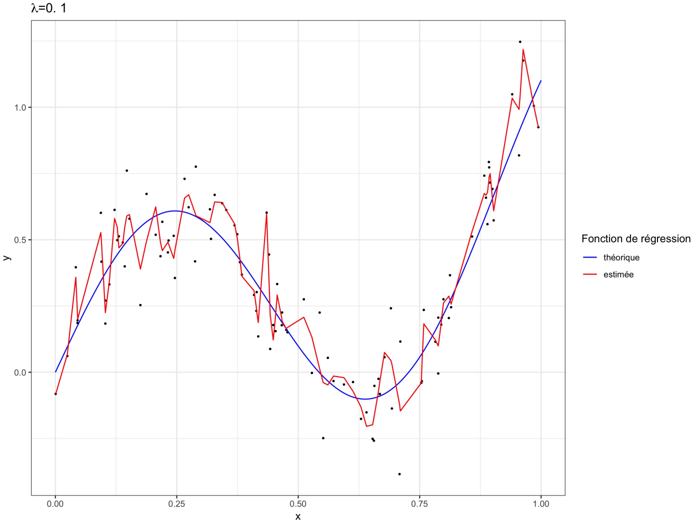


Illustration II

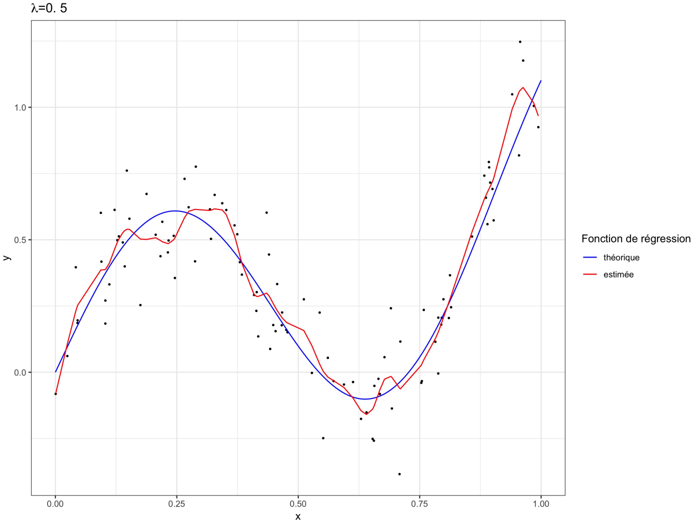


Illustration III

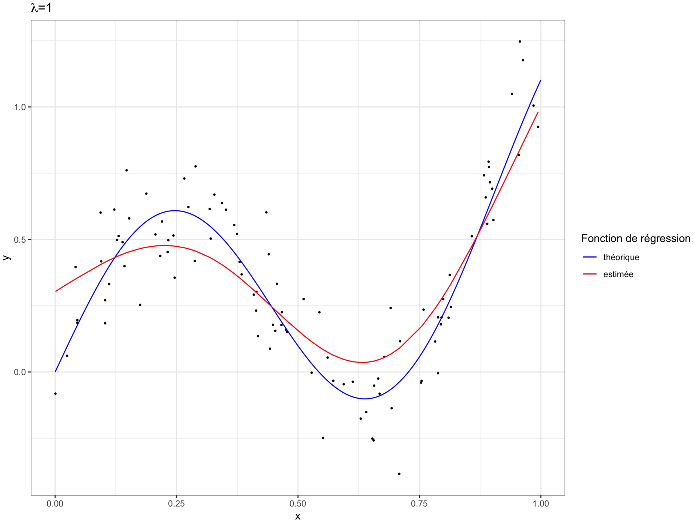
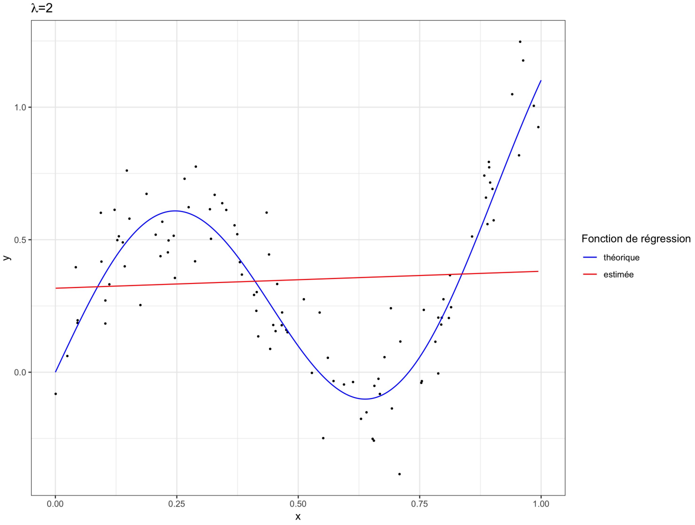


Illustration IV



Plan

Données considérées

- On dispose d'un échantillon de (X, Y) :

$$\mathcal{D}_n = (X_i, Y_i)_{i \in \{1,\dots,n\}}$$

  où $X = (X_1, \dots, X_p)^\top \in \mathbb{R}^p$ et $Y \in \mathbb{R}$.

- On note :

$$d_n = (x_i, y_i)_{i \in \{1,\dots,n\}} \ .$$

Le modèle

- Le modèle additif généralisé (GAM : *Generalized Additive Model*) suppose que :

$$Y = c + \sum_{j=1}^{p} g_j\left(X_j\right) + \varepsilon$$

  où $g_j : \mathbb{R} \to \mathbb{R}$ sont p fonctions inconnues.

- Pour assurer l'existence, il faut imposer une contrainte, par exemple :

$$\forall j \in \{1, \ldots, p\} : \int g_j\left(x\right) \mathrm{d}x = 0 \ .$$

- On peut notamment estimer les fonctions $\left(g_j\right)_{j \in \{1,\ldots,p\}}$ par noyau, par polynômes locaux, par projection sur des bases orthogonales et par ajustement spline.

- La méthode des splines est la plus couramment employée pour les modèles GAM.

Le critère d'estimation

- On suppose ici que chaque fonction g_j est estimée à l'aide de fonctions splines.

- On cherche à minimiser :

$$\sum_{i=1}^{n}\left(y_i - c - \sum_{j=1}^{p} g_j\left(x_{ij}\right)\right)^2 + \sum_{j=1}^{p} \lambda_j \int \left[g_j^{(2)}\left(x\right)\right]^2 \mathrm{d}x$$

où $\left(\lambda_j\right)_{j\in\{1,\ldots,p\}} \in \mathbb{R}^{+p}$ sont des hyper-paramètres de régularisation.

- Les solutions sont des splines cubiques, chaque fonction g_j ayant pour noeuds les $\left(x_{ij}\right)_{i\in\{1,\ldots,n\}}$.

- On impose comme contrainte d'unicité :

$$\forall j \in \{1,\ldots,p\} : \sum_{i=1}^{n} g_j\left(x_{ij}\right) = 0 \ .$$

Estimation : méthode de backfitting

1. Initialisation :

$$\widehat{c} = \bar{y} \ ,$$
$$\forall j \in \{1, \ldots, p\} : \widehat{g}_j(x) = 0 \ .$$

2. Pour $k \in \{1, \ldots, p\}$:

   2.1 On estime g_k en fixant tous les autres (étape de backfitting).
   Le problème à minimiser est :

$$\min_{g_k} \sum_{i=1}^{n} \left(y_i - \widehat{c} - \sum_{j=1, j \neq k}^{p} \widehat{g}_j(x_{ij}) - g_k(x_{ik}) \right)^2 + \lambda_k \int \left[{g_k}^{(2)}(x) \right]^2 \mathrm{d}x \ .$$

   2.2 On centre $\widehat{g}_k$ en lui soustrayant :

$$\frac{1}{n} \sum_{i=1}^{n} \widehat{g}_k(x_{ik}) \ .$$

On itère l'étape 2 jusqu'à stabilisation de l'optimisation.

Remarques

- Il existe d'autre méthodes d'estimation pour les modèles GAM.
- On peut réunir certaines covariables (en veillant au fléau de la dimension).
- On peut utiliser les modèles sur des séries temporelles.

Le coin R

On peut utiliser plusieurs packages, parmi lesquels :

- Le package `gam` (fonction de base : `gam`) proposé par Hastie.
- Le package `mgcv` (fonction de base : `gam`) proposé par Wood.

Références

Friedman, J. H. 1991, «Multivariate adaptive regression splines», *The Annals of Statistics*, vol. 19, n° 1, p. 1–67.

Green, P. et B. W. Silverman. 1994, *Nonparametric regression and generalized linear models : a roughness penalty approach*, Chapman & Hall.

Hastie, T. et R. Tibshirani. 1986, «Generalized additive models», *Statistical Science*, vol. 1, n° 3, p. 295–318.

Hastie, T. et R. Tibshirani. 1990, *Generalized additive models*, CRC, Chapman & Hall.

Wood, S. 2006, *Generalized additive models : an introduction with R*, CRC, Chapman & Hall.