Apprentissage supervisé

masedki.github.io

5 décembre 2019

Introduction

Références

- `http://wikistat.fr/`
- `https://github.com/wikistat/`

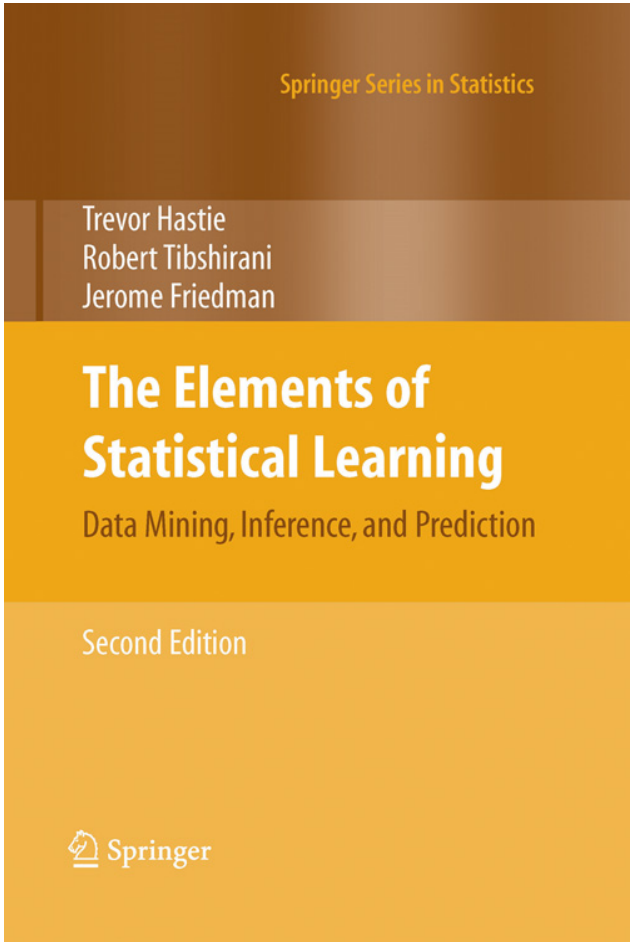


FIGURE – Disponible en ligne

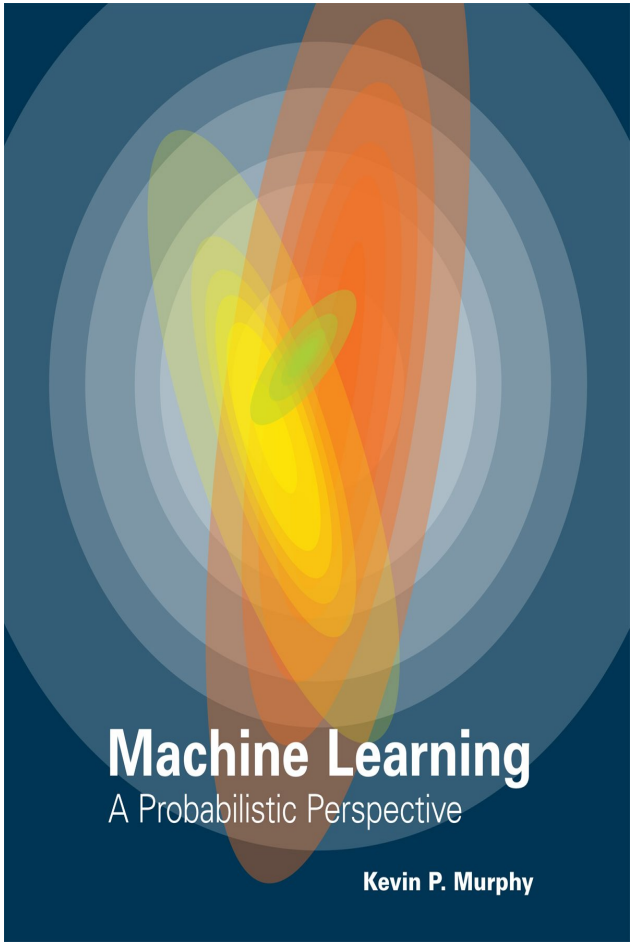


FIGURE – Je peux le fournir

Problèmes d'apprentissage statistique

1. Identifier les facteurs de risque du cancer de la prostate
2. Prédire si une personne est à risque pour une maladie coronarienne à partir de mesures cliniques, son régime et ses données démographiques.
3. Classification d'échantillons de tissus dans différents types de cancers, en fonction de données d'expressions de gènes
4. Classer des images de tumeurs

Apprentissage supervisé : point de départ

- Une variable de **sortie** Y (variable réponse, variable cible)
- Un vecteur de p variables X (appelé variables explicatives, covariables ou variables d'entrée *regressors, features, predictors*)
- En régression, Y est une variable quantitative (le dosage du PSA, tension artérielle)
- En classification, Y prend un nombre fini de valeurs (vivant/mort, les nombres 0-9, le type de cancer)
- Des données dites d'apprentissage *training data* $(x_1, y_1), \ldots, (x_N, y_N)$. Ce sont les observations.

Objectif

À partir des données d'apprentissage

- Prédire la réponse non observée d'un cas "test"
- Comprendre l'influence des variables explicatives sur la variable réponse (comment et de combien)
- Mesurer la qualité de notre "inférence statistique" notamment sa prédiction

Pourquoi ce cours !!!

- Il est important de comprendre les différentes techniques pour savoir comment et quand les utiliser
- Il faut absolument comprendre les méthodes basiques en premier
- Il est indispensable d'évaluer la précision et les limites d'une méthode car souvent les méthodes simples fonctionnent mieux que les méthodes sophistiquées !!

Un mot sur l'apprentissage non-supervisé

- Pas de réponse (Y)
- Buts plus flous : description de données, analyse de données
- Exemple : Regrouper des observations similaires (marketing,. . .)
- Difficulté de l'évaluation du résultat
- Différent de l'apprentissage supervisé, mais peut être une étape préliminaire à un apprentissage supervisé

Apprentissage statistique versus Machine learning

Deux domaines qui nomment la même chose!!!

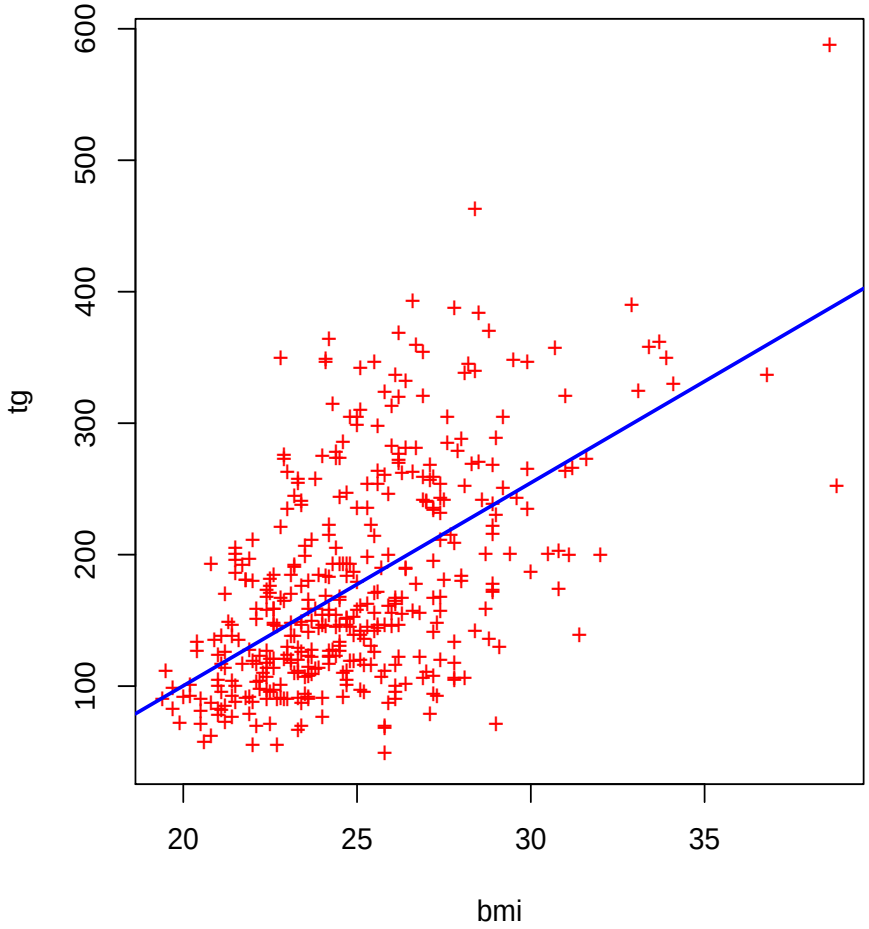
- Machine learning est une branche de l'intelligence artificielle
- Apprentissage statistique est une branche de la statistique

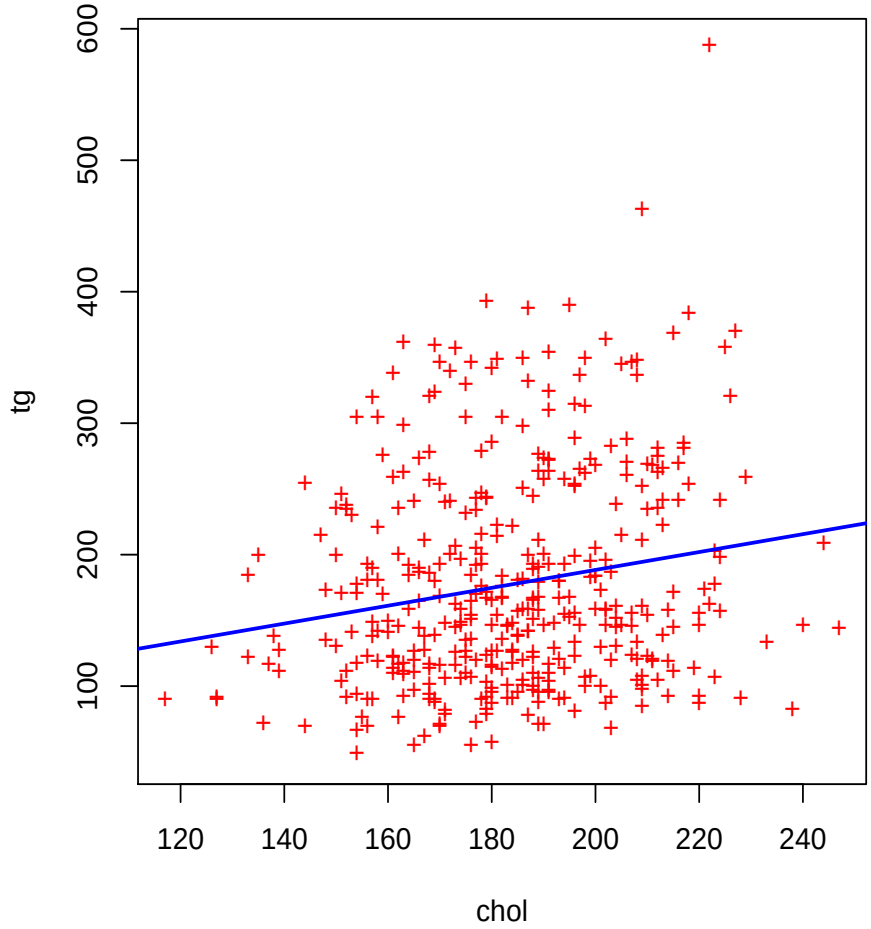
Différences entre les deux visions

- En Machine learning, on met l'accent sur l'application à grande échelle et la précision de la prédiction
- L'apprentissage statistique met l'accent sur les modèles et leur interprétabilité, précision et incertitude.

Apprentissage statistique : exemple

triglycérides vs BMI et cholestérol avec la droite de régression





Apprentissage : exemple + notations

- Peut-on prédire le taux de tri-glycérides en fonction du BMI et du taux de cholestérol, c'est à dire un modèle

$$\text{Triglycérides} \approx f\big(\text{BMI}, \text{cholestérol}\big)$$

- Ici le taux de Tri-glycérides représente la variable réponse Y qu'on cherche à prédire ou à expliquer
- Le BMI est une variable explicative ou covarible qu'on note X_1 et le taux cholestérol est aussi une variable explicative qu'on note X_2.

On peut maintenant écrire notre modèle

$$Y = f(X) + \varepsilon \quad \text{où} \quad X = \begin{pmatrix} X_1 \\ X_2 \end{pmatrix}$$

ε capte l'erreur de mesure.

Apprentissage : quelle est la meilleure fonction $f(X)$?

- Avec une "meilleure" fonction f on peut prédire Y pour une nouvelle observation des variables explicatives $X = x$
- De manière générale, on peut identifier les composantes importantes de $X = (X_1, X_2 \ldots, X_p)$ pour expliquer Y et les composantes qui le sont moins. Selon la complexité de f, on peut comprendre comment et de combien les composantes X_j de X influent sur la valeur de Y.

La réponse est oui : la fonction de régression

- C'est $f(0.5) = \mathbb{E}\big(Y|X = 0.5\big)$ la valeur moyenne de Y sachant que $X = 0.5$.
- C'est la fonction optimale pour l'erreur quadratique, c'est à dire, minimise $\mathbb{E}\Big(\big(Y - g(X)\big)^2|X = x\Big)$ pour toute fonction g et toute valeur de x.
- $\varepsilon = Y - f(X)$ est l'erreur incompressible, même si f est connue, pour chaque valeur de X, nous avons une réalisation d'une variable aléatoire Y

La fonction de régression

Nous avons

$$\mathbb{E}_{X,Y}\Big[\Big(Y - g(X)\Big)^2\Big] = \mathbb{E}_X \mathbb{E}_{Y|X}\Big[\Big(Y - g(X)\Big)^2 \mid X\Big]$$

Donc il suffit de minimiser cette erreur ponctuellement en X

$$f(x) = \text{argmin}_c \mathbb{E}_{Y|X}\Big[\Big(Y - c\Big)^2 \mid X = x\Big].$$

La solution est donnée par

$$f(x) = \mathbb{E}\big[Y \mid X = x\big]$$

Décomposition de l'erreur

Pour tout estimateur $\widehat{f}(x)$ de $f(x)$ à x fixé, nous avons

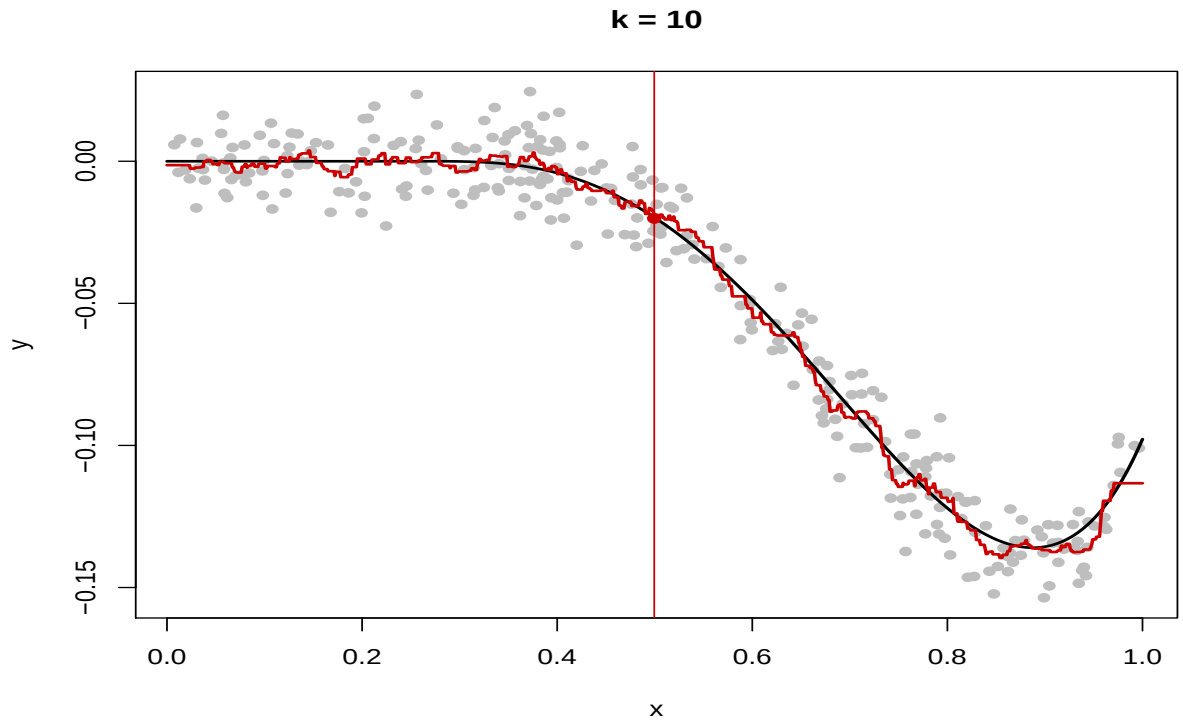
$$\begin{aligned}
\mathbb{E}_{\mathcal{X},\mathcal{Y}}\left[\left(f(x)-\widehat{f}(x)\right)^2\right] &= \left[f(x)\right]^2 - 2f(x)\mathbb{E}_{\mathcal{X},\mathcal{Y}}\left(\widehat{f}(x)\right) + \mathbb{E}_{\mathcal{X},\mathcal{Y}}\left[\left(\widehat{f}(x)\right)^2\right] \\
&= \left[f(x) - \mathbb{E}_{\mathcal{X},\mathcal{Y}}\left(\widehat{f}(x)\right)\right]^2 + \mathbb{E}_{\mathcal{X},\mathcal{Y}}\left[\left(\widehat{f}(x)\right)^2\right] \\
&\quad - \left[\mathbb{E}_{\mathcal{X},\mathcal{Y}}\left(\widehat{f}(x)\right)\right]^2 \\
&= \Big(\text{biais}\Big)^2 + \text{Var}\left[\widehat{f}(x)\right]
\end{aligned}$$

estimation de f ?

- Nous n'avons aucune observation avec $x = 0.5$
- On ne sait pas calculer $\mathbb{E}\big(Y|X = x\big)$!
- Approximation

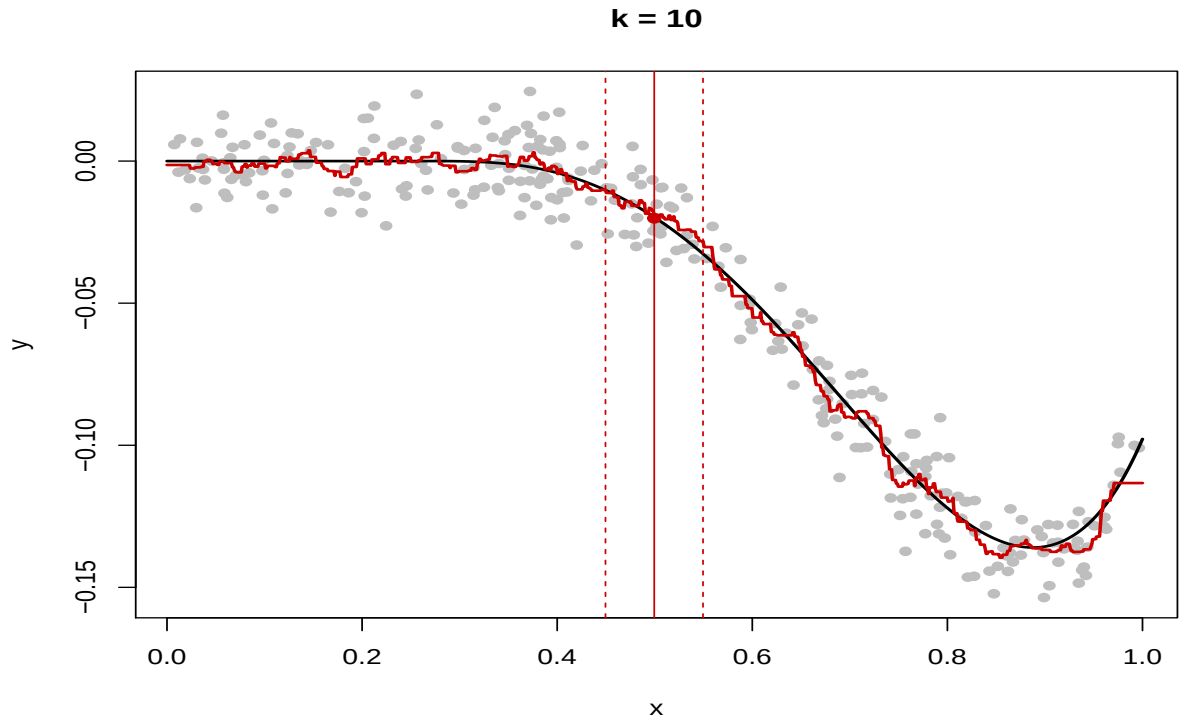
$$\widehat{f}(x) = \text{Moyenne}\Big(Y, X \in \mathcal{N}(x)\Big)$$

où $\mathcal{N}(x)$ représente un certain voisinage de x.

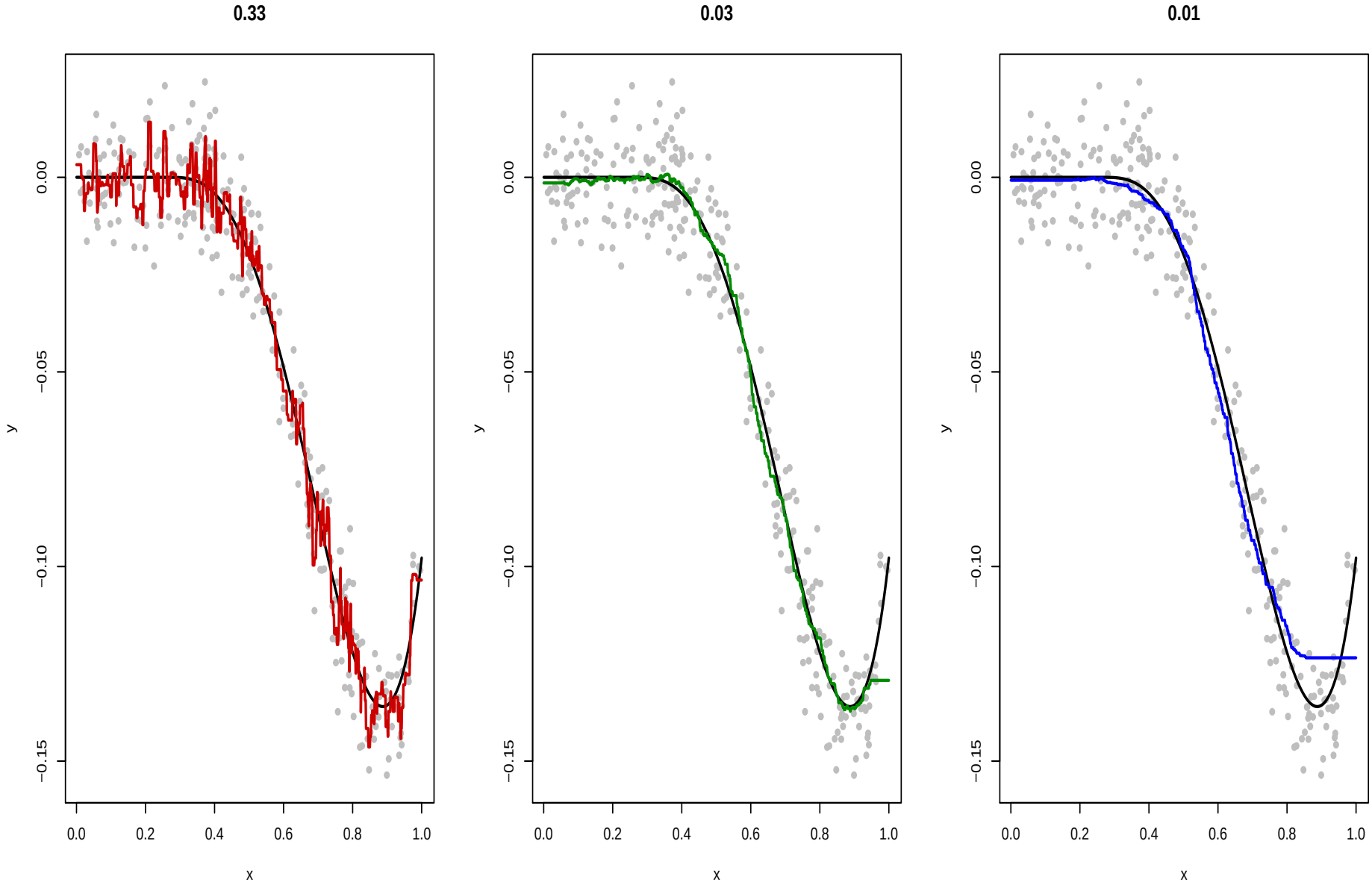


Une fonction idéale $f(X)$? pour une certaine valeur de X, disons 0.5 ?

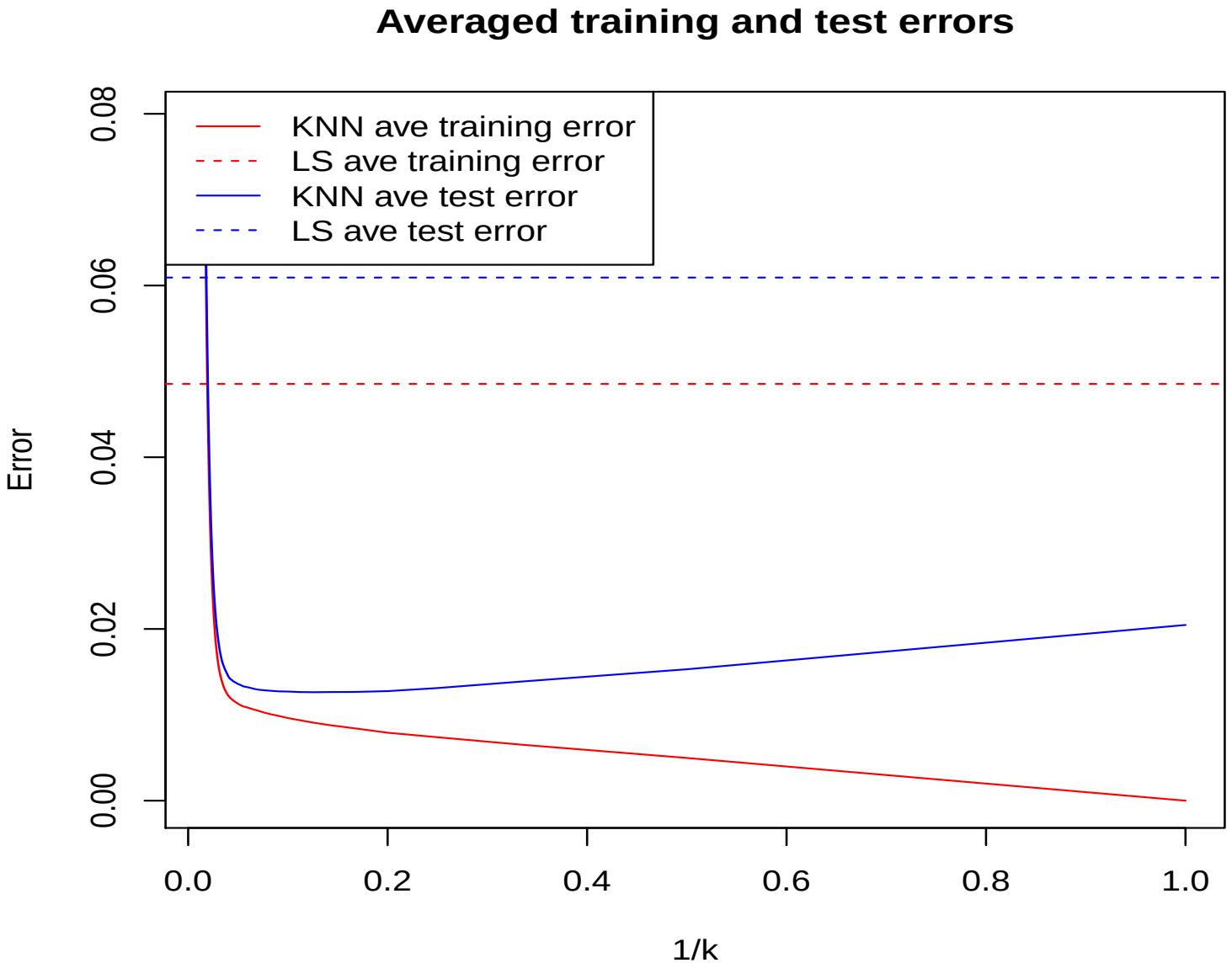
graphiquement



Complexité d'un modèle (compromis biais variance)



Évaluation de la précision : phénomène de sur-apprentissage



Évaluer la précision : premier pas

Supposons que l'on ajuste un modèle $\widehat{f}(x)$ sur des données d'apprentissage $\text{Tr} = \{(x_1, y_1), \ldots, (x_N, y_N)\}$.

Performance de $\widehat{f}$?

Première idée : erreur moyenne de prédiction sur Tr :

$$\text{MSE}_{\mathbf{Tr}} = \text{Moyenne}_{i \in \mathbf{Tr}} \left(y_i - \widehat{f}(x_i) \right)^2$$

OPTIMISTE

(sur-apprentissage)

Meilleure idée : sur un jeu de données de *test*, $\text{Te} = \{(x_{N+1}, y_{N+1}), \ldots, \}$, indépendant de Tr :

$$\text{MSE}_{\mathbf{Te}} = \text{Moyenne}_{i \in \text{Te}} \left(y_i - \widehat{f}(x_i) \right)^2$$

Apprentissage : problème de classification

Ici la variable réponse Y est qualitative :
le type d'une tumeur $\mathcal{C} = \{\text{maligne}, \quad \text{bénigne}\}$
Les objectifs sont

- Construire une règle de classification $g(X)$ qui permet d'associer un "label" de $\mathcal{C}$ pour une nouvelle obsevation X sans label connu a priori.
- Évaluer l'erreur de classification de la règle
- Comprendre le rôle des chaque variable explicative $X = (X_1, X_2, \ldots, X_p)$ dans la règle de classification

Classification binaire

- Un échantillon i.i.d $(X_1, Y_1), \ldots, (X_n, Y_n)$ à valeurs dans $\mathbb{R}^p \times \{0, 1\}$.
- Objectif : Prédire ou expliquer la variable Y à partir d'une nouvelle observation X.
- Méthode : construire une règle classification

$$g : \mathbb{R}^p \mapsto \{0, 1\}.$$

- Critère de performance pour g : probabilité d'erreur ou de mauvais classement

$$L(g) = \mathbb{P}\big(g(X) \neq Y\big).$$

La règle de Bayes

- Un autre champion :

$$g^*(x) = \begin{cases} 0 & \text{si} \quad \mathbb{P}\big(Y=0|X=x\big) \geq \mathbb{P}\big(Y=1|X=x\big) \\ 1 & \text{sinon,} \end{cases}$$

  appelé règle de Bayes.
- Quelque soit la règle de décision g, nous avons

$$L^* = L(g^*) = \mathbb{P}\big(g^*(X) \neq Y\big) \leq \mathbb{P}\big(g(X) \neq Y\big) = L(g).$$

- Problème : g^* est inconnue en pratique. Il faut construire une règle $\widehat{g}_n$ à partir des données $(X_1, Y_1), \ldots, (X_n, Y_n)$, tel que

$$\widehat{g}_n(x) \approx g^*(x).$$

Plus de 2 classes

Supposons qu'on a le cas général où $\mathcal{C}$ possède K labels numérotés de 1 à K, on définit les probabilités conditionnelles

$$p_k(x) = \mathbb{P}\Big(Y = k | X = x\Big), \quad k = 1, 2, \ldots, K.$$

La règle de classification dite de Bayes en un certain point x_0 est donnée par

$$g(x_0) = j \quad \text{si} \quad j = \underset{k \in \{1,\ldots,K\}}{\arg\max}\, p_k(x_0)$$

Une règle de classification basée sur les plus proches voisins

$$p_k\big(x_0\big) = \frac{1}{|\mathcal{N}_0|} \sum_{i \in \mathcal{N}_0} I\big(y_i = k\big)$$

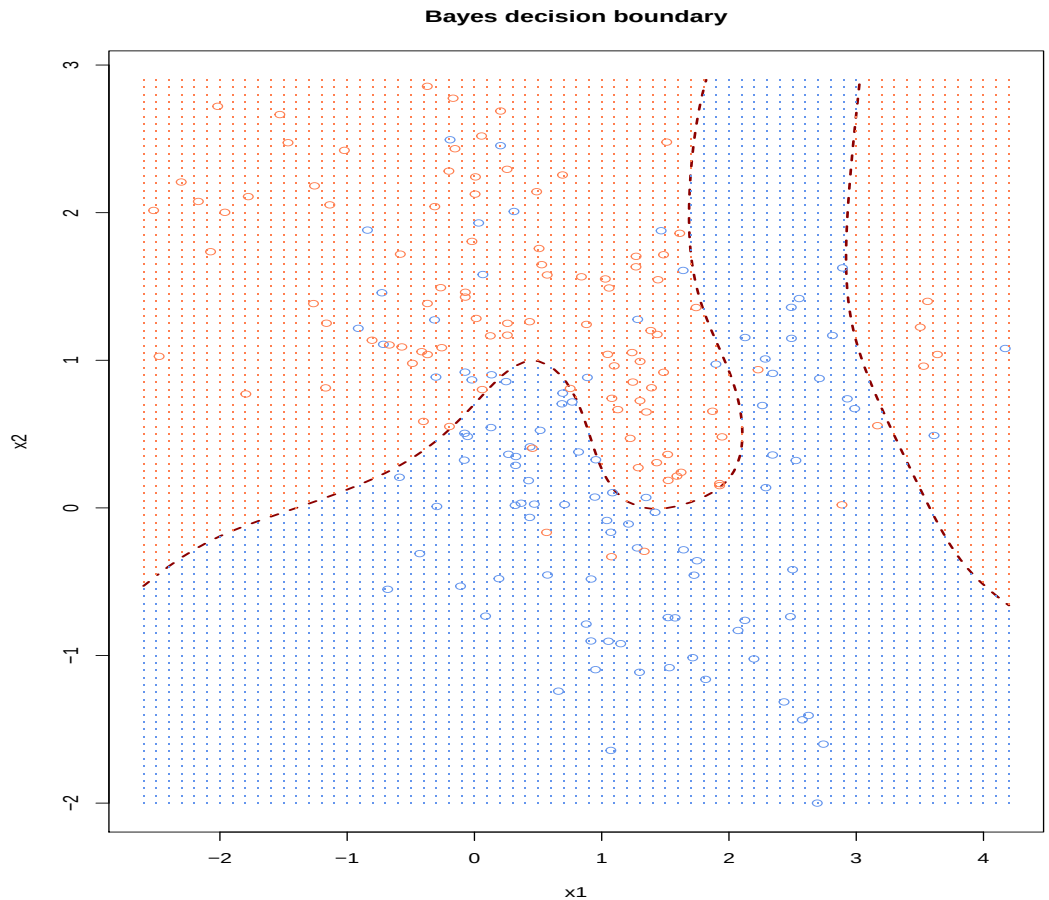
Un peu de formalisme : évaluation

- La mesure de performance d'une règle de classification $\widehat{g}(x)$est donnée par l'erreur de classification

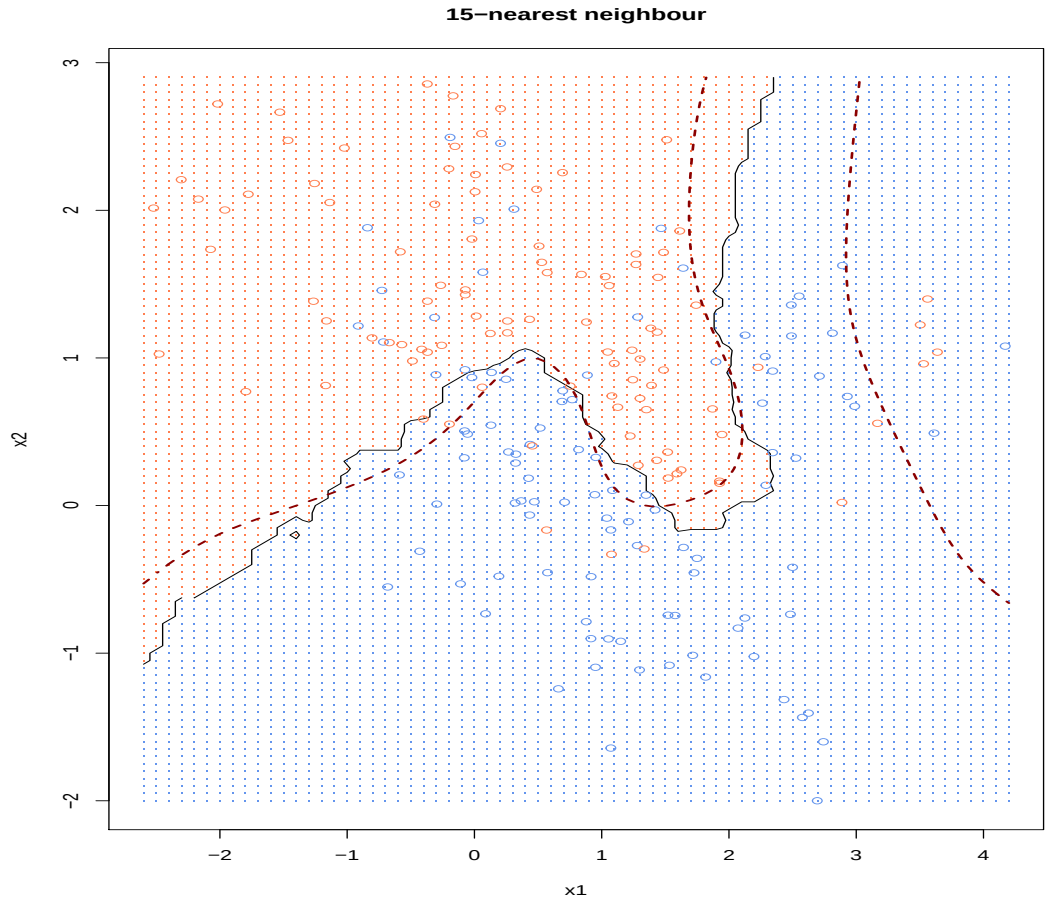
$$\text{Err}_{\text{Te}} = \text{Moyenne}_{i \in \text{Te}} I\Big(y_i \neq \widehat{g}(x_i)\Big)$$

- La règle de classification de Bayes (avec les vraies $p_k(x)$) réalise la plus petite erreur de classification dans la population.
- Les svm (*Support Vector Machines*) construisent des modèles structurés pour $g(x)$
- La régression logistique, les modèles comme la LDA QDA proposent des constructions de modèles structurés pour $p_k(x)$

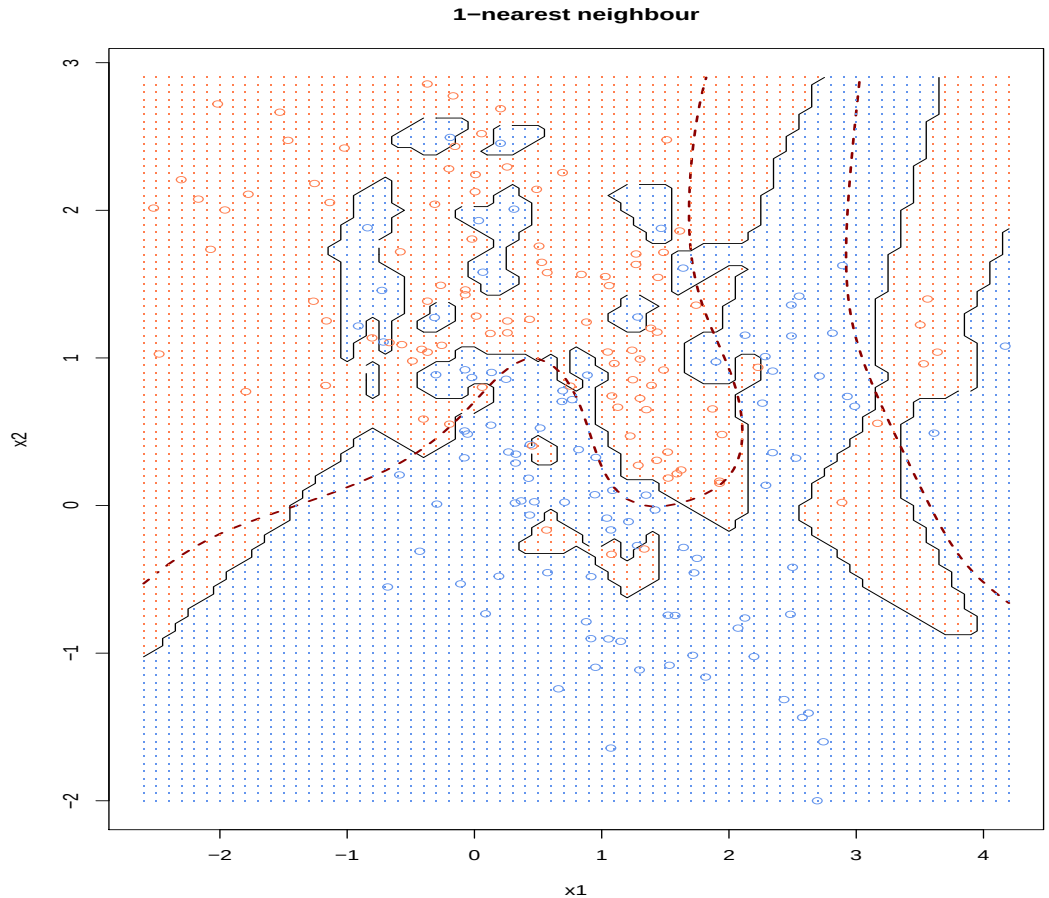
Jeu de données avec la frontière issue de la règle de Bayes



Règle de classification knn $k = 15$



Règle de classification knn $k = 1$



Les Knn sont victimes du fléau de la dimension

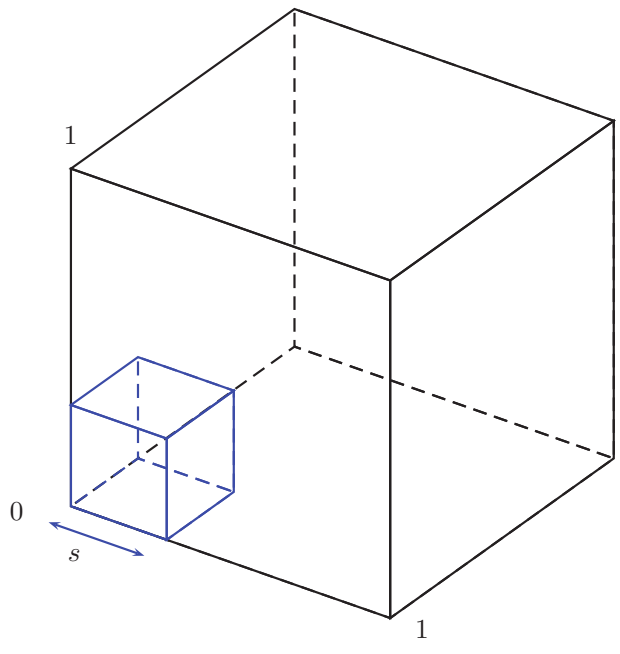
- Ces méthodes, basées sur des moyennes autour des voisins sont plutôt bonnes si
  - petite dimension $p \leq 4$
  - grand échantillon $n \gg p$
- des versions lissées, obtenues par
  - méthodes à noyaux
  - lissage par splines,
  - ...

Raison. le *fléau de la dimension*.
Les voisins les plus proches peuvent être éloignés en grande dimension

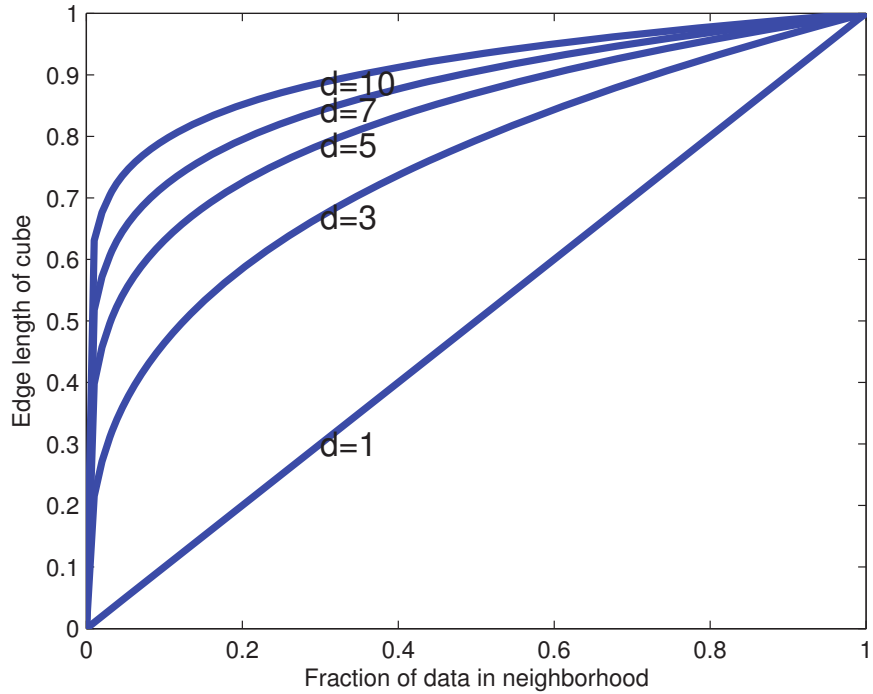
- Il faut une quantité raisonnable de valeurs de y_i à moyenner pour que $\widehat{f}(x)$ ait une faible variance
- En grande dimension, pour obtenir cette quantité d'observation, il faut s'éloigner beaucoup de x.

On perd l'idée de moyenne **locale** autre de $X = x$.

Le fléau de la dimension



(a)



(b)

But

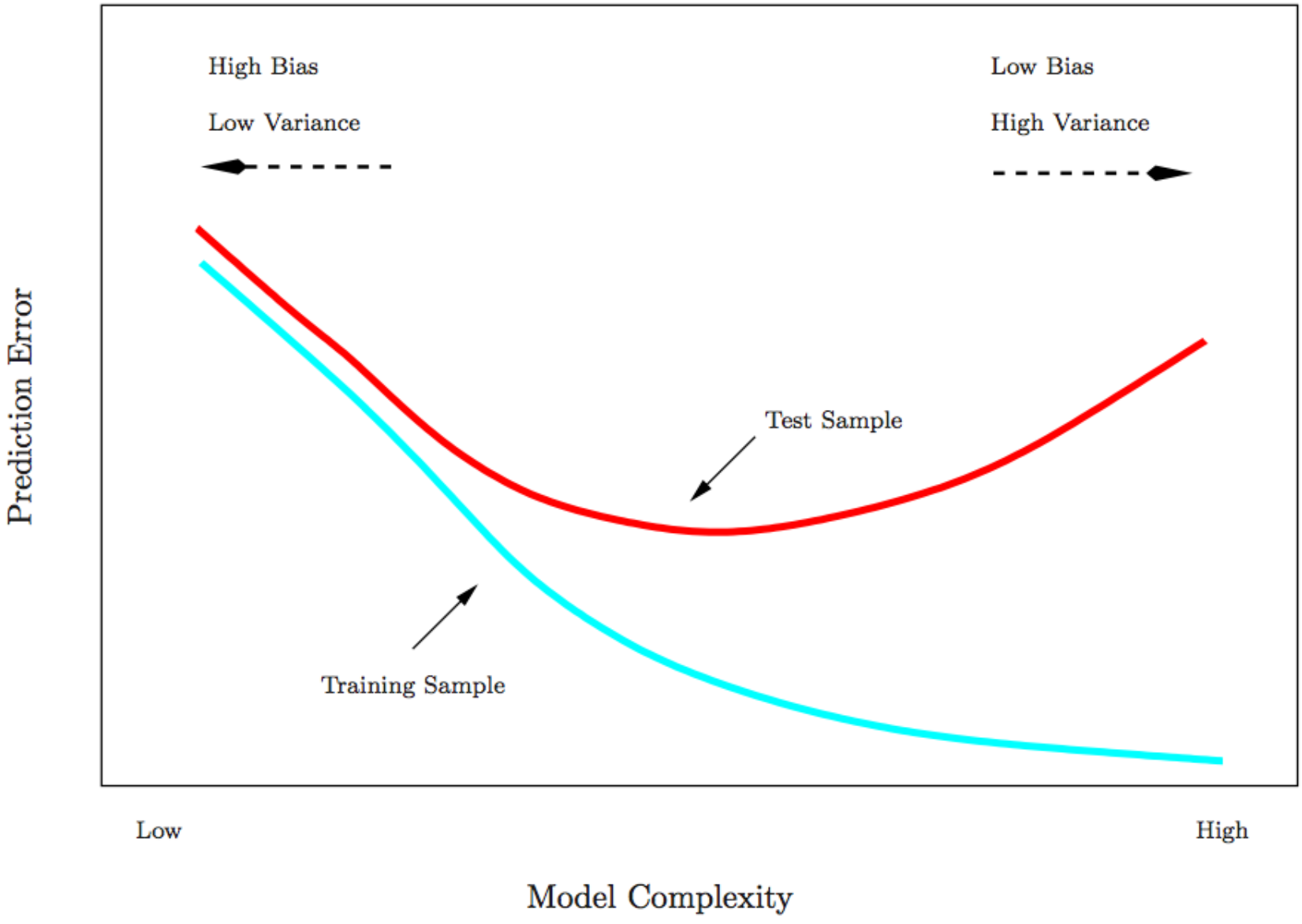
- Dans cette partie, nous allons discuter de deux méthodes de *ré-échantillonnage* : la validation croisée et le bootstrap
- Ces méthodes ré-ajustent le modèle que l'on souhaite sur des échantillons issus de l'échantillon d'apprentissage, dans le but d'obtenir des informations supplémentaires sur ce modèle
- Par exemples, ces méthodes fournissent des estimations de l'erreur sur des ensembles de test, le biais et la variance des estimations de paramètres...

Erreur d'entrainement et erreur de test

On rappelle la différence entre *erreur de test* et *erreur d'entrainement* :

- L'*erreur de test* est l'erreur moyenne commise par une méthode d'apprentissage statistique pour prédire une réponse sur une nouvelle observation, qui n'a pas été utilisée pour ajuster le modèle.
- En revanche, l'*erreur d'entrainement* peut être facilement calculée en appliquant la méthode d'apprentissage sur les données d'entrainement.
- Mais l'erreur d'entrainement est souvent bien différente de l'erreur de test, et en particulier, l'erreur d'entrainement sous-estime parfois grandement l'erreur de test — on parle d'erreur trop *optimiste*.

Erreur d'entrainement et erreur de test



Estimations de l'erreur de prédiction

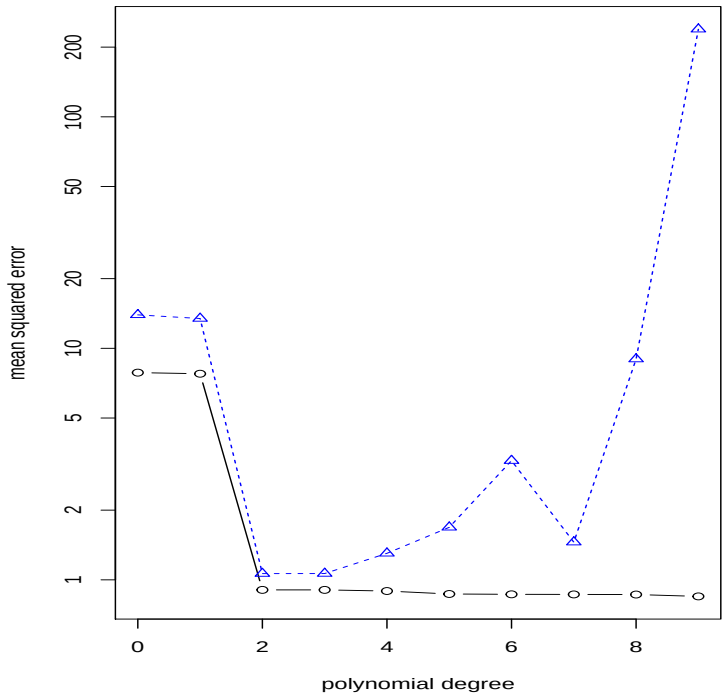
- La meilleure solution : un grand ensemble de test clairement désigné. Bien souvent, ce n'est pas disponible.
- Certaines méthodes permettent de corriger l'erreur d'entrainement pour estimer l'erreur de test, avec des arguments fondés mathématiquement.
  Cela inclut les C_p *de Mallows*, les critères AIC et BIC.
  Ils seront discutés plus tard.
- Ici, nous nous intéressons à une classe de méthodes qui estime l'erreur de test en mettant de côté un sous-ensemble des données d'entrainement disponibles pour ajuster les modèles, et en appliquant la méthodes ajustée sur ces données mises de côté.

Approche par ensemble de validation

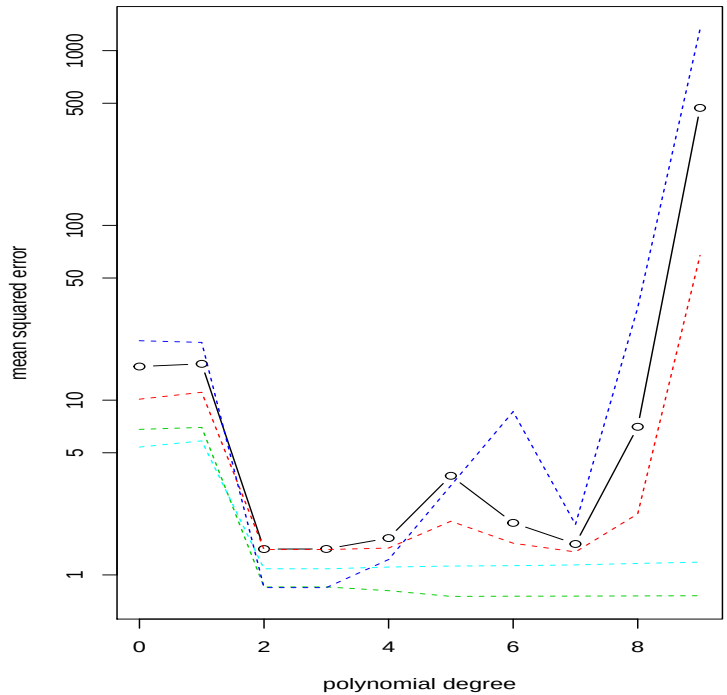
- Cette méthode propose de diviser l'échantillon d'apprentissage en deux : un ensemble d'entrainement et un ensemble de validation
- Le modèle est ajusté sur l'ensemble d'entrainement, et on l'utilise ensuite pour prédire les réponses sur l'échantillon de validation.
- L'erreur obtenue en comparant prédiction et observation sur cet échantillon de validation approche l'erreur de test. On utilise typiquement des moindres carrés (MSE) en régression et des taux de mauvaises classification si la réponse est qualitative (ou une fonction de coût d'erreur)

Exemple sur les données simulées (degré 2)

- On veut comparer la régression linéaires à des régressions polynomiales de différents degrés
- On divise en deux les 200 observations : 100 pour l'entrainement, 100 pour le test.



Sur une partition aléatoire



Variabilité d'une partition à l'autre

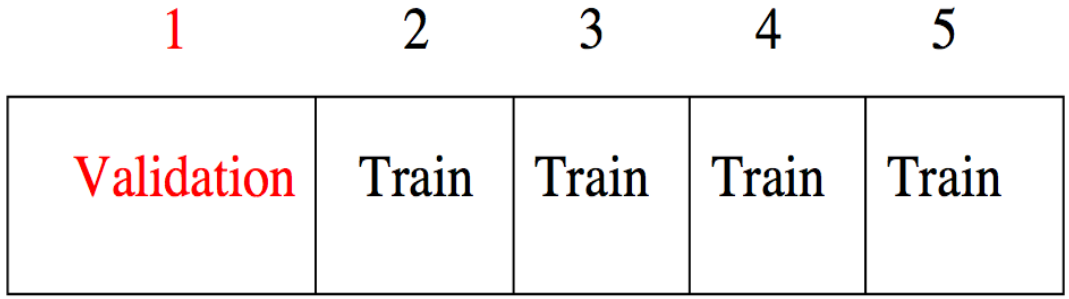
Inconvénients de l'approche par ensemble de validation

- L'estimation obtenue par cette méthode peut être très variable, et dépend de la chance ou malchance dans la construction du sous-échantillon de validation
- Dans cette approche, seule une moitié des observations est utilisée pour ajuster les modèles — celles qui sont dans l'ensemble d'entrainement.
- Cela suggère que l'erreur calculée peut surestimer l'erreur de test d'un modèle ajusté sur l'ensemble des données (moins de variabilité d'échantillonnage dans l'inférence des paramètres du modèle)

Déjà mieux : échanger les rôles entrainement-validation et faire la moyenne des deux erreurs obtenues. On *croise* les rôles.

Validation croisée à K groupes

- C'est la méthode la plus couramment utilisée pour estimer l'erreur de test
- L'estimation peut être utilisée pour choisir le meilleur modèle (la meilleure méthode d'apprentissage), ou approcher l'erreur de prédiction du modèle finalement choisi.
- L'idée est de diviser les données en K groupes de même taille. On laisse le k-ème bloc de côté, on ajuste le modèle, et on l'évalue sur le bloc laissé de côté.
- On répète l'opération en laissant de côté le bloc $k = 1$, puis $k = 2, \ldots$ jusqu'à $k = K$. Et on combine les résultats



Détails

Pour chacune des observations, on obtient une prédiction $\widehat{y_i} = \widehat{f}(x_i)$ ou $\widehat{C}(x_i)$ au moment où i est dans le groupe mis de côté, et une seule prédiction.
On compare alors ces prédictions aux observations comme pour l'erreur de test

$$MSE_{(K)} = \frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n}(y_i - \widehat{y_i})^2$$

ou

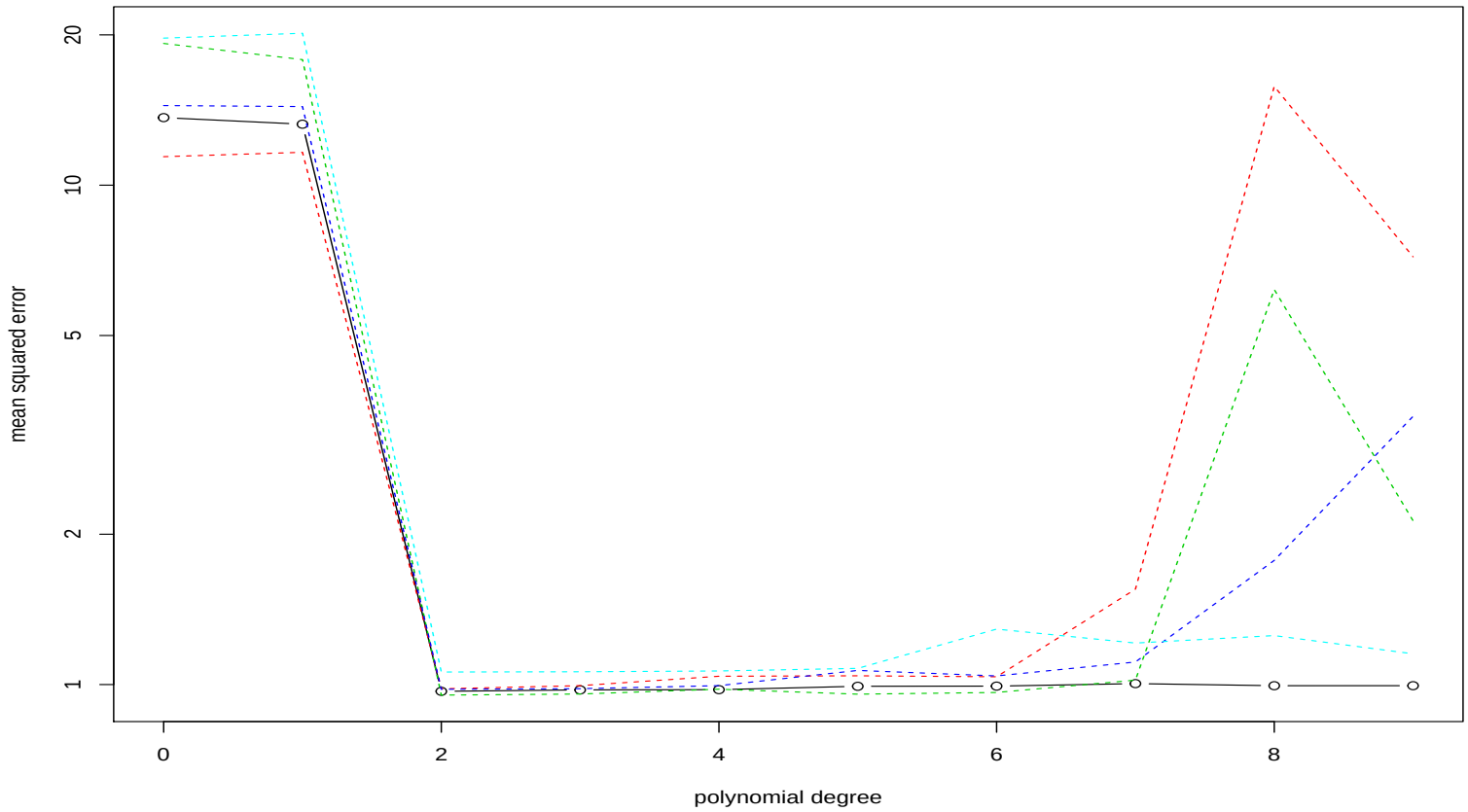
$$\tau_{(K)} = \frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n}\mathbf{1}\{y_i - \widehat{C}(x_i)\}$$

Lorsque $K = n$, on parle de « *leave-one out cross-validation* » (LOOCV)

Danger avec le leave-one out !

On dit que LOOCV ne secoue pas assez les données. En effet, les classifiers $\widehat{C}$ ou les fonctions de régression inférées $\widehat{f}$ avec $(n-1)$ données sont très corrélés les uns aux autres.
On ne voit plus l'erreur d'échantillonnage, autrement dit la variabilité de l'estimation de la fonction. C'était pourtant tout l'intérêt de la validation croisée.
On choisit généralement $K = 5$ ou $K = 10$ blocs.

Retour au jeu de données simulé

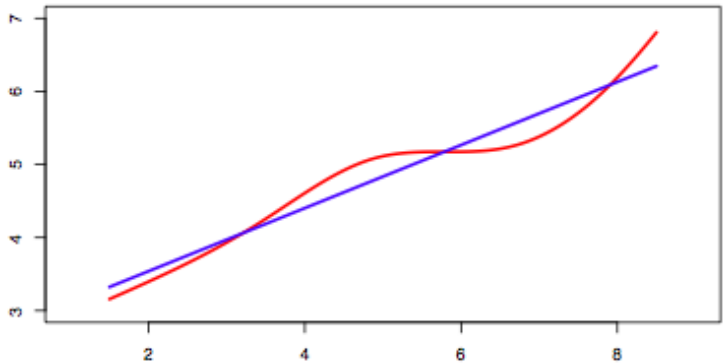


En cas d'égalité, choisir le modèle le plus *parcimonieux* car il aura naturellement moins de variance d'estimation dans les coefficients du modèle.

Sélection de variables en régression linéaire

Régression linéaire : rappel

- Une approche simple pour faire de l'apprentissage supervisé. Elle suppose que Y dépend linéairement de $X_1, \ldots X_p$
- Les vraies fonctions de régression ne sont jamais linéaires



- Même si cela semble trop simple, la régression linéaire est extrêmement utile à la fois conceptuellement et en pratique.

Le cas de régression linéaire simple

- On pose un modèle de la forme

$$Y = \beta_0 + \beta_1 X + \varepsilon,$$

où β_0, β_1 inconnus sont ordonnée à l'origine (intercept) et pente (slope). Ce sont les *coefficients* du modèle

- Étant estimés ces coefficients par $\widehat{\beta_0}$ et $\widehat{\beta_1}$, on prédit y sachant x avec

$$\widehat{y} = \widehat{\beta_0} + \widehat{\beta_1} x,$$

Régression linéaire multiple

- Notre modèle

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

- On interprète β_j comme l'effet moyen sur Y d'un accroissement de X_j d'une unité *lorsque tous les autres prédicteurs sont fixés*.
- On ne peut faire aucune affirmation en terme de *causalité*.

Exemple. $Y =$ *serum triglycerides mg/dl*,
$A =$ *age in years* et B *body-mass index*, kg/m^2.
$\widehat{Y} = -247.25 + 3.5A + 9.3B$.
Comment s'interprète 9.3 ?

Interpréter les coefficients de régression

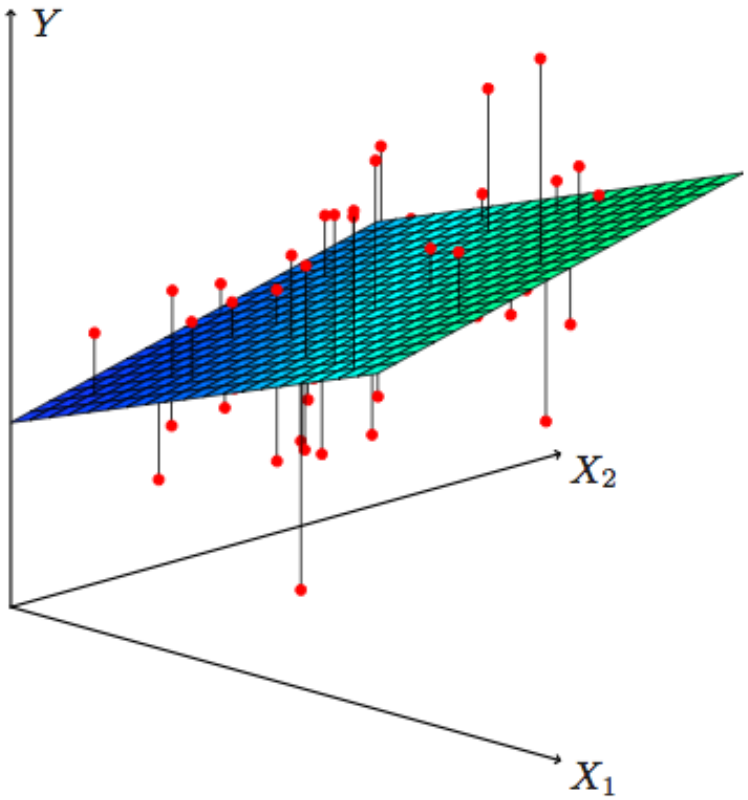
- Le scenario idéal lorsque les prédicteurs sont indépendants, et le design équilibré
  - chaque coeff peut être estimé et testé séparément
  - interprétation de gauche est OK
- La corrélation entre X_j pose des problèmes
  - la variance des estimateurs s'accroit
  - l'interprétation devient hasardeuse (lorsque X_j change, tout change !)

Estimation et prédiction pour la régression multiple

- À partir d'estimation des coef $\widehat{\beta_0}$, $\widehat{\beta_1}$, $\ldots$, $\widehat{\beta_p}$, on peut prédire avec

$$\widehat{y} = \widehat{\beta_0} + \widehat{\beta_1} x_1 + \cdots + \widehat{\beta_p} x_p$$

- Comme en dimension 1, on estime les β en minimisant la somme des carrées résiduelle. Formule théorique qui dépend d'une inversion de matrice produit. $\rightarrow$ utiliser un logiciel de statistique
- De même, $SE(\beta_j)$ pour chaque coefficient, t-test de nullité, test de Fisher,...



Résultats pour les données triglycérides

	Coeff	Std.Err	t-stat	p-value
Intercept	-247.25	21.24	-11.64	<2e-16
`BMI`	9.30	0.90	10.32	<2e-16
`age`	3.50	0.19	18.69	<2e-16

Corrélations

	`TG`	`BMI`	`age`
`TG`	1.00	0.56	0.73
`BMI`		1.00	0.34
`age`			1.00

Quelques rappels

On note

- La somme des carrés totale $\text{SST} = \text{SYY} = \sum_{i=1}^{n} (y_i - \bar{y})^2$
- La somme des carrés résiduelle $\text{RSS} = \sum_{i=1}^{n} (y_i - \hat{y}_i)^2$, où

$$\widehat{\mathbf{Y}} = \mathbf{X}\widehat{\boldsymbol{\beta}} \quad \widehat{\boldsymbol{\beta}} = \left(\mathbf{X}'\mathbf{X}\right)^{-1}\mathbf{X}'\mathbf{Y}$$

- La somme des carrés expliquée par la régression $\text{SSreg} = \sum_{i=1}^{n} (\hat{y}_i - \bar{y})^2$

Des questions importantes

1. Y a t-il au moins un des X_j utile pour prédire Y ?
2. Sont-ils vraiment tous utiles ?
3. Comment le modèle s'ajuste aux données ?
4. Avec une nouvelle valeur de X, quelle réponse doit-on prédire ? Précision de la prédiction ?

Des questions importantes

1. Y a t-il au moins un des X_j utile pour prédire Y ?
2. Sont-ils vraiment tous utiles ?
3. Comment le modèle s'ajuste aux données ?
4. Avec une nouvelle valeur de X, quelle réponse doit-on prédire ? Précision de la prédiction ?

Pour la première question, on utilise la F-statistique

$$F = \frac{(\text{SST} - \text{RSS})/p}{\text{RSS}/(n-p-1)} \sim F_{p,n-p-1}$$

Quantité	Valeur
Residual Std.Err	50.34
R^2	0.63
F-stat	343.7

Des questions importantes

1. Y a t-il au moins un des X_j utile pour prédire Y ?
2. Sont-ils vraiment tous utiles ?
3. Comment le modèle s'ajuste aux données ?
4. Avec une nouvelle valeur de X, quelle réponse doit-on prédire ? Précision de la prédiction ?

- Choix de co-variables : approche complète
  Comparer les modèles linéaires avec tous les sous-ensembles possibles de co-variables
- Souvent 2^p trop grand ($\log_{10}(2^{40}) \approx 12.0$
  On utilise une méthode que ne parcourt que certains sous-ensembles. Deux approches standard
  Sélections progressive, ou rétrograde
- Nécessite de répondre à la question suivante pour effectuer la comparaison.

Choix de co-variables

Méthode progressive
(forward)

1. Commencer par le modèle nul (à zéro co-variables)
2. Ajuster les p régressions linéaires simples et ajouter au modèle nul la co-variable qui à le plus petit RSS
3. Ajouter à ce modèle à une co-variable la co-variable qui fait baisser le plus le RSS
4. Continuer jusqu'à un critère d'arrêt (par exemple sur la p-value du t-test)

Méthode rétrograde
(backward)

1. Commencer par le modèle avec tous les co-variables
2. Supprimer la variable avec la plus grande p-value —i.e., la co-variable la moins significative pour le modèle
3. Ré-ajuster le modèle, et enlever de nouveau la co-variable de plus grande p-value
4. Continuer jusqu'à un critère d'arrêt (par exemple portant sur la valeur de la p-value de la co-variable que l'on enlèverait)

Choix de co-variables

- Critère plus systématique pour choisir le modèle « optimal » dans ceux que l'on parcourt
- Avec C_p de Mallows, Akaike information criterion (AIC), Bayesian information criterion (BIC), R^2 ajusté et validation croisée (CV)

Évaluer un sous ensembles de covariables

On supposera dans la suite que nous avons m covariables au total et on entend par modèle un sous-ensemble de ces covariables de taille p.

Évaluer un sous ensembles de covariables

On supposera dans la suite que nous avons m covariables au total et on entend par modèle un sous-ensemble de ces covariables de taille p.

Rappelons que

$$R^2 = \frac{\text{SSreg}}{\text{SST}} = 1 - \frac{\text{RSS}}{\text{SST}}$$

et

$$R^2_{\text{adj}} == 1 - \frac{\text{RSS}\,/(n-p-1)}{\text{SST}\,/(n-1)}$$

où p est le nombre de variables du modèle.

- On sélectionne le modèle avec le R^2_{adj} le plus élevé, cela revient à choisir le sous-ensemble de variables qui minimise

$$S^2 = \frac{\text{RSS}}{n-p-1}$$

où p est le nombre de variables du modèle.

Choix basé sur R^2_{adj}

- Souvent le choix basé sur R^2_{adj} montre un phénomène de ***over-fitting***.
- Supposons que la valeur maximale de $R^2_{\text{adj}} = 0.692$ pour un sous-ensemble $p = 10$ de covariables, $R^2_{\text{adj}} = 0.691$ pour $p = 9$ et $R^2_{\text{adj}} = 0.541$ pour un sous-ensemble de $p = 8$ covariables.
- Il est clairement préférable de choisir le modèle à $p = 10$ covariables.

Choix basé sur R^2_{adj}

- Souvent le choix basé sur R^2_{adj} montre un phénomène de ***over-fitting***.
- Supposons que la valeur maximale de $R^2_{\text{adj}} = 0.692$ pour un sous-ensemble $p = 10$ de covariables, $R^2_{\text{adj}} = 0.691$ pour $p = 9$ et $R^2_{\text{adj}} = 0.541$ pour un sous-ensemble de $p = 8$ covariables.
- Il est clairement préférable de choisir le modèle à $p = 10$ covariables.

On va faire appel à un critère(s) basé(s) sur la vraisemblance.

La vraisemblance

Rappelons que d'après les hypothèses du modèle linéaire

$$Y_i \mid x_{i1}, \ldots, x_{ip} \sim \mathcal{N}\big(\beta_0 + \beta_1 x_{i1} + \cdots + \beta_p x_{ip}, \sigma^2\big).$$

Et

$$f\big(y_i \mid x_{i1}, \ldots, x_{ip}\big) = \frac{1}{\sigma\sqrt{2\pi}} \exp\left[-\frac{\Big(y_i - \big\{\beta_0 + \beta_1 x_{i1} + \cdots + \beta_p x_{ip}\big\}\Big)^2}{2\sigma^2}\right]$$

La vraisemblance

Rappelons que d'après les hypothèses du modèle linéaire

$$Y_i \mid x_{i1}, \ldots, x_{ip} \sim \mathcal{N}\big(\beta_0 + \beta_1 x_{i1} + \cdots + \beta_p x_{ip}, \sigma^2\big).$$

Et

$$f\big(y_i \mid x_{i1}, \ldots, x_{ip}\big) = \frac{1}{\sigma\sqrt{2\pi}} \exp\left[-\frac{\Big(y_i - \big\{\beta_0 + \beta_1 x_{i1} + \cdots + \beta_p x_{ip}\big\}\Big)^2}{2\sigma^2}\right]$$

- Écrire la vraisemblance

$$L\big(\beta_0, \beta_1, \ldots, \beta_p, \sigma^2; y_1, \ldots, y_n\big)$$

- Écrire la log-vraisemblance

$$\ell\big(\beta_0, \beta_1, \ldots, \beta_p, \sigma^2; y_1, \ldots, y_n\big)$$

Mesurer l'ajustement ou l'adéquation du modèle

L'estimateur par maximum de vraisemblance de σ^2 est donné par

$$\hat{\sigma}^2_{\text{MLE}} = \frac{\text{RSS}}{n}.$$

$$\ell\big(\hat{\beta}_0, \hat{\beta}_1, \ldots, \hat{\beta}_p, \hat{\sigma}^2_{\text{MLE}}; y_1, \ldots, y_n\big) = -\frac{n}{2}\ln(2\pi) - \frac{n}{2}\ln\left(\frac{\text{RSS}}{n}\right) - \frac{n}{2}$$

Critère d'information

Un critère d'information est une quantité qui réalise un compromis entre l'ajustement aux données (*la vraisemblance par exemple*) et la complexité du modèle.

Donc

- On peut chercher le modèle qui **maximise**

  Ajustement - Pénalité

- On peut chercher le modèle qui **minimise**

  - Ajustement + Pénalité

Critère d'information C_p de Mallows

Le critère d'information noté C_p de Mallows associé au modèle à p covariables est donné par

$$C_p = \frac{\text{RSS}_p}{S^2} + 2p - n$$

où RSS_p est la somme des carrés des résidus du modèle en question et S^2 est l'estimateur de σ^2 dans le modèle complet.

Critère d'information AIC

Le critère d'information noté AIC (*Akaike's Information Criterion*) associé à un modèle à p covariables est donné par

$$\text{AIC} = -2\ell\big(\hat{\beta}_0, \hat{\beta}_1, \ldots, \hat{\beta}_p, \hat{\sigma}^2_{\text{MLE}}; y_1, \ldots, y_n\big) + 2K$$

où $K = p + 2$ est nombre de paramètre du modèle.
On peut montrer que

$$\text{AIC} = n \log \hat{\sigma}^2_{\text{MLE}} + 2p + \text{const.}$$

Ce critère est préférable pour la ***prédiction***.

Critère d'information BIC

Le critère d'information noté BIC (*Bayesian Information Criterion*) associé à un modèle à p covariables est donné par

$$\text{BIC} = -2\ell\big(\hat{\beta}_0, \hat{\beta}_1, \ldots, \hat{\beta}_p, \hat{\sigma}^2_{\text{MLE}}; y_1, \ldots, y_n\big) + K \ln(n)$$

où $K = p + 2$ est nombre de paramètre du modèle.

- Ce critère possède de ***bonnes propriétés théoriques***.
- Ce critère est préférable pour ***l'explication***.

Sélection de modèle

L'idée de chercher le modèle (un sous-ensemble de covariables) qui minimise un des trois critères précédents.

Comment procéder ?

Sélection de modèle

L'idée de chercher le modèle (un sous-ensemble de covariables) qui minimise un des trois critères précédents.

Comment procéder ?

Recherche exhaustive : calculer la valeur du critère pour chaque modèle.

Sélection de modèle

L'idée de chercher le modèle (un sous-ensemble de covariables) qui minimise un des trois critères précédents.

Comment procéder ?

Recherche exhaustive : calculer la valeur du critère pour chaque modèle.

Problème combinatoire : $2^{\text{le nombre de covariables}}$ modèles en compétition ! !

Sélection de modèle en forward

Le modèle de départ de la procédure de sélection *forward* est le modèle avec la constante seulement. La procédure consiste à

1. Ajouter séparément chaque variable au modèle actuel et calculer le critère d'intérêt (BIC, AIC, ou C_p).
2. Si aucun des nouveaux modèles n'améliore le critère, alors : **stop**.
3. Mettre à jour le modèle en incluant la covariable qui apporte la meilleure amélioration au sens du critère. Aller à **1.**

Sélection de modèle backward

Le point de départ de la procédure d'élimination *backward* est le modèle complet incluant toutes les covariables. La procédure consiste à

1. Si aucune élimination d'une covariable n'améliore le critère alors : **stop**.
2. Mettre à jour le modèle en éliminant la covariable qui réalise la meilleure amélioration du critère. Aller à **1.**

Données cancer de la prostate

lcavol	log(cancer volume)
lweight	log(prostate weight)
age	age
lbph	log(benign prostatic hyperplasia amount)
svi	seminal vesicle invasion
lcp	log(capsular penetration)
gleason	Gleason score
pgg45	percentage Gleason scores 4 or 5
lpsa	log(prostate specific antigen)

Stamey, T.A., Kabalin, J.N., McNeal, J.E., Johnstone, I.M., Freiha, F., Redwine,E.A. and Yang, N. (1989). Prostate specific antigen in the diagnosis and treatment of adenocarcinoma of the prostate : II. radical prostatectomy treated patients, Journal of Urology 141(5), 1076–1083.

Comparaison de ces critères

- Je déconseille le R^2 ajusté.
- C_p et AIC sont des critères qui réalisent un compris biais-variance. Ils sont donc indiqués pour choisir un modèle que l'on souhaite utiliser pour prédire.
- BIC pénalise plus les modèles de grandes dimensions. C'est le seul critère à être consistent (i.e., à fournir un estimateur qui converge lorsque $n \to \infty$)
- BIC étant plus sélectif, on doit le préférer si l'on souhaite un modèle explicatif.
- Lorsque la taille de la base d'apprentissage est grande, préférer BIC (AIC fournit des modèles de trop grandes dimensions)

Sélection de variables : quelques remarques

Interprétabilité

- Si le vrai modèle ne contient que **quelques variables liées à la response** $\rightsquigarrow$ les algorithmes de sélection peuvent retrouver les prédicteurs pertinents.
- Si le vrai modèle contient **beaucoup de variables trés corrélées** $\rightsquigarrow$ les variables sélectionnées seront difficiles à interpréter.

Limites liées à la stabilité

En présence de prédicteurs très corrélés ou lorsque $n < p$, **de petites perturbations** des données peuvent provoquer **de grandes différences** entre les ensembles de variables sélectionnées.

Méthode de shrinkage

Régression ridge et *Lasso*

- Les méthodes précédentes de choix de sous-ensembles utilisent les moindres carrés pour ajuster chacun des modèles en compétition.
- Alternativement, on peut ajuster un modèle contenant toutes les p covariables en utilisant une technique que *contraint* ou *régularise* les estimations des coefficients, ou de façon équivalente, pousse les coefficients vers 0.
- Il n'est pas évidant de comprendre pourquoi de telles contraintes vont améliorer l'ajustement, mais il se trouve qu'elles réduisent la variance de l'estimation des coefficients.

Régression ridge

- Rappelons que la procédure d'ajustement par moindres carrés estime les coefficients β_0, β_1,..., β_p en minimisant

$$\mathrm{RSS}(\boldsymbol{\beta}) = \sum_{i=1}^{n} \left(y_i - \beta_0 - \sum_{j=1}^{p} \beta_j x_{ij} \right)^2 .$$

- En revanche, la régression ridge estime les coefficients en minimisant

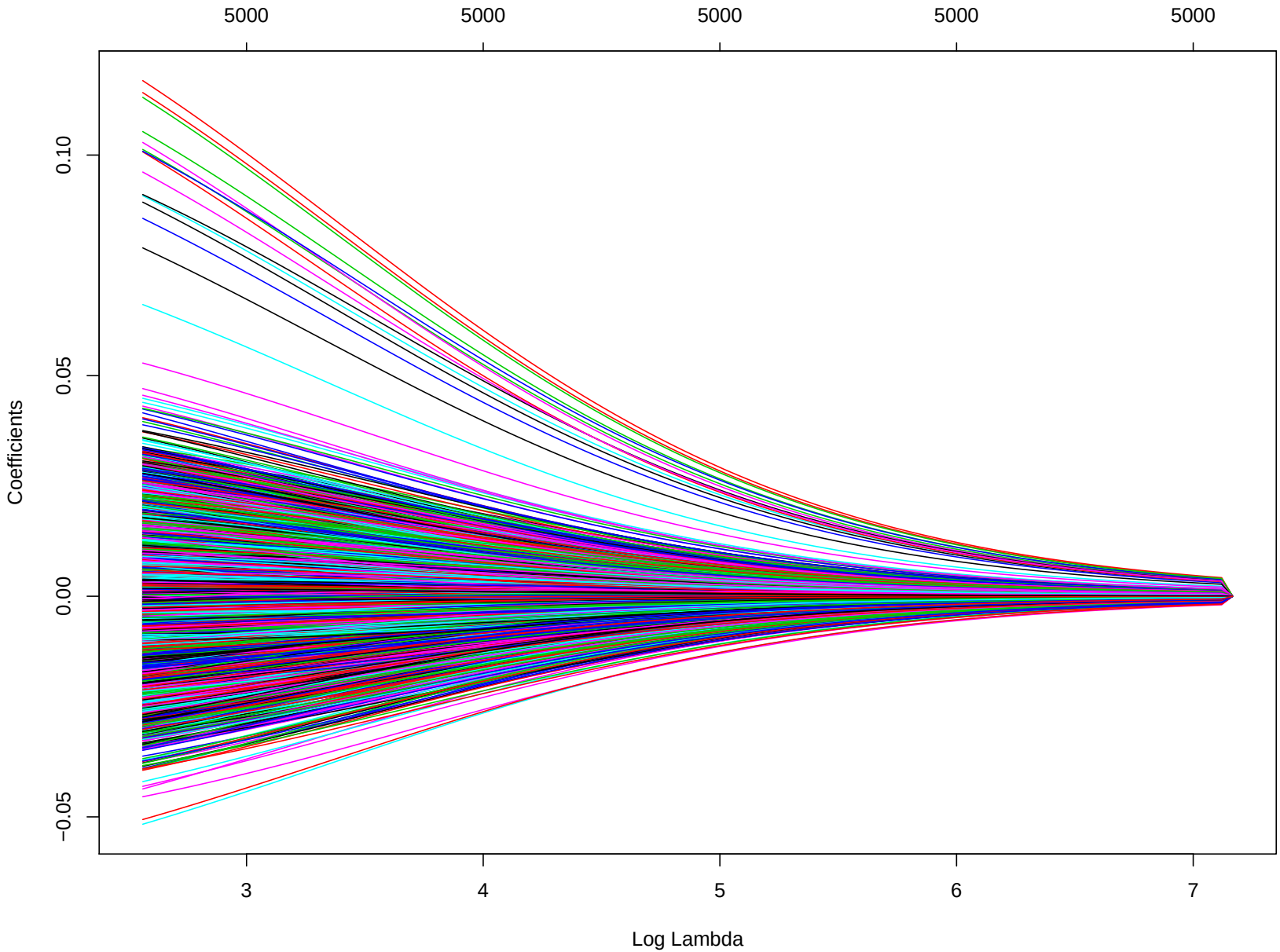
$$\sum_{i=1}^{n} \left(y_i - \beta_0 - \sum_{j=1}^{p} \beta_j x_{ij} \right)^2 + \lambda \sum_{j=1}^{p} \beta_j^2 = \mathrm{RSS}(\boldsymbol{\beta}) + \lambda \sum_{j=1}^{p} \beta_j^2,$$

où λ est un *paramètre de réglage*, à déterminer par ailleurs.

Régression ridge (suite)

- Comme les moindres carrés, la régression ridge cherche des estimations des coefficients qui s'ajustent sur les données, donc à rendre $\mathrm{RSS}(\boldsymbol{\beta})$ petit.
- Cependant, le second terme $\lambda \sum_{j=1}^{p} \beta_j^2$, appelé *pénalité ridge* est petit lorsque les β_j sont proches de 0, et tire donc les estimations vers ce point.
- Le paramètre de réglage λ sert à contrôler l'impact de cette pénalité sur l'estimation.
- Choisir une bonne valeur de λ est critique pour construire un modèle acceptable. On utilise la validation croisée.

Exemple jeu de données $n = 1000$ et $p = 5000$

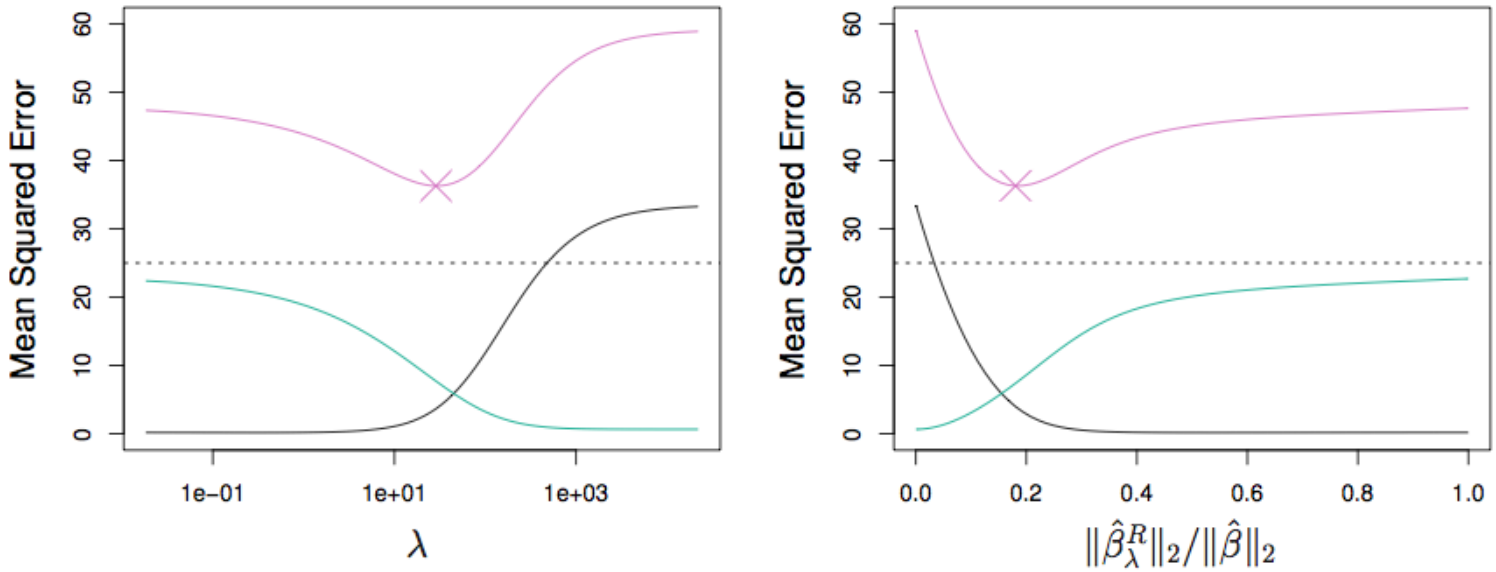


Régression ridge : normaliser les prédicteurs

- La méthode des moindres carrés standard est insensible à la normalisation des prédicteurs : si l'on multiplie X_j par c, le coefficient sera remplacé par $\hat{\beta}_j/c$.
- En revanche, la régression ridge peut changer *substantiellement* lorsque l'on multiplie un prédicteur par une constante, à cause de la norme quadratique dans le terme de pénalité.
- C'est pourquoi il est vivement recommander de toujours standardiser les prédicteurs (marginalement) avant d'utiliser la régression ridge.

Pour la régression ridge ?

Compromis biais-variance



Données simulées : $n = 50$, $p = 45$, tous de coefficients non nuls. Biais au carré (en noir), variance (en vert) et erreur de test quadratique (en violet) pour la régression ridge.
Droite horizontale : erreur minimale.

Le Lasso : *Least Absolute Shrinkage and Selection Operator*

- La régression ridge a un inconvénient évident : contrairement à la sélection de variable, la régression ridge inclut tous les prédicteurs dans le modèle final.
- Le Lasso est une alternative relativement récente qui répond à cette critique. On minimise en fait

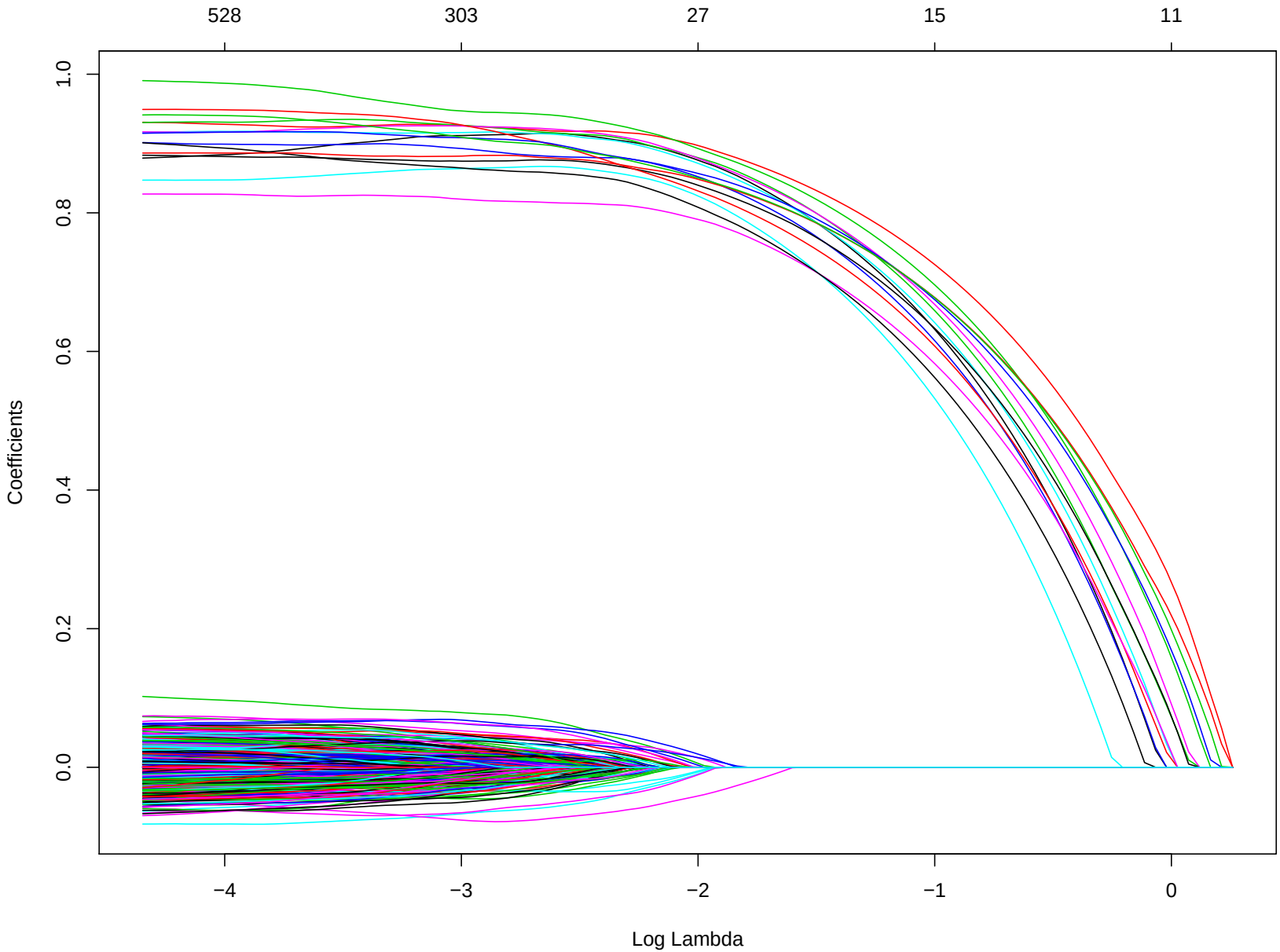
$$\sum_{i=1}^{n}\left(y_i - \beta_0 - \sum_{j=1}^{p}\beta_j x_{ij}\right)^2 + \lambda\sum_{j=1}^{p}\left|\beta_j\right| = \mathrm{RSS}(\boldsymbol{\beta}) + \lambda\sum_{j=1}^{p}\left|\beta_j\right|,$$

- On parle de pénalité ℓ^1 au lieu de pénalité ℓ^2 (ou quadratique)

Le Lasso (suite)

- Comme pour la régression ridge, le Lasso tire les estimations des coefficients vers 0.
- Cependant, dans le cas du Lasso, la pénalité ℓ^1 a pour effet de forcer certains coefficients à s'annuler lorsque λ est suffisamment grand.
- Donc, le Lasso permet de faire de la *sélection de variable*.
- On parle de modèle creux (sparse), c'est-à-dire de modèles qui n'impliquent qu'un sous ensemble des variables.
- Comme pour la régression ridge, choisir une bonne valeur de λ est critique. Procéder par validation ou validation croisée.

Exemple : $n = 1000$ et $p = 5000$



Qu'est qui fait marcher le Lasso ?

Avec les multiplicateurs de Lagrange, on peut voir

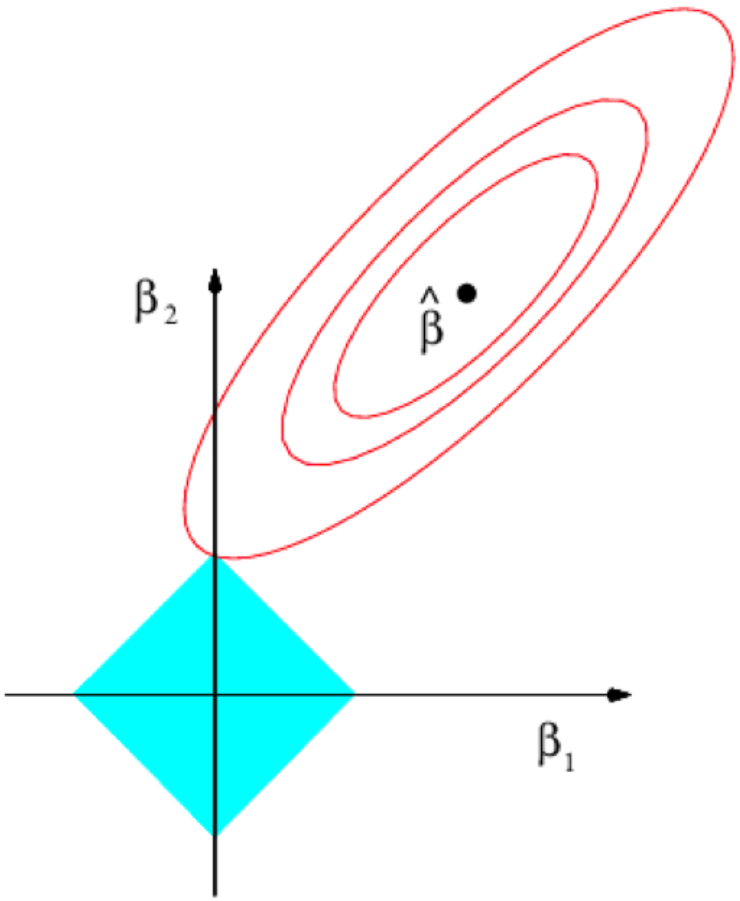
- La régression ridge comme

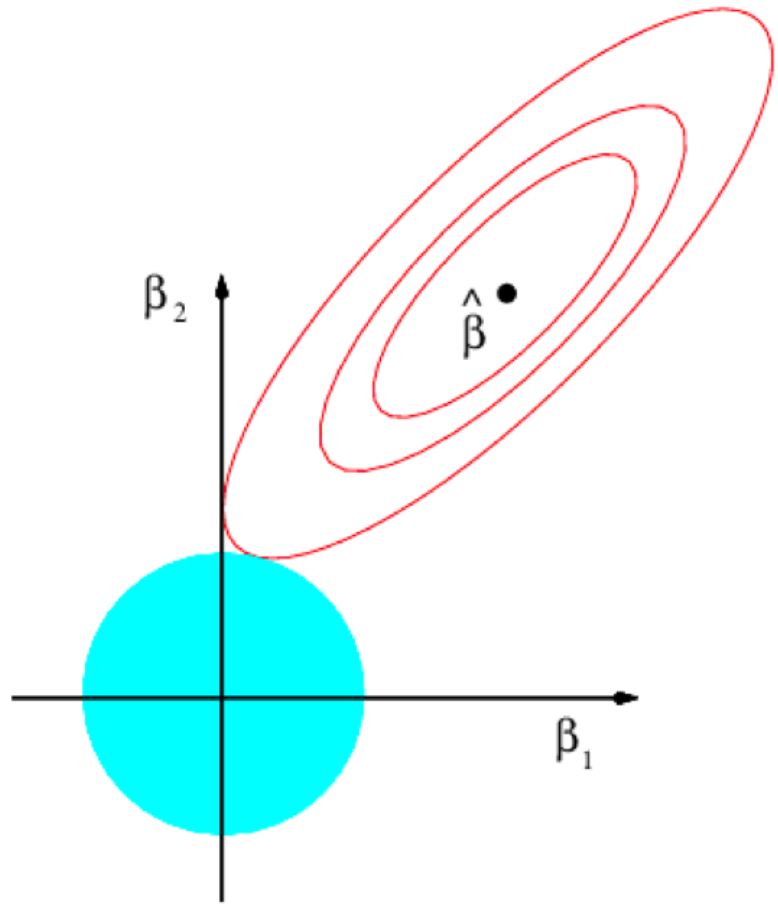
$$\text{minimise} \sum_{i=1}^{n} \left(y_i - \beta_0 - \sum_{j=1}^{p} \beta_j x_{ij} \right)^2 \text{ sous la contrainte } \sum_{j=1}^{p} \beta_j^2 \leq s$$

- Le Lasso comme

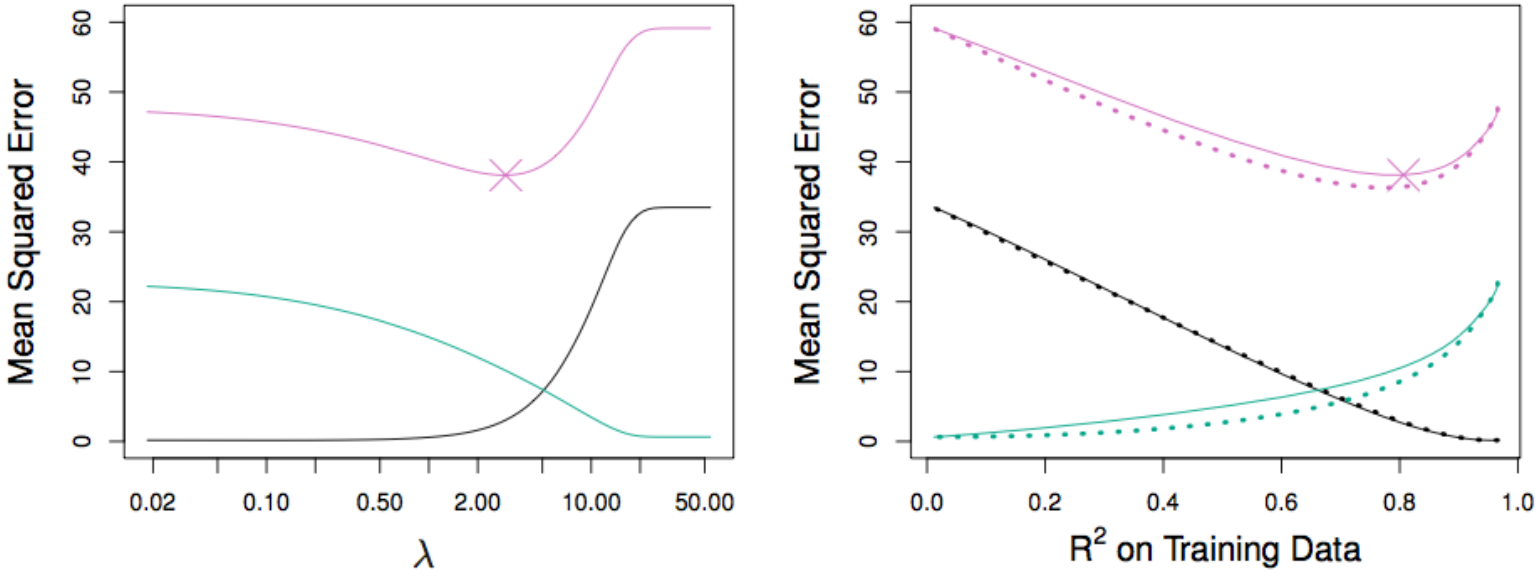
$$\text{minimise} \sum_{i=1}^{n} \left(y_i - \beta_0 - \sum_{j=1}^{p} \beta_j x_{ij} \right)^2 \text{ sous la contrainte } \sum_{j=1}^{p} |\beta_j| \leq s$$

Le Lasso en image





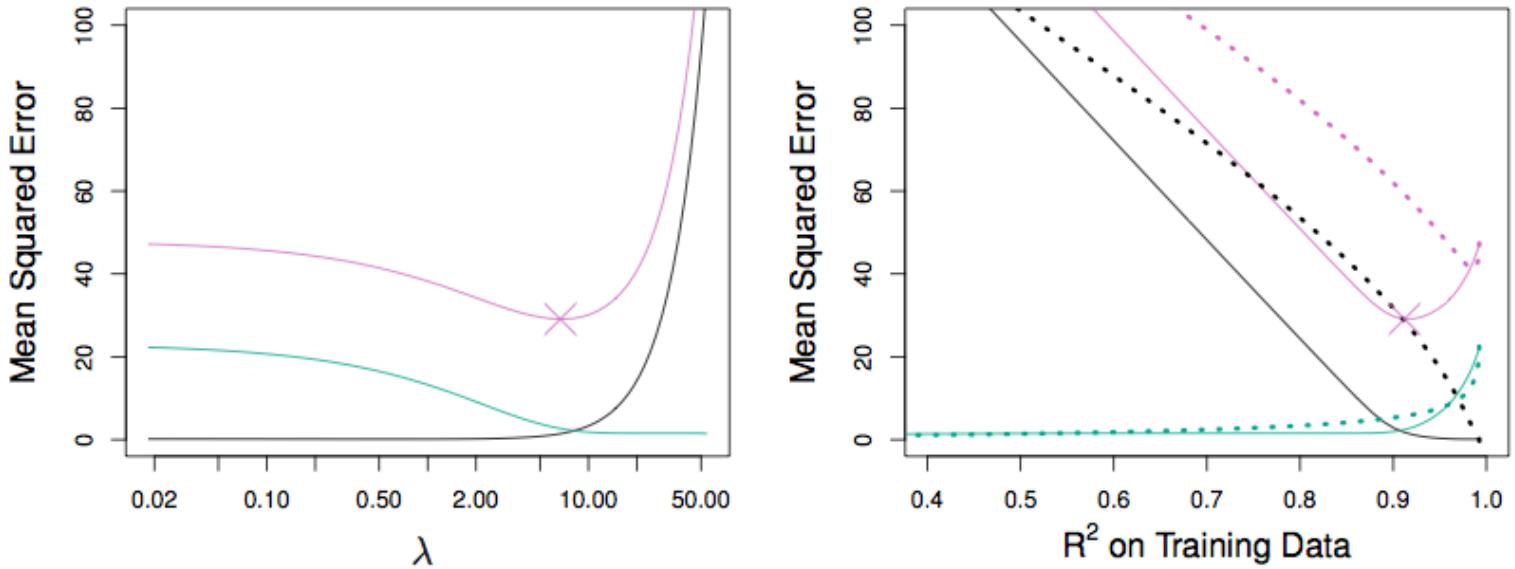
Comparaison du Lasso et de la régression ridge



À gauche, biais au carré (noir), variance (en vert) et erreur quadratique de test (violet) pour le Lasso sur données simulées.

À droite, comparaison du biais au carré, de la variance et de l'erreur de test quadratique pour le Lasso (traits plains) et la régression ridge (pointillés)

Comparaison du Lasso et de la régression ridge (suite)



À gauche, biais au carré (noir), variance (en vert) et erreur quadratique de test (violet) pour le Lasso sur données simulées (où seulement deux prédicteurs sont influents).

À droite, comparaison du biais au carré, de la variance et de l'erreur de test quadratique pour le Lasso (traits plains) et la régression ridge (pointillés)

Conclusions

- Ces deux exemples montrent qu'il n'y a pas de meilleur choix universel entre la régression ridge et le Lasso.
- En général, on s'attend à ce que le Lasso se comporte mieux lorsque la réponse est une fonction d'un nombre relativement faible de prédicteurs.
- Cependant, le nombre de prédicteurs reliés à la réponse n'est jamais connu *a priori* dans des cas concrets.
- Une technique comme la validation croisée permet de déterminer quelle est la meilleure approche.

Choisir le paramètre de réglage λ

- Comme pour les méthodes du début, la régression ridge et le Lasso doivent être calibré pour déterminer le meilleur modèle.
- C'est-à-dire qu'il faut une méthode qui choisisse une valeur du paramètre de réglage λ, ou de la contrainte s.
- La *validation croisée* fournit une façon simple d'attaquer ce problème. On fixe une grille de valeurs de λ possible et sur cette grille, on estime l'erreur de test par validation croisée.
- On choisit alors la valeurs de λ pour laquelle cette estimation de l'erreur de test est la plus faible.
- Enfin, le modèle est ré-ajusté pour utiliser toutes les observations de la base d'entrainement avec la valeur de λ précédemment obtenue.

Le zoo des méthodes lasso I

- The eslaticnet *Zou et Hastie 2005* vise à activer les variables corrélées simultanément

$$\widehat{\boldsymbol{\beta}}^{\text{e-net}} = \underset{\boldsymbol{\beta}\in\mathbb{R}^p}{\arg\min} \left\{ \frac{1}{2}\text{RSS}(\boldsymbol{\beta}) + \lambda\big(\alpha\|\boldsymbol{\beta}\|_1 + (1-\alpha)\|\boldsymbol{\beta}\|_2\big) \right\}$$

- Adaptive/Weighted-Lasso pondère chaque composante du vecteur de coefficients

$$\widehat{\boldsymbol{\beta}}^{\text{lasso}} = \underset{\boldsymbol{\beta}\in\mathbb{R}^p}{\arg\min} \left\{ \frac{1}{2}\text{RSS}(\boldsymbol{\beta}) + \lambda\|\mathbf{w}\circ\boldsymbol{\beta}\|_1 \right\}.$$

Le zoo des méthodes lasso II

- Group-Lasso *Yuan and Lin 2006* vise à activer les variables par groupes

$$\widehat{\boldsymbol{\beta}}^{\text{group}} = \underset{\boldsymbol{\beta}\in\mathbb{R}^p}{\arg\min} \left\{ \frac{1}{2}\text{RSS}(\boldsymbol{\beta}) + \lambda \sum_{k=1}^{K} w_k \|\boldsymbol{\beta}_{\mathcal{G}_k}\|_1 \right\}$$

- Cooperative-Lasso *Chiquet et al. 2010* vise à activer les variables par groupes de même signe

$$\widehat{\boldsymbol{\beta}}^{\text{coop}} = \underset{\boldsymbol{\beta}\in\mathbb{R}^p}{\arg\min} \left\{ \frac{1}{2}\text{RSS}(\boldsymbol{\beta}) + \lambda \sum_{k=1}^{K} w_k \left(\|\boldsymbol{\beta}^+_{\mathcal{G}_k}\|_1 + \|\boldsymbol{\beta}^-_{\mathcal{G}_k}\|_1 \right) \right\}$$

Bilan

- Les méthodes de sélection de modèles sont essentielles pour l'analyse de données, et l'apprentissage statistique, en particulier avec de gros jeu de données contenant de nombreux prédicteurs.
- Les questions de recherches qui donnent des solutions creuses (parcimonieuses, ou sparses), comme le Lasso, sont d'actualité.

Classification

Régression logistique

Notons $p(X) = \mathbb{P}(Y = 1|X)$ et considérons un seul prédicteur X. La régression logistique pose

$$p(X) = \frac{exp(\beta_0 + \beta_1 X)}{1 + exp(\beta_0 + \beta_1 X)}$$

qui est toujours entre 0 et 1 ! On a alors

$$\log\left(\frac{p(X)}{1 - p(X)}\right) = \beta_0 + \beta_1 X$$

(transformation logit)

Estimation par maximum de vraisemblance La vraisemblance

$$L(\beta_0, \beta_1) = \prod_{i:y_i=1} p(x_i) \prod_{i:y_i=0} [1-p(x_i)]$$

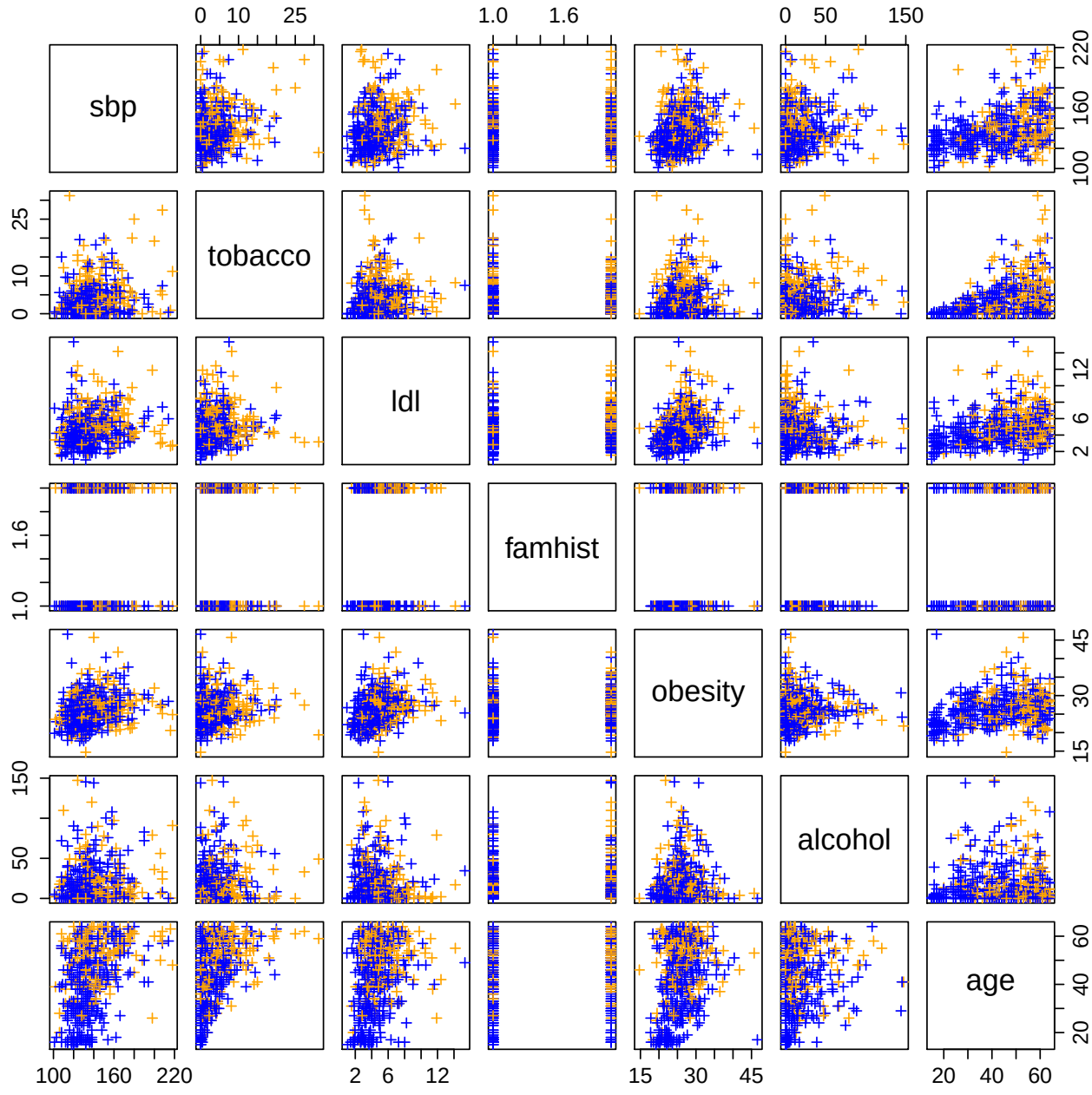
que l'on maximise pour obtenir β_0 et β_1 (Ordinateur)
La plupart des logiciels de statistique le font (glm de R par exemple)

Régression logisitque à plusieurs co-variables

$$\log\left(\frac{p(X)}{1-p(X)}\right) = \beta_0 + \beta_1 X_1 + \cdots + \beta_p X_p$$

Exemple : maladie cardiaque en Afrique du Sud

- 160 cas d'infarctus du myocarde (MI) et 302 cas de contrôle (homme entre 15-64 ans), de la province de Cap-Occidental en Afrique du Sud, au début des années 80
- Prévalence très élevée dans cette région : 5.1 %
- Mesure de 7 prédicteurs (facteurs de risque), montrés dans la page suivante
- Le but est d'identifier l'influence et la force relative des facteurs de risque
- Cette étude fait partie d'un programme de santé publique dont le but était de sensibiliser la population sur une régime plus équilibré



orange : MI
bleu : contrôle
`famhist` : 1 si antécédents familiaux

Exemple (suite)

```
> heartfit <- glm(chd ~ .,data=heart ,family=binomial)
> summary(heartfit)

Call:
glm(formula = chd ~ ., family = binomial, data = heart)

Coefficients:
                  Estimate Std. Error z value Pr(>|z|)
(Intercept)     -4.1295997  0.9641558  -4.283 1.84e-05 ***
sbp              0.0057607  0.0056326   1.023  0.30643
tobacco          0.0795256  0.0262150   3.034  0.00242 **
ldl              0.1847793  0.0574115   3.219  0.00129 **
famhistPresent   0.9391855  0.2248691   4.177 2.96e-05 ***
obesity         -0.0345434  0.0291053  -1.187  0.23529
alcohol          0.0006065  0.0044550   0.136  0.89171
age              0.0425412  0.0101749   4.181 2.90e-05 ***
---
Signif. codes:  0 ‘***’ 0.001 ‘**’ 0.01 ‘*’ 0.05 ‘.’ 0.1 ‘ ’ 1

(Dispersion parameter for binomial family taken to be 1)

    Null deviance: 596.11  on 461  degrees of freedom
```

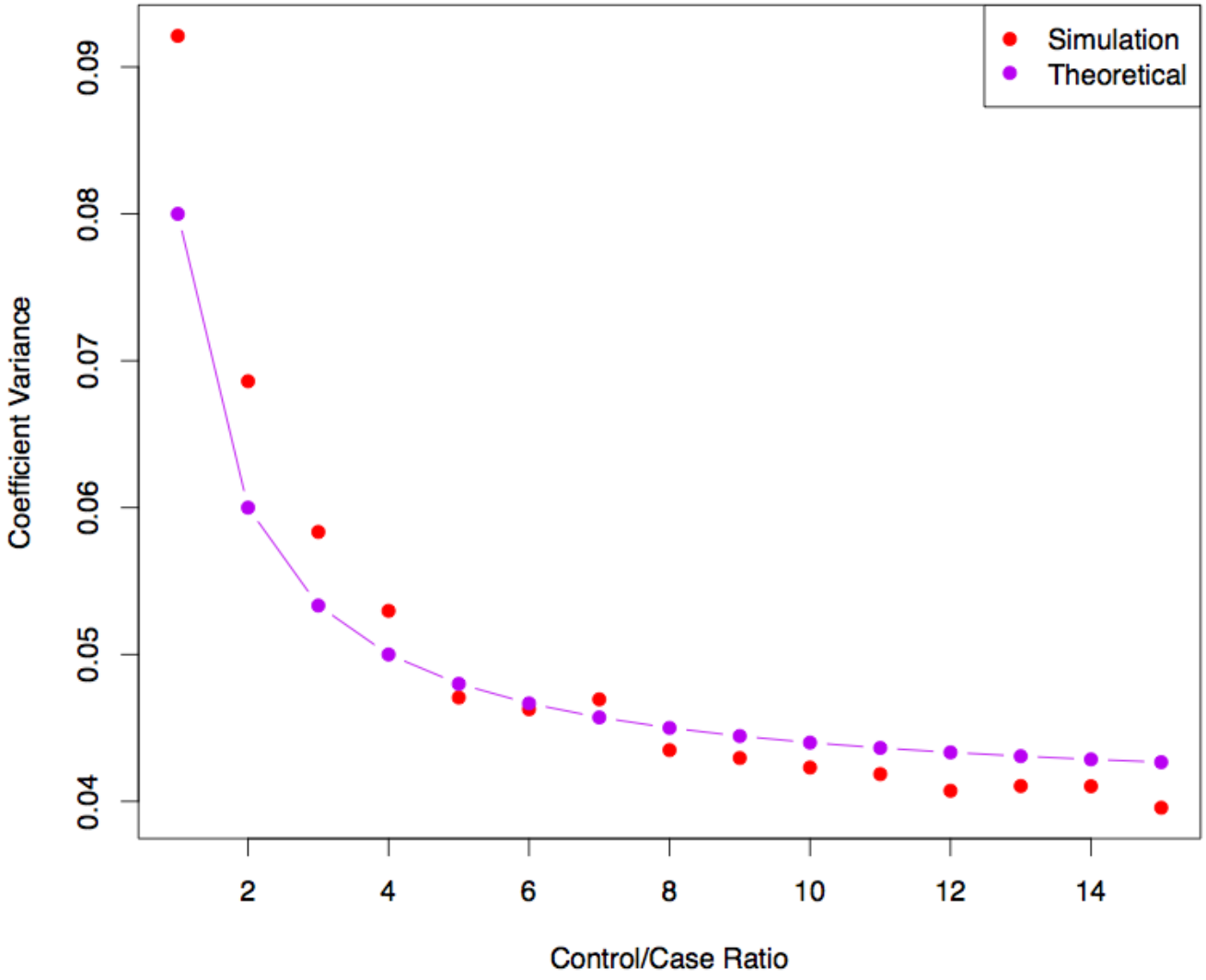
Échantillonnage du contrôle et régression logistique

- Dans les données d'Afrique du Sud, il y a 160 MI et 302 contrôle — $\tilde{\pi} = 0.35$ des cas. Cependant, la prévalence des MI dans la région est de $\pi = 0.05$.
- Ce biais d'échantillonnage permet d'estimer les β_j, $j \neq 0$, avec plus de précision (si modèle correct). Mais l'estimation de β_0 doit être corrigée.
- Une simple transformation permet de le faire :

$$\widehat{\beta_0}^* = \widehat{\beta_0} + \log\left(\frac{\pi}{1-\pi}\right) - \log\left(\frac{\tilde{\pi}}{1-\tilde{\pi}}\right)$$

- Souvent, les cas pathologiques sont rares et on les prend tous. On peut sur-échantillonner jusqu'à 5 fois plus que les cas témoins. Au delà, peu de gain dans la variance d'erreur d'échantillonnage.

Gain de variance par biais d'échantillonnage de données binaires



Au delà d'un facteur 5 de sur-représentation des cas pathologiques, le gain n'est plus intéressant.

Régression logistique à plus de deux modalités

Jusqu'à maintenant, nous avons discuté de régression logistique pour expliquer un Y à deux modalités. Il est facile de généraliser à plus de deux classes. Une possibilité (utilisée dans la bibliothèque `glmnet` de R) est la forme symétrique

$$\mathbb{P}(Y = k|X) = \frac{\exp(\beta_{0k} + \beta_{1k}X_1 + \cdots + \beta_{pk}X_p}{\sum_{\ell=1}^{K} \exp(\beta_{0\ell} + \beta_{1\ell}X_1 + \cdots + \beta_{p\ell}X_p}$$

Il y a donc une fonction linéaire par classe ou modalité.
En fait, ce modèle est sur-paramétré, et comme dans le cas de 2 classes, on peut supprimer l'une des fonctions linéaires et seules $(K-1)$ sont utiles. *Le vérifier !*
La régression logistique multi-classe porte plusieurs noms. On parle parfois de régression multinomiale.

Sélection de modèles

Revenons à l'expression

$$\underset{(\beta_0,\boldsymbol{\beta})\in\mathbb{R}^{p+1}}{\text{minimiser}} \left\{ -\frac{1}{N}\ell\big(\beta_0,\boldsymbol{\beta}\big) + \lambda P_\alpha\big(\boldsymbol{\beta}\big) \right\}$$

- $\ell\big(\beta_0,\boldsymbol{\beta}\big) = \frac{1}{2\sigma^2}\|y - \beta_0\mathbf{1} - X\boldsymbol{\beta}\|_2^2 + c$ pour une régression linéaire multiple.
- Dans le cas d'une régression logistique

$$\ell\big(\beta_0,\boldsymbol{\beta}\big) = \sum_{i=1}^{N}\left\{ y_i\big(\beta_0 + \boldsymbol{\beta}' x_i\big) - \log\left(1 + e^{\beta_0+\boldsymbol{\beta}' x_i}\right)\right\}$$

- La terme de régularisation (de pénalité)

$$P_\alpha\big(\boldsymbol{\beta}\big) = \alpha\|\boldsymbol{\beta}\|_1 + (1-\alpha)\|\boldsymbol{\beta}\|_2$$

Lasso si $(\alpha = 1)$ ridge si $\alpha = 1$.

Deux exemples en grande dimension

Allons faire des testes sous R

- Jeu de données leukemia du package spikeslab : les gênes exprimés différentiellement exprimés pour les deux types de leucémie *Acute Myeloblastic Leukemia* et *Acute Lymphoblastic Leukemia*. $n = 72$ et $p = 3571$.
- Jeu de données nki du package BreastCancerNKI de bioconductor : déterminer les gênes exprimés sous la condition *estrogen receptor status* actif. $n = 337$ et $p = 24481$