# Régression en grande dimension

Laurent Rouvière

2020-07-05

## 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** ;
- `Régressions 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 $B \times 4$.

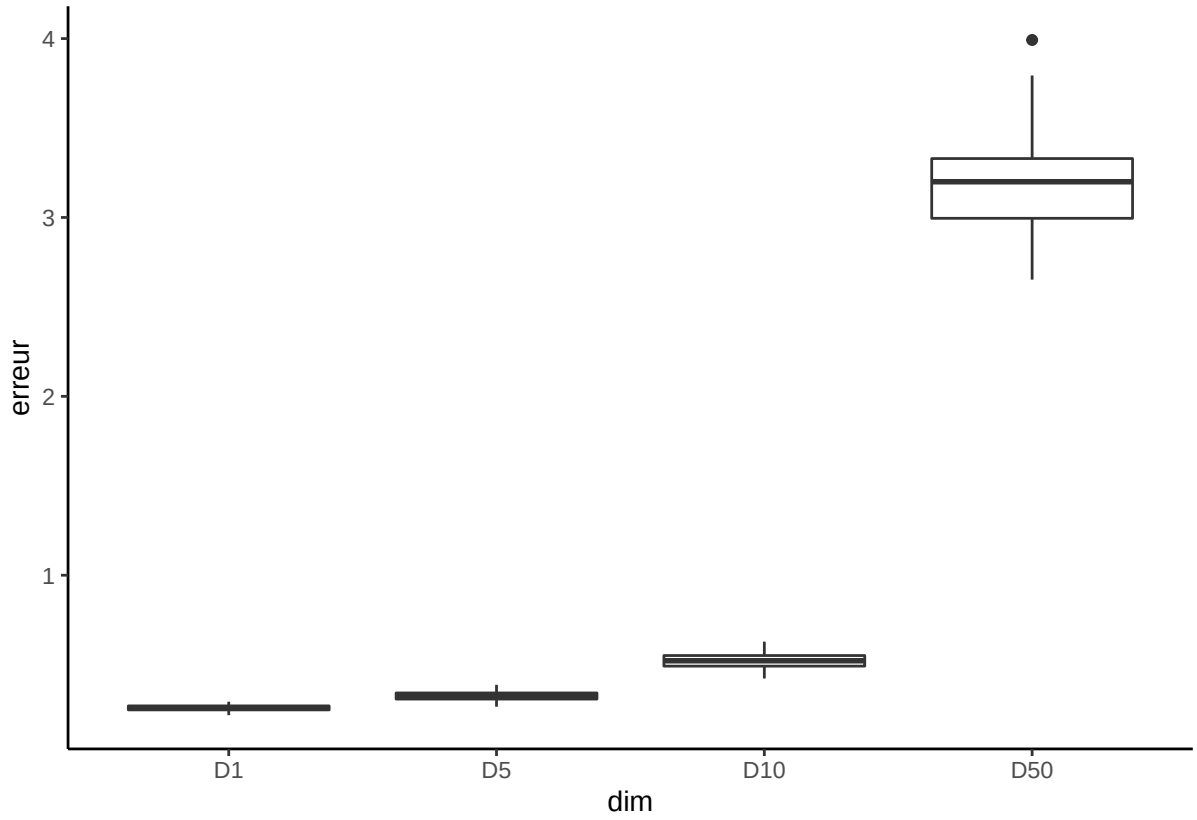
```
B <- 100
mat.err <- matrix(0,ncol=length(DIM),nrow=B)
for (p in 1:length(DIM)){
  for (i in 1:B){
df <- simu(napp=300,ntest=500,p=DIM[p],graine=1234*p+2*i)
k.opt <- sel.k(K_cand,df$Xapp,df$Yapp)
prev <- knn.reg(train=df$Xapp,y=df$Yapp,test=df$Xtest,k=k.opt)$pred
mat.err[i,p] <- mean((prev-df$Ytest)^2)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

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()
```




4. 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 $\widehat{\beta}_1$ :

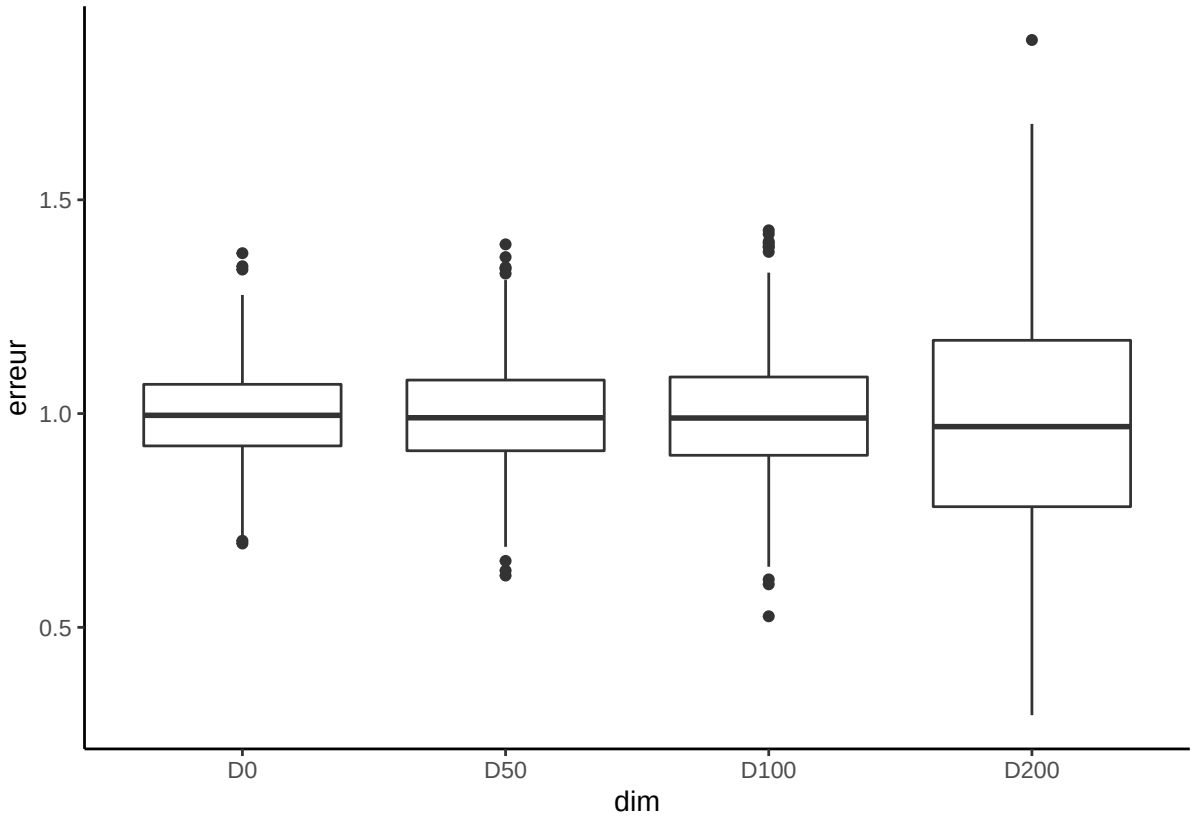
```
df <- data.frame(matbeta1)
nom.dim <- paste("D",DIM,sep="")
names(df) <- nom.dim
```

— 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 Giraud (2015))**.**

Soit $X^{(1)} = (X_1^{(1)}, \ldots, X_p^{(1)})$ et $X^{(2)} = (X_1^{(2)}, \ldots, X_p^{(2)})$ 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 $i = 1, \dots, n$

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

   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

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

   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

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

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

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

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

On déduit

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

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

Les performances des estimateurs classiques (MCO) des paramètres du modèle linéaire

$$Y = \beta_0 + \beta_1 X_1 + \cdots + \beta_d X_d + \varepsilon$$

peuvent se dégrader lorsque la dimension $d$ est grande ou en présence de dépendance linéaire entre les variables explicatives. Les régressions sur composantes consistent à trouver de nouvelles composantes $Z_k, j = k, \ldots, q$ avec $q \leq p$ qui s'écrivent le plus souvent comme des combinaisons linéaires des $X_j$ dans l'idée de diminuer le nombre de paramètres du modèlé ou la dépendance entre les covariables. Il existe plusieurs façons de construire ces composantes, dans cette partie nous proposons :

— la **régression sous composantes principales (PCR)** : il s'agit de faire simplement une ACP sur la matrice des variables explicatives ;
— la **régression partial least square (PLS)** qui fait intervenir la variable cible dans la construction des composantes.

Nous commençons par un bref rappel sur la sélection de variables.

## 2.1 Sélection de variables

On considère le jeu de données `ozone.txt` où on cherche à expliquer la concentration maximale en ozone relevée sur une journée (variable `maxO3`) par d'autres variables essentiellement météorologiques.

```
ozone <- read.table("data/ozone.txt")
head(ozone)
         maxO3   T9  T12  T15 Ne9 Ne12 Ne15     Vx9    Vx12
20010601    87 15.6 18.5 18.4   4    4    8  0.6946 -1.7101
20010602    82 17.0 18.4 17.7   5    5    7 -4.3301 -4.0000
20010603    92 15.3 17.6 19.5   2    5    4  2.9544  1.8794
20010604   114 16.2 19.7 22.5   1    1    0  0.9848  0.3473
20010605    94 17.4 20.5 20.4   8    8    7 -0.5000 -2.9544
20010606    80 17.7 19.8 18.3   6    6    7 -5.6382 -5.0000
            Vx15 maxO3v  vent pluie
20010601 -0.6946     84  Nord   Sec
20010602 -3.0000     87  Nord   Sec
20010603  0.5209     82   Est   Sec
20010604 -0.1736     92  Nord   Sec
20010605 -4.3301    114 Ouest   Sec
20010606 -6.0000     94 Ouest Pluie
```

1. Ajuster un modèle linéaire avec `lm` et analyser la pertinence des variables explicatives dans le modèle.

```
lin.complet <- lm(maxO3~.,data=ozone)
summary(lin.complet)

Call:
lm(formula = maxO3 ~ ., data = ozone)

Residuals:
    Min      1Q  Median      3Q     Max
-51.814  -8.695  -1.020   7.891  40.046

Coefficients:
            Estimate Std. Error t value Pr(>|t|)
(Intercept) 16.26536   15.94398   1.020   0.3102
T9           0.03917    1.16496   0.034   0.9732
T12          1.97257    1.47570   1.337   0.1844
T15          0.45031    1.18707   0.379   0.7053
Ne9         -2.10975    0.95985  -2.198   0.0303 *
Ne12        -0.60559    1.42634  -0.425   0.6721
Ne15        -0.01718    1.03589  -0.017   0.9868
Vx9          0.48261    0.98762   0.489   0.6262
Vx12         0.51379    1.24717   0.412   0.6813
Vx15         0.72662    0.95198   0.763   0.4471
maxO3v       0.34438    0.06699   5.141 1.42e-06 ***
ventNord     0.53956    6.69459   0.081   0.9359
ventOuest    5.53632    8.24792   0.671   0.5037
ventSud      5.42028    7.16180   0.757   0.4510
pluieSec     3.24713    3.48251   0.932   0.3534
---
Signif. codes:
0 '***' 0.001 '**' 0.01 '*' 0.05 '.' 0.1 ' ' 1

Residual standard error: 14.51 on 97 degrees of freedom
Multiple R-squared:  0.7686,        Adjusted R-squared:  0.7352
F-statistic: 23.01 on 14 and 97 DF,  p-value: < 2.2e-16
anova(lin.complet)
```

```
Analysis of Variance Table

Response: maxO3
          Df Sum Sq Mean Sq  F value    Pr(>F)
T9         1  43138   43138 205.0160 < 2.2e-16 ***
T12        1  11125   11125  52.8706 9.165e-11 ***
T15        1    876     876   4.1619 0.0440614 *
Ne9        1   3244    3244  15.4170 0.0001613 ***
Ne12       1    232     232   1.1035 0.2961089
Ne15       1      5       5   0.0248 0.8752847
Vx9        1   2217    2217  10.5355 0.0016079 **
Vx12       1      1       1   0.0049 0.9443039
Vx15       1     67      67   0.3186 0.5737491
maxO3v     1   6460    6460  30.6993 2.584e-07 ***
vent       3    234      78   0.3709 0.7741473
pluie      1    183     183   0.8694 0.3534399
Residuals 97  20410     210
---
Signif. codes:
0 '***' 0.001 '**' 0.01 '*' 0.05 '.' 0.1 ' ' 1
```

*Il semble que quelques variables ne sont pas nécessaires dans le modèle.*

2. Expliquer les sorties de la commande

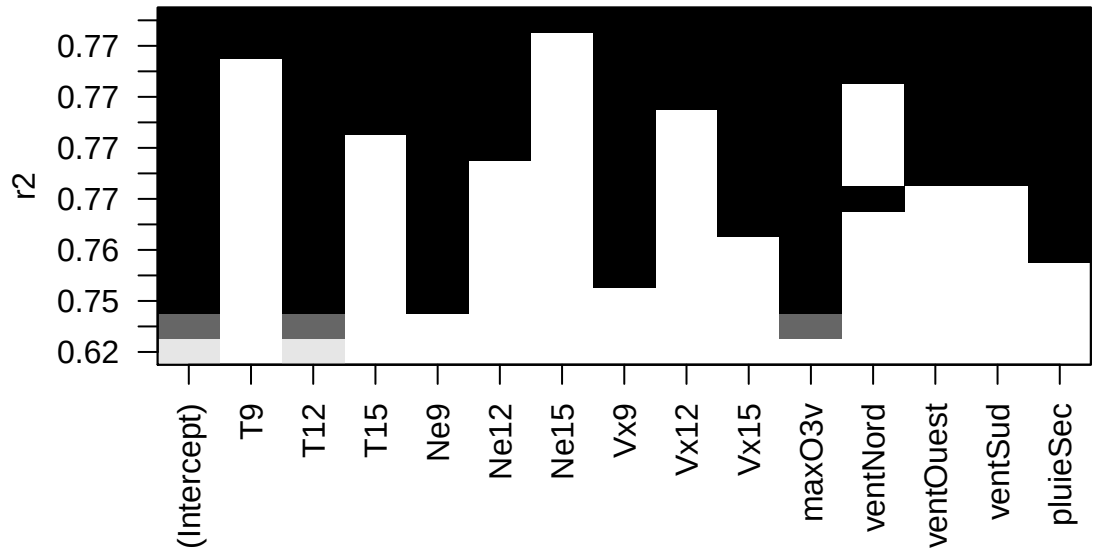
```
library(leaps)
mod.sel <- regsubsets(maxO3~.,data=ozone,nvmax=14)
summary(mod.sel)
Subset selection object
Call: regsubsets.formula(maxO3 ~ ., data = ozone, nvmax = 14)
14 Variables  (and intercept)
          Forced in Forced out
T9            FALSE      FALSE
T12           FALSE      FALSE
T15           FALSE      FALSE
Ne9           FALSE      FALSE
Ne12          FALSE      FALSE
Ne15          FALSE      FALSE
Vx9           FALSE      FALSE
Vx12          FALSE      FALSE
Vx15          FALSE      FALSE
maxO3v        FALSE      FALSE
ventNord      FALSE      FALSE
ventOuest     FALSE      FALSE
ventSud       FALSE      FALSE
pluieSec      FALSE      FALSE
1 subsets of each size up to 14
Selection Algorithm: exhaustive
          T9  T12 T15 Ne9 Ne12 Ne15 Vx9 Vx12 Vx15 maxO3v
1  ( 1 )  " " "*" " " " " " " "  " "  " " " "  " "  " "
2  ( 1 )  " " "*" " " " " " " "  " "  " " " "  " "  "*"
3  ( 1 )  " " "*" " " "*" " " "  " "  " " " "  " "  "*"
4  ( 1 )  " " "*" " " "*" " " "  " "  "*" " "  " "  "*"
5  ( 1 )  " " "*" " " "*" " " "  " "  "*" " "  " "  "*"
6  ( 1 )  " " "*" " " "*" " " "  " "  "*" " "  "*"  "*"
7  ( 1 )  " " "*" " " "*" " " "  " "  "*" " "  "*"  "*"
```

```
8  ( 1 )  " " "*" " " "*" " "  " "  "*" " "  "*"  "*"
9  ( 1 )  " " "*" " " "*" "*"  " "  "*" " "  "*"  "*"
10  ( 1 ) " " "*" "*" "*" "*"  " "  "*" " "  "*"  "*"
11  ( 1 ) " " "*" "*" "*" "*"  " "  "*" "*"  "*"  "*"
12  ( 1 ) " " "*" "*" "*" "*"  " "  "*" "*"  "*"  "*"
13  ( 1 ) "*" "*" "*" "*" "*"  " "  "*" "*"  "*"  "*"
14  ( 1 ) "*" "*" "*" "*" "*"  "*"  "*" "*"  "*"  "*"
          ventNord ventOuest ventSud pluieSec
1  ( 1 )  " "      " "       " "     " "
2  ( 1 )  " "      " "       " "     " "
3  ( 1 )  " "      " "       " "     " "
4  ( 1 )  " "      " "       " "     " "
5  ( 1 )  " "      " "       " "     "*"
6  ( 1 )  " "      " "       " "     "*"
7  ( 1 )  "*"      " "       " "     "*"
8  ( 1 )  " "      "*"       "*"     "*"
9  ( 1 )  " "      "*"       "*"     "*"
10  ( 1 ) " "      "*"       "*"     "*"
11  ( 1 ) " "      "*"       "*"     "*"
12  ( 1 ) "*"      "*"       "*"     "*"
13  ( 1 ) "*"      "*"       "*"     "*"
14  ( 1 ) "*"      "*"       "*"     "*"
```

*On obtient une table avec des étoiles qui permettent de visualiser les meilleurs modèles à* $1, 2, \ldots, 8$ *variables au sens du* $R^2$.

3. Sélectionner le meilleur modèle au sens du $R^2$. Que remarquez-vous ?

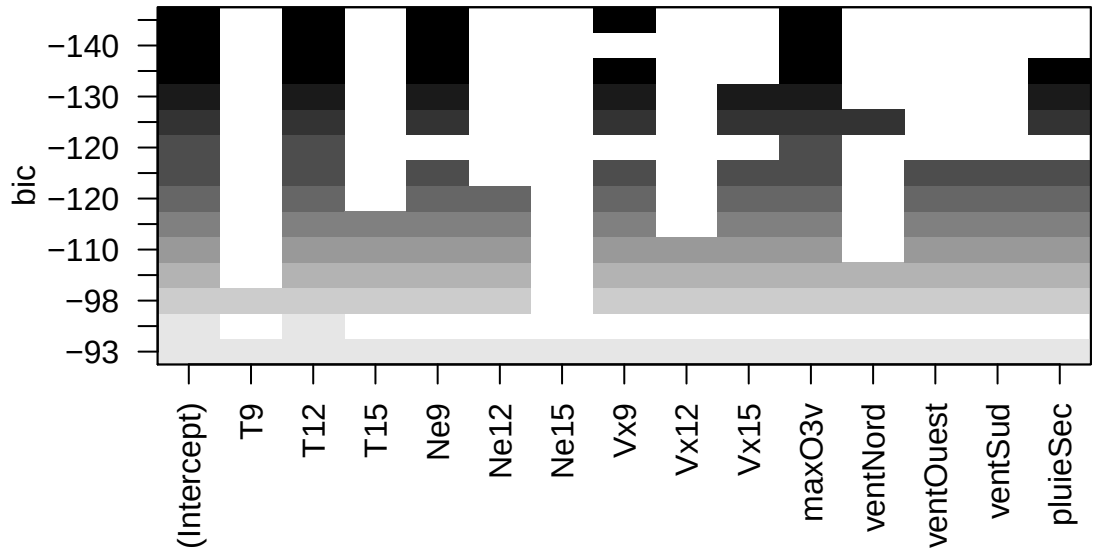
```
plot(mod.sel,scale="r2")
```



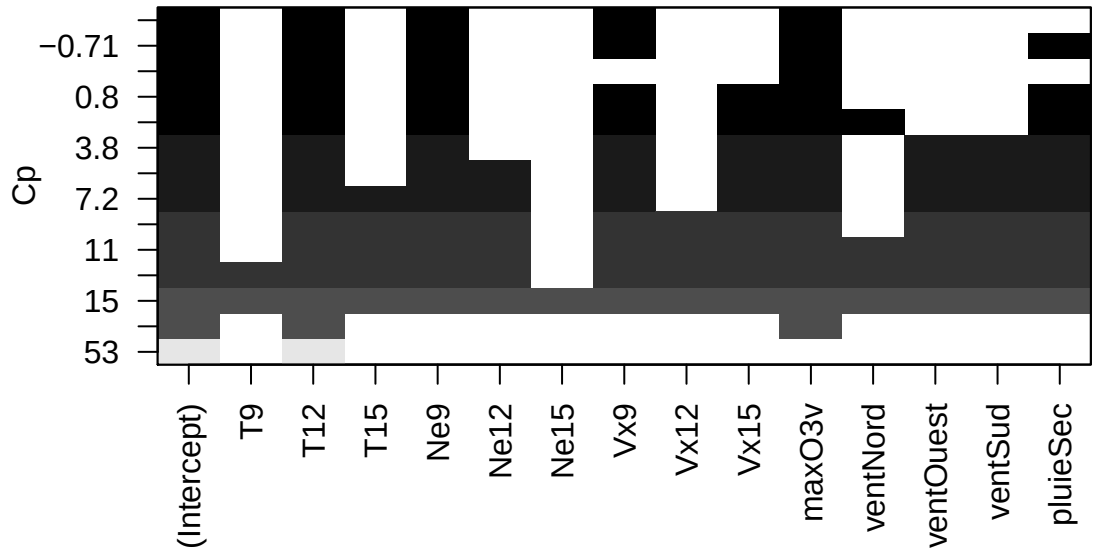

*Le meilleur modèle est le modèle complet. C'est logique puisque le* $R^2$ *va toujours privilégier le modèle le plus complexe, c'est un critère* `d'ajustement`.

4. Faire de même pour le $C_p$ et le $BIC$. Que remarquez-vous pour les variables explicatives qualitatives ?

```
plot(mod.sel,scale="bic")
```




```
plot(mod.sel,scale="Cp")
```




*Ces critères choisissent ici le même modèle, avec 4 variables. On remarque que les variables qualitatives ne sont* ***pas réellement traitées comme des variables*** *: une modalité est égale à une variable. Par conséquent, cette procédure ne permet pas vraiment de sélectionner des variables qualitatives.*

5. Comparer cette méthode avec des modèles sélectionnées par la fonction `step` ou la fonction `bestglm` du package `bestglm`.

   — *La fonction* ***step*** *permet de faire de la sélection* ***pas à pas****. Par exemple, pour une procédure* ***descendante*** *avec le critère AIC on utilisera :*

```
mod.step <- step(lin.complet,direction="backward",trace=0)
mod.step

Call:
lm(formula = maxO3 ~ T12 + Ne9 + Vx9 + maxO3v, data = ozone)

Coefficients:
(Intercept)          T12          Ne9          Vx9
```

```
    12.6313       2.7641      -2.5154       1.2929
     maxO3v
     0.3548
```

— *La fonction* `bestglm` *permet quant à elle de faire des sélections exhaustive ou pas à pas, on pour l'utiliser pour tous les* ***glm****. Attention les variables qualitatives doivent être des facteurs et la variable à expliquer doit être positionnée en dernière colonne pour cette fonction.*

```
ozone1 <- ozone %>% mutate(vent=as.factor(vent),pluie=as.factor(pluie)) %>%
  select(-maxO3,everything())
library(bestglm)
model.bglm <- bestglm(ozone1,IC="BIC")
model.bglm$BestModel %>% summary()

Call:
lm(formula = y ~ ., data = data.frame(Xy[, c(bestset[-1], FALSE),
    drop = FALSE], y = y))

Residuals:
    Min      1Q  Median      3Q     Max
-52.396  -8.377  -1.086   7.951  40.933

Coefficients:
            Estimate Std. Error t value Pr(>|t|)
(Intercept) 12.63131   11.00088   1.148 0.253443
T12          2.76409    0.47450   5.825 6.07e-08 ***
Ne9         -2.51540    0.67585  -3.722 0.000317 ***
Vx9          1.29286    0.60218   2.147 0.034055 *
maxO3v       0.35483    0.05789   6.130 1.50e-08 ***
---
Signif. codes:
0 '***' 0.001 '**' 0.01 '*' 0.05 '.' 0.1 ' ' 1

Residual standard error: 14 on 107 degrees of freedom
Multiple R-squared:  0.7622,        Adjusted R-squared:  0.7533
F-statistic: 85.75 on 4 and 107 DF,  p-value: < 2.2e-16
```

## 2.2 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]
   ```

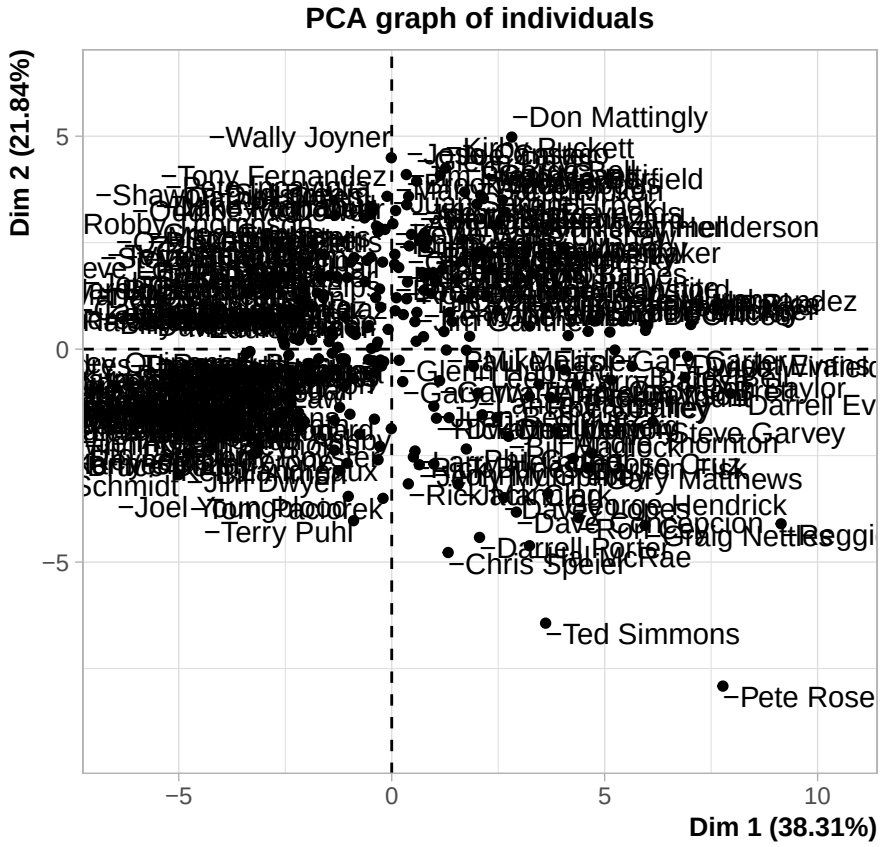
2. Calculer la matrice **Xcr** qui correspond à la matrice **X** centrée réduite. On pourra utiliser la fonction `scale`.

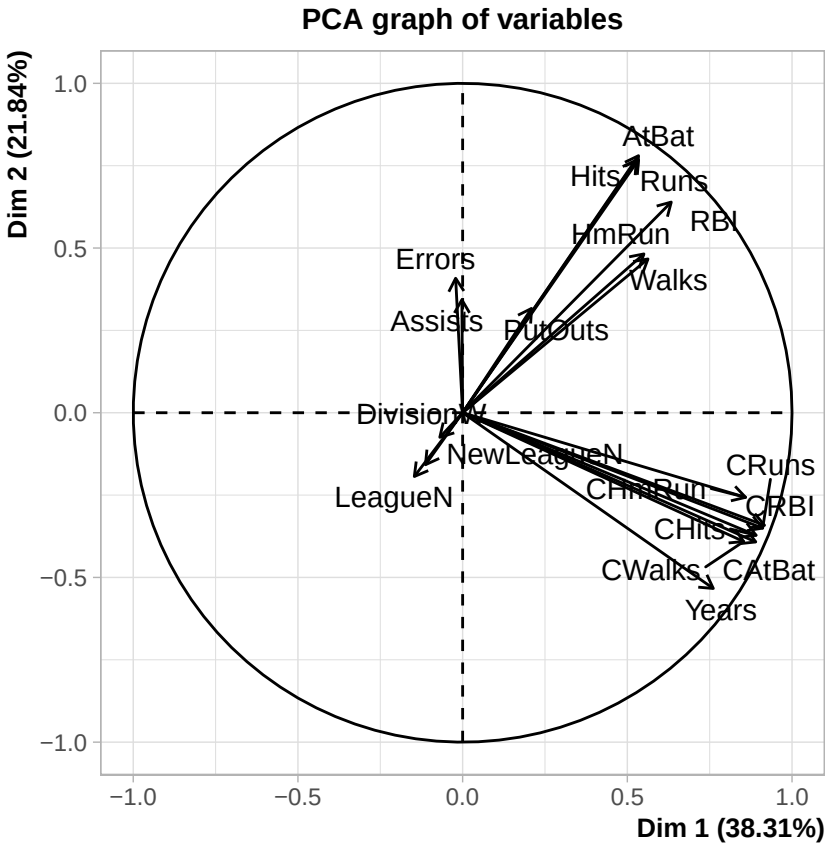
```
Xcr <- scale(X)
Xbar  <- apply(X,2,mean)
stdX <- apply(X,2,sd)
```

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)
```






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
  535.92588   106.57139    21.64469    24.34057    37.05637
      Dim.5
  -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`
  535.92588   106.57139    21.64469    24.34057    37.05637
        `5`
  -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]
[1,] 28.76604 30.44702 25.8445 33.00088 33.81997 35.08779
         [,7]     [,8]     [,9]    [,10]    [,11]    [,12]
[1,] 22.35103 29.01477 29.78584 30.00201 32.06912 31.11231
        [,13]   [,14]     [,15]    [,16]     [,17]     [,18]
[1,] 31.48735 19.439 -63.20387 17.36044 -5.523264 -6.044002
        [,19]
[1,] 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]
[1,] 0.1952793 0.6747214 2.95126 1.292134 1.306662 1.615605
         [,7]       [,8]       [,9]     [,10]      [,11]
[1,] 4.662667 0.01268914 0.04595165 0.3649987 0.09682748
          [,12]    [,13]    [,14]   [,15]      [,16]
[1,] 0.09621344 0.119245 38.86728 -126.19 0.06201606
           [,17]      [,18]    [,19]
[1,] -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
```

## 2.3 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
```

## 2.4 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.*

# 3 Régressions pénalisées (ou sous contraintes)

Nous considérons toujours le modèle linéaire

$$Y = \beta_0 + \beta_1 X_1 + \cdots + \beta_d X_d + \varepsilon$$

Lorsque $d$ est grand ou que les variables sont linéairement dépendantes, les estimateurs des moindres carrées peuvent être mis en défaut. Les méthodes pénalisées ou sous contraintes consistent alors à restreindre l'espace sur lequel on minimise ce critère. On va alors chercher le vecteur $\beta$ qui minimise

$$\sum_{i=1}^{n}\left(y_i - \beta_0 - \sum_{j=1}^{d} x_{ij}\beta_j\right)^2 \quad \text{sous la contrainte} \quad \sum_{j=1}^{d}\beta_j^2 \leq t$$

ou de façon équivalente (dans le sens où il existe une équivalence entre $t$ et $\lambda$)

$$\sum_{i=1}^{n}\left(y_i - \beta_0 - \sum_{j=1}^{d} x_{ij}\beta_j\right)^2 + \lambda\sum_{j=1}^{d}\beta_j^2.$$

Les estimateurs obtenus sont les estimateurs **ridge**. Les estimateurs **lasso** s'obtiennent en remplaçant la contrainte ou la pénalité par une norme 1 ($\sum_{j=1}^{d}|\beta_j|$). Nous présentons dans cette partie les étapes principales qui permettent de faire ce type de régression avec **R**. Le package le plus souvent utilisé est `glmnet`.

## 3.1 Ridge et lasso avec glmnet

On considère le jeu de données `ozone.txt` où on cherche à expliquer la concentration maximale en ozone relevée sur une journée (variable `maxO3`) par d'autres variables essentiellement météorologiques.

```
ozone <- read.table("data/ozone.txt")
head(ozone)
         maxO3   T9  T12  T15 Ne9 Ne12 Ne15     Vx9    Vx12
20010601    87 15.6 18.5 18.4   4    4    8  0.6946 -1.7101
20010602    82 17.0 18.4 17.7   5    5    7 -4.3301 -4.0000
20010603    92 15.3 17.6 19.5   2    5    4  2.9544  1.8794
```

```
20010604   114 16.2 19.7 22.5   1    1    0  0.9848  0.3473
20010605    94 17.4 20.5 20.4   8    8    7 -0.5000 -2.9544
20010606    80 17.7 19.8 18.3   6    6    7 -5.6382 -5.0000
            Vx15 maxO3v  vent pluie
20010601 -0.6946     84  Nord   Sec
20010602 -3.0000     87  Nord   Sec
20010603  0.5209     82   Est   Sec
20010604 -0.1736     92  Nord   Sec
20010605 -4.3301    114 Ouest   Sec
20010606 -6.0000     94 Ouest Pluie
```

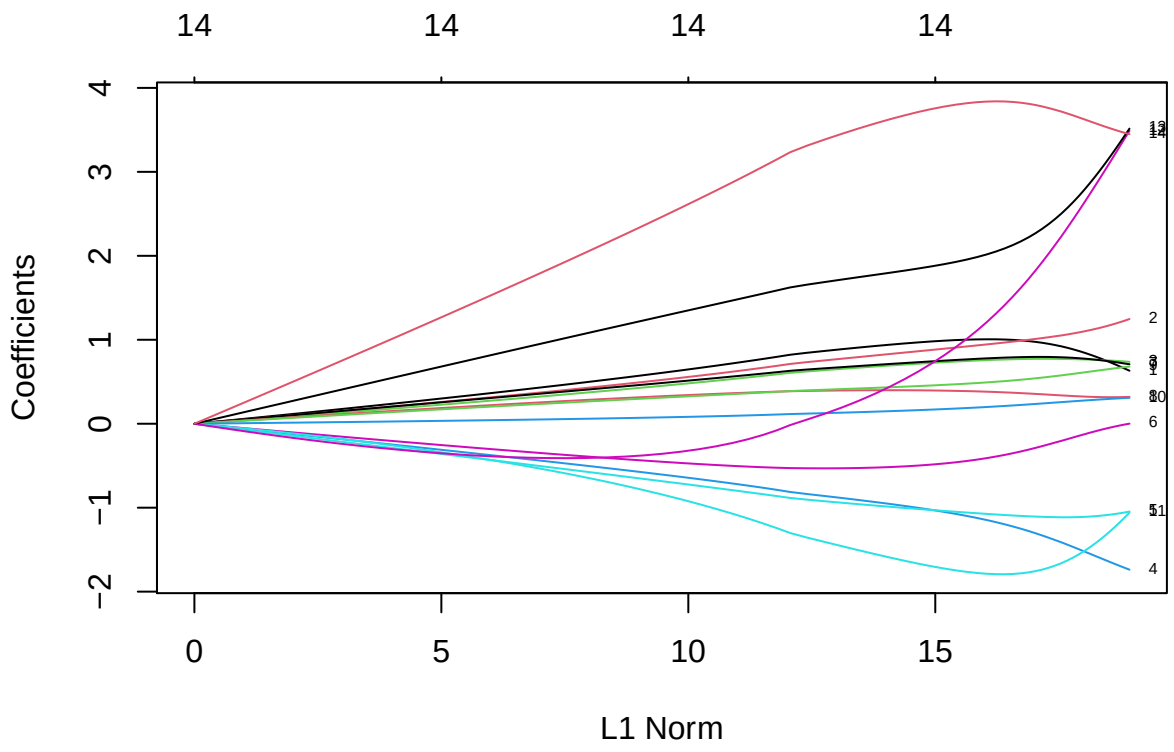
Contrairement à la plupart des autres package **R** qui permettent de faire de l'apprentissage, le package `glmnet` n'autorise pas l'utilisation de `formules` : il faut spécifier explicitement la matrice des $X$ et le vecteur des $Y$. On peut obtenir la matrice des $X$ et notamment le codage des variables qualitatives avec la fonction `model.matrix` :

```
ozone.X <- model.matrix(maxO3~.,data=ozone)[,-1]
ozone.Y <- ozone$maxO3
```

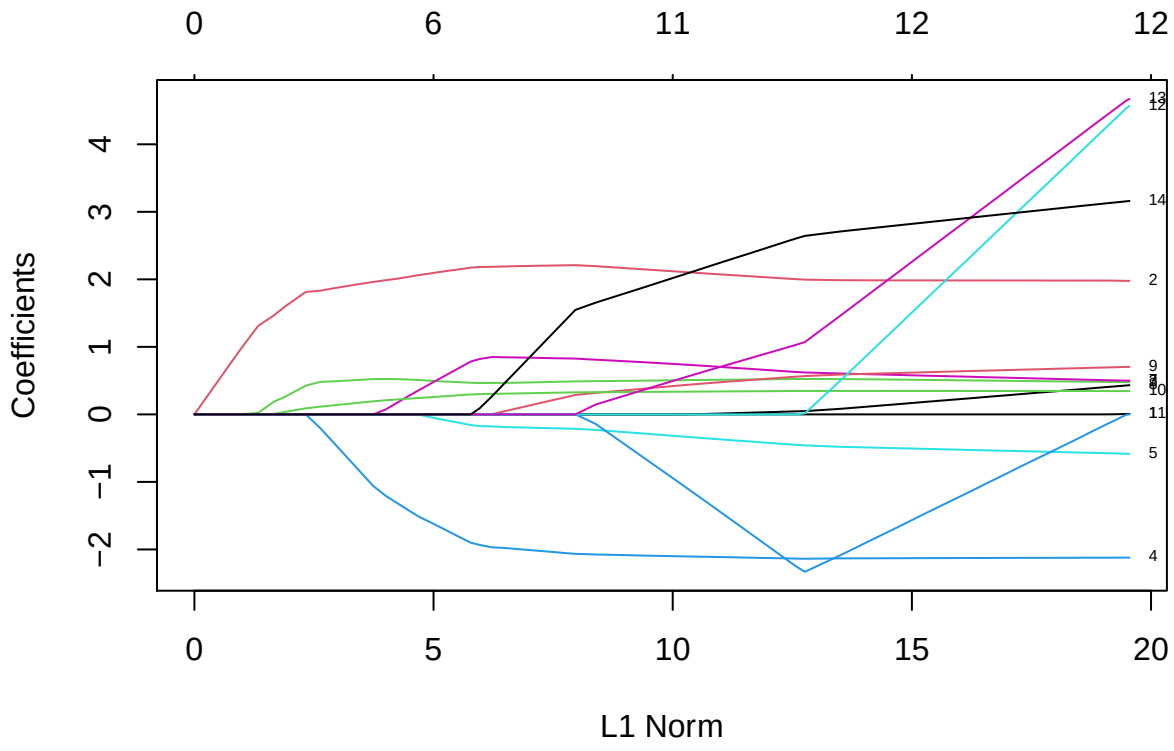
1. Charger le package `glmnet` et à l'aide de la fonction `glmnet` calculer les estimateurs `ridge` et `lasso`.
```
library(glmnet)
mod.R <- glmnet(ozone.X,ozone.Y,alpha=0)
mod.L <- glmnet(ozone.X,ozone.Y,alpha=1)
```

2. Analyser les sorties qui se trouvent dans les arguments `lambda` et `beta` de `glmnet`.
*La fonction `glmnet` calcule tous les estimateurs pour une grille de valeurs de `lambda` spécifiée ici :*
```
mod.R$lambda %>% head()
[1] 22007.27 20052.20 18270.82 16647.69 15168.76 13821.21
```
*On peut récupérer les valeurs de `beta` associées à chaque valeur de la grille avec*
```
mod.R$beta[,1]
           T9           T12           T15           Ne9
 6.376767e-36  5.523924e-36  4.867402e-36 -6.821464e-36
         Ne12          Ne15           Vx9          Vx12
-7.994984e-36 -5.839057e-36  5.706014e-36  4.387350e-36
         Vx15        maxO3v      ventNord     ventOuest
 3.970583e-36  6.892387e-37 -5.830507e-36 -1.022483e-35
      ventSud      pluieSec
 1.519222e-35  2.772246e-35
```

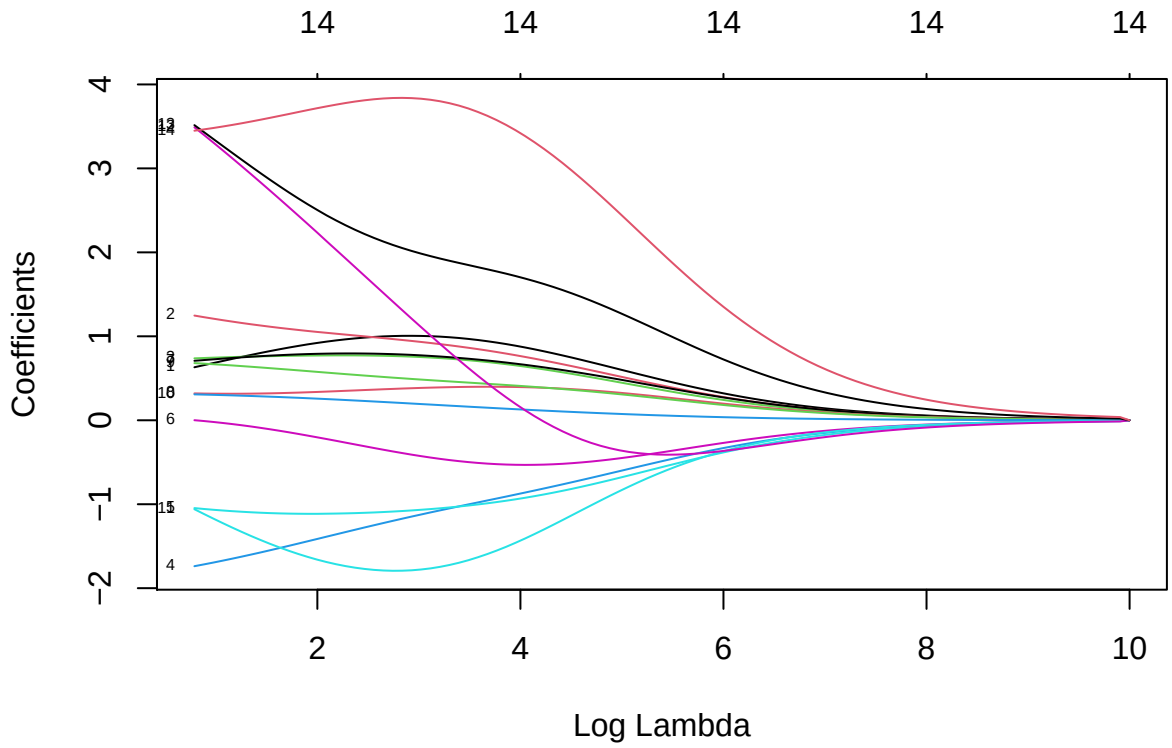
3. Visualiser les chemins de régularisation des estimateurs `ridge` et `lasso`. On pourra utiliser la fonction `plot`.
```
plot(mod.R,label=TRUE)
```



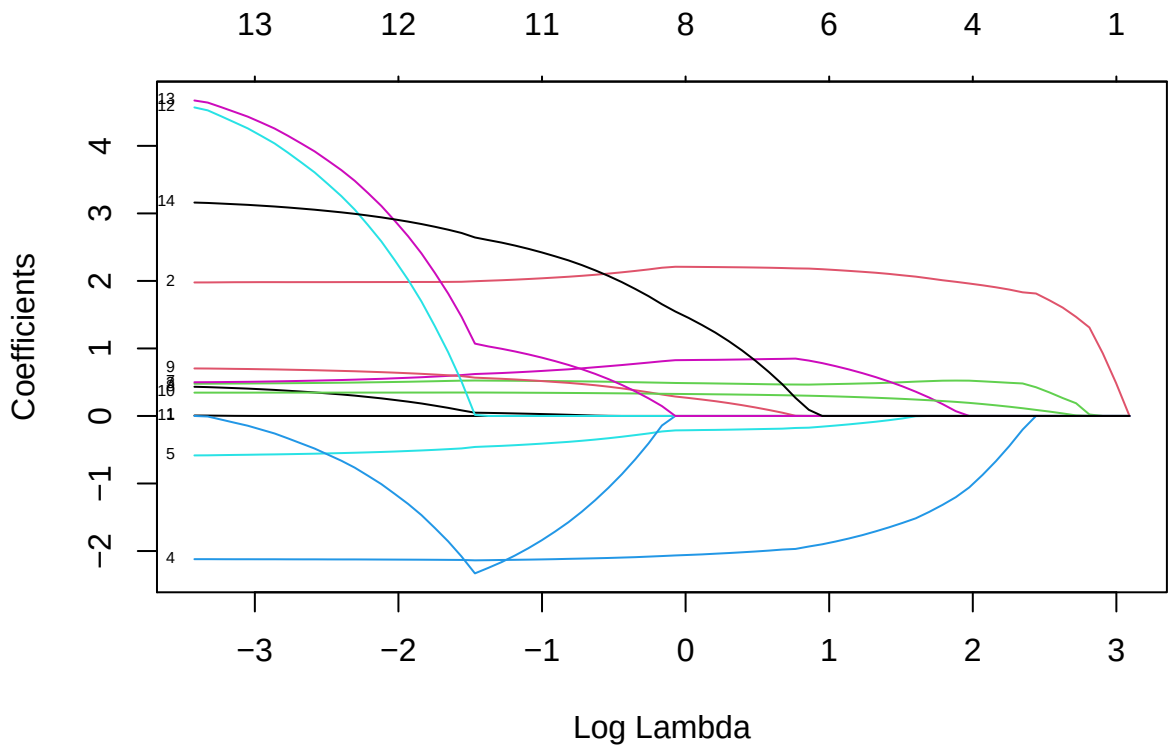

```
plot(mod.L,label=TRUE)
```



```
plot(mod.R,xvar="lambda",label=TRUE)
```



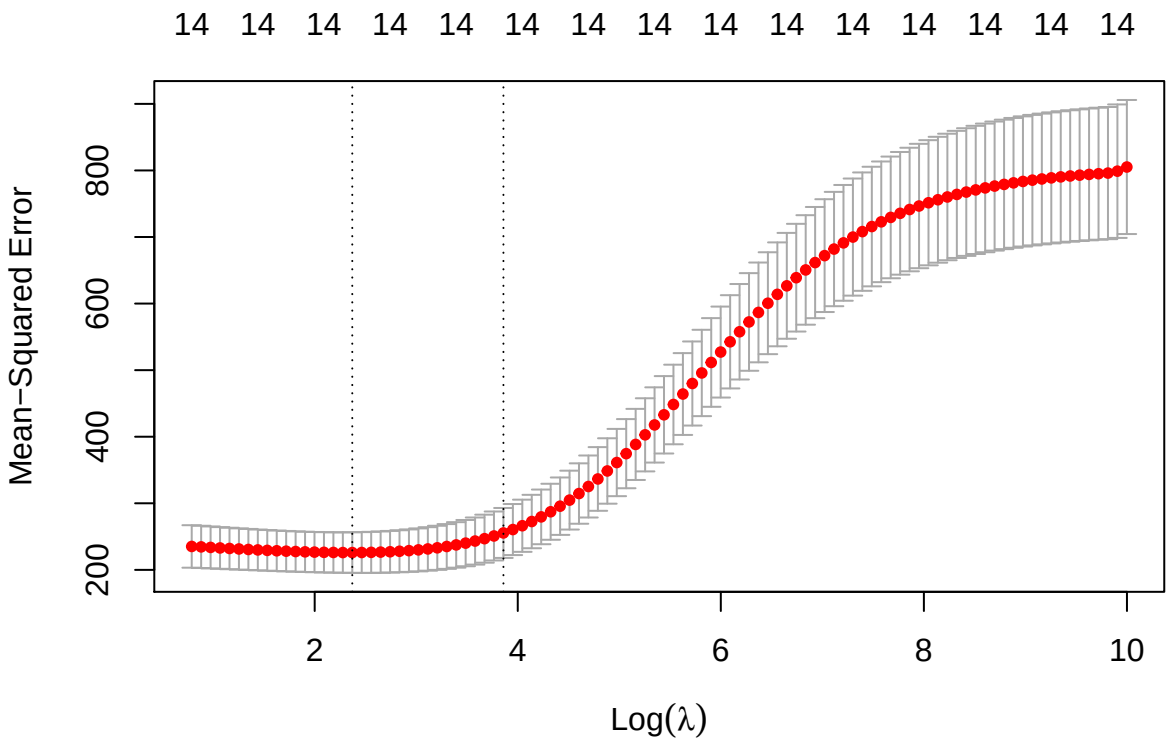

```
plot(mod.L,xvar="lambda",label=TRUE)
```




4. Sélectionner les paramètres de régularisation à l'aide de la fonction `cv.glmnet`. On pourra notamment faire un `plot` de l'objet et expliquer le graphe obtenu.

*Commençons par **ridge** :*

```
ridgeCV <- cv.glmnet(ozone.X,ozone.Y,alpha=0)
plot(ridgeCV)
```




*On visualise les erreurs quadratiques calculées par validation croisée 10 blocs en fonction de* `lambda` *(échelle logarithmique). Deux traites verticaux sont représentés :*

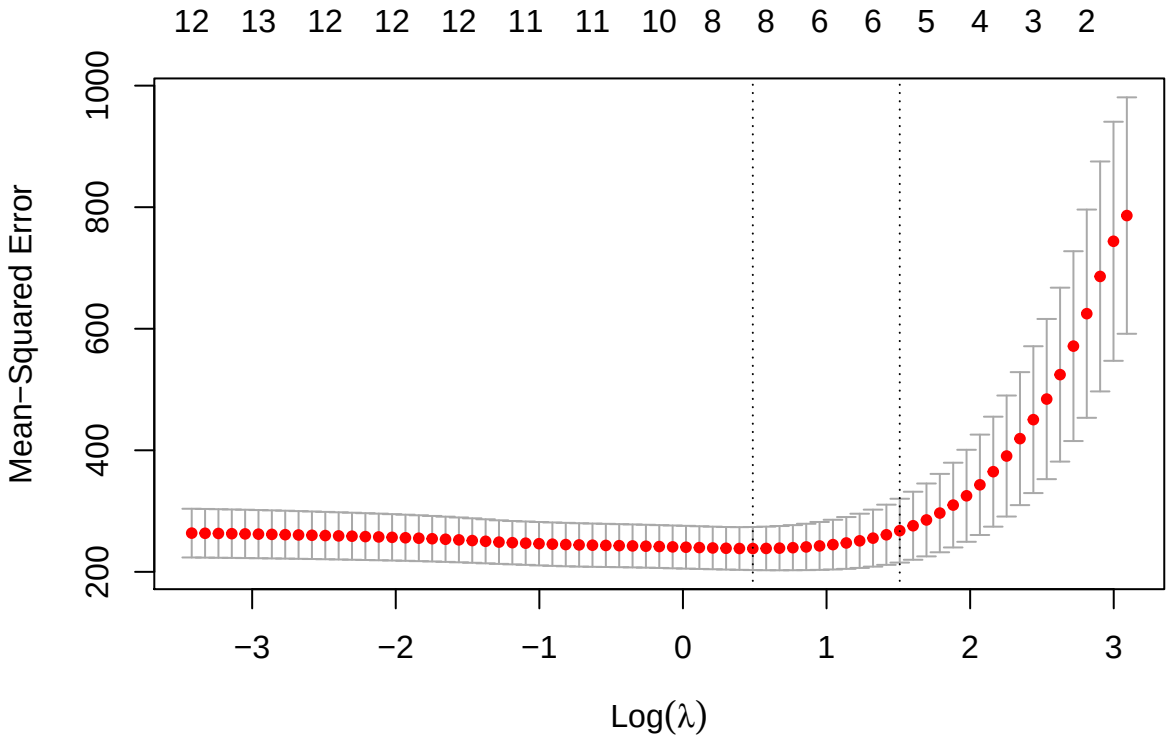
- *celui de gauche correspond à la valeur de* `lambda` *qui minimise l'erreur quadratique ;*
- *celui de droite correspond à la plus grande valeur de* `lambda` *telle que l'erreur ne dépasse pas l'erreur minimale + 1 écart-type estimé de cette erreur.*

*D'un point de vu pratique, cela signifie que l'utilisateur peut choisir n'importe quelle valeur de* `lambda` *entre les deux traits verticaux. Si on veut diminuer la complexité du modèle on choisir la valeur de droite. On peut obtenir ces deux valeurs avec*

```
ridgeCV$lambda.min
[1] 10.70126
ridgeCV$lambda.1se
[1] 47.41322
```

*On peut faire de même pour le **lasso** :*

```
lassoCV <- cv.glmnet(ozone.X,ozone.Y,alpha=1)
plot(lassoCV)
```




5. On souhaite prédire la variable cible pour de nouveaux individus. Prenons par exemple les 25ème et 50ème individus du jeu de données. Calculer les valeurs prédites.
   *Une première approche pourrait consister à réajuster le modèle sur toutes les données pour la valeur de* ***lambda*** *sélectionnée. Cette étape est en réalité déjà effectuée par la fonction* ***cv.glmnet****. Il suffit par conséquent d'appliquer la fonction* ***predict*** *à l'objet obtenu avec* ***cv.glmnet*** *en spécifiant la valeur de* ***lambda*** *souhaitée. Par exemple pour* ***ridge*** *:*

```
predict(ridgeCV,newx = ozone.X[50:51,],s="lambda.min")
                1
20010723 90.34787
20010724 96.71932
predict(ridgeCV,newx = ozone.X[50:51,],s="lambda.1se")
                1
20010723 93.33611
20010724 96.14918
```

   *On peut faire de même pour le* ***lasso*** *:*

```
predict(lassoCV,newx = ozone.X[50:51,],s="lambda.min")
                1
20010723 87.19995
20010724 97.82825
predict(lassoCV,newx = ozone.X[50:51,],s="lambda.1se")
                1
20010723 87.40631
20010724 95.85602
```

6. A l'aide d'une validation croisée, comparer les performances des estimateurs **MCO**, **ridge** et **lasso**. On pourra utiliser les données `ozone_complet.txt` qui contiennent plus d'individus et de variables.

```
ozone1 <- read.table("data/ozone_complet.txt",sep=";") %>% na.omit()
ozone1.X <- model.matrix(maxO3~.,data=ozone1)[,-1]
ozone1.Y <- ozone1$maxO3
```

   *On crée une fonction qui calcule les erreurs quadratiques par validations croisée des 3 procédures d'estimation.*

```
cv.ridge.lasso <- function(data,form){
  set.seed(1234)
  data.X <- model.matrix(form,data=data)[,-1]
  data.Y <- data$maxO3
  blocs <- caret::createFolds(1:nrow(data),k=10)
  prev <- matrix(0,ncol=3,nrow=nrow(data)) %>% as.data.frame()
  names(prev) <- c("lin","ridge","lasso")
  for (k in 1:10){
app <- data[-blocs[[k]],]
test <- data[blocs[[k]],]
app.X <- data.X[-blocs[[k]],]
app.Y <- data.Y[-blocs[[k]]]
test.X <- data.X[blocs[[k]],]
test.Y <- data.Y[blocs[[k]]]
ridge <- cv.glmnet(app.X,app.Y,alpha=0)
lasso <- cv.glmnet(app.X,app.Y,alpha=1)
lin <- lm(form,data=app)
prev[blocs[[k]],] <- tibble(lin=predict(lin,newdata=test),
           ridge=as.vector(predict(ridge,newx=test.X)),
           lasso=as.vector(predict(lasso,newx=test.X)))
  }
  err <- prev %>% mutate(obs=data$maxO3) %>% summarise_at(1:3,~mean((obs-.)^2))
  return(err)
}
```

```
cv.ridge.lasso(ozone1,form=formula(maxO3~.))
       lin    ridge    lasso
1 184.3755 192.4984 191.5436
```

*On remarque que les approches régularisées n'apportent rien par rapport aux estimateurs MCO ici. Ceci peut s'expliquer par le fait que le nombre de variables n'est pas très important.*

7. Refaire la question précédente en considérant toutes les interactions d'ordre 2.

```
cv.ridge.lasso(ozone1,form=formula(maxO3~.^2))
       lin    ridge    lasso
1 185.0517 168.7122 166.0982
```

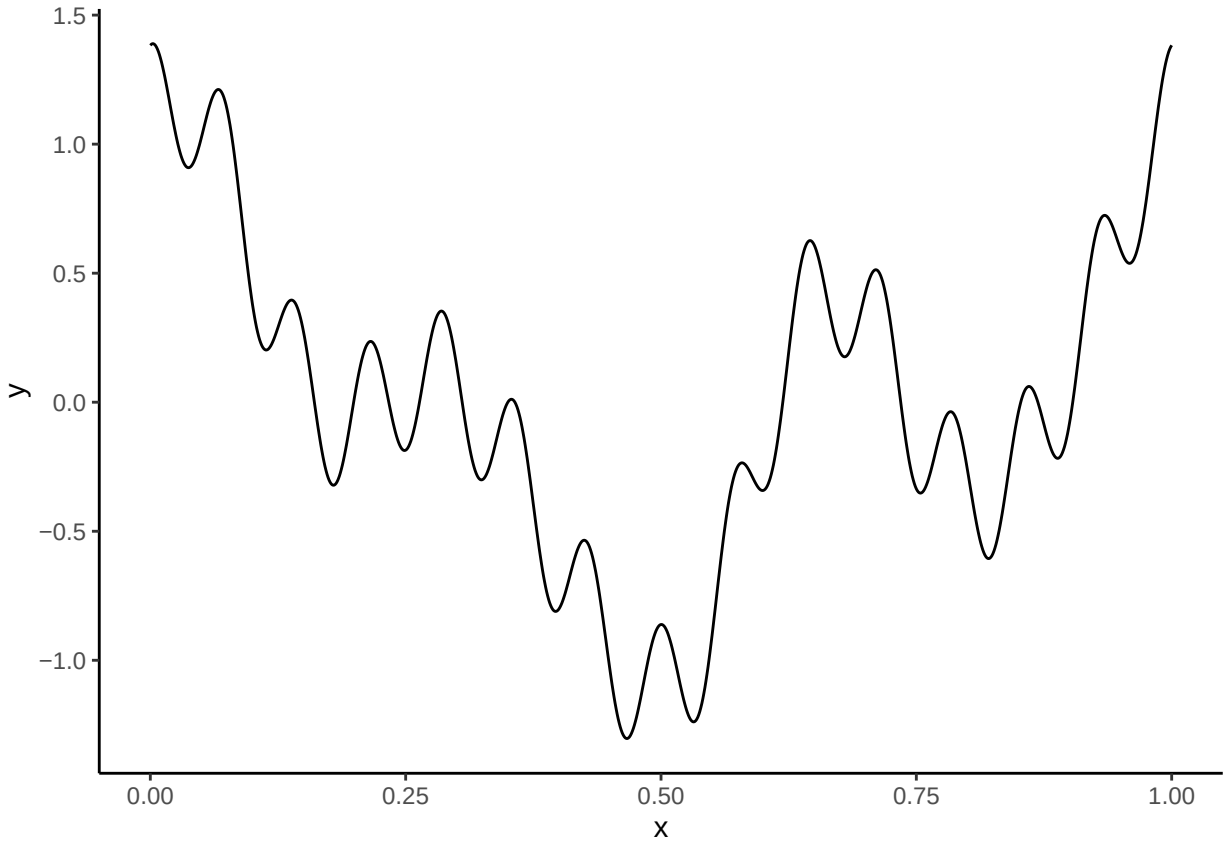
*Les méthodes régularisées permettent ici de diminuer les erreurs quadratiques de manière intéressante. Cela vient certainement du fait du nombre de variables explicatives qui est beaucoup plus important lorsqu'on prend en compte toutes les interactions d'ordre 2, nous en avons en effet 253 :*

```
ozone2.X <- model.matrix(maxO3~.^2,data=ozone1)[,-1]
dim(ozone2.X)
[1] 1366  253
```

## 3.2 Reconstruction d'un signal

Le fichier `signal.csv` contient un signal que l'on peut représenter par une fonction $m : \mathbb{R} \to \mathbb{R}$. On le visualise

```
signal <- read_csv("data/signal.csv")
ggplot(signal)+aes(x=x,y=y)+geom_line()
```

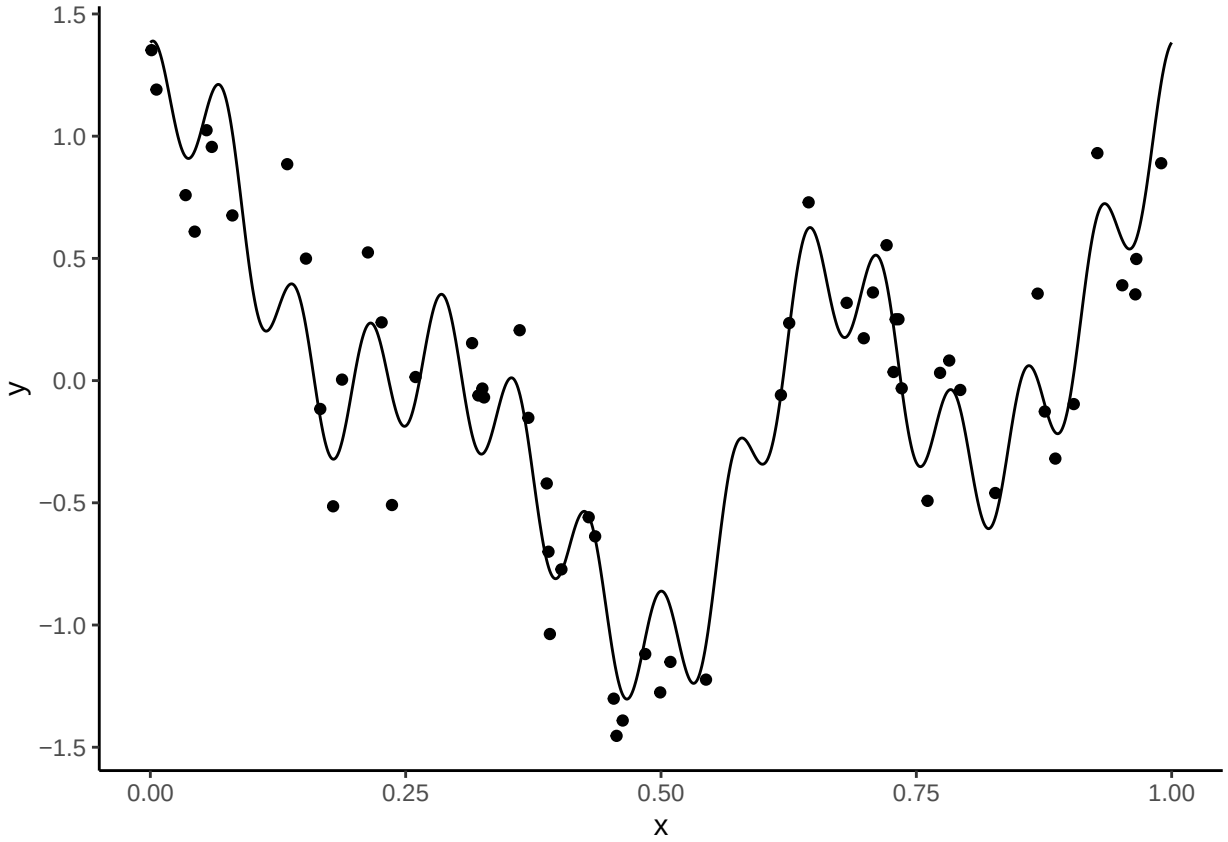



Plaçons nous dans le cas où on ne dispose que d'une version bruitée de ce signal. La courbe n'est pas observée mais on dispose d'un échantillon $(x_i, y_i), i = 1, \ldots, n$ généré selon le modèle

$$y_i = m(x_i) + \varepsilon_i.$$

Le fichier `ech_signal.csv` contient $n = 60$ observations issues de ce modèle. On représente les données et la courbe

```
donnees <- read_csv("data/ech_signal.csv")
ggplot(signal)+aes(x=x,y=y)+geom_line()+
  geom_point(data=donnees,aes(x=X,y=Y))
```




Nous cherchons dans cette partie à reconstruire le signal à partir de l'échantillon. Bien entendu, vu la forme du signal, un modèle linéaire de la forme

$$y_i = \beta_0 + \beta_1 x_i + \varepsilon_i$$

n'est pas approprié. De nombreuses approches en **traitement du signal** proposent d'utiliser une `base` ou `dictionnaire` représentée par une collection de fonctions $\{\psi_j(x)\}_{j=1,\dots,K}$ et de décomposer le signal dans cette base :

$$m(x) \approx \sum_{j=1}^{K} \beta_j \psi_j(x).$$

Pour un dictionnaire donné, on peut alors considérer un **modèle linéaire**

$$y_i = \sum_{j=1}^{K} \beta_j \psi_j(x) + \varepsilon_i. \tag{1}$$

Le problème est toujours d'estimer les paramètres $\beta_j$ mais les variables sont maintenant définies par les élements du dictionnaire. Il existe différent type de dictionnaire, dans cet exercice nous proposons de considérer la base de Fourier définie par

$$\psi_0(x) = 1, \quad \psi_{2j-1}(x) = \cos(2j\pi x) \quad \text{et} \quad \psi_{2j}(x) = \sin(2j\pi x), \quad j = 1, \dots, K.$$

1. Écrire une fonction **R** qui admet en entrée :
   — une grille de valeurs de `x` (un vecteur)

— une valeur de `K` (un entier positif)

et qui renvoie en sortie une matrice qui contiennent les valeurs du dictionnaire pour chaque valeur de `x`. Cette matrice devra donc contenir `2K` colonnes et le nombre de lignes sera égal à la longueur du vecteur `x`.

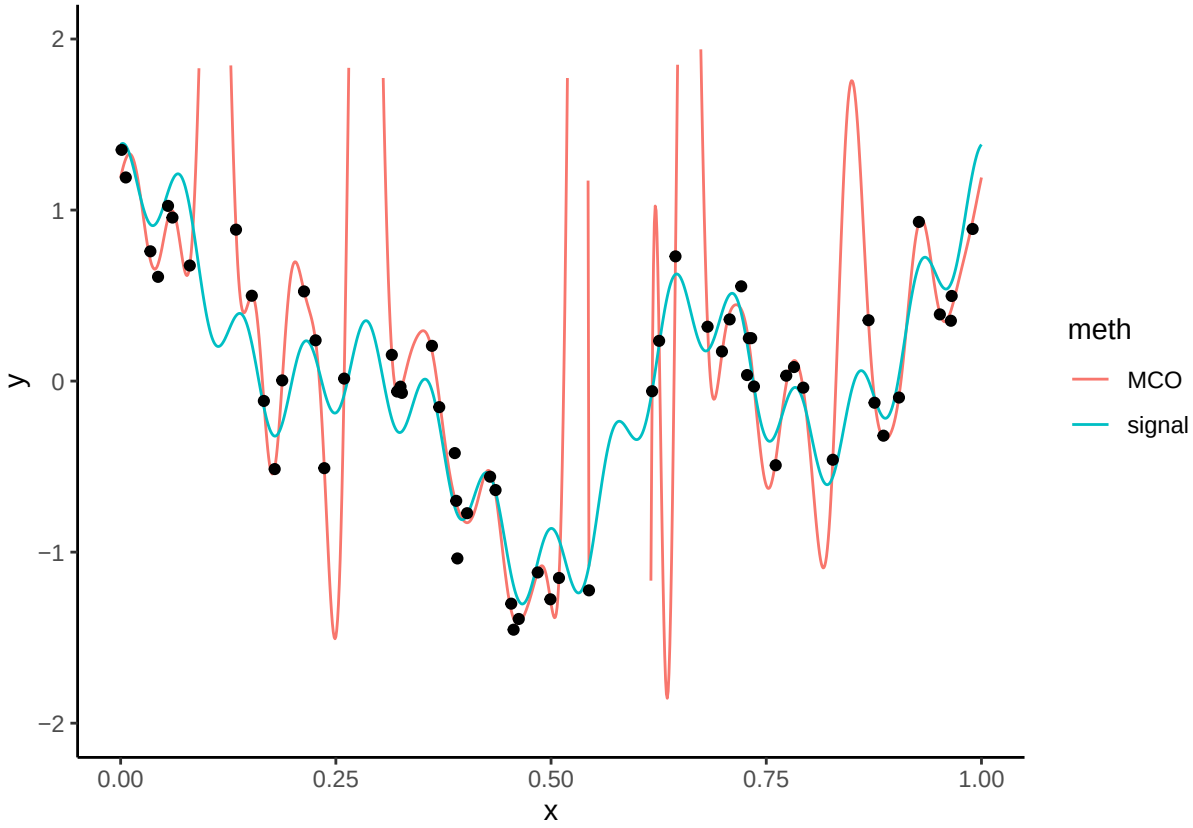
```
mat.dict <- function(K,x){
        res <- matrix(0,nrow=length(x),ncol=2*K) %>% as_tibble()
        for (j in 1:K){
          res[,2*j-1] <- cos(2*j*pi*x)
                res[,2*j] <- sin(2*j*pi*x)
        }
        return(res)
}
```

2. On fixe `K=25`. Calculer les estimateurs des moindres carrés du modèle (1).
   *Il suffit d'ajuster le modèle linéaire où les variables explicatives sont données par le dictionnaire :*

```
D25 <- mat.dict(25,donnees$X) %>% mutate(Y=donnees$Y)
mod.lin <- lm(Y~.,data=D25)
```

3. Représenter le signal estimé. Commenter le graphe.

```
S25 <- mat.dict(25,signal$x)
prev.MCO <- predict(mod.lin,newdata = S25)
signal1 <- signal %>% mutate(MCO=prev.MCO) %>% rename(signal=y)
signal2 <- signal1 %>% pivot_longer(-x,names_to="meth",values_to="y")
ggplot(signal2)+aes(x=x,y=y)+geom_line(aes(color=meth))+
  scale_y_continuous(limits = c(-2,2))+geom_point(data=donnees,aes(x=X,y=Y))
```

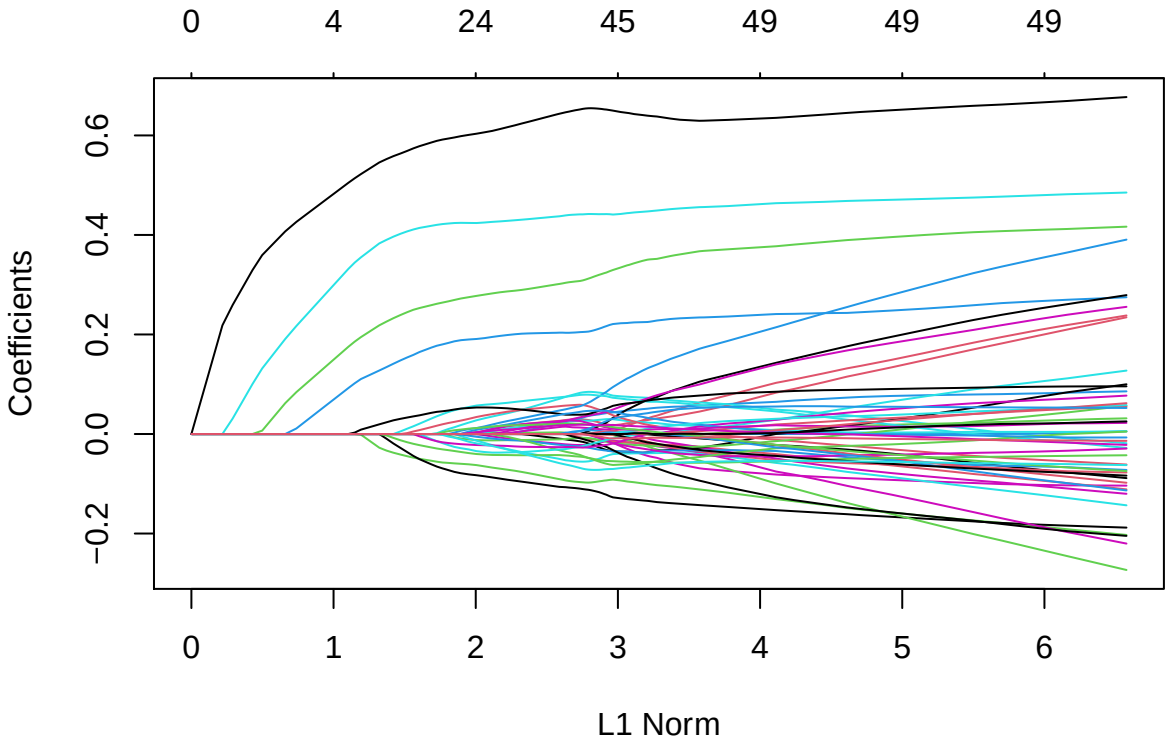


*Le signal estimé a tendance à surajuster les données. Cela vient du fait que on estime 51 paramètres avec seulement 60 observations.*

4. Calculer les estimateurs **lasso** et représenter le signal issu de ces estimateurs.

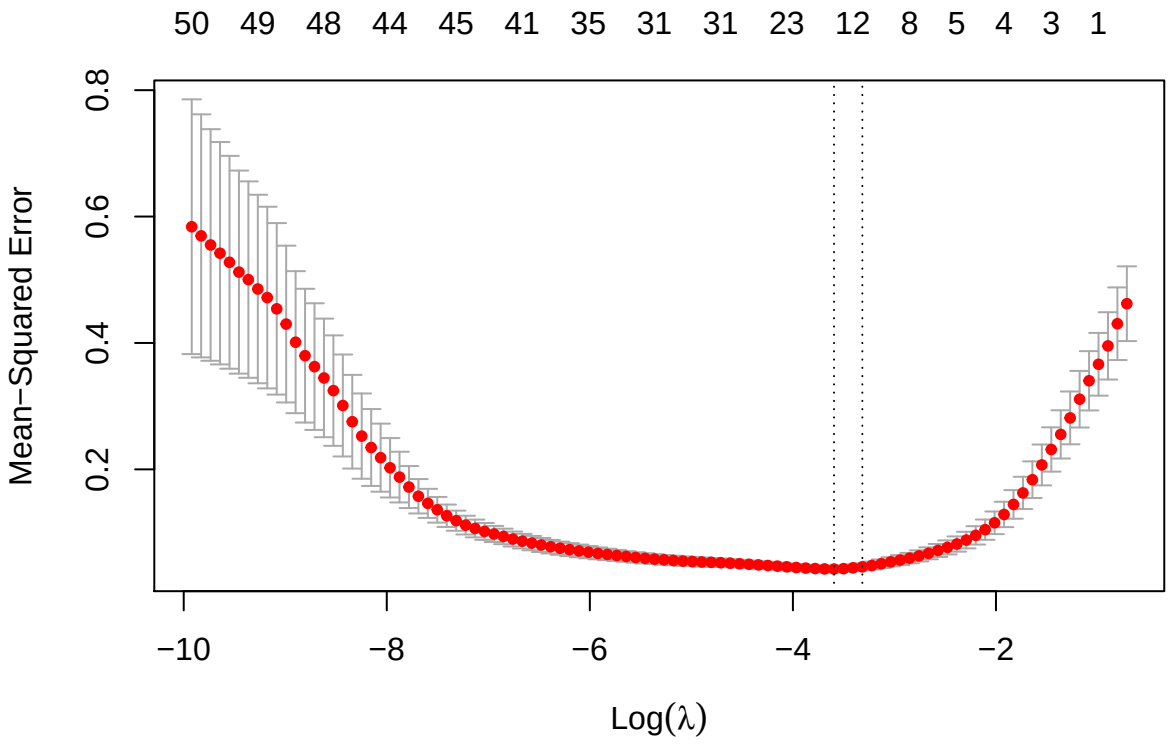
   *On regarde tout d'abord le* ***chemin de régularisation*** *des estimateurs* ***lasso***

```
X.25 <- model.matrix(Y~.,data=D25)[,-1]
lasso1 <- glmnet(X.25,D25$Y,alpha=1)
plot(lasso1)
```



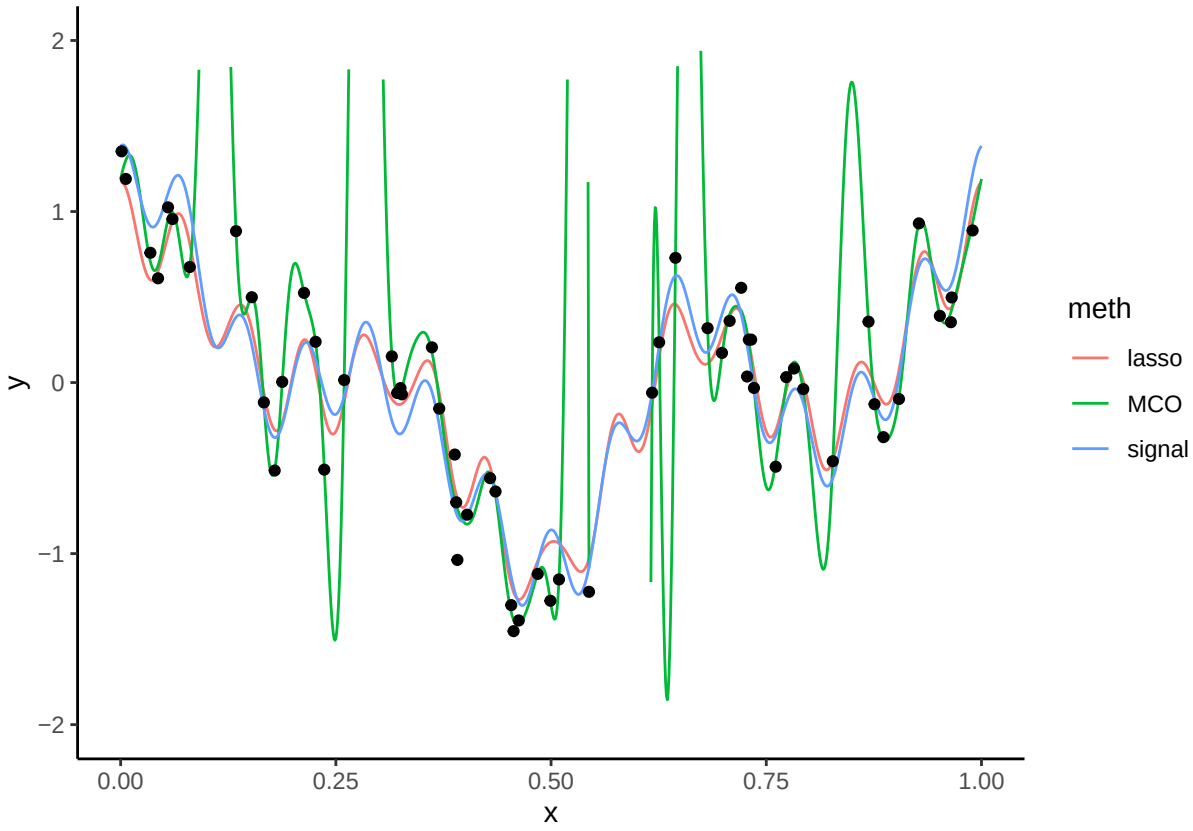

*Il semble que quelques coefficients quittent la valeur 0 bien avant les autres. On effectue maintenant la validation croisée pour sélectionner le paramètre $\lambda$.*

```
lasso.cv <- cv.glmnet(X.25,D25$Y,alpha=1)
plot(lasso.cv)
```




*On calcule les prévisions et on trace le signal.*

```
prev.lasso <- as.vector(predict(lasso.cv,newx=as.matrix(S25)))
signal1$lasso <- prev.lasso
signal2 <- signal1 %>% pivot_longer(-x,names_to="meth",values_to="y")
ggplot(signal2)+aes(x=x,y=y)+geom_line(aes(color=meth))+
  scale_y_continuous(limits = c(-2,2))+geom_point(data=donnees,aes(x=X,y=Y))
```




*L'algorithme* ***lasso*** *a permi de corriger le problème de sur-apprentissage.*

5. Identifier les coefficients lasso sélectionnés qui ne sont pas nuls.

```
v.sel <- which(coef(lasso.cv)!=0)
v.sel
 [1]  1  2  4  5  6  8 21 28 30 36 37 38 40
```

6. Ajouter les signaux ajustés par les algorithme PCR et PLS.

   — *On effectue la* `PCR` *:*

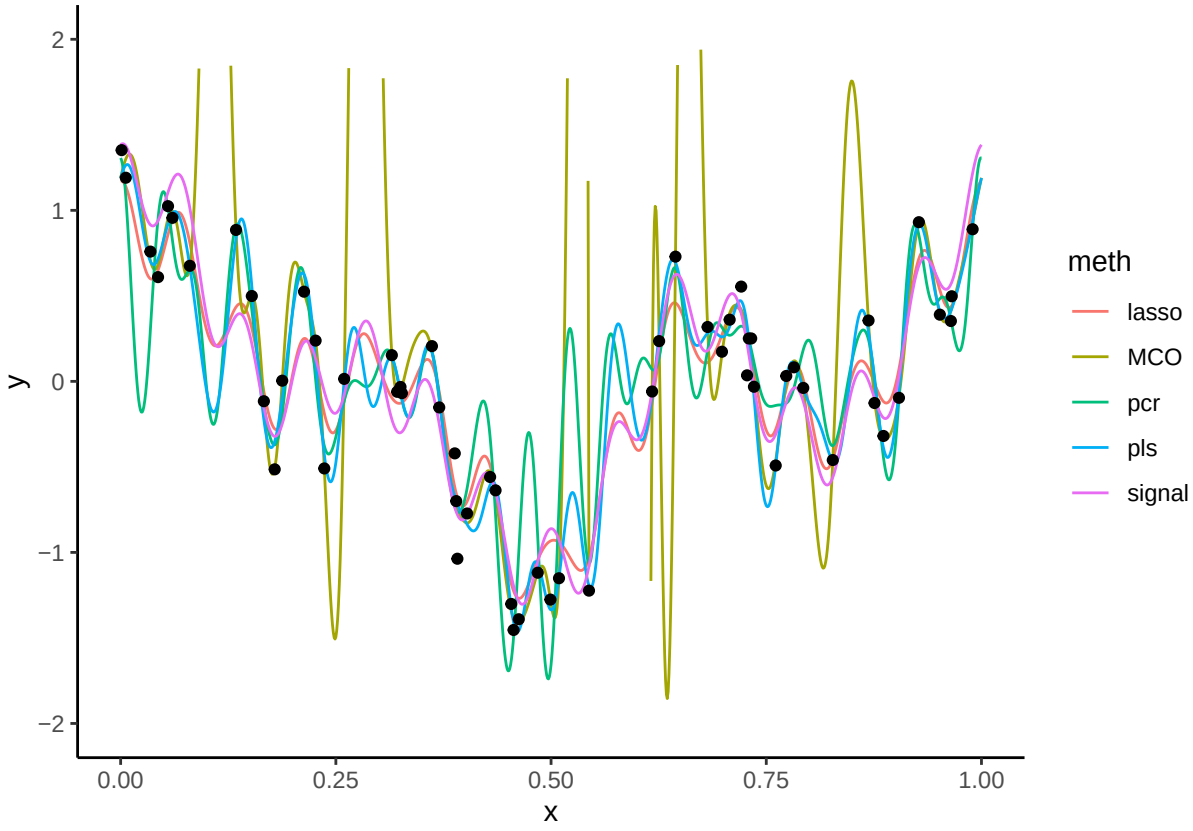
```
pcr.fit <- pcr(Y~.,data=D25,validation="CV")
ncomp.pcr <- which.min(pcr.fit$validation$PRESS)
ncomp.pcr
[1] 33
prev.pcr <- predict(pcr.fit,newdata=S25,ncomp=ncomp.pcr)
```

   — *Puis la* `PLS` *:*

```
pls.fit <- plsr(Y~.,data=D25,validation="CV")
ncomp.pls <- which.min(pls.fit$validation$PRESS)
ncomp.pls
[1] 7
prev.pls <- predict(pls.fit,newdata=S25,ncomp=ncomp.pls)
```

   — *On trace les signaux :*

```
signal1$pcr <- prev.pcr
signal1$pls <- prev.pls
signal2 <- signal1 %>% pivot_longer(-x,names_to="meth",values_to="y")
ggplot(signal2)+aes(x=x,y=y)+geom_line(aes(color=meth))+
  scale_y_continuous(limits = c(-2,2))+geom_point(data=donnees,aes(x=X,y=Y))
```




*On peut également obtenir les erreurs quadratiques (puisqu'on connait la vraie courbe)*

```
signal1 %>% summarise_at(-(1:2),~mean((.-signal)^2)) %>%
  sort() %>% round(3)
# A tibble: 1 x 4
  lasso   pls   pcr   MCO
  <dbl> <dbl> <dbl> <dbl>
1 0.014 0.055 0.152  598.
```

### 3.3 Régression logistique pénalisée

On considère le jeu de données sur la détection d'images publicitaires disponible ici https://archive.ics.uci.edu/ml/datasets/internet+advertisements.

```
ad.data <- read.table("data/ad_data.txt",header=FALSE,sep=",",dec=".",na.strings = "?",strip.white = TRU
names(ad.data)[ncol(ad.data)] <- "Y"
ad.data$Y <- as.factor(ad.data$Y)
```

La variable à expliquer est

```
summary(ad.data$Y)
   ad. nonad.
   459   2820
```

Cette variable est binaire. On considère une régression logistique pour expliquer cette variable. Le nombre de variables explicatives étant important, comparer les algorithmes du maximum de vraisemblance aux algorithmes de type **ridge/lasso** en faisant une validation croisée 10 blocs.On pourra utiliser comme critère de comparaison l'`erreur de classification`, la `courbe ROC` et l'`AUC`. Il faudra également prendre des décisions pertinentes vis-à-vis des données manquantes...

*On commence par regarder les données manquantes :*

```
sum(is.na(ad.data))
[1] 2729
var.na <- apply(is.na(ad.data),2,any)
names(ad.data)[var.na]
[1] "V1" "V2" "V3" "V4"
ind.na <- apply(is.na(ad.data),1,any)
sum(ind.na)
[1] 920
```

*On remarque que 920 individus ont au moins une donnée manquante alors que seules les 4 premières variables ont des données manquantes, on choisit donc de supprimer ces 4 variables.*

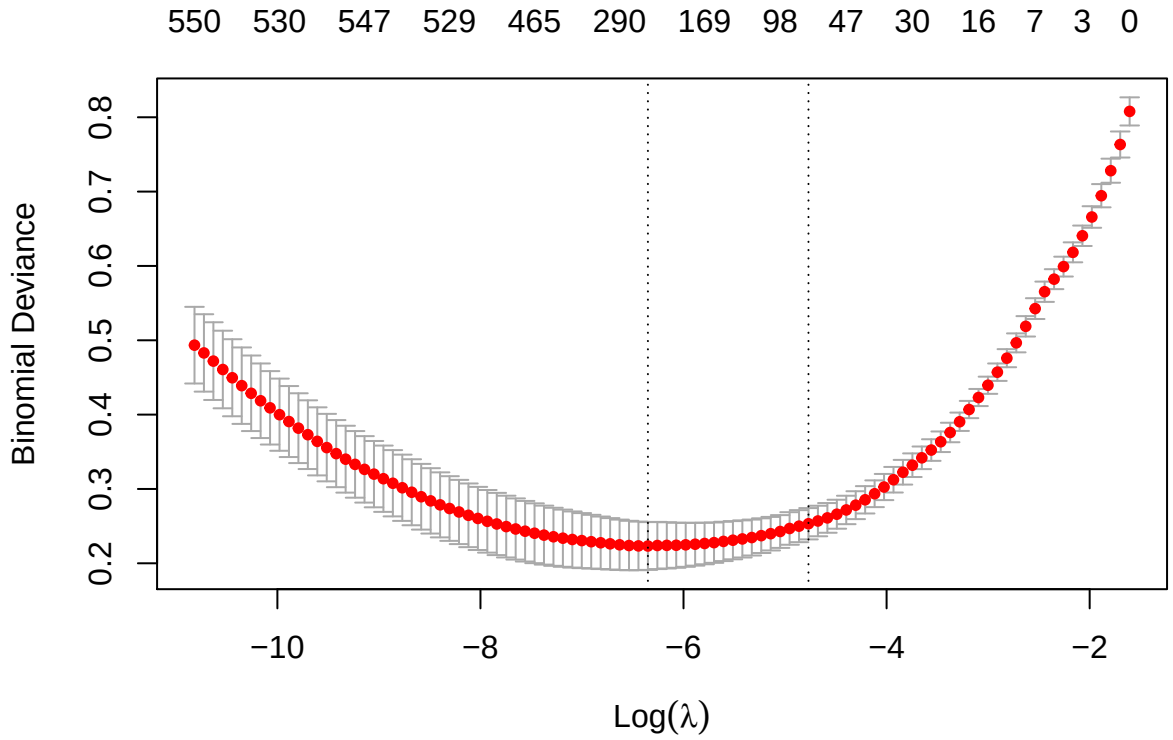
```
ad.data1 <- ad.data[,var.na==FALSE]
dim(ad.data1)
[1] 3279 1555
sum(is.na(ad.data1))
[1] 0
```

On construit les matrices des variables explicatives pour les méthodes lasso et ridge (`glmnet` veut les variables explicatives sous forme de matrices).

```
X.ad <- model.matrix(Y~.,data=ad.data1)[,-1]
Y.ad <- ad.data1$Y
```

Avant de faire la validation croisée, nous présentons juste comment faire l'algorithme `lasso`. Comme pour la régression, on utilise la fonction `cv.glmnet`, il faut juste ajouter l'argument `family="binomial"` :

```
set.seed(1234)
lasso.cv <- cv.glmnet(X.ad,Y.ad,family="binomial",alpha=1)
plot(lasso.cv)
```




*Par défaut le critère utilisé pour la classification binaire est celui de la* **déviance**. *On peut utilisé d'autres critères comme l'***erreur de classification** *ou l'***auc** *en modifiant l'argument* **type.measure**. *On gardera la déviance dans la suite. On peut maintenant faire la validation croisée 10 blocs pour calculer les prévisions des 3 algorithmes.*

```
set.seed(5678)
blocs <- caret::createFolds(1:nrow(ad.data1),k=10)
score <- matrix(0,ncol=3,nrow=nrow(ad.data1)) %>% as.data.frame()
names(score) <- c("MV","ridge","lasso")
for (k in 1:10){
  print(k)
  app <- ad.data1[-blocs[[k]],]
  test <- ad.data1[blocs[[k]],]
  app.X <- X.ad[-blocs[[k]],]
  app.Y <- Y.ad[-blocs[[k]]]
  test.X <- X.ad[blocs[[k]],]
  test.Y <- Y.ad[blocs[[k]]]
  ridge <- cv.glmnet(app.X,app.Y,family="binomial",alpha=0)
  lasso <- cv.glmnet(app.X,app.Y,family="binomial",alpha=1)
  MV <- glm(Y~.,data=app,family="binomial")
  score[blocs[[k]],] <- tibble(MV=predict(MV,newdata=test,type="response"),
             ridge=as.vector(predict(ridge,newx=test.X,type="response")),
             lasso=as.vector(predict(lasso,newx=test.X,type="response")))
}
```

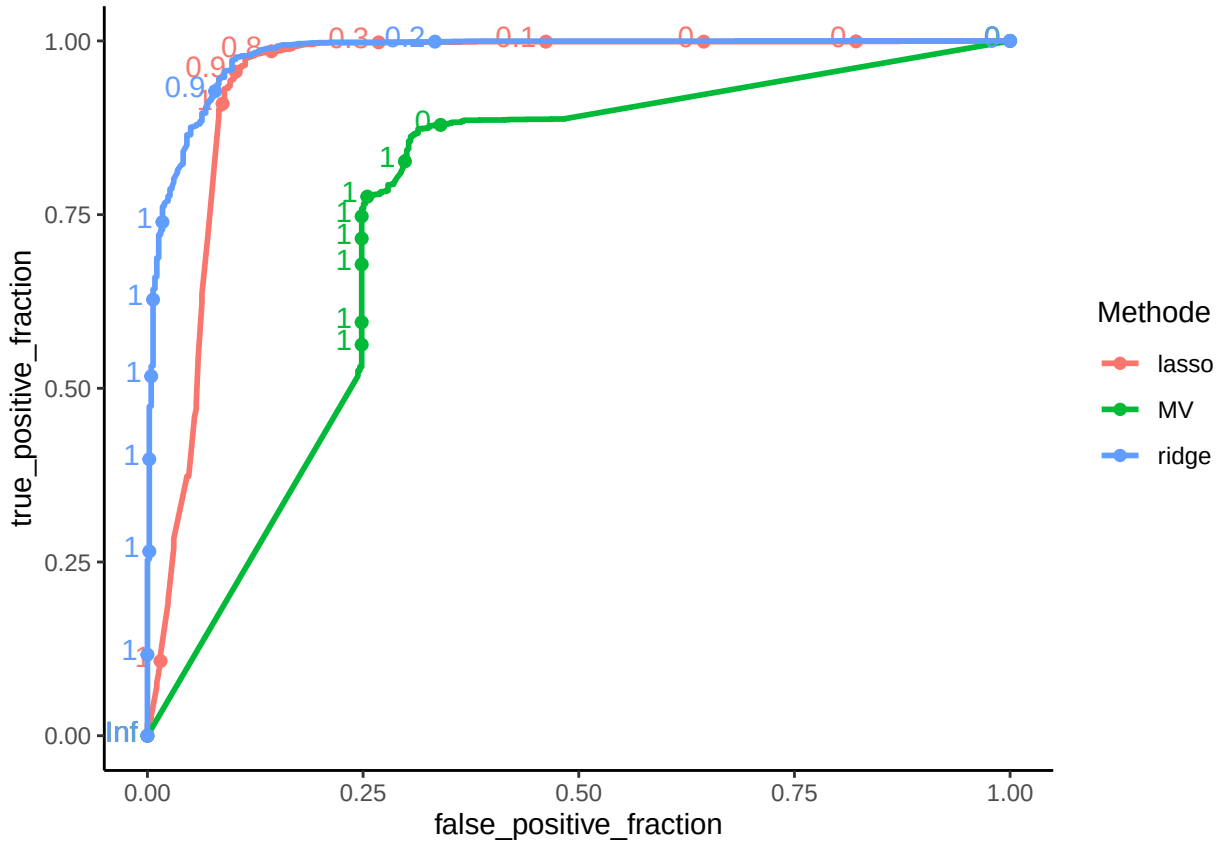
*Le* **tibble score** *contient, pour chaque individu, les prévisions eds probabilités a posteriori*

$$\mathbf{P}(Y = nonad.|X = x_i), \quad i = 1, \ldots, n.$$

*On peut déduire de ce tableau les critères souhaités :*

— *les* **courbes ROC** *:*

```
score1 <- score %>%
  mutate(obs=fct_recode(ad.data1$Y,"0"="ad.","1"="nonad.")) %>%
  pivot_longer(-obs,names_to="Methode",values_to="score")
ggplot(score1)+aes(m=score,d=as.numeric(obs),color=Methode)+plotROC::geom_roc()
```




— *les AUC :*

```
score1 %>% group_by(Methode) %>%
      summarize(AUC=round(as.numeric(pROC::auc(obs,score)),3)) %>%
      arrange(desc(AUC))
# A tibble: 3 x 2
  Methode   AUC
  <chr>   <dbl>
1 ridge   0.981
2 lasso   0.945
3 MV      0.756
```

— *les erreurs de classification :*

```
score1 %>% mutate(prev=round(score),err=prev!=obs) %>%
  group_by(Methode) %>% summarize(Err_classif=round(mean(err),3)) %>%
  arrange(Err_classif)
# A tibble: 3 x 2
  Methode Err_classif
  <chr>         <dbl>
1 lasso          0.03
```

```
2 ridge         0.03
3 MV            0.153
```

*On remarque que les méthodes pénalisées sont nettement meilleures que l'approche classique par maximum de vraisemblance sur cet exemple.*

# 4 Modèle additif

Le modèle additif (modèle GAM) peut être vu comme un compromis entre une modélisation linéaire et non paramétrique de la fonction de régression. Il suppose que cette fonction s'écrit

$$m(x) = m(x_1, \ldots, x_d) = \alpha + g_1(x_1) + \cdots + g_d(x_d).$$

## 4.1 Pseudo backfitting

L'algorithme du backfitting est souvent utilisé pour estimer les composantes du modèle additif. Etant donné un échantillon $(x_i, y_i), i = 1, \ldots, n$ on note $\bar{\mathbb{Y}}$ le vecteur des $y_i$ et $\mathbb{X}_k$ le vecteur contenant les observations de la variable $k$ pour $k = 1, \ldots, d$. L'algorithme se résume ainsi

1. Initialisation : $\widehat{\alpha} = \bar{\mathbb{Y}}$, $\widehat{g}_k(x_k) = \bar{\mathbb{X}}_k$.
2. Pour $k = 1, \ldots, d$ :
   - $\mathbb{Y}^{(k)} = \mathbb{Y} - \widehat{\alpha} - \sum_{j \neq k} \widehat{g}_j(\mathbb{X}_j)$ (résidus partiels)
   - $\widehat{g}_k$ : lissage non paramétrique de $\mathbb{Y}^{(k)}$ sur $\mathbb{X}_k$.
3. Répéter l'étape précédente tant que les $\widehat{g}_k$ changent.

On propose dans cette partie d'utiliser cet algorithme pour estimer les paramètres du modèle linéaire en remplaçant le lissage non paramétrique par un estimateur MCO. On considère le modèle de régression linéaire

$$Y = \beta_0 + \beta_1 X_1 + \beta_2 X_2 + \varepsilon$$

avec $X_1$ et $X_2$ de lois uniformes sur $[0, 1]$ et $\varepsilon$ de loi $\mathcal{N}(0, 1)$ ($\varepsilon$ est indépendante de $(X_1, X_2)'$).

1. Générer un échantillon $(x_i, y_i)$ de taille $n = 300$ selon le modèle ci-dessus pour $\beta_0 = 1, \beta_1 = 3, \beta_2 = 5$.

```
set.seed(1234)
n <- 300
X1<-runif(n)
X2<-runif(n)
bruit<-rnorm(n)
Y<-1+3*X1+5*X2+bruit
donnees<-data.frame(Y,X1,X2)
```

2. Créer une fonction **R** qui admet en entrée un jeu de données et qui fournit en sortie les estimateurs par la méthode du backfitting.

```
pseudo_back <- function(df,eps=0.00001){
  mat.X <- model.matrix(Y~.,data=df)
  beta_i <- rep(0,ncol(mat.X))
  beta <- rep(1,ncol(mat.X))
  while (min(abs(beta_i-beta))>eps){
beta_i <- beta
for (k in 1:ncol(mat.X)){
  Yk <- Y-mat.X[,-k]%*%(beta[-k])
  dfk <- data.frame(Yk=Yk,Xk=mat.X[,k])
  beta[k]<-coef(lm(Yk~Xk-1,data=dfk))
```

```
}
  }
  return(beta)
}
```

3. En déduire les estimateurs backfitting pour le problème considéré.

```
pseudo_back(donnees)
[1] 1.021341 2.864543 4.980367
```

4. Comparer aux estimateurs **MCO**.

```
lm(Y~.,data=donnees)

Call:
lm(formula = Y ~ ., data = donnees)

Coefficients:
(Intercept)           X1           X2
      1.021        2.865        4.981
```

*On obtient les mêmes estimateurs.*

## 4.2 Modèle GAM

On considère les données générées selon

```
n <- 1000
set.seed(1465)
X1 <- 2*runif(n)
X2 <- 2*runif(n)
bruit <- rnorm(n)
Y <- 2*X1+sin(8*pi*X2)+bruit
donnees<-data.frame(Y,X1,X2)
```

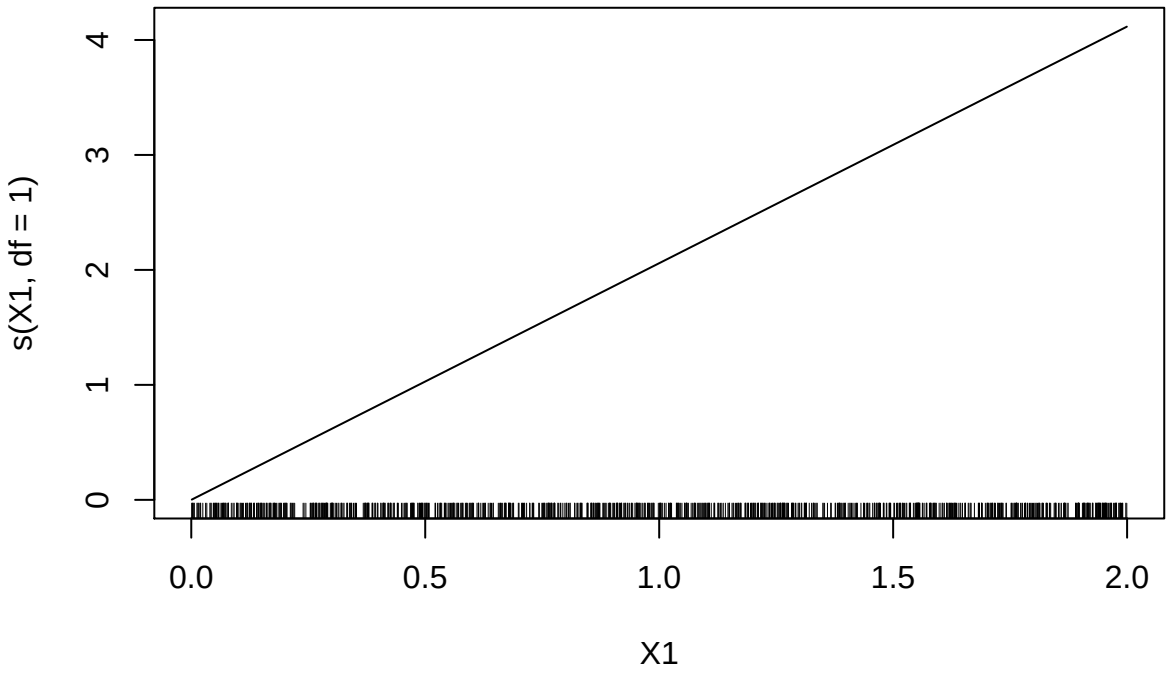
1. Écrire le modèle
   *Il s'agit d'un modèle additif*

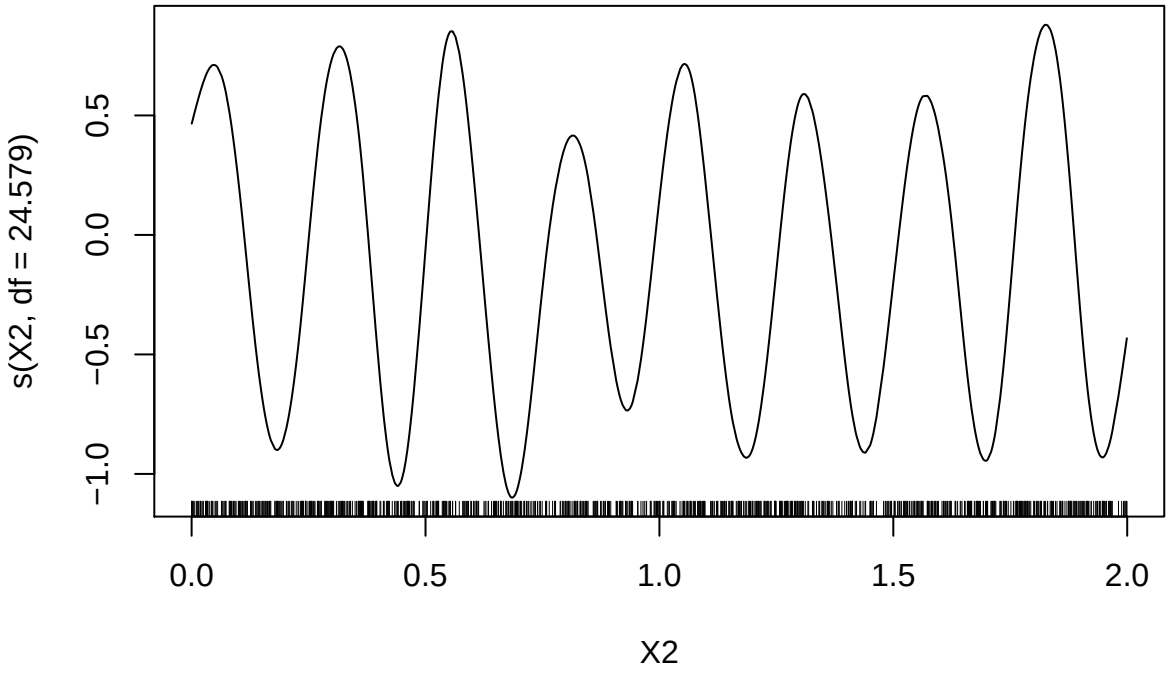
$$Y = 2X_1 + \sin(8\pi X_2) + \varepsilon$$

   *où* $X_1$ *et* $X_2$ *sont uniformes sur* $[0,1]$ *et* $\varepsilon$ *suit une* $\mathcal{N}(0,1)$.

2. A l'aide du package **gam** visualiser les estimateurs des composantes additives du modèle. On utilisera tout d'abord un lissage par **spline** avec 1 ddl pour la première composante et 24.579 ddl pour la seconde.

```
library(gam)
model1 <- gam(Y~s(X1,df=1)+s(X2,df=24.579)-1,data=donnees)
plot(model1)
```

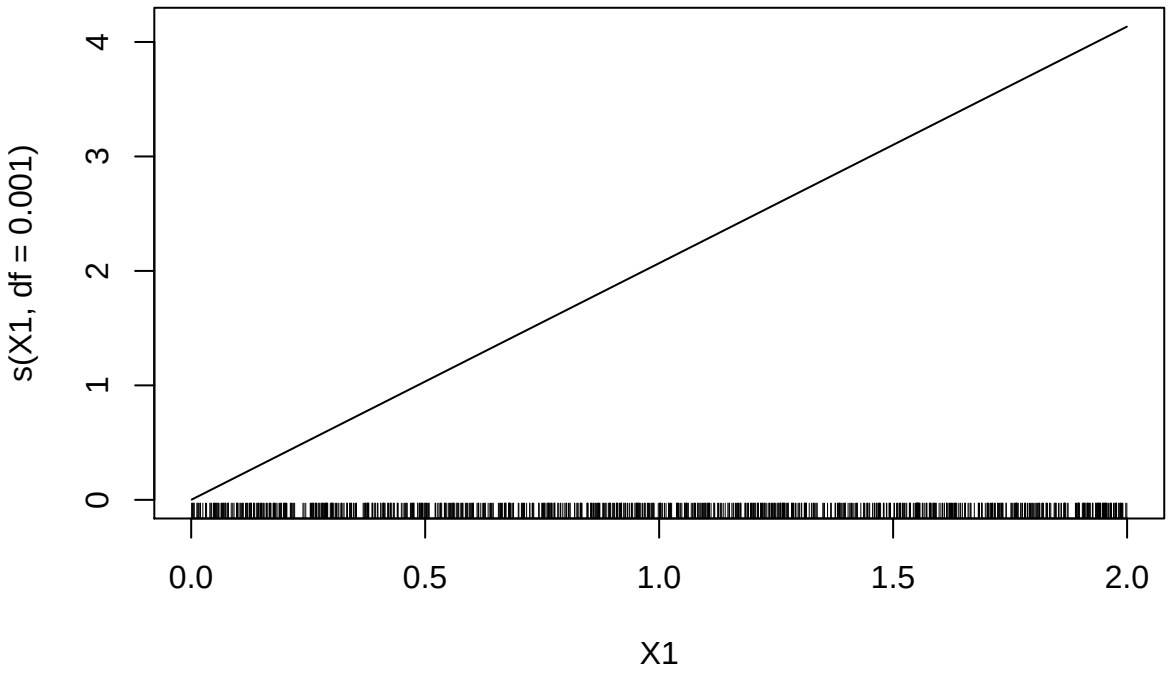


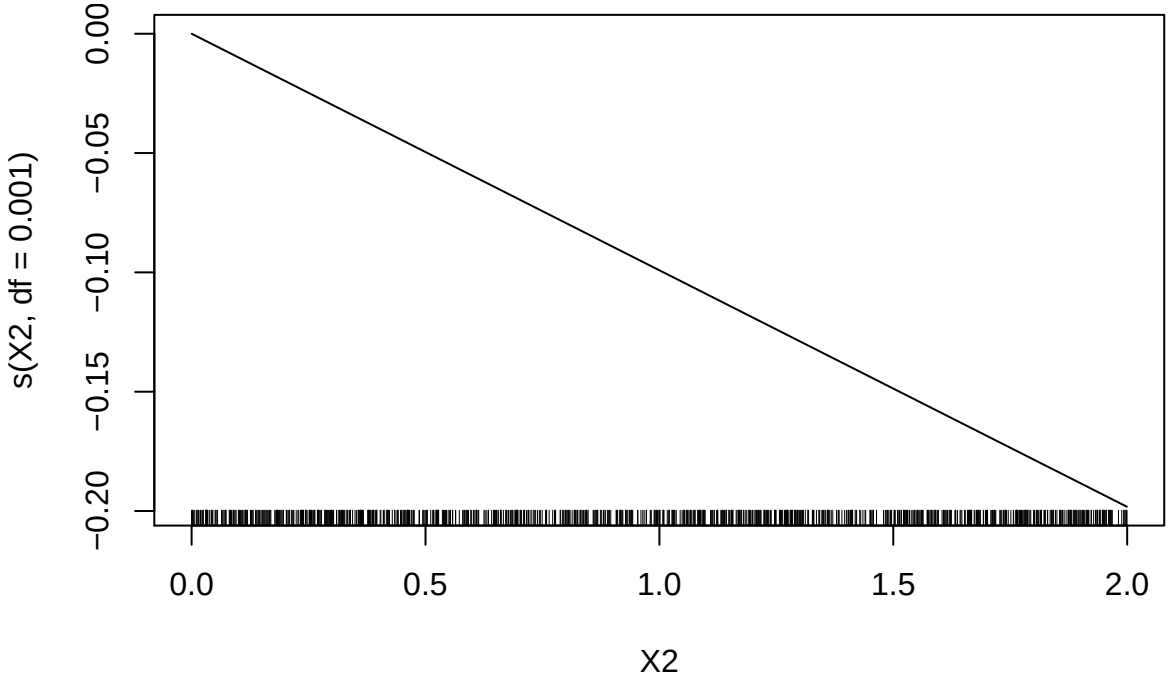




3. Faire varier les degrés de liberté, interpréter.

   *On prend d'abord peu de degrés de liberté.*

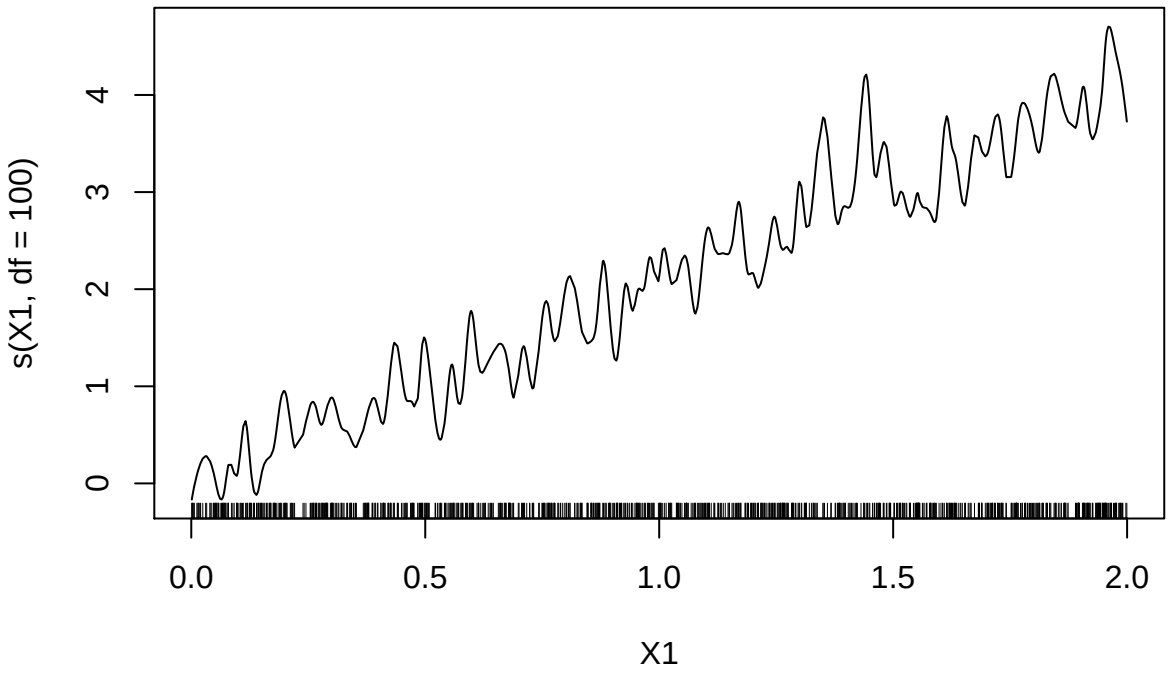
```
model2 <- gam(Y~s(X1,df=0.001)+s(X2,df=0.001)-1,data=donnees)
plot(model2)
```

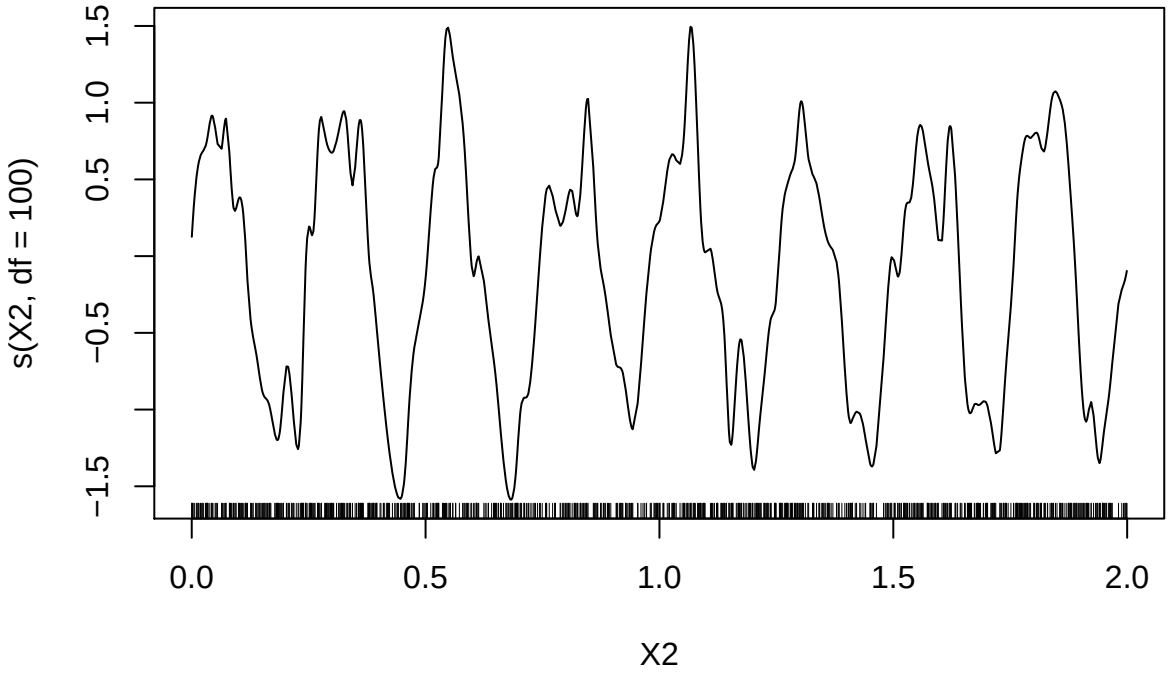



*Le sinus n'est pas bien estimé. On prend maintenant un grand nombre de degrés de liberté.*

```
model2 <- gam(Y~s(X1,df=100)+s(X2,df=100)-1,data=donnees)
plot(model2)
```

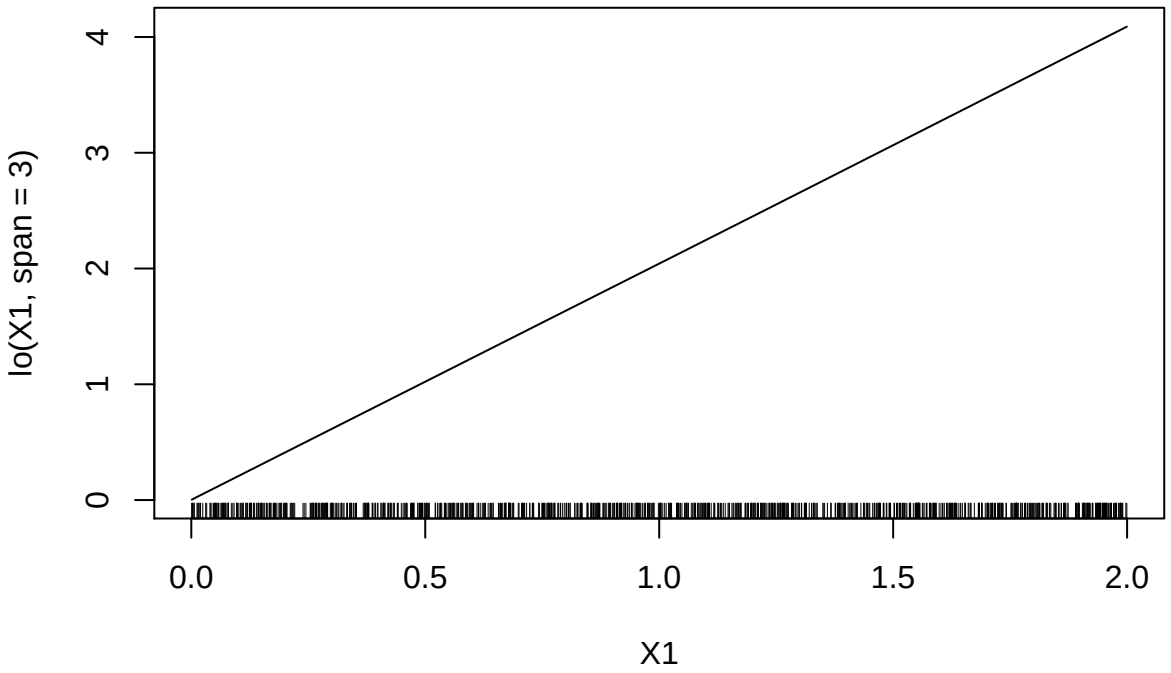


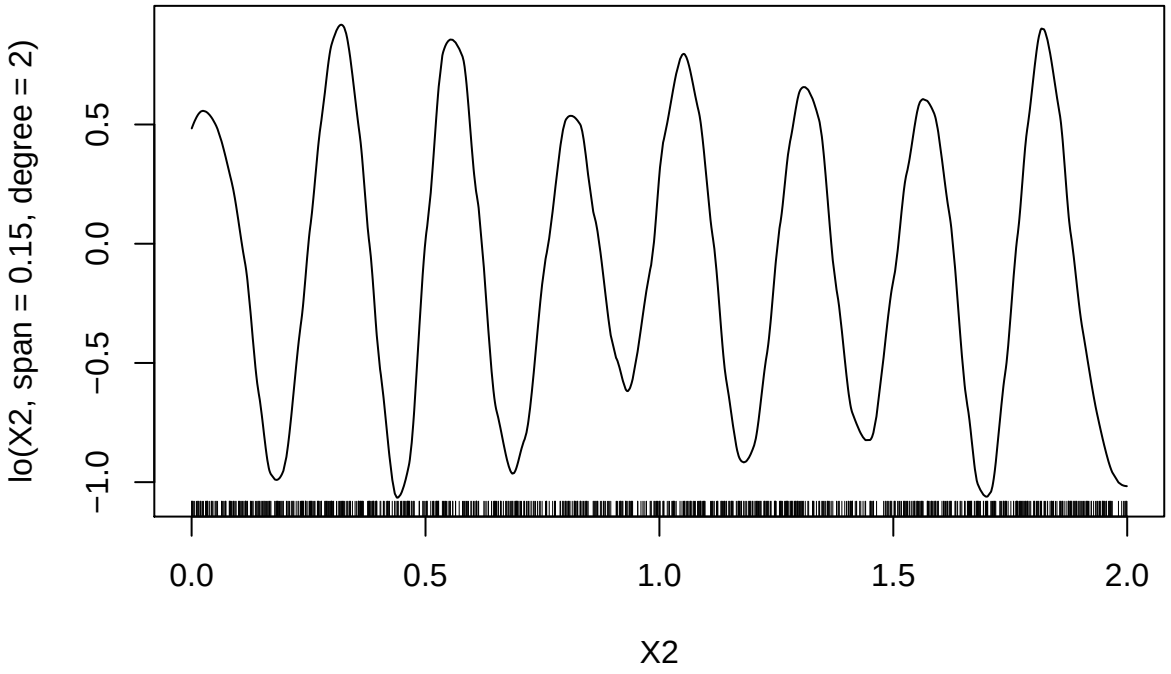




*Le modèle est trop flexible, risque de sur-ajustement.*

4. Faire le même travail avec le lisseur **loess**. On commencera avec `degree=2` et `span=0.15` puis on fera varier le paramètre `span`.

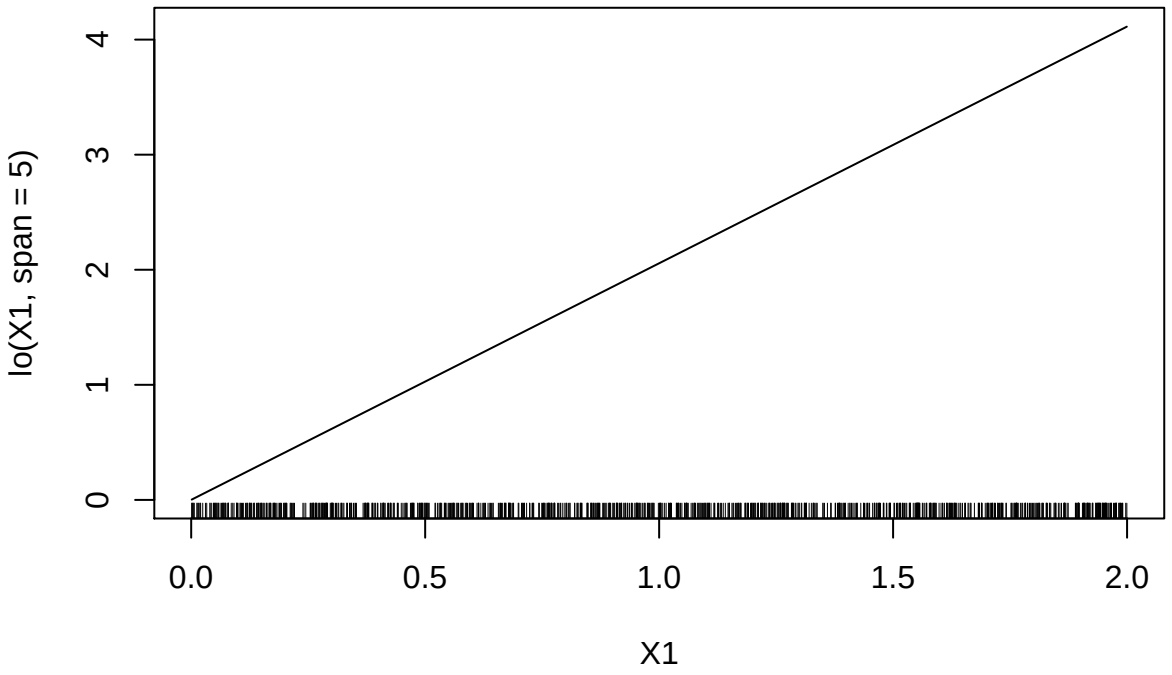
```
model4 <- gam(Y~lo(X1,span=3)+lo(X2,span=0.15,degree=2)-1,data=donnees)
plot(model4)
```

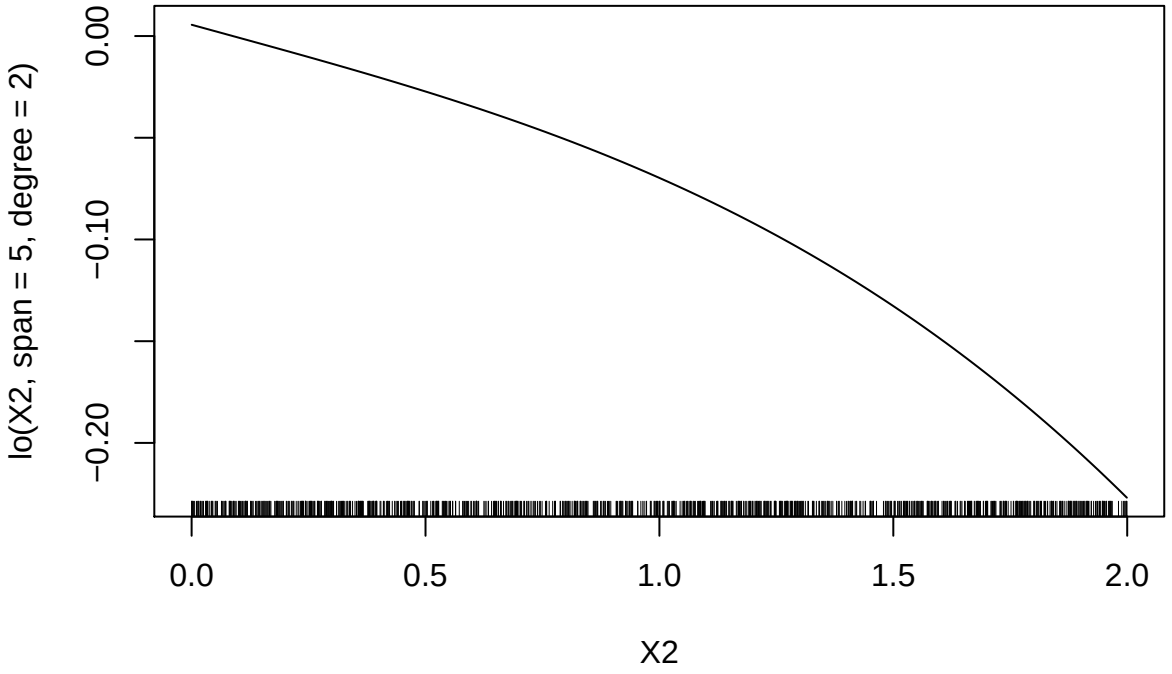


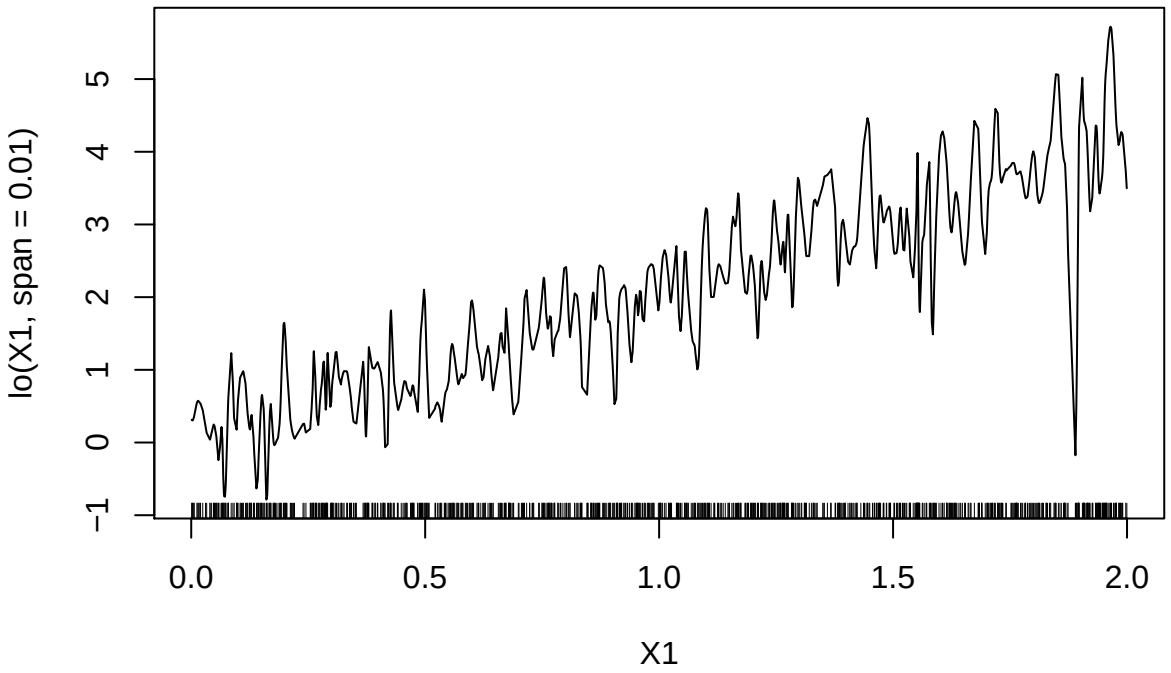

*On fait varier* ***span*** *:*

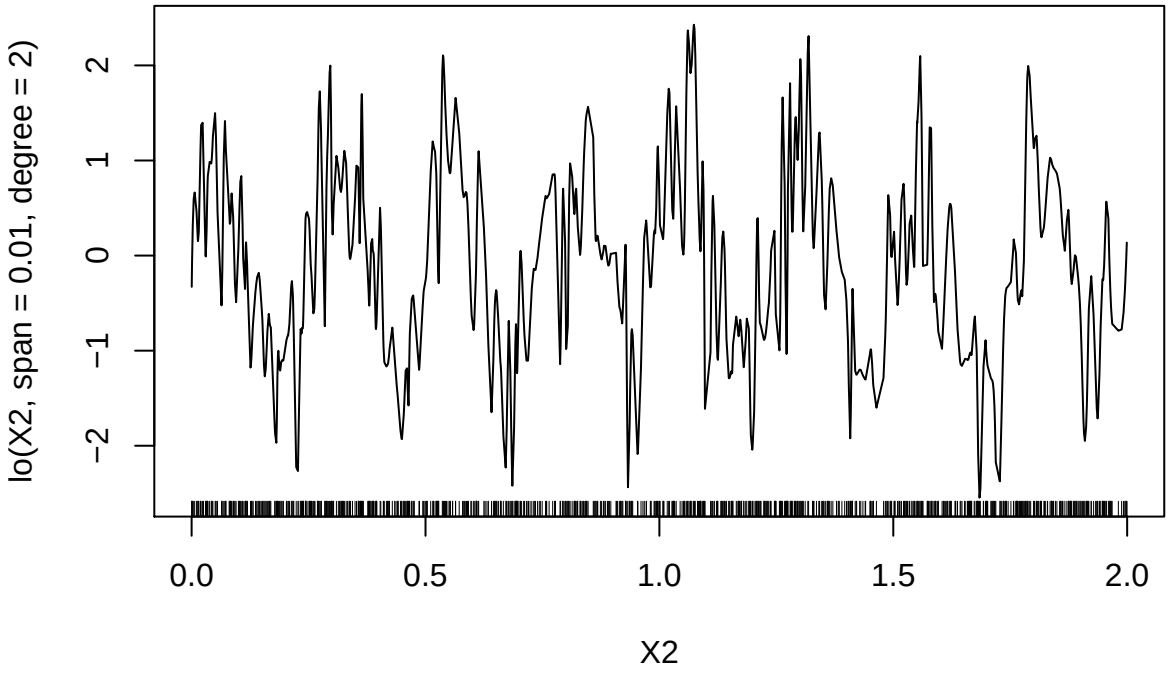
```
model5 <- gam(Y~lo(X1,span=5)+lo(X2,span=5,degree=2)-1,data=donnees)
plot(model5)
```




```
model6 <- gam(Y~lo(X1,span=0.01)+lo(X2,span=0.01,degree=2)-1,data=donnees)
plot(model6)
```

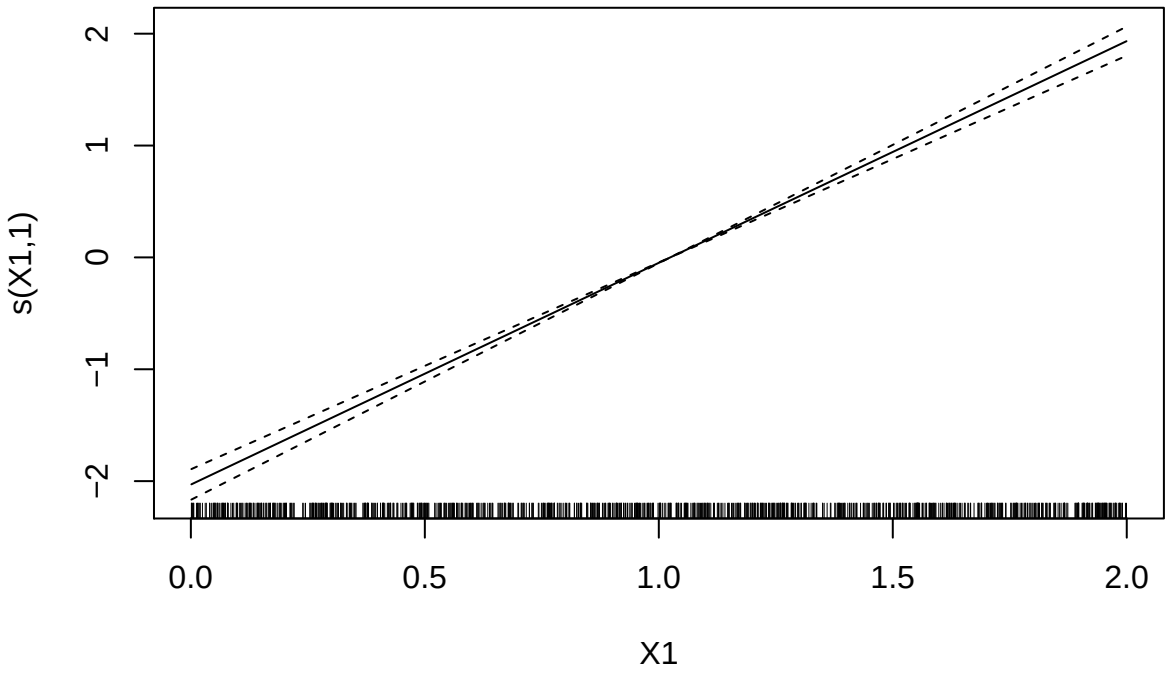


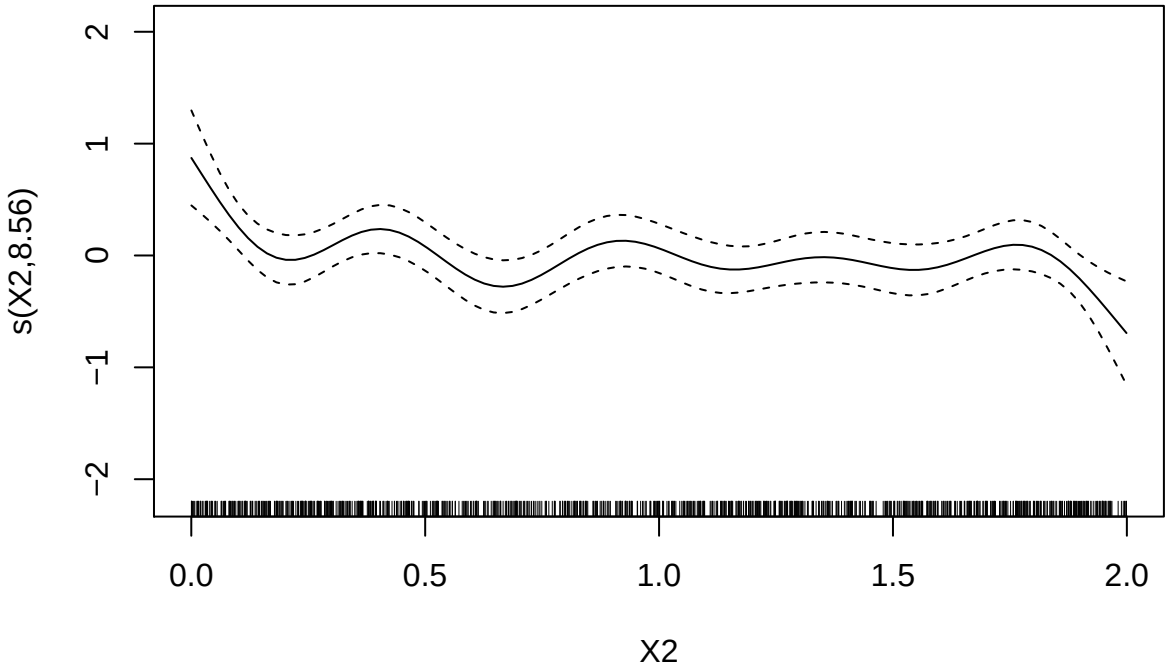




*On a les mêmes remarques que pour les splines.*

5. Estimer le degrés de liberté avec la fonction `gam` du package **mgcv** (Il n'est pas nécessaire de charger le package pour éviter les conflits).

```
mod.mgcv <- mgcv::gam(Y~s(X1)+s(X2),data=donnees)
plot(mod.mgcv)
```




### 4.3 Régression logistique additive

On considère le jeu de données **panne.txt** qui recense des pannes de machine (`etat=1`) en fonction de leur âge et de leur marque.

1. Faire une régression logistique permettant d'expliquer la variable `etat` par la variable `age` uniquement. Critiquer le modèle.

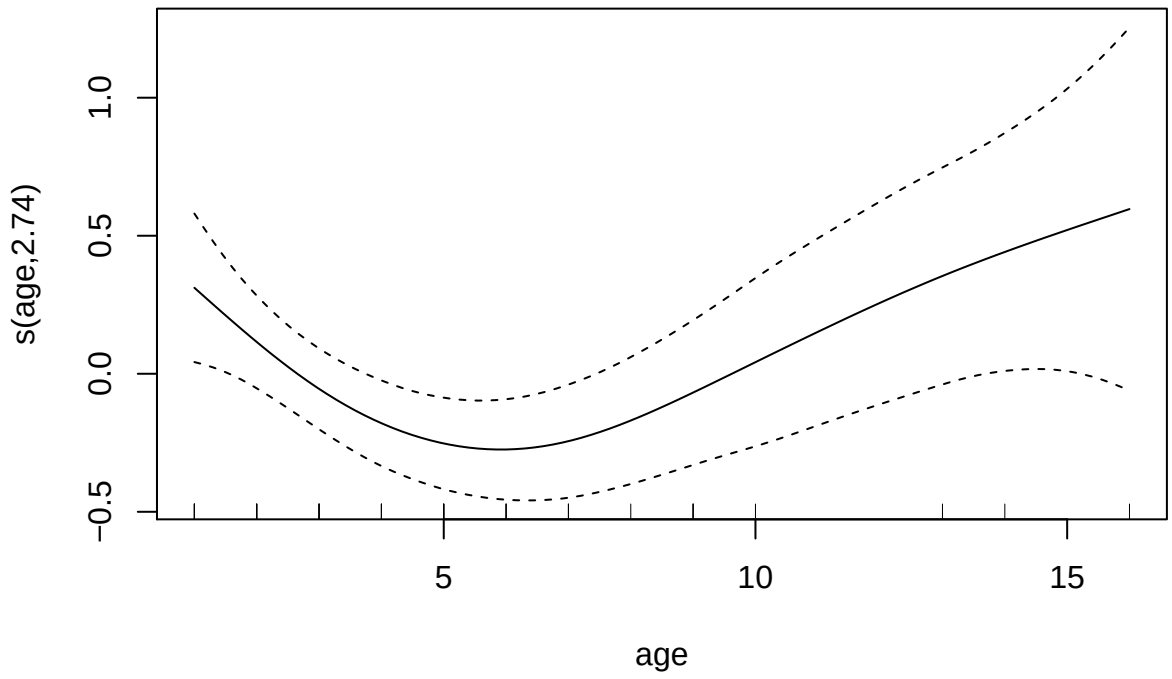
```
panne <- read.table("data/panne.txt",header=TRUE)
mod1 <- glm(etat~age,data=panne,family=binomial)
summary(mod1)
```

```
Call:
glm(formula = etat ~ age, family = binomial, data = panne)

Deviance Residuals:
   Min      1Q  Median      3Q     Max
-1.253  -1.199   1.015   1.183   1.210

Coefficients:
            Estimate Std. Error z value Pr(>|z|)
(Intercept) -0.10748    0.59864  -0.180    0.858
age          0.03141    0.09117   0.345    0.730

(Dispersion parameter for binomial family taken to be 1)

    Null deviance: 45.717  on 32  degrees of freedom
Residual deviance: 45.598  on 31  degrees of freedom
AIC: 49.598

Number of Fisher Scoring iterations: 3
```

*Le modèle n'est pas pertinent. On accepte la nullité du coefficient* **age**, *ce qui signifie que le modèle constant est meilleur que le modèle avec la variable* **age**.

2. Ajuster un modèle additif, toujours avec uniquement la variable age.

```
mod.panne <- mgcv::gam(etat~s(age),data=panne)
plot(mod.panne)
```




3. En utilisant le modèle additif, proposer un nouveau modèle logistique plus pertinent.

*Il semble que l'âge agisse de façon quadratique. Cela peut s'expliquer par le fait que les pannes interviennent souvent au début (phase de rodage) et à la fin (vieillissement de la machine).*

```
mod2 <- glm(etat~age+I(age^2),data=panne,family=binomial)
summary(mod2)
```

```
Call:
glm(formula = etat ~ age + I(age^2), family = binomial, data = panne)

Deviance Residuals:
     Min        1Q    Median        3Q       Max
-1.54043  -0.74739   0.00033   0.64877   1.88091

Coefficients:
            Estimate Std. Error z value Pr(>|z|)
(Intercept)  4.18501    1.73860   2.407  0.01608 *
age         -2.03343    0.77401  -2.627  0.00861 **
I(age^2)     0.17601    0.07044   2.499  0.01247 *
---
Signif. codes:
0 '***' 0.001 '**' 0.01 '*' 0.05 '.' 0.1 ' ' 1

(Dispersion parameter for binomial family taken to be 1)

    Null deviance: 45.717  on 32  degrees of freedom
Residual deviance: 31.279  on 30  degrees of freedom
AIC: 37.279

Number of Fisher Scoring iterations: 6
```

*On remarque ici que l'âge devient "significatif" !*

# Références

Giraud, C. (2015). *Introduction to High-Dimensional Statistics*. CRC Press.