# Régression en grande dimension

Laurent Rouvière

2020-06-14

## Table des matières



## Présentation

Ce tutoriel présente quelques exercices d'application du cours `Modèle linéaire en grande dimension`. On pourra trouver les documents de cours ainsi que les données utilisées à l'adresse suivante https://lrouviere.github.io/stat_grand_dim/. Des connaissances de base en R sont nécessaires. Le tutoriel se structure en 4 parties :

- `Fléau de la dimension` : identification du problème de la dimension pour le problème de régression ;
- `Régression sur composantes` : présentation des algorithmes **PCR** et **PLS** ;
- `Régression pénalisées` : régularisation à l'aide de pénalités de type **Ridge/Lasso**
- `Modèle additif` : conservation de la structure additive du modèle linéaire mais modélisation non paramétrique des composantes..

## 1 Introduction à la grande dimension

Nous proposons ici d'illustrer le problème de la grande dimension en régression. On commencera par étudier, à l'aide de simulation, ce problème pour l'estimateurs des $k$ plus proches voisins, puis pour les estimateurs des moindres carrés dans le modèle linéaire. Quelques exercices sont ensuite proposées pour calculer les vitesses de convergence de ces estimateurs dans des modèles simples.

### 1.1 Fléau de la dimension pour les plus proches voisins

La fonction suivante permet de générer un échantillon d'apprentissage et un échantillon test selon le modèle

$$Y = X_1^2 + \cdots + X_p^2 + \varepsilon$$

où les $X_j$ sont uniformes i.i.d de loi uniorme sur $[0, 1]$ et le bruit $\varepsilon$ suit une loi $\mathcal{N}(0, 0.5^2)$.

```
> simu <- function(napp=300,ntest=500,p=3,graine=1234){
+   set.seed(graine)
+   n <- napp+ntest
+   X <- matrix(runif(n*p),ncol=p)
+   Y <- apply(X^2,1,sum)+rnorm(n,sd=0.5)
+   Yapp <- Y[1:napp]
+   Ytest <- Y[-(1:napp)]
+   Xapp <- data.frame(X[1:napp,])
+   Xtest <- data.frame(X[-(1:napp),])
+   return(list(Xapp=Xapp,Yapp=Yapp,Xtest=Xtest,Ytest=Ytest))
+ }
> df <- simu(napp=300,ntest=500,p=3,graine=1234)
```

La fonction **knn.reg** du package **FNN** permet de construire des estimateurs des $k$ plus proches voisins en régression. On peut par exemple faire du 3 plus proches voisin avec

```
> library(FNN)
> mod3ppv <- knn.reg(train=df$Xapp,y=df$Yapp,k=3)
```

Parmi toutes les sorties proposées par cette fonction on a notamment

```
> mod3ppv$PRESS
## [1] 98.98178
```

qui renvoie la somme des carrés des erreurs de prévision par validation croisée Leave-One-Out (LOO). On peut ainsi obtenir l'erreur quadratique moyenne par LOO

```
> mod3ppv$PRESS/max(c(nrow(df$Xapp),1))
## [1] 0.3299393
```

1. Construire la fonction **sel.k** qui admet en entrée :
   — une grille de valeurs possibles de plus proches voisins (un vecteur).
   — une matrice **Xapp** de dimension $n \times p$ qui contient les valeurs variables explicatives.
   — un vecteur **Yapp** de dimension $n$ qui contient les valeurs de la variable à expliquer

   et qui renvoie en sortie la valeur de $k$ dans la grille qui minimise l'erreur LOO présentée ci-dessus.

   ```
   > sel.k <- function(K_cand=seq(1,50,by=5),Xapp,Yapp){
   +   ind <- 1
   +   err <- rep(0,length(K_cand))
   +   for (k in K_cand){
   + modkppv <- knn.reg(train=Xapp,y=Yapp,k=k)
   + err[ind] <- modkppv$PRESS/max(c(nrow(Xapp),1))
   + ind <- ind+1
   +   }
   +   return(K_cand[which.min(err)])
   + }
   ```

   Une fois la fonction créée, on peut calculer l'erreur de l'estimateur sélectionné sur un échantillon test avec

   ```
   > k.opt <- sel.k(seq(1,50,by=5),df$Xapp,df$Yapp)
   > prev <- knn.reg(train=df$Xapp,y=df$Yapp,test=df$Xtest,k=k.opt)$pred
   > mean((prev-df$Ytest)^2)
   ## [1] 0.283869
   ```

2. On souhaite comparer les erreurs des règles des $k$ plus proches voisins en fonction de la dimension. On considère 4 dimensions collectées dans le vecteur `DIM` et la grille de valeurs de $k$ suivantes :

```
> DIM <- c(1,5,10,50)
> K_cand <- seq(1,50,by=5)
```

Pour chaque valeur de dimension répéter $B = 100$ fois :

— simuler un échantillon d'apprentissage de taille 300 et test de taille 500
— calculer la valeur optimale de $k$ dans **K_cand** grâce à **sel.k**
— calculer l'erreur de l'estimateur sélectionné sur un échantillon test.

On pourra stocker les résultats dans une matrice de dimension $B \times 4$.

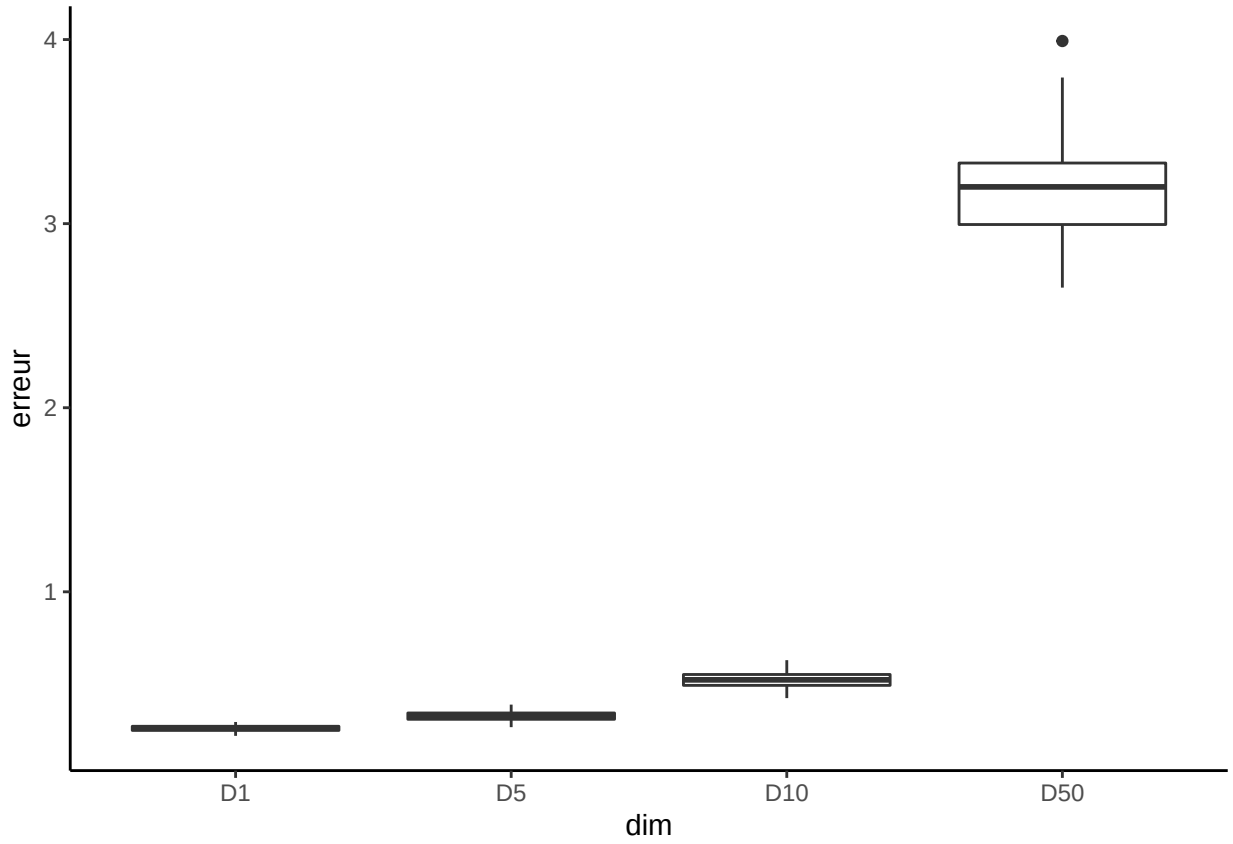
```
> B <- 100
> mat.err <- matrix(0,ncol=length(DIM),nrow=B)
> for (p in 1:length(DIM)){
+   for (i in 1:B){
+ df <- simu(napp=300,ntest=500,p=DIM[p],graine=1234*p+2*i)
+ k.opt <- sel.k(K_cand,df$Xapp,df$Yapp)
+ prev <- knn.reg(train=df$Xapp,y=df$Yapp,test=df$Xtest,k=k.opt)$pred
+ mat.err[i,p] <- mean((prev-df$Ytest)^2)
+   }
+ }
```

3. A l'aide d'indicateurs numériques et de boxplots, comparer la distribution des erreurs en fonction de la dimension.

```
> df <- data.frame(mat.err)
> nom.dim <- paste("D",DIM,sep="")
> names(df) <- nom.dim
```

```
> df %>% summarise_all(mean)
##         D1        D5     D10      D50
## 1 0.258003 0.3243574 0.52247 3.191055
> df %>% summarise_all(var)
##              D1           D5          D10         D50
## 1 0.0002556399 0.0005417109 0.001857967 0.06749414
```

```
> df1 <- pivot_longer(df,cols=everything(),names_to="dim",values_to="erreur")
> df1 <- df1 %>% mutate(dim=fct_relevel(dim,nom.dim))
> ggplot(df1)+aes(x=dim,y=erreur)+geom_boxplot()+theme_classic()
```




3. Conclure

Les estimateurs sont moins précis lorsque la dimension augmente. C'est le **fléau de la dimension**.

## 1.2 Influence de la dimension dans le modèle linéaire

En vous basant sur l'exercice précédent, proposer une illustration qui peut mettre en évidence la précision d'estimation dans le modèle linéaire en fonction de la dimension. On pourra par exemple considérer le modèle linaire suivant

$$Y = X_1 + 0X_2 + \cdots + 0X_p + \varepsilon$$

et étudier la performance de l'estimateur MCO du coefficient de $X_1$ pour différentes valeurs de $p$. Par exemple avec $p$ dans le vecteur

```
> DIM <- c(0,50,100,200)
```

Les données pourront être générées avec la fonction suivante

```
> n <- 250
> p <- 1000
> X <- matrix(runif(n*p),ncol=p)
> simu.lin <- function(X,graine){
+   set.seed(graine)
+   Y <- X[,1]+rnorm(nrow(X),sd=0.5)
+   df <- data.frame(Y,X)
+   return(df)
+ }
```

On s'intéresse à la distribution de $\widehat{\beta}_1$ en fonction de la dimension. Pour ce faire, on calcule un grand nombre d'estimateurs de $\widehat{\beta}_1$ pour différentes valeurs de $p$.

```
> B <- 500
> matbeta1 <- matrix(0,nrow=B,ncol=length(DIM))
> for (i in 1:B){
+   dftot <- simu.lin(X,i+1)
+   for (p in 1:length(DIM)){
+     dfp <- dftot[,(1:(2+DIM[p]))]
+     mod <- lm(Y~.,data=dfp)
+     matbeta1[i,p] <- coef(mod)[2]
+   }
+ }
```

On compare, pour chaque dimension considérée, les distributions de $\widehat{\beta}_1$ :

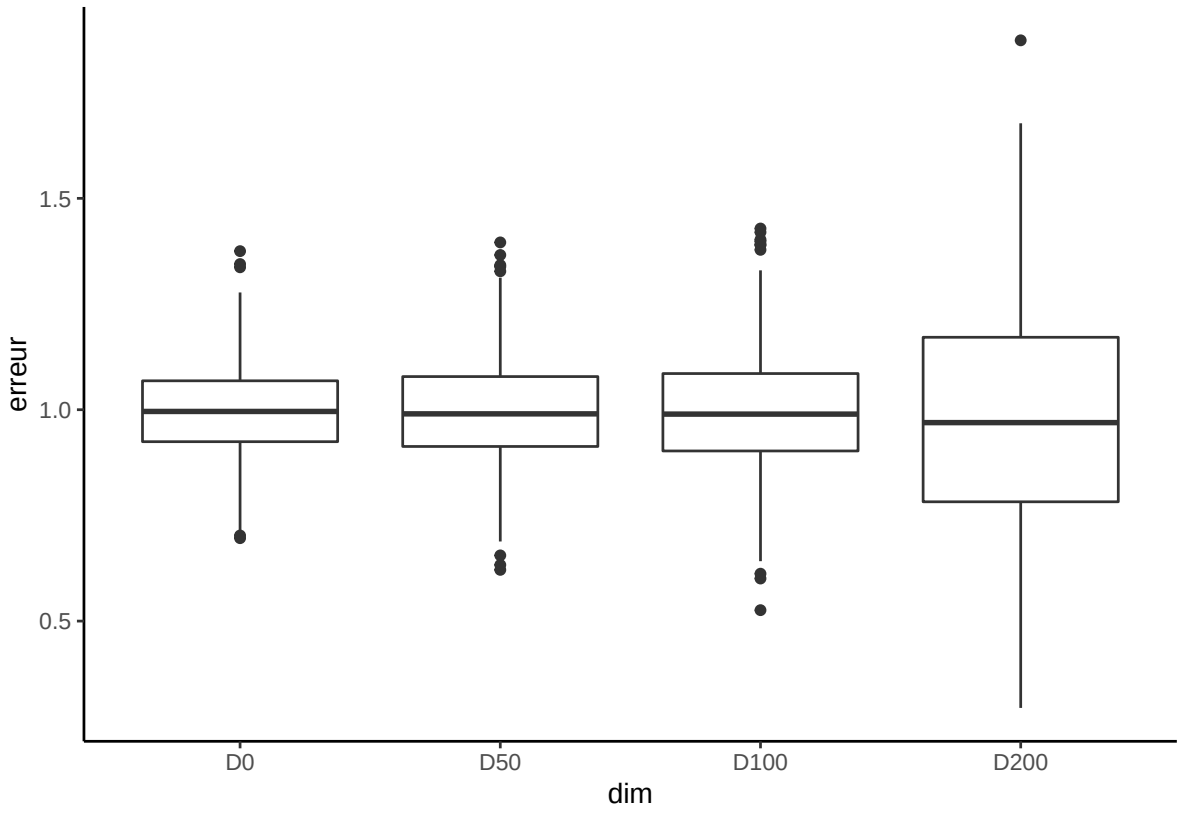
```
> df <- data.frame(matbeta1)
> nom.dim <- paste("D",DIM,sep="")
> names(df) <- nom.dim
```

— en étudiant le biais et la variance

```
> df %>% summarise_all(mean)
##          D0       D50      D100     D200
## 1 0.992891 0.9960811 0.9959025 0.98173
> df %>% summarise_all(var)
##            D0       D50       D100       D200
## 1 0.01266578 0.016072 0.02023046 0.06939837
```

— en visualisant la distribution avec un boxplot

```
> df1 <- gather(df,key="dim",value="erreur")
> df1 <- df1 %>% mutate(dim=fct_relevel(dim,nom.dim))
> ggplot(df1)+aes(x=dim,y=erreur)+geom_boxplot()+theme_classic()
```



On retrouve bien que la dimension impacte notamment la variance des estimateurs.

## 1.3 Exercices

**Exercice 1.1** (Distances entre deux points, voir [@gir15)**.** ]

Soit $X^{(1)} = (X_1^{(1)}, \dots, X_p^{(1)})$ et $X^{(2)} = (X_1^{(2)}, \dots, X_p^{(2)})$ deux variables aléatoires indépendantes de loi uniforme sur l'hypercube $[0,1]^p$. Montrer que

$$\mathbf{E}[\|X^{(1)} - X^{(2)}\|^2] = \frac{p}{6} \quad \text{et} \quad \sigma[\|X^{(1)} - X^{(2)}\|^2] \approx 0.2\sqrt{p}.$$

Soit $U$ et $U'$ deux variables aléatoires indépendantes de loi uniforme sur $[0,1]$. On a

$$\mathbf{E}[\|X^{(1)} - X^{(2)}\|^2] = \sum_{k=1}^{p} \mathbf{E}\left[\left(X_k^{(1)} - X_k^{(2)}\right)\right] = p\mathbf{E}[(U-U')^2] = p(2\mathbf{E}[U^2] - 2\mathbf{E}[U]^2) = \frac{p}{6}$$

car $\mathbf{E}[U^2] = 1/3$ et $\mathbf{E}[U] = 1/2$. De même

$$\sigma[\|X^{(1)} - X^{(2)}\|^2] = \sqrt{\sum_{k=1}^{p} \mathbf{V}\left[\left(X_k^{(1)} - X_k^{(2)}\right)\right]} = \sqrt{p\mathbf{V}[(U'-U)^2]} \approx 0.2\sqrt{p}$$

car

$$\mathbf{E}\left[(U'-U)^4\right] = \int_0^1 \int_0^1 (x-y)^4 \, \mathrm{d}x\mathrm{d}y = \frac{1}{15}$$

et donc $\mathbf{V}[(U'-U)^2] = 1/15 - 1/36 \approx 0.04$.

**Exercice 1.2** (Vitesse de convergence pour l'estimateur à noyau)**.**

On considère le modèle de régression

$$Y_i = m(x_i) + \varepsilon_i, \quad i = 1, \dots, n$$

où $x_1, \dots, x_n \in \mathbb{R}^d$ sont déterministes et $\varepsilon_1, \dots, \varepsilon_n$ sont des variables i.i.d. d'espérance nulle et de variance $\sigma^2 < +\infty$. On désigne par $\|\,.\,\|$ la norme Euclidienne dans $\mathbb{R}^d$. On définit l'estimateur localement constant de $m$ en $x \in \mathbb{R}^d$ par :

$$\hat{m}(x) = \underset{a \in \mathbb{R}}{\operatorname{argmin}} \sum_{i=1}^{n} (Y_i - a)^2 K\left(\frac{\|x_i - x\|}{h}\right)$$

où $h > 0$ et pour $u \in \mathbb{R}, K(u) = \mathbf{1}_{[0,1]}(u)$. On suppose que $\sum_{i=1}^n K\left(\frac{\|x_i - x\|}{h}\right) > 0$.

1. Donner la forme explicite de $\hat{m}(x)$.

   En annulant la dérivée par rapport à $a$, on obtient

   $$\hat{m}(x) = \frac{\sum_{i=1}^n Y_i K\left(\frac{\|x_i - x\|}{h}\right)}{\sum_{i=1}^n K\left(\frac{\|x_i - x\|}{h}\right)}.$$

2. Montrer que

   $$\mathbf{V}[\hat{m}(x)] = \frac{\sigma^2}{\sum_{i=1}^n K\left(\frac{\|x_i - x\|}{h}\right)}$$

   et

   $$\mathbf{E}[\hat{m}(x)] - m(x) = \frac{\sum_{i=1}^n (m(x_i) - m(x)) K\left(\frac{\|x_i - x\|}{h}\right)}{\sum_{i=1}^n K\left(\frac{\|x_i - x\|}{h}\right)}.$$

Ces propriétés se déduisent directement en remarquant que $\mathbf{V}[Y_i] = \sigma^2$ et $\mathbf{E}[Y_i] = m(x_i)$.

3. On suppose maintenant que $m$ est Lipschitzienne de constante $L$, c'est-à-dire que $\forall (x_1, x_2) \in \mathbb{R}^d \times \mathbb{R}^d$

$$|m(x_1) - m(x_2)| \leq L\|x_1 - x_2\|.$$

Montrer que

$$|\text{biais}[\hat{m}(x)]| \leq Lh.$$

On a $|m(x_i) - m(x)| \leq L\|x_i - x\|$. Or

$$K\left(\frac{\|x_i - x\|}{h}\right)$$

est non nul si et seulement si $\|x_i - x\| \leq h$. Donc pour tout $i = 1, \ldots, n$

$$L\|x_i - x\|K\left(\frac{\|x_i - x\|}{h}\right) \leq LhK\left(\frac{\|x_i - x\|}{h}\right).$$

D'où le résultat.

4. On suppose de plus qu'il existe une constante $C_1$ telle que

$$C_1 \leq \frac{\sum_{i=1}^n \mathbf{1}_{B_h}(x_i - x)}{n\text{Vol}(B_h)},$$

où $B_h = \{u \in \mathbb{R}^d : \|u\| \leq h\}$ est la boule de rayon $h$ dans $\mathbb{R}^d$ et $\text{Vol}(A)$ désigne le volume d'un ensemble $A \subset \mathbb{R}^d$. Montrer que

$$\mathbf{V}[\hat{m}(x)] \leq \frac{C_2\sigma^2}{nh^d},$$

où $C_2$ est une constante dépendant de $C_1$ et $d$ à préciser.

On a

$$\mathbf{V}[\hat{m}(x)] = \frac{\sigma^2}{\sum_{i=1}^n K\left(\frac{\|x_i - x\|}{h}\right)} = \frac{\sigma^2}{\sum_{i=1}^n \mathbf{1}_{B_h}(x_i - x)}.$$

Or

$$\sum_{i=1}^n \mathbf{1}_{B_h}(x_i - x) \geq C_1 n\text{Vol}(B_h) \geq C_1\gamma_d nh^d$$

où $\gamma_d$ désigne le volume e la boule unité en dimension $d$. On a donc

$$\mathbf{V}[\hat{m}(x)] \leq \frac{\sigma^2}{C_1\gamma_d nh^d}.$$

5. Déduire des questions précédentes un majorant de l'erreur quadratique moyenne de $\hat{m}(x)$.

On déduit

$$\mathbf{E}[(\hat{m}(x) - m(x))^2] \leq L^2h^2 + \frac{C_2\sigma^2}{nh^d}.$$

6. Calculer $h_{\text{opt}}$ la valeur de $h$ qui minimise ce majorant. Que vaut ce majorant lorsque $h = h_{\text{opt}}$. Comment varie cette vitesse lorsque $d$ augmente. Interpréter.

Soit $M(h)$ le majorant. On a

$$M(h)' = 2hL^2 - \frac{C_2\sigma^2 d}{n}h^{-d-1}.$$

La dérivée s'annule pour

$$h_{\text{opt}} = \frac{2L^2}{C_2\sigma^2 d}n^{-\frac{1}{d+2}}.$$

Lorsque $h = h_{\text{opt}}$ l'erreur quadratique vérifie

$$\mathbf{E}[(\hat{m}(x) - m(x))^2] = \mathrm{O}\left(n^{-\frac{2}{d+2}}\right).$$

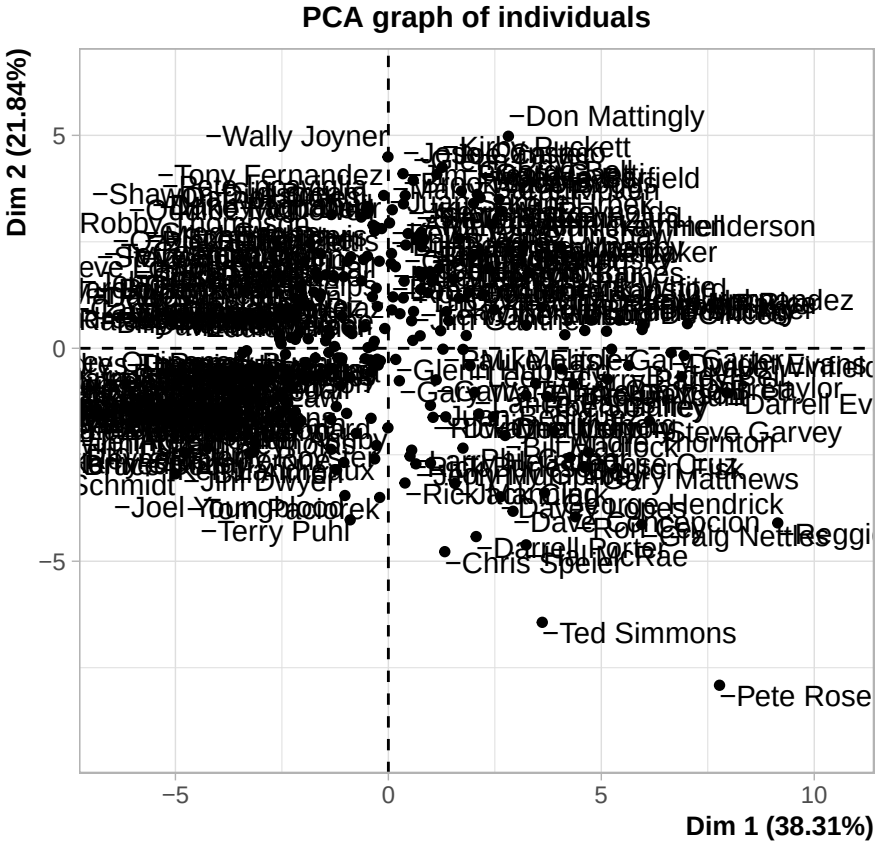
# 2 Régression sur composantes

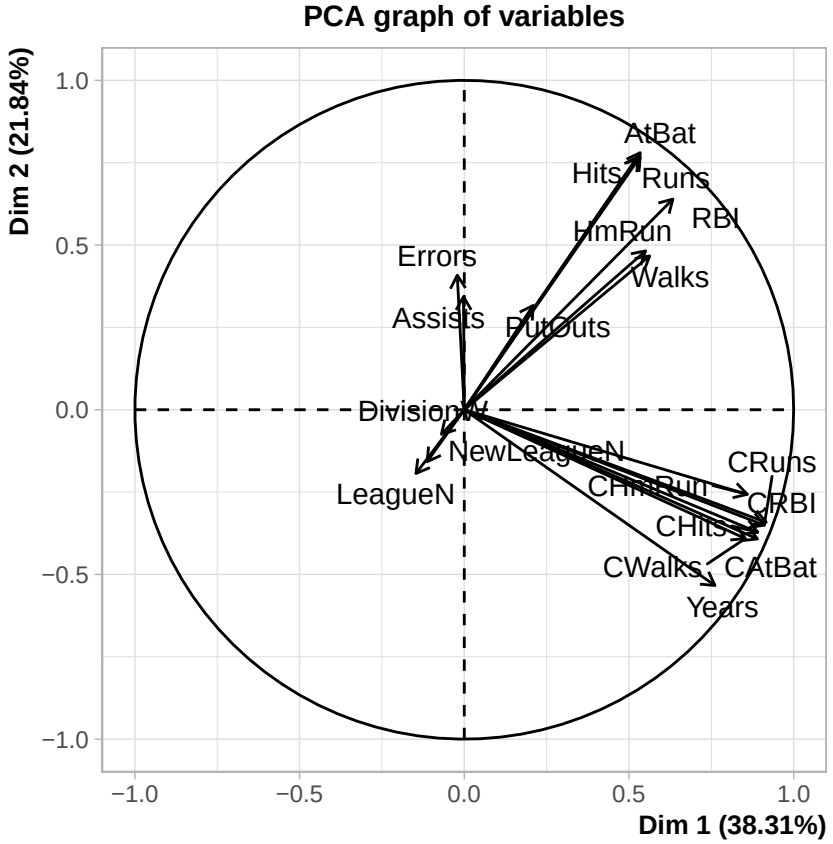
## 2.1 Régression sur composantes principales (méthodo)

On considère le jeu de données **Hitters** dans lequel où on souhaite expliquer la variable **Salary** par les autres variables du jeu de données. On supprime les individus qui possèdent des données manquantes.

```
> library(ISLR)
> Hitters <- na.omit(Hitters)
```

1. Parmi les variables explicatives, certaines sont qualitatives. Expliquer comment, à l'aide de la fonction **model.matrix** on peut utiliser ces variables dans un modèle linéaire. On appellera **X** la matrice des variables explicatives construites avec cette variable.
   *Comme pour le modèle linéaire, on utilise des contraintes identifiantes. Cela revient à prendre une modalité de référence et à coder les autres modalités par 0-1.*
   ```
   > X <- model.matrix(Salary~.,data=Hitters)[,-1]
   ```
2. Calculer la matrice **Xcr** qui correspond à la matrice **X** centrée réduite. On pourra utiliser la fonction `scale`.
   ```
   > Xcr <- scale(X)
   > Xbar  <- apply(X,2,mean)
   > stdX <- apply(X,2,sd)
   ```
3. A l'aide de la fonction `PCA` du package **FactoMineR**, effectuer l'ACP du tableau **Xcr** avec l'option `scale.unit=FALSE`.
   *On utilise ici `scale.unit=FALSE` car les données sont déjà centrées-réduites. Ca nous permet de contrôler cette étape.*
   ```
   > library(FactoMineR)
   > acp.hit <- PCA(Xcr,scale.unit=FALSE,graph=TRUE)
   ```


PCA graph of individuals
Dim 2 (21.84%)
Dim 1 (38.31%)
Don Mattingly
Wally Joyner
Tony Fernandez
Robby
Henderson
Steve Garvey
Darrell Ev
Joel
Terry Puhl
Chris Speier
Ted Simmons
Pete Rose
5
0
−5
−5
0
5
10


PCA graph of variables
Dim 2 (21.84%)
Dim 1 (38.31%)
AtBat
Hits
Runs
RBI
HmRun
Walks
Errors
Assists
PutOuts
DivisionW
NewLeagueN
LeagueN
CRuns
CHmRun
CRBI
CHits
CWalks
CAtBat
Years
1.0
0.5
0.0
−0.5
−1.0
−1.0
−0.5
0.0
0.5
1.0

4. Récupérer les coordonnées des individus sur les 5 premiers axes de l'ACP (variables $Z$ dans le cours).

```
> Z <- acp.hit$ind$coord
```

5. Effectuer la régression linéaire sur les 5 premières composantes principales et calculer les estimateurs des MCO ($\widehat{\theta}_k, k = 1, \ldots, 5$ dans le cours).

```
> donnees <- cbind.data.frame(Z,Salary=Hitters$Salary)
> mod <- lm(Salary~.,data=donnees)
> theta <- coef(mod)
> theta
## (Intercept)       Dim.1       Dim.2       Dim.3       Dim.4       Dim.5
##   535.92588   106.57139    21.64469    24.34057    37.05637   -58.52540
```

***Remarque*** *: on peut aussi tout faire "à la main" (sans utiliser* ***PCA****)*

```
> acp.main <- eigen(t(Xcr)%*%Xcr)
> U <- acp.main$vectors
> CC <- Xcr%*%(-U[,1:5])
> D <- cbind.data.frame(CC,Salary=Hitters$Salary)
> modS <- lm(Salary~.,data=D)
> coefS <- modS$coefficients
> coef(modS)
## (Intercept)          `1`          `2`          `3`          `4`          `5`
##   535.92588   106.57139    21.64469    24.34057    37.05637   -58.52540
```

6. En déduire les estimateurs dans l'espace des données initiales pour les données centrées réduites, puis pour les données brutes. On pourra récupérer les vecteurs propres de l'ACP ($u_k$ dans le cours) dans la sortie **svd** de la fonction **PCA**

— *Pour les données centrées-réduites, les coefficients s'obtiennent avec les formules vues en cours*

$$\widehat{\beta}_0 = \bar{y} \quad et \quad \widehat{\beta}_j = \widehat{\theta}' v_j.$$

```
> U <- acp.hit$svd$V
> V <- t(U)
> beta0.cr <- mean(Hitters$Salary)
> beta.cr <- as.vector(theta[2:6])%*%V
> beta.cr
##          [,1]     [,2]     [,3]     [,4]     [,5]     [,6]     [,7]     [,8]
## [1,] 28.76604 30.44702 25.8445 33.00088 33.81997 35.08779 22.35103 29.01477
##          [,9]    [,10]    [,11]    [,12]    [,13]   [,14]     [,15]    [,16]
## [1,] 29.78584 30.00201 32.06912 31.11231 31.48735 19.439 -63.20387 17.36044
##          [,17]     [,18]    [,19]
## [1,] -5.523264 -6.044002 21.74267
```

— *Pour les données brutes, on utilise les formules :*

$$\widehat{\beta}_0 = \bar{y} - \sum_{j=1}^{p} \widehat{\theta}' v_j \frac{\bar{x}_j}{\sigma_{x_j}} \quad et \quad \widehat{\beta}_j = \frac{\widehat{\theta}' v_j}{\sigma_{X_j}}, j = 1, \ldots, p.$$

```
> beta0 <- beta0.cr-sum(beta.cr*Xbar/stdX)
> beta <- beta.cr/stdX
> beta0
## [1] -58.32022
> beta
##           [,1]      [,2]    [,3]     [,4]     [,5]     [,6]     [,7]       [,8]
## [1,] 0.1952793 0.6747214 2.95126 1.292134 1.306662 1.615605 4.662667 0.01268914
```

```
##            [,9]     [,10]      [,11]      [,12]    [,13]    [,14]   [,15]
## [1,] 0.04595165 0.3649987 0.09682748 0.09621344 0.119245 38.86728 -126.19
##           [,16]       [,17]      [,18]    [,19]
## [1,] 0.06201606 -0.03807032 -0.9148466 43.51629
```

7. Retrouver les estimateurs dans l'espace des données initiales pour les données centrées réduites à l'aide de la fonction `pcr` du package **pls**.

```
> library(pls)
> pcr.fit <- pcr(Salary~.,data=Hitters,scale=TRUE,ncomp=19)
> coefficients(pcr.fit,ncomp=5)
## , , 5 comps
##
##                Salary
## AtBat       28.766042
## Hits        30.447021
## HmRun       25.844498
## Runs        33.000876
## RBI         33.819966
## Walks       35.087794
## Years       22.351033
## CAtBat      29.014768
## CHits       29.785842
## CHmRun      30.002014
## CRuns       32.069124
## CRBI        31.112315
## CWalks      31.487349
## LeagueN     19.438996
## DivisionW  -63.203872
## PutOuts     17.360440
## Assists     -5.523264
## Errors      -6.044002
## NewLeagueN  21.742668
```

8. On considère les individus suivants

```
> df.new <- Hitters[c(1,100,80),]
```

Calculer de 3 façons différentes les valeurs de salaire prédites par la régression sur 5 composantes principales.

— *Approche classique : on utilise* ***predict.pcr*** *:*

```
> predict(pcr.fit,newdata=df.new,ncomp=5)
## , , 5 comps
##
##                  Salary
## -Alan Ashby    495.0068
## -Hubie Brooks 577.9581
## -George Bell   822.0296
```

— *On considère les valeurs centrées réduites et on utilise :*

$$\widehat{y} = \bar{y} + \widehat{\theta}' v_1 \tilde{x}_1 + \cdots + \widehat{\theta}' v_p \tilde{x}_p$$

```
> t(as.matrix(coefficients(pcr.fit,ncomp=5))) %*%
+   t(as.matrix(Xcr[c(1,100,80),]))+mean(Hitters$Salary)
##      -Alan Ashby -Hubie Brooks -George Bell
```

```
## [1,]    495.0068      577.9581     822.0296
> #ou
> beta0.cr+beta.cr%*%t(as.matrix(Xcr[c(1,100,80),]))
##      -Alan Ashby -Hubie Brooks -George Bell
## [1,]    495.0068      577.9581     822.0296
```

— *On considère les données brutes et on utilise :*

$$\widehat{y} = \widehat{\beta}_0 + \widehat{\beta}_1 x_1 + \cdots + \widehat{\beta}_p x_p$$

```
> beta0+beta %*% t(as.matrix(X[c(1,100,80),]))
##      -Alan Ashby -Hubie Brooks -George Bell
## [1,]    495.0068      577.9581     822.0296
```

## 2.2 Régression PLS : méthodo

On considère les mêmes données que précédemment.

1. A l'aide du vecteur $Y$ (*Salary*) et de la matrice des $X$ centrées réduites calculées dans l'exercice précédent, calculer la première composante **PLS** $Z_1$.

```
> Y <- as.vector(Hitters$Salary)
> w1 <- t(Xcr)%*%Y
> w1
##                   [,1]
## AtBat       46659.1995
## Hits        51848.3247
## HmRun       40543.5500
## Runs        49624.3823
## RBI         53122.7240
## Walks       52462.0450
## Years       47354.8899
## CAtBat      62185.5603
## CHits       64877.3193
## CHmRun      62043.1671
## CRuns       66504.6198
## CRBI        67011.4288
## CWalks      57893.5821
## LeagueN     -1688.0134
## DivisionW  -22753.8726
## PutOuts     35514.7030
## Assists      3006.3756
## Errors       -638.3256
## NewLeagueN   -335.0136
> Z1 <- Xcr%*%w1
```

2. En déduire le coefficient associé à cette première composante en considérant le modèle

$$Y = \alpha_1 Z_1 + \varepsilon.$$

```
> df <- data.frame(Z1,Y)
> mod1 <- lm(Y~Z1-1,data=df)
> alpha1 <- coef(mod1)
> alpha1
##           Z1
## 0.0005367014
```

3. En déduire les coefficients en fonction des variables initiales (centrées réduites) de la régression PLS à une composante

$$Y = \beta_0 + \beta_1 X_1 + \cdots + \beta_p X_p + \varepsilon.$$

```
> alpha1*w1
##                   [,1]
## AtBat        25.0420570
## Hits         27.8270677
## HmRun        21.7597795
## Runs         26.6334747
## RBI          28.5110396
## Walks        28.1564522
## Years        25.4154350
## CAtBat       33.3750764
## CHits        34.8197471
## CHmRun       33.2986538
## CRuns        35.6931216
## CRBI         35.9651267
## CWalks       31.0715657
## LeagueN      -0.9059591
## DivisionW   -12.2120349
## PutOuts      19.0607903
## Assists       1.6135259
## Errors       -0.3425902
## NewLeagueN   -0.1798022
```

4. Retrouver ces coefficients en utilisant la fonction `plsr`.

```
> pls.fit <- plsr(Salary~.,data=Hitters,scale=TRUE)
> coefficients(pls.fit,ncomp = 1)
## , , 1 comps
##
##                  Salary
## AtBat        25.0420570
## Hits         27.8270677
## HmRun        21.7597795
## Runs         26.6334747
## RBI          28.5110396
## Walks        28.1564522
## Years        25.4154350
## CAtBat       33.3750764
## CHits        34.8197471
## CHmRun       33.2986538
## CRuns        35.6931216
## CRBI         35.9651267
## CWalks       31.0715657
## LeagueN      -0.9059591
## DivisionW   -12.2120349
## PutOuts      19.0607903
## Assists       1.6135259
## Errors       -0.3425902
## NewLeagueN   -0.1798022
```

## 2.3 Comparaison : PCR vs PLS.

1. Séparer le jeu de données en un échantillon d'apprentissage de taille 200 et un échantillon test de taille 63.

```
> set.seed(1234)
> perm <- sample(nrow(Hitters))
> dapp <- Hitters[perm[1:200],]
> dtest <- Hitters[perm[201:nrow(Hitters)],]
```

2. Avec les données d'apprentissage uniquement construire les régressions PCR et PLS. On choisira les nombres de composantes par validation croisée.

```
> choix.pcr <- pcr(Salary~.,data=dapp,validation="CV")
> ncomp.pcr <- which.min(choix.pcr$validation$PRESS)
```

```
> choix.pls <- plsr(Salary~.,data=dapp,validation="CV")
> ncomp.pls <- which.min(choix.pls$validation$PRESS)
```

3. Comparer les deux méthodes en utilisant l'échantillon de validation. On pourra également utiliser un modèle linéaire classique.

```
> mod.lin <- lm(Salary~.,data=dapp)
```

```
> prev <- data.frame(
+   lin=predict(mod.lin,newdata=dtest),
+   pcr=as.vector(predict(choix.pcr,newdata = dtest,ncomp=ncomp.pcr)),
+   pls=as.vector(predict(choix.pls,newdata = dtest,ncomp=ncomp.pls)),
+   obs=dtest$Salary
+ )
```

```
> prev %>% summarize_at(1:3,~(mean((.-obs)^2))) %>% sqrt()
##        lin      pcr      pls
## 1 334.8819 348.3943 342.7771
```

4. Comparer ces méthodes en faisant une validation croisée 10 blocs.
*On définit d'abord les 10 blocs pour la validation croisée.*

```
> set.seed(1234)
> bloc <- sample(1:10,nrow(Hitters),replace=TRUE)
> table(bloc)
## bloc
##  1  2  3  4  5  6  7  8  9 10
## 19 22 31 29 28 39 19 26 25 25
```

```
> set.seed(4321)
> prev <- data.frame(matrix(0,nrow=nrow(Hitters),ncol=3))
> names(prev) <- c("lin","PCR","PLS")
> for (k in 1:10){
+ #  print(k)
+   ind.test <- bloc==k
+   dapp <- Hitters[!ind.test,]
+   dtest <- Hitters[ind.test,]
+   choix.pcr <- pcr(Salary~.,data=dapp,validation="CV")
+   ncomp.pcr <- which.min(choix.pcr$validation$PRESS)
+   choix.pls <- plsr(Salary~.,data=dapp,validation="CV")
+   ncomp.pls <- which.min(choix.pls$validation$PRESS)
+   mod.lin <- lm(Salary~.,data=dapp)
+   prev[ind.test,] <- data.frame(
+ lin=predict(mod.lin,newdata=dtest),
+ PCR=as.vector(predict(choix.pcr,newdata = dtest,ncomp=ncomp.pcr)),
```

```
+ PLS=as.vector(predict(choix.pls,newdata = dtest,ncomp=ncomp.pls)))
+ }
```

```
> prev %>% mutate(obs=Hitters$Salary) %>% summarize_at(1:3,~(mean((.-obs)^2))) %>% sqrt()
##        lin      PCR      PLS
## 1 340.0631 343.8019 350.6712
```

*On compare à un modèle qui prédit toujours la moyenne :*

```
> var(Hitters$Salary) %>% sqrt()
## [1] 451.1187
```

*On peut retenter l'analyse en considérant toutes les interactions d'ordre 2 :*

```
> set.seed(54321)
> prev1 <- data.frame(matrix(0,nrow=nrow(Hitters),ncol=3))
> names(prev1) <- c("lin","PCR","PLS")
> for (k in 1:10){
+ #  print(k)
+   ind.test <- bloc==k
+   dapp <- Hitters[!ind.test,]
+   dtest <- Hitters[ind.test,]
+   choix.pcr <- pcr(Salary~.^2,data=dapp,validation="CV")
+   ncomp.pcr <- which.min(choix.pcr$validation$PRESS)
+   choix.pls <- plsr(Salary~.^2,data=dapp,validation="CV")
+   ncomp.pls <- which.min(choix.pls$validation$PRESS)
+   mod.lin <- lm(Salary~.^2,data=dapp)
+   prev1[ind.test,] <- data.frame(
+ lin=predict(mod.lin,newdata=dtest),
+ PCR=as.vector(predict(choix.pcr,newdata = dtest,ncomp=ncomp.pcr)),
+ PLS=as.vector(predict(choix.pls,newdata = dtest,ncomp=ncomp.pls)))
+ }
```

*On obtient les performances suivantes :*

```
> prev1 %>% mutate(obs=Hitters$Salary) %>% summarize_at(1:3,~(mean((.-obs)^2))) %>% sqrt()
##        lin      PCR      PLS
## 1 1494.847 330.0474 349.1116
```

*On mesure bien l'intérêt de réduire la dimension dans ce nouveau contexte.*