

### Estimation de la teneur en octane par analyse du spectre infrarouge

L'objectif de ce mini-projet est de générer un modèle prédisant la teneur en octane dans un échantillon de gasoil à partir de 401 mesures du spectre infrarouge dudit échantillon. Pour cela, nous disposons d'un jeu de données contenant 60 prélèvements. Pour chacun de ces prélèvements, nous avons accès à 401 mesures du spectre infrarouge (variables descriptives) ainsi qu'à la teneur en octane du prélèvement (variable à prédire).

Dans ce mini-projet, après une analyse exploratoire, nous modéliserons la teneur en octane par une régression linéaire pénalisée. Ensuite, nous utiliserons une régression logistique pénalisée.

Ce mini-projet est l'occasion d'étudier en détail la théorie de la régression linéaire. Une première partie est donc entièrement consacrée aux aspects théoriques.

#### Plan

1. Un peu de théorie + Bonus pour les curieux.ses
2. Analyse exploratoire
3. Régression pénalisée
4. Régression logistique pénalisée

#### Partie I : Un peu de théorie + Bonus pour les curieux.ses

**Q1.1.** Modélisons une régression linéaire :  $Y = \theta_0 1_n + X\theta + \epsilon$

Nous recherchons l'estimateur des moindres carrés, donc :  $\underset{\theta_0 \in \mathbb{R}, \theta \in \mathbb{R}^p}{\operatorname{argmin}} \|Y - \theta_0 1_n - X\theta\|^2$

Soit  $L(\theta_0, \theta) = \|Y - \theta_0 1_n - X\theta\|^2$  le lagrangien de ce problème.

Etudions les fonctions partielles.

Soit  $f(\theta_0) = \|Y - \theta_0 1_n - X\theta\|^2$ . On a  $f(\theta_0 + h) = \|Y - (\theta_0 + h)1_n - X\theta\|^2$ , donc :

$$f(\theta_0 + h) = \|Y - \theta_0 1_n - X\theta\|^2 - 2\langle Y - \theta_0 1_n - X\theta, h1_n \rangle + \|h1_n\|^2$$

D'où :

$$f(\theta_0 + h) = f(\theta_0) - 2h\langle 1_n, Y - \theta_0 1_n - X\theta \rangle + h^2 \|1_n\|^2$$

D'où :

$$f(\theta_0 + h) = f(\theta_0) + 2\langle 1_n, \theta_0 1_n + X\theta - Y \rangle h + nh^2$$

D'où :

$$f(\theta_0 + h) = f(\theta_0) + 2(\theta_0 1_n' 1_n + 1_n' X\theta - 1_n' Y)h + nh^2$$

D'où :

$$\frac{f(\theta_0 + h) - f(\theta_0)}{h} \xrightarrow{h \rightarrow 0} 2(\theta_0 1_n' 1_n + 1_n' X\theta - 1_n' Y)$$

Donc  $f$  est dérivable en  $\theta_0$  de dérivée  $f'(\theta_0) = 2(n\theta_0 + 1_n' X\theta - 1_n' Y)$ .

Soit  $g(\theta) = \|Y - \theta_0 1_n - X\theta\|^2$ . On a  $g(\theta + H) = \|Y - \theta_0 1_n - X(\theta + H)\|^2$ , donc :

$$g(\theta + H) = \|Y - \theta_0 1_n - X\theta\|^2 - 2\langle Y - \theta_0 1_n - X\theta, XH \rangle + \|XH\|^2$$

D'où :

$$g(\theta + H) = g(\theta) + 2\langle \theta_0 1_n + X\theta - Y, XH \rangle + \|XH\|^2$$

D'où :

$$g(\theta + H) = g(\theta) + 2\langle \theta_0 X'1_n + X'X\theta - X'Y, H \rangle + \|XH\|^2$$

Or,  $\|XH\|^2 \leq \|X\|^2 \|H\|^2$ . Donc  $\frac{\|XH\|^2}{\|H\|^2} \rightarrow_{H \rightarrow 0} 0$ . Donc :  $\nabla g(\theta) = 2(\theta_0 X'1_n + X'X\theta - X'Y)$ .

On en déduit que  $\nabla L(\theta_0, \theta) = \begin{pmatrix} 2(n\theta_0 + 1_n'X\theta - 1_n'Y) \\ 2(\theta_0 X'1_n + X'X\theta - X'Y) \end{pmatrix}$ .

On en déduit aussi la hessienne :  $\nabla^2 L(\theta_0, \theta) = \begin{pmatrix} 2n & 21_n'X \\ 2X'1_n & 2X'X \end{pmatrix} = \mathbb{X}'\mathbb{X}$  avec  $\mathbb{X} = \begin{pmatrix} 1_n & X \end{pmatrix}$ .

$(\mathbb{X}'\mathbb{X})' = \mathbb{X}'(\mathbb{X}')' = \mathbb{X}'\mathbb{X}$  donc  $\mathbb{X}'\mathbb{X}$  est une matrice symétrique réelle. D'après le théorème spectral, le spectre de  $\mathbb{X}'\mathbb{X}$  est donc inclus dans  $\mathbb{R}$ .

Soit  $\lambda$  une valeur propre de  $\mathbb{X}'\mathbb{X}$  et  $v$  un vecteur propre associé. De  $\mathbb{X}'\mathbb{X}v = \lambda v$  il découle  $v'\mathbb{X}'\mathbb{X}v = \lambda v'v$  d'où :  $\|Xv\|^2 = \lambda \|v\|^2$ . Donc  $\lambda \geq 0$ . Il en résulte que  $\mathbb{X}'\mathbb{X} \in \mathbb{S}_n^+(\mathbb{R})$ .

**Ceci assure qu'en cas d'annulation du gradient, le point calculé correspond bien à un minimum. Tout semble bien parti pour obtenir les coefficients de l'EMC, mais ça va bloquer car en grande dimension comme ici, il y a dégénérescence du rang.**

Soit  $v \in \ker(X'X)$ . Donc  $\|Xv\|^2 = 0$ , d'où  $v \in \ker(X)$ . D'où  $\ker(X'X) \subset \ker(X)$ . Soit  $w \in \ker(X)$ . On a  $Xw = 0$  d'où  $X'Xw = 0$ . Donc  $w \in \ker(X'X)$ . D'où  $\ker(X) \subset \ker(X'X)$ . Par double inclusion, il vient  $\ker(X) = \ker(X'X)$ . En particulier,  $\dim(\ker(X)) = \dim(\ker(X'X))$ . Or  $X$  et  $X'X$  sont toutes deux des applications ayant pour espace de départ  $\mathbb{R}^p$ . Par le théorème du rang,  $p = \text{rg}(X) + \dim(\ker(X))$  et  $p = \text{rg}(X'X) + \dim(\ker(X'X))$ . Donc  $\text{rg}(X) = \text{rg}(X'X)$ . Or nous sommes en grande dimension, donc  $X$  a beaucoup plus de colonnes que de lignes. Donc  $\text{rg}(X) \leq n < p$ . Donc  $\text{rg}(X'X) < p$ . Donc  $X'X$  n'est pas inversible. Par conséquent, il y a une infinité de solutions à l'équation de nullité du gradient dans laquelle  $X'X$  intervient. Là est le blocage. Quels coefficients  $\theta$  choisir s'il y a plein de possibilités ? C'est dans ce cadre que la régression Ridge intervient. En régression Ridge, nous ajoutons la contrainte  $\|\theta\|^2 \leq \delta$  (pour un certain réel  $\delta$ ) au problème de minimisation. Cela a pour effet de restreindre de manière homogène les possibilités pour  $\theta$ . De plus, les calculs à la question 1.2 montreront que  $X'X$  est remplacée par  $X'X + k\text{Id}_p$  pour un certain réel  $k > 0$ , où  $X'X + k\text{Id}_p$  est une matrice inversible. L'estimateur pourra donc être calculé.

**Q1.2.** Nous pénalisons l'estimation des moindres carrés, donc :  $\underset{\substack{\theta_0 \in \mathbb{R}, \theta \in \mathbb{R}^p \\ \|\theta\|^2 \leq \delta}}{\text{argmin}} \|Y - \theta_0 1_n - X\theta\|^2$

Soit  $L(k, \theta_0, \theta) = \|Y - \theta_0 1_n - X\theta\|^2 + k(\|\theta\|^2 - \delta)$  le lagrangien de ce problème.

Etudions les fonctions partielles.

Soit  $f(\theta_0) = \|Y - \theta_0 1_n - X\theta\|^2 + k(\|\theta\|^2 - \delta)$ . D'après la question 1.1, le terme  $k(\|\theta\|^2 - \delta)$  ne dépendant pas de  $\theta_0$ ,  $f$  est dérivable en  $\theta_0$  de dérivée  $f'(\theta_0) = 2(n\theta_0 + 1_n'X\theta - 1_n'Y)$ .

Soit  $g(\theta) = \|Y - \theta_0 1_n - X\theta\|^2 + k(\|\theta\|^2 - \delta)$ .

On a  $g(\theta + H) = \|Y - \theta_0 1_n - X(\theta + H)\|^2 + k(\|\theta + H\|^2 - \delta)$ , donc :

$$g(\theta + H) = \|Y - \theta_0 \mathbf{1}_n - X\theta\|^2 - 2\langle Y - \theta_0 \mathbf{1}_n - X\theta, XH \rangle + \|XH\|^2 + k(\|\theta\|^2 + 2\langle \theta, H \rangle + \|H\|^2 - \delta)$$

D'où :

$$g(\theta + H) = g(\theta) + 2\langle \theta_0 X' \mathbf{1}_n + X' X \theta - X' Y + k\theta, H \rangle + \|XH\|^2 + k\|H\|^2$$

Or,  $\|XH\|^2 \leq \|X\|^2 \|H\|^2$ . Donc  $\frac{\|XH\|^2}{\|H\|^2} \rightarrow_{H \rightarrow 0} 0$ . Donc :  $\nabla g(\theta) = 2(\theta_0 X' \mathbf{1}_n + (X' X + k \text{Id}_p) \theta - X' Y)$ .

On en déduit que  $\nabla_{\theta_0, \theta} L(k, \theta_0, \theta) = \begin{pmatrix} 2(n\theta_0 + \mathbf{1}'_n X \theta - \mathbf{1}'_n Y) \\ 2(\theta_0 X' \mathbf{1}_n + (X' X + k \text{Id}_p) \theta - X' Y) \end{pmatrix}$ .

On en déduit aussi la hessienne :  $\nabla_{\theta_0, \theta}^2 L(\theta_0, \theta) = \begin{pmatrix} 2\mathbf{n} & 2\mathbf{1}'_n X \\ 2X' \mathbf{1}_n & 2(X' X + k \text{Id}_p) \end{pmatrix} = \mathbb{X}' \mathbb{X} + \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 2k \text{Id}_p \end{pmatrix}$   
avec  $\mathbb{X} = (\mathbf{1}_n \quad X)$ .

D'après les conditions nécessaires d'optimalité apportées par Karush, Kuhn et Tucker (KKT),  $\theta_0^*$  et  $\theta^*$  vérifient :

$$\begin{cases} \nabla_{\theta_0, \theta} L(k^*, \theta_0^*, \theta^*) = 0 \\ k^* \geq 0 \\ k^*(\|\theta^*\|^2 - \delta) = 0 \end{cases}$$

A la question 1.1, la matrice  $X' X$  n'est pas inversible, ce qui empêche de résoudre le système de nullité du gradient. Mais ici, si  $k^* > 0$ , alors le spectre de  $X' X + k^* \text{Id}_p$  est dans  $\mathbb{R}_+^*$ , et  $X' X + k^* \text{Id}_p$  est inversible. On peut alors écrire  $\theta^* = (X' X + k^* \text{Id}_p)^{-1} (X' Y - \theta_0^* X' \mathbf{1}_n)$ . En injectant dans la première équation, on obtient  $n\theta_0^* + \mathbf{1}'_n X (X' X + k^* \text{Id}_p)^{-1} (X' Y - \theta_0^* X' \mathbf{1}_n) = \mathbf{1}'_n Y$ , d'où :

$$(n - \mathbf{1}'_n X (X' X + k^* \text{Id}_p)^{-1} X' \mathbf{1}_n) \theta_0^* = \mathbf{1}'_n Y - \mathbf{1}'_n X (X' X + k^* \text{Id}_p)^{-1} X' Y$$

D'où :

$$\theta_0^* = \left( n - \mathbf{1}'_n X (X' X + k^* \text{Id}_p)^{-1} X' \mathbf{1}_n \right)^{-1} \mathbf{1}'_n \left( \text{Id}_n - X (X' X + k^* \text{Id}_p)^{-1} X' \right) Y$$

Et les autres coefficients :

$$\theta^* = (X' X + k^* \text{Id}_p)^{-1} (X' Y - \theta_0^* X' \mathbf{1}_n)$$

Remarque : Ayant choisi  $k^* > 0$ , la contrainte est saturée :  $\|\theta^*\|^2 = \delta$ . D'après les expressions ci-dessus, on remarque qu'un choix de  $k^*$  entraîne automatiquement une valeur pour  $\delta$ . Il semble plus naturel de se permettre de choisir  $k^*$  (quitte à ne pas choisir  $\delta$ ) que l'inverse.

Soit  $m \in \mathcal{M}_{np}(\mathbb{R})$  tel que pour tout  $(i, j) \in \llbracket 1, n \rrbracket \times \llbracket 1, p \rrbracket$ ,  $m_{ij} = \frac{1}{n} \sum_{l=1}^n X_{lj} = \frac{1}{n} \mathbf{1}'_n X_j$ .

D'après la dernière égalité, on remarque donc que  $\mathbf{m}_i = \frac{1}{n} \mathbf{1}'_n X \in \mathcal{M}_{1p}(\mathbb{R})$  pour tout  $i \in \llbracket 1, n \rrbracket$ .

$$\text{Donc } \mathbf{m} = \frac{1}{n} \mathbf{1}_n \mathbf{1}'_n X.$$

Si nous centrons préalablement les colonnes, nous remplaçons  $X$  par  $X - m$  dans tous les calculs. Il y a toutefois une subtilité : si nous choisissons  $k^*$  et pas  $\delta$ , nous avons la liberté de prendre le même  $k^* > 0$  dans les deux situations centrée/ non centrée, mais dans ce cas  $\delta_{\text{centré}} \neq \delta_{\text{non centré}}$ . A l'inverse, si nous choisissons  $\delta$  et que nous le fixons pour les deux situations,  $k^*_{\text{centré}} \neq k^*_{\text{non centré}}$ . En fonction du choix que nous faisons, la comparaison des estimateurs n'est pas la même.

Le premier choix ayant plus de sens et étant celui implémenté dans R, on choisit le même  $k^*$  pour les deux situations.

Cela donne :

$$\tilde{\theta}_0^* = \left( n - 1_n'(X - m)((X - m)'(X - m) + k^* \text{Id}_p)^{-1}(X - m)'1_n \right)^{-1} 1_n' \left( \text{Id}_n - (X - m)((X - m)'(X - m) + k^* \text{Id}_p)^{-1}(X - m)' \right) Y$$

Et :

$$\tilde{\theta}^* = ((X - m)'(X - m) + k^* \text{Id}_p)^{-1} ((X - m)'Y - \theta_0^*(X - m)'1_n)$$

$$\text{Or, } 1_n'1_n = n \text{ d'où } 1_n'(X - m) = 1_n' \left( \text{Id}_n - \frac{1}{n} 1_n 1_n' \right) X = \left( 1_n' - \frac{1}{n} 1_n' 1_n 1_n' \right) X = (1_n' - 1_n')X = 0.$$

Par conséquent (belle simplification !),

$$\tilde{\theta}_0^* = \frac{1}{n} 1_n' Y$$

Or  $(X - m)'1_n = 0$  (c'est la transposée du résultat ci-dessus), d'où :

$$\tilde{\theta}^* = ((X - m)'(X - m) + k^* \text{Id}_p)^{-1} (X - m)'Y$$

Or, d'après la nullité du gradient dans le cas non centré,  $X'Y = \theta_0^* X'1_n + (X'X + k^* \text{Id}_p)\theta^*$  et  $\theta_0^* = \frac{1}{n} 1_n'(Y - X\theta^*)$ , d'où :

$$\tilde{\theta}^* = ((X - m)'(X - m) + k^* \text{Id}_p)^{-1} \left( \frac{1}{n} 1_n'(Y - X\theta^*)X'1_n + (X'X + k^* \text{Id}_p)\theta^* - m'Y \right)$$

D'où :

$$\tilde{\theta}^* = ((X - m)'(X - m) + k^* \text{Id}_p)^{-1} \left( \frac{1}{n} 1_n' Y X' 1_n - \frac{1}{n} 1_n' X \theta^* X' 1_n + (X'X + k^* \text{Id}_p)\theta^* - m'Y \right)$$

Or  $1_n'Y$  est un réel, donc  $\frac{1}{n} 1_n' Y X' 1_n = \frac{1}{n} X' 1_n 1_n' Y = m'Y$  :

$$\tilde{\theta}^* = ((X - m)'(X - m) + k^* \text{Id}_p)^{-1} \left( -\frac{1}{n} 1_n' X \theta^* X' 1_n + (X'X + k^* \text{Id}_p)\theta^* \right)$$

Or  $1_n' X \theta^*$  est un réel, donc  $\frac{1}{n} 1_n' X \theta^* X' 1_n = \frac{1}{n} X' 1_n 1_n' X \theta^* = X'm\theta^*$  :

$$\tilde{\theta}^* = ((X - m)'(X - m) + k^* \text{Id}_p)^{-1} (X'X - X'm + k^* \text{Id}_p)\theta^*$$

Enfin,  $(X - m)'(X - m) = X'X - X'm - m'X + m'm = X'X - \frac{1}{n} X'1_n 1_n'X - \frac{1}{n} X'1_n 1_n'X + \frac{1}{n^2} X'1_n 1_n' 1_n 1_n'X = X'X - \frac{1}{n} X'1_n 1_n'X - \frac{1}{n} X'1_n 1_n'X + \frac{1}{n} X'1_n 1_n'X = X'X - X'm$ , d'où :

$$\tilde{\theta}^* = \theta^*$$

**1.3.** On décompose  $X$  en valeurs singulières :  $X = \sum_{j=1}^r \sigma_j u_j v_j'$  où

- $\{u_j\}$  est une famille orthonormée de  $\mathbb{R}^n$
- $\{v_j\}$  est une famille orthonormée de  $\mathbb{R}^p$
- $r = \text{rg}(X)$

$$\text{Donc } X'X = \left( \sum_{j=1}^r \sigma_j u_j v_j' \right)' \sum_{i=1}^r \sigma_i u_i v_i' = \sum_{j=1}^r \sum_{i=1}^r \sigma_j v_j u_j' \sigma_i u_i v_i' = \sum_{j=1}^r \sum_{i=1}^r \sigma_j \sigma_i v_j u_j' u_i v_i'$$

Or  $\{u_j\}$  est une famille orthonormée de  $\mathbb{R}^n$ , donc pour tout  $(i, j) \in \llbracket 1, r \rrbracket^2$ ,  $u_j' u_i = \delta_{ij}$  (coefficient de Kronecker)

$$\text{Donc } X'X = \sum_{j=1}^r \sum_{i=1}^r \delta_{ij} \sigma_j \sigma_i v_j v_i' = \sum_{j=1}^r \sigma_j^2 v_j v_j'.$$

Dans un premier temps, simplifions l'expression suivante :

$$\left( \sum_{j=1}^r \frac{1}{\sigma_j^2 + \lambda} v_j v_j' + \frac{1}{\lambda} \sum_{j=r+1}^p v_j v_j' \right) X'X = \left( \sum_{j=1}^r \frac{1}{\sigma_j^2 + \lambda} v_j v_j' + \frac{1}{\lambda} \sum_{j=r+1}^p v_j v_j' \right) \sum_{i=1}^r \sigma_i^2 v_i v_i'$$

Donc en développant :

$$\left( \sum_{j=1}^r \frac{1}{\sigma_j^2 + \lambda} v_j v_j' + \frac{1}{\lambda} \sum_{j=r+1}^p v_j v_j' \right) X'X = \sum_{j=1}^r \sum_{i=1}^r \frac{1}{\sigma_j^2 + \lambda} v_j v_j' \sigma_i^2 v_i v_i' + \frac{1}{\lambda} \sum_{j=r+1}^p \sum_{i=1}^r \sigma_i^2 v_j v_j' v_i v_i'$$

En utilisant le caractère orthonormal de  $\{v_j\}$  :

$$\left( \sum_{j=1}^r \frac{1}{\sigma_j^2 + \lambda} v_j v_j' + \frac{1}{\lambda} \sum_{j=r+1}^p v_j v_j' \right) X'X = \sum_{j=1}^r \sum_{i=1}^r \frac{\delta_{ij} \sigma_i^2}{\sigma_j^2 + \lambda} v_j v_i' + \frac{1}{\lambda} \sum_{j=r+1}^p \sum_{i=1}^r \delta_{ij} \sigma_i^2 v_j v_i'$$

En simplifiant les signes somme et symboles de Kronecker :

$$\left( \sum_{j=1}^r \frac{1}{\sigma_j^2 + \lambda} v_j v_j' + \frac{1}{\lambda} \sum_{j=r+1}^p v_j v_j' \right) X'X = \sum_{j=1}^r \frac{\sigma_j^2}{\sigma_j^2 + \lambda} v_j v_j'$$

Dans un second temps, simplifions l'expression suivante :

$$\left( \sum_{j=1}^r \frac{1}{\sigma_j^2 + \lambda} v_j v_j' + \frac{1}{\lambda} \sum_{j=r+1}^p v_j v_j' \right) \lambda Id_p = \sum_{j=1}^r \frac{\lambda}{\sigma_j^2 + \lambda} v_j v_j' + \sum_{j=r+1}^p v_j v_j'$$

Donc :

$$\left( \sum_{j=1}^r \frac{1}{\sigma_j^2 + \lambda} v_j v_j' + \frac{1}{\lambda} \sum_{j=r+1}^p v_j v_j' \right) (X'X + \lambda Id_p) = \sum_{j=1}^p v_j v_j'$$

Il reste à montrer que  $\sum_{j=1}^p v_j v_j' = Id_p$ .

$$\text{Pour tout } i \in \llbracket 1, p \rrbracket, \left( \sum_{j=1}^p v_j v_j' \right) v_i = \sum_{j=1}^p v_j v_j' v_i = \sum_{j=1}^p \delta_{ij} v_j = v_i$$

Or  $\{v_j\}$  est une base de  $\mathbb{R}^p$ , donc  $\sum_{j=1}^p v_j v_j' = Id_p$ .

**Donc  $X'X + \lambda Id_p$  est inversible d'inverse  $\sum_{j=1}^r \frac{1}{\sigma_j^2 + \lambda} v_j v_j' + \frac{1}{\lambda} \sum_{j=r+1}^p v_j v_j'$ .**

Par conséquent,

$$A_\lambda = \left( \sum_{j=1}^r \frac{1}{\sigma_j^2 + \lambda} v_j v_j' + \frac{1}{\lambda} \sum_{j=r+1}^p v_j v_j' \right) X'$$

D'où :

$$A_\lambda = \left( \sum_{j=1}^r \frac{1}{\sigma_j^2 + \lambda} v_j v_j' + \frac{1}{\lambda} \sum_{j=r+1}^p v_j v_j' \right) \sum_{i=1}^r \sigma_i v_i u_i'$$

En développant, il vient :

$$A_\lambda = \sum_{j=1}^r \sum_{i=1}^r \frac{1}{\sigma_j^2 + \lambda} v_j v_j' \sigma_i v_i u_i' + \frac{1}{\lambda} \sum_{j=r+1}^p \sum_{i=1}^r v_j v_j' \sigma_i v_i u_i'$$

En utilisant le caractère orthonormal de  $\{v_j\}$  :

$$A_\lambda = \sum_{j=1}^r \sum_{i=1}^r \frac{\delta_{ij} \sigma_i}{\sigma_j^2 + \lambda} v_j u_i' + \frac{1}{\lambda} \sum_{j=r+1}^p \sum_{i=1}^r \delta_{ij} \sigma_i v_j u_i'$$

En simplifiant les signes somme et symboles de Kronecker :

$$A_\lambda = \sum_{j=1}^r \frac{\sigma_j}{\sigma_j^2 + \lambda} v_j u_j'$$

Par conséquent,

$$A_\lambda \rightarrow_{\lambda \rightarrow 0} \sum_{j=1}^r \frac{1}{\sigma_j} v_j u_j'$$

**QB.1.**  $(XX')' = (X')'X' = XX'$  donc  $XX'$  est une matrice symétrique réelle :  $XX' \in S_n(\mathbb{R})$ .

Par le théorème spectral, il existe une base orthonormée  $\{u_j\}_{j \in \llbracket 1, n \rrbracket}$  de  $\mathbb{R}^n$ , de sorte que  $u_j$  est un vecteur propre associé à la  $j$  – ième valeur propre  $\lambda_j$  de  $XX'$ , où les valeurs propres ont été classées par ordre décroissant. Cette dernière remarque a un sens puisque les valeurs propres d'une matrice symétrique réelle sont toujours réelles d'après le théorème spectral.

De plus, pour tout  $j \in \llbracket 1, n \rrbracket$ ,  $XX' u_j = \lambda_j u_j$  implique  $u_j' XX' u_j = \lambda_j u_j' u_j$  d'où  $\|X' u_j\|^2 = \lambda_j \|u_j\|^2$ . Par conséquent, toutes les valeurs propres sont positives ou nulles.

Par conséquent, en notant  $r' = rg(XX') \in \llbracket 1, n \rrbracket$ , on a :

- Pour tout  $j \in \llbracket 1, r' \rrbracket$ ,  $\lambda_j > 0$
- Pour tout  $j \in \llbracket r' + 1, n \rrbracket$ ,  $\lambda_j = 0$

On sait déjà que pour tout  $j \in \llbracket 1, n \rrbracket$ ,  $XX' u_j = \lambda_j u_j$ . Or, en utilisant le caractère orthonormal de la famille  $\{u_j\}_{j \in \llbracket 1, n \rrbracket}$ , on a pour tout  $j \in \llbracket 1, n \rrbracket$ ,

$$\left( \sum_{l=1}^{r'} \lambda_l u_l u_l' \right) u_j = \sum_{l=1}^{r'} \lambda_l u_l u_l' u_j = \sum_{l=1}^{r'} \delta_{lj} \lambda_l u_l = \lambda_j u_j$$

Donc les matrices  $XX'$  et  $\sum_{l=1}^{r'} \lambda_l u_l u_l'$  sont égales sur la base  $\{u_j\}_{j \in \llbracket 1, n \rrbracket}$  de  $\mathbb{R}^n$ , donc elles sont égales.

$$\text{Donc } XX' = \sum_{j=1}^{r'} \lambda_j u_j u_j'.$$

Enfin, montrons que  $r' = r = rg(X)$ . Nous avons déjà fait un raisonnement semblable à la question 1.1. Soit  $v \in \ker(XX')$ . Donc  $\|X'v\|^2 = 0$ , d'où  $v \in \ker(X')$ . D'où  $\ker(XX') \subset \ker(X')$ . Soit  $w \in \ker(X')$ . On a  $X'w = 0$  d'où  $XX'w = 0$ . Donc  $w \in \ker(XX')$ . D'où  $\ker(X') \subset \ker(XX')$ . Par double inclusion, il vient  $\ker(X') = \ker(XX')$ . En particulier,  $\dim(\ker(X')) = \dim(\ker(XX'))$ . Or  $X'$  et  $XX'$  sont toutes deux des applications ayant pour espace de départ  $\mathbb{R}^n$ . Par le théorème du rang,  $n = rg(X') + \dim(\ker(X'))$  et  $n = rg(XX') + \dim(\ker(XX'))$ . **Donc  $r = rg(X) = rg(X') = rg(XX') = r'$ , et :**

$$XX' = \sum_{j=1}^r \lambda_j u_j u_j'$$

**QB.2** Tout d'abord, montrons que  $\sum_{j=1}^r u_j u_j'$  est une matrice de projection. En utilisant le caractère orthonormal de  $\{u_j\}$ ,

$$\left( \sum_{j=1}^r u_j u_j' \right)' \sum_{l=1}^r u_l u_l' = \sum_{j=1}^r \sum_{l=1}^r u_j u_j' u_l u_l' = \sum_{j=1}^r \sum_{l=1}^r \delta_{jl} u_j u_l' = \sum_{j=1}^r \sum_{l=1}^r \delta_{jl} u_j u_l' = \sum_{j=1}^r u_j u_j'$$

Donc  $\sum_{j=1}^r u_j u_j'$  est une matrice de projection.

Rappelons que  $\{u_j\}_{j \in \llbracket 1, n \rrbracket}$  est une base de  $\mathbb{R}^n$ . L'image de  $\{u_j\}_{j \in \llbracket 1, n \rrbracket}$  par  $\sum_{j=1}^r u_j u_j'$  nous donne donc accès (par linéarité) à  $Im(\sum_{j=1}^r u_j u_j')$ . Or :

- Pour tout  $k \in \llbracket 1, r \rrbracket$ ,  $\sum_{j=1}^r u_j u_j' u_k = u_k$
- Pour tout  $k \in \llbracket r+1, n \rrbracket$ ,  $\sum_{j=1}^r u_j u_j' u_k = 0$

Par conséquent,  $Im(\sum_{j=1}^r u_j u_j') = Vect(\{u_j\}_{j \in \llbracket 1, r \rrbracket})$ .

De plus, d'après les équations aux valeurs propres de  $XX'$  vues à la question 5.1 nous avons immédiatement :  $Im(XX') = Vect(\{u_j\}_{j \in \llbracket 1, r \rrbracket})$ . De plus, ces équations nous informent que  $u_j$  est dans l'image de  $X$  pour l'antécédent  $\frac{1}{\lambda_j} X' u_j$ , pour tout  $j \leq r$ . Nous savons donc aussi que  $Vect(\{u_j\}_{j \in \llbracket 1, r \rrbracket}) \subset Im(X)$ . D'où  $Im(XX') \subset Im(X)$ . D'après la question 5.1,  $rg(XX') = rg(X)$ , d'où finalement  $Im(XX') = Im(X)$ .

**Donc  $Im(\sum_{j=1}^r u_j u_j') = Vect(\{u_j\}_{j \in \llbracket 1, r \rrbracket}) = Im(XX') = Im(X)$ .**

**Donc  $\sum_{j=1}^r u_j u_j'$  est une matrice de projection de  $Im(XX')$ , et les projections sur  $Im(XX')$  et  $Im(X)$  sont identiques.**

**QB.3** Pour tout  $(i, j) \in \llbracket 1, r \rrbracket$ ,  $v_i' v_j = \lambda_i^{-1/2} \lambda_j^{-1/2} u_i' X X' u_j = \lambda_i^{-1/2} \lambda_j^{1/2} u_i' u_j = \lambda_i^{-1/2} \lambda_j^{1/2} \delta_{ij}$

Par conséquent,  $\{v_i\}_{i \in \llbracket 1, r \rrbracket}$  est une famille orthonormée de  $\mathbb{R}^p$ .

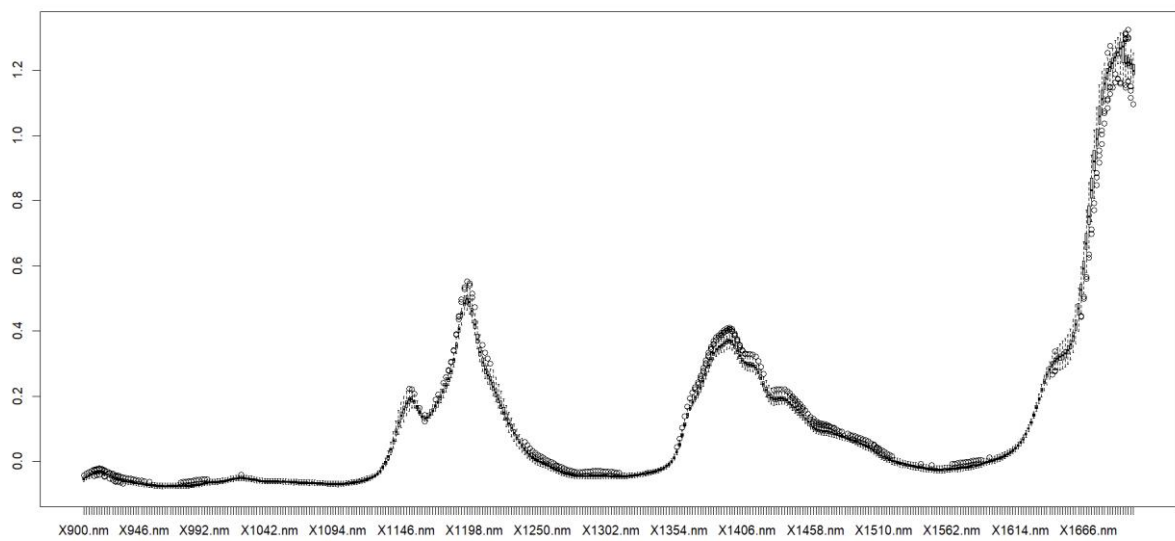
Pour tout  $i \in \llbracket 1, r \rrbracket$ ,  $X'Xv_i = X'X\lambda_i^{-1/2}X'u_i = \lambda_i^{-1/2}X'XX'u_i = \lambda_i^{-1/2}X'\lambda_i u_i = \lambda_i v_i$ .

Donc  $\{v_i\}_{i \in \llbracket 1, r \rrbracket}$  est une famille orthonormée de  $\mathbb{R}^p$  de vecteurs propres de  $X'X$ .

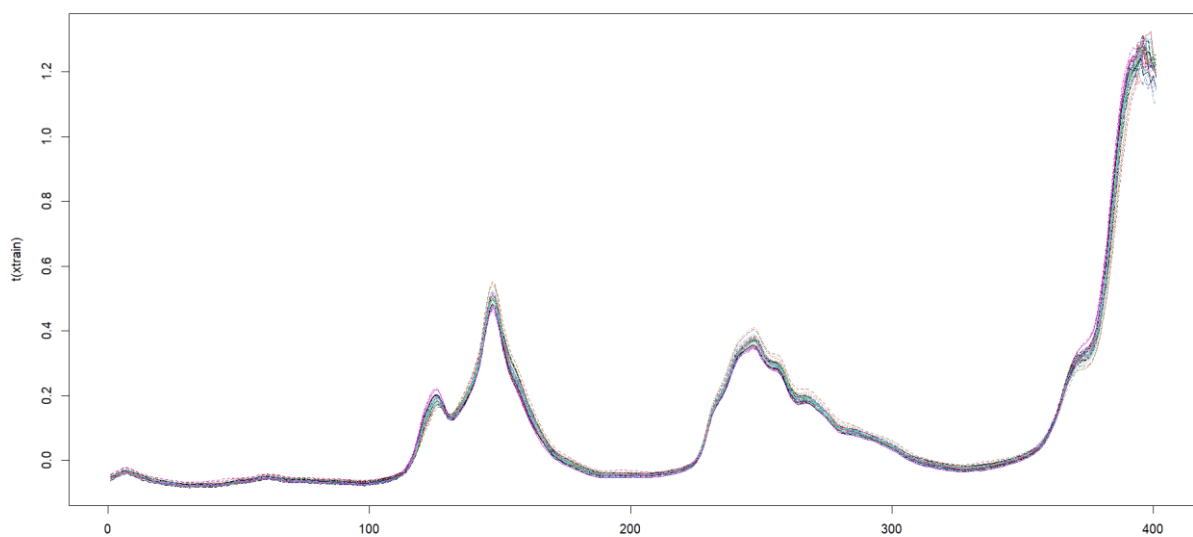
Via l'égalité  $v_j = \lambda_j^{-1/2}X'u_j$  valable pour tout  $j \leq r$ , on sait que les matrices  $X'$  et  $\sum_{j=1}^r \sqrt{\lambda_j} v_j u_j'$  coïncident sur la base  $\{u_j\}_{j \in \llbracket 1, n \rrbracket}$ . Par conséquent,  $X = \sum_{j=1}^r \sqrt{\lambda_j} u_j v_j'$ .

## Partie II : Analyse exploratoire

### 2.1 Boxplots :

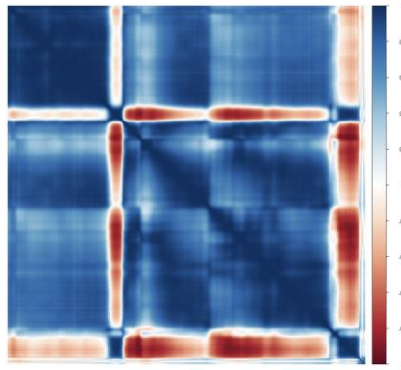


Courbes des spectres pour chaque observation :



Corrélations entre les mesures de fréquences :



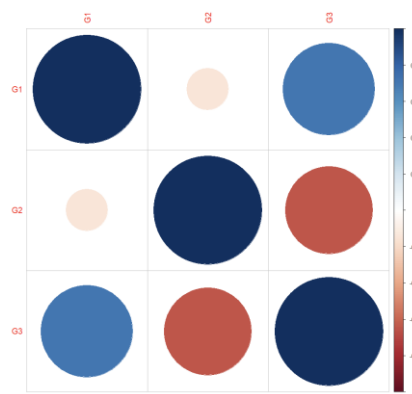


Les fréquences sont classées par ordre croissant en partant de 900 nm et en allant jusqu'à 1700 nm.

Se distinguent trois groupes de fréquences :

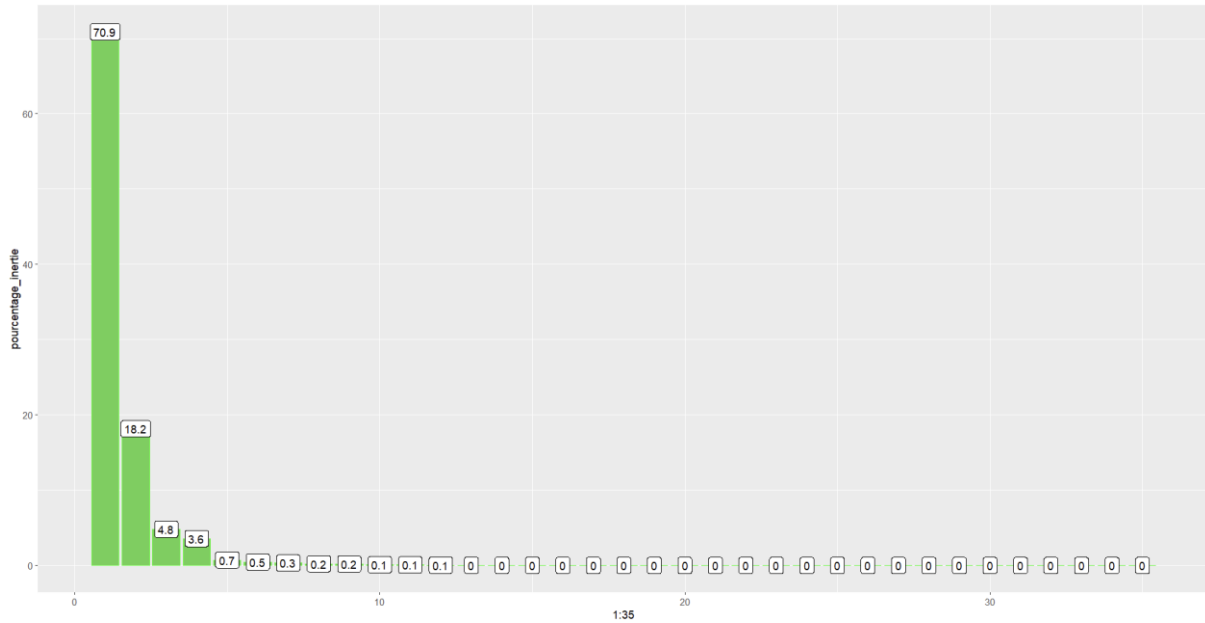
- Le premier de 900 nm à 1134 nm, appelons-le G1
- Le second de 1134 nm à 1152 nm et de 1642 nm à 1700 nm, appelons-le G2
- Le troisième de 1154 nm à 1640 nm, appelons-le G3

Moyennons les variables sur ces groupes et réétudions les corrélations :



- G1 et G2 sont décorrélés
- G1 et G3 sont corrélés positivement
- G2 et G3 sont anticorrélés, c'est-à-dire fortement corrélés négativement

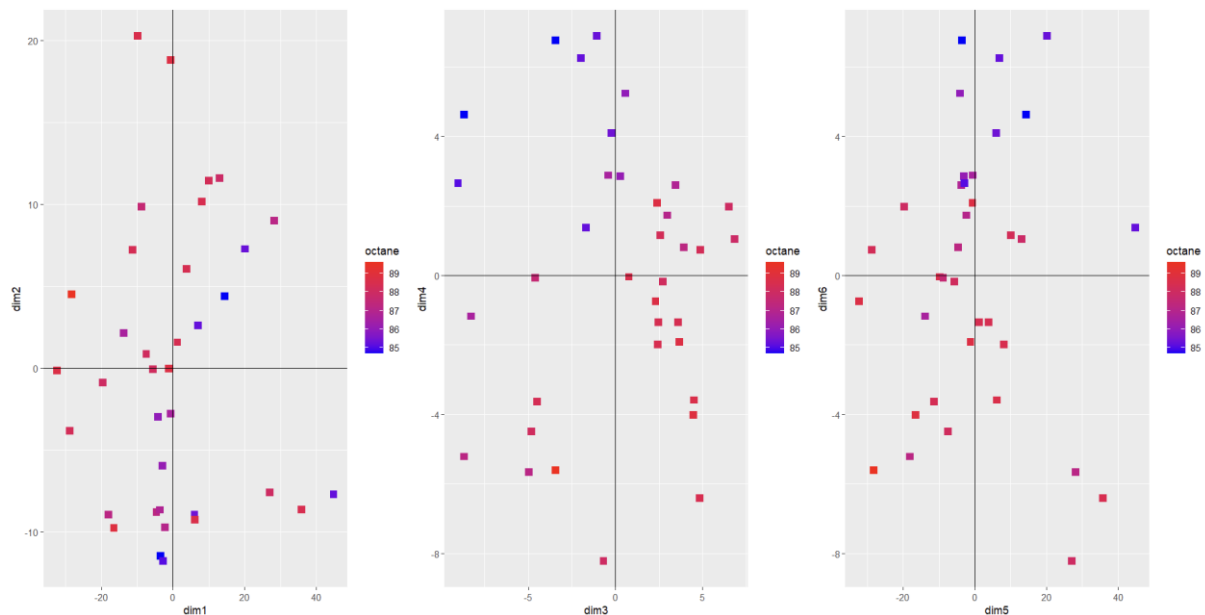
**2.1** Eboulis des valeurs propres :



Il y a 35 valeurs propres distinctes. Le jeu de données que nous sommes en train d'étudier est le jeu d'apprentissage, qui contient 36 lignes et 401 lignes. Il est normal qu'il y ait moins de 36 valeurs propres, car  $rg(X'X) = rg(X)$  et  $rg(X)$  est inférieur ou égal au nombre de lignes de  $X$ .

De plus, on constate que les six premières valeurs propres représentent à elles seules 98,7% de l'inertie du nuage.

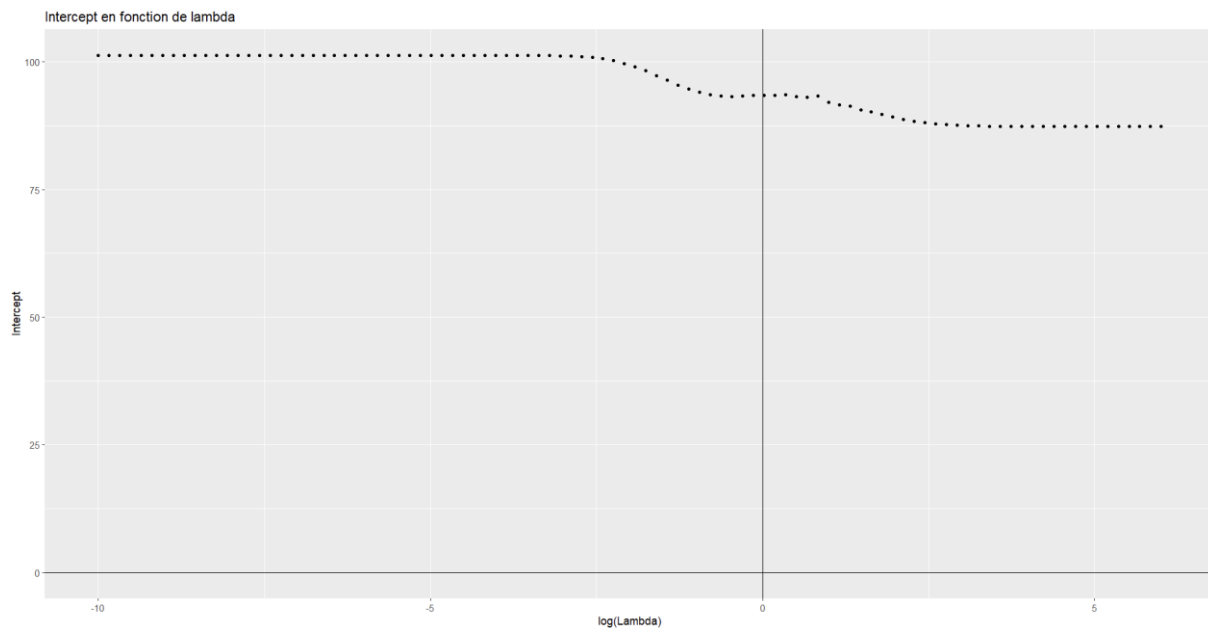
Projection du nuage sur les trois premiers plans principaux :



Le deuxième plan principal semble être le plus informatif : plus le point est situé en haut à gauche, plus la teneur en octane est faible.

### Partie III : Régression pénalisée

#### 3.1

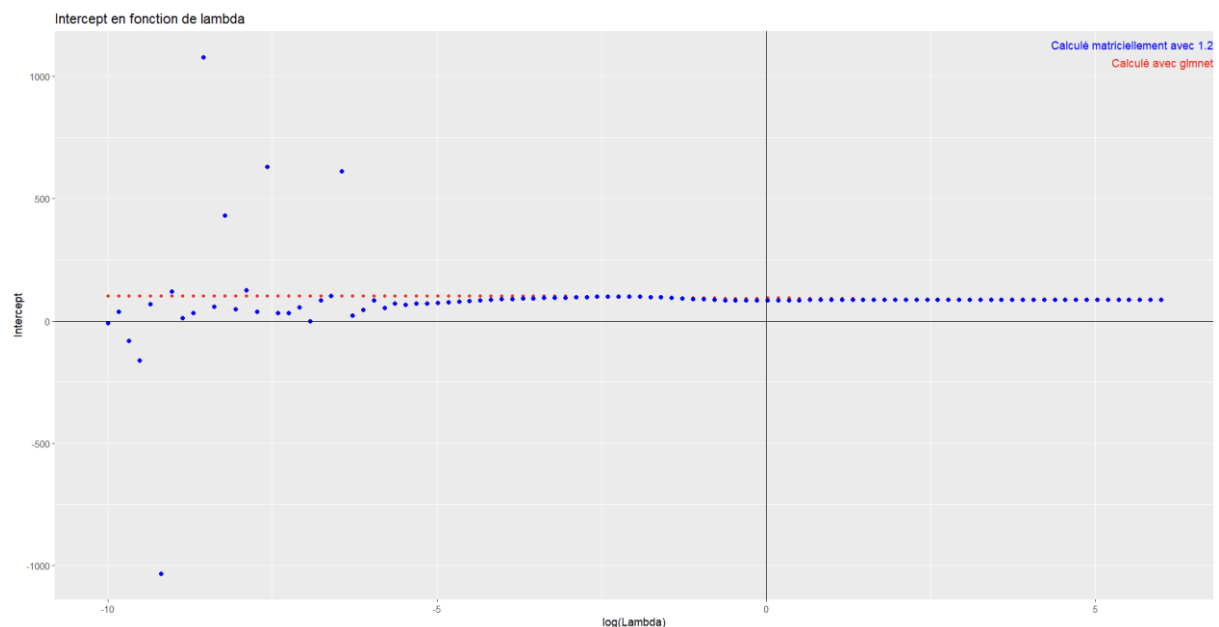


**Remarque :** les notations  $\lambda$ ,  $k$  et  $k^*$  désignent toutes la même chose : le coefficient de Lagrange pour le problème d'optimisation associé à la régression Ridge.  $\lambda$  est la notation utilisée par R.

L'intercept est fonction décroissante du paramètre  $\lambda (= k^*)$  choisi. Le fait que l'intercept dépende de  $k^*$  n'est pas surprenant, d'après sa formule obtenue à la question 1.2 :

$$\theta_0^* = \left( n - 1_n'X(X'X + k^*Id_p)^{-1}X'1_n \right)^{-1} 1_n' \left( Id_n - X(X'X + k^*Id_p)^{-1}X' \right) Y$$

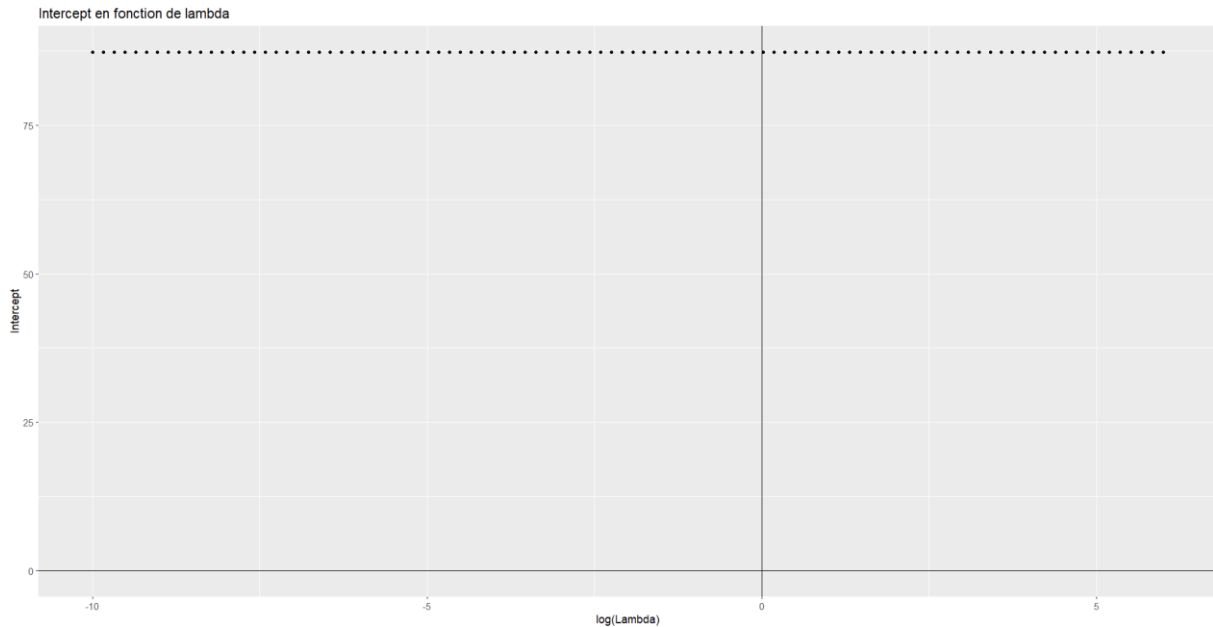
Représentons sur un même graphique les courbes de l'intercept obtenues par glmnet et par la question 1.2 :



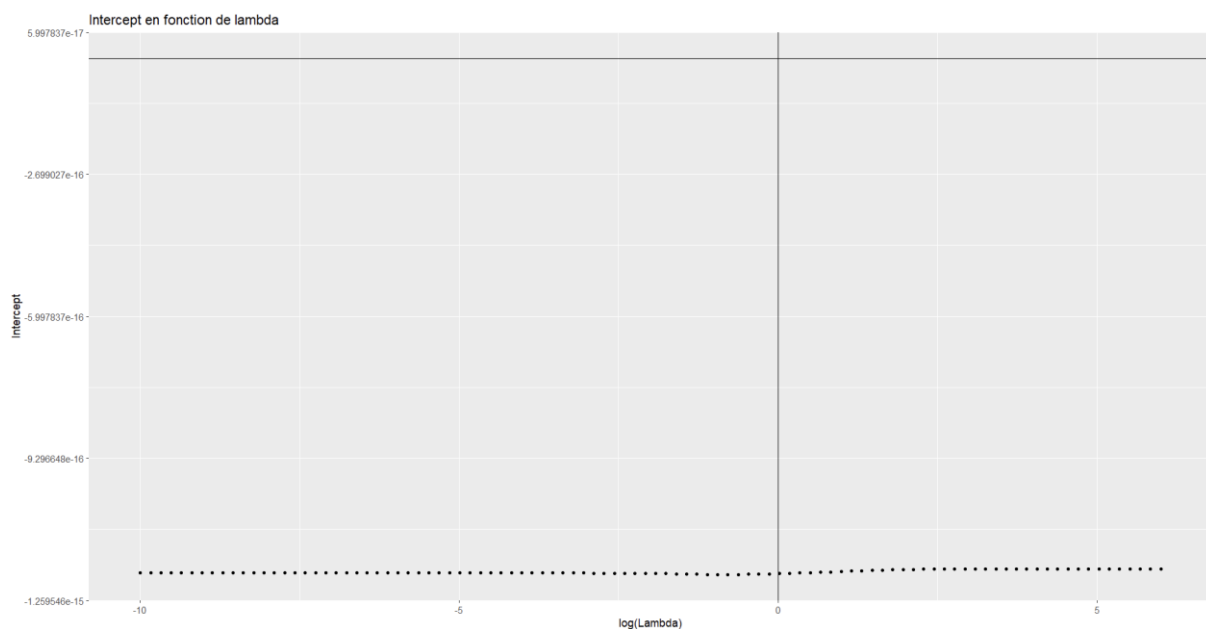
Pour des valeurs de  $\lambda$  suffisamment élevées, les intercepts obtenus par glmnet et par calcul matriciel coïncident, ce qui est rassurant. En revanche, lorsque  $\lambda$  est trop faible, certains coefficients de la matrice  $(X'X + \lambda Id_p)^{-1}$  explosent, ce qui amoindrit la précision du calcul matriciel et conduit au

nuage de points bleu ci-dessous qui semble de plus en plus aléatoire en se déplaçant vers la gauche. La différence est que glmnet calcule l'intercept plus efficacement le produit de matrices.

Par contre, on s'attend à ce que l'intercept soit indépendant de  $\lambda$  lorsque  $X$  (les variables explicatives) est centré, car dans ce cas  $\tilde{\theta}_0^* = \frac{1}{n} 1_n' Y$  (cf question 1.2). Vérifions cette affirmation :



C'est effectivement le cas. De plus, on peut vérifier avec  $\text{mean}(Y)$  que la moyenne de  $Y$  est bien de 87,34 ce qui correspond à la valeur de l'intercept sur le graphique ci-dessus. Il est donc clair que si nous centrons  $Y$ , l'intercept sera constamment nul, indépendamment de  $\lambda$  :



Pour rappel, deux matrices  $F$  et  $G$  sont pseudo-inverse l'une de l'autre si et seulement si les deux conditions suivantes sont remplies :

- $FGF = F$
- $GFG = G$

Bien sûr, en informatique, la notion de nullité n'existant pas à cause des approximations, nous utilisons la commande R suivante pour s'assurer que tous les coefficients de  $FGF - F$  sont inférieurs à  $10^{-10}$  et nous faisons la même chose pour  $GFG - G$  :

**M=A0 %\*% x %\*% A0 - A0**

**N=x %\*% A0 %\*% x -x**

**all(M<1e-10)**

**all(N<1e-10)**

R renvoie **true** à chaque fois, donc **A0 est bien une pseudo-inverse la matrice centrée réduite du spectre.**

On rappelle les formules des coefficients de régression dans le cas où  $X$  n'est pas centré ni réduit :

$$\theta_0^* = \left( n - \mathbf{1}_n' X (X'X + k^* \text{Id}_p)^{-1} X' \mathbf{1}_n \right)^{-1} \mathbf{1}_n' \left( \text{Id}_n - X (X'X + k^* \text{Id}_p)^{-1} X' \right) Y$$

$$\theta^* = (X'X + k^* \text{Id}_p)^{-1} (X'Y - \theta_0^* X' \mathbf{1}_n) = A_\lambda (Y - \theta_0^* \mathbf{1}_n)$$

Lorsque  $X$  est centré, on a (voir question 1.2 pour la preuve) :

$$\theta_0^* = \frac{1}{n} \mathbf{1}_n' Y$$

De plus, lorsque  $Y$  est centré,  $\mathbf{1}_n' Y = 0$ , donc :

$$\theta_0^* = 0$$

$$\theta^* = A_\lambda Y = \widehat{\theta}_\lambda$$

Nous sommes dans ce dernier cas, donc :

$$\widehat{\theta}_\lambda \rightarrow_{\lambda \rightarrow 0} A_0 Y$$

Nous avons précédemment calculé  $A_0$  sur R, donc il suffit de multiplier par  $Y$ .

**3.2** Dans toute cette question, les matrices  $X$  et  $Y$  sont standardisées donc :

$$\theta_0^* = 0$$

$$\theta^* = A_\lambda Y = \widehat{\theta}_\lambda$$

La fonction glmnet résout  $\underset{\theta_0 \in \mathbb{R}, \theta \in \mathbb{R}^p}{\operatorname{argmin}} \frac{1}{2n_{obs}} \|Y - \theta_0 \mathbf{1}_n - X\theta\|^2$  au lieu de résoudre  $\underset{\theta_0 \in \mathbb{R}, \theta \in \mathbb{R}^p}{\operatorname{argmin}} \|Y - \theta_0 \mathbf{1}_n - X\theta\|^2$  sous la contrainte  $\frac{1}{2} \|\theta\|^2 \leq \delta$ .

$\theta_0 \mathbf{1}_n - X\theta\|^2$ .

Le lagrangien s'écrit  $L(k, \theta_0, \theta) = \frac{1}{2n_{obs}} \|Y - \theta_0 \mathbf{1}_n - X\theta\|^2 + k \left( \frac{1}{2} \|\theta\|^2 - \delta \right)$  au lieu de s'écrire  $L(k, \theta_0, \theta) = \|Y - \theta_0 \mathbf{1}_n - X\theta\|^2 + k(\|\theta\|^2 - \delta)$ .

Son gradient vaut  $\nabla_{\theta_0, \theta} L(k, \theta_0, \theta) = \left( \frac{1}{n_{obs}} (\theta_0 X' \mathbf{1}_n + (X'X + n_{obs} k \text{Id}_p) \theta - X'Y) \right)$  au lieu de valoir

$$\nabla_{\theta_0, \theta} L(k, \theta_0, \theta) = \begin{pmatrix} 2(n\theta_0 + \mathbf{1}_n' X\theta - \mathbf{1}_n' Y) \\ 2(\theta_0 X' \mathbf{1}_n + (X'X + k \text{Id}_p) \theta - X'Y) \end{pmatrix}.$$

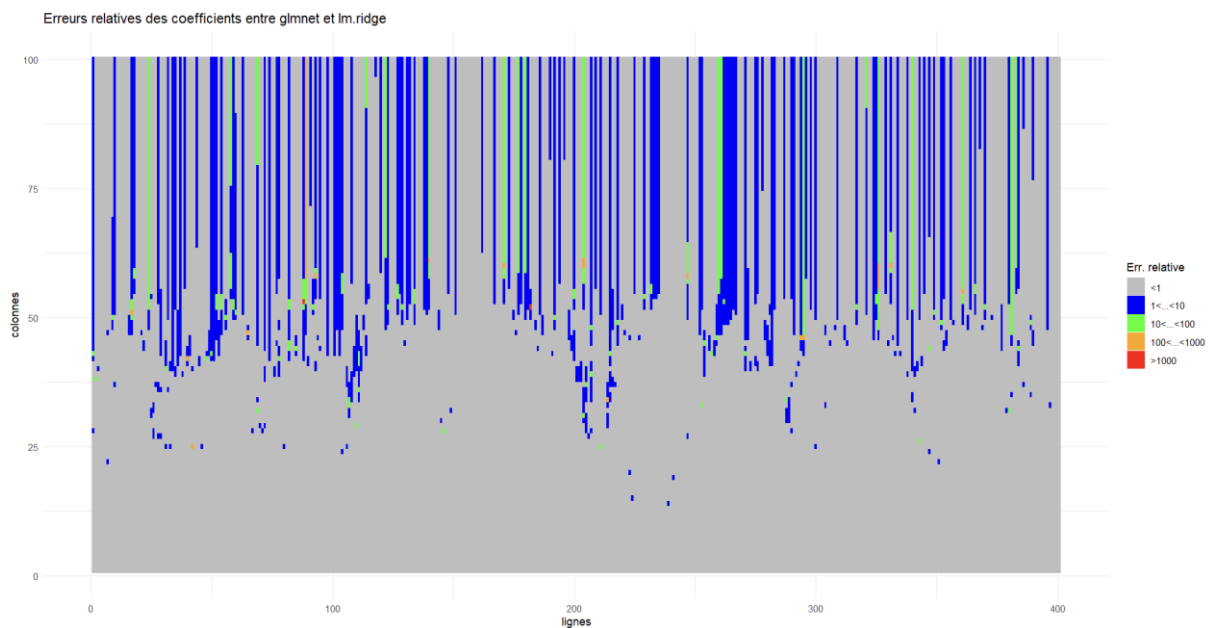
Par conséquent, puisqu'en plus nous avons standardisé les données, on a  $\theta^* = (X'X + n_{obs}k * Id_p)^{-1} X'Y$  au lieu d'avoir  $\theta^* = (X'X + k * Id_p)^{-1} X'Y$ .

Donc pour obtenir la même matrice de coefficients avec `lm.ridge` qu'avec `glmnet`, si on applique la grille `grid` à `glmnet`, alors il faut appliquer la grille  $n_{obs} \times grid$  à `lm.ridge`, en sachant que  $n_{obs} = 36$ , pour obtenir la même matrice de coefficients. Ainsi,

```
ridge.fit.lm = lm.ridge(octane~.,data=as.data.frame(donnees),lambda=36*grid)
```

```
ridge.fit.glmnet = glmnet(donnees[,-1],donnees[,1],alpha=0,lambda=grid)
```

donnent le même résultat. Pour s'en assurer, représentons l'erreur relative entre les deux matrices de coefficients :



Je ne sais pas si c'est le meilleur moyen de comparer deux matrices de coefficients lorsque les coefficients sont aussi faibles, mais en tout cas, on constate que les résultats des deux fonctions sont très proches. On peut aussi s'en convaincre terme à terme. Par exemple :

```
(ridge.fit.lm.coef)[1,1] # -1.968386e-07
```

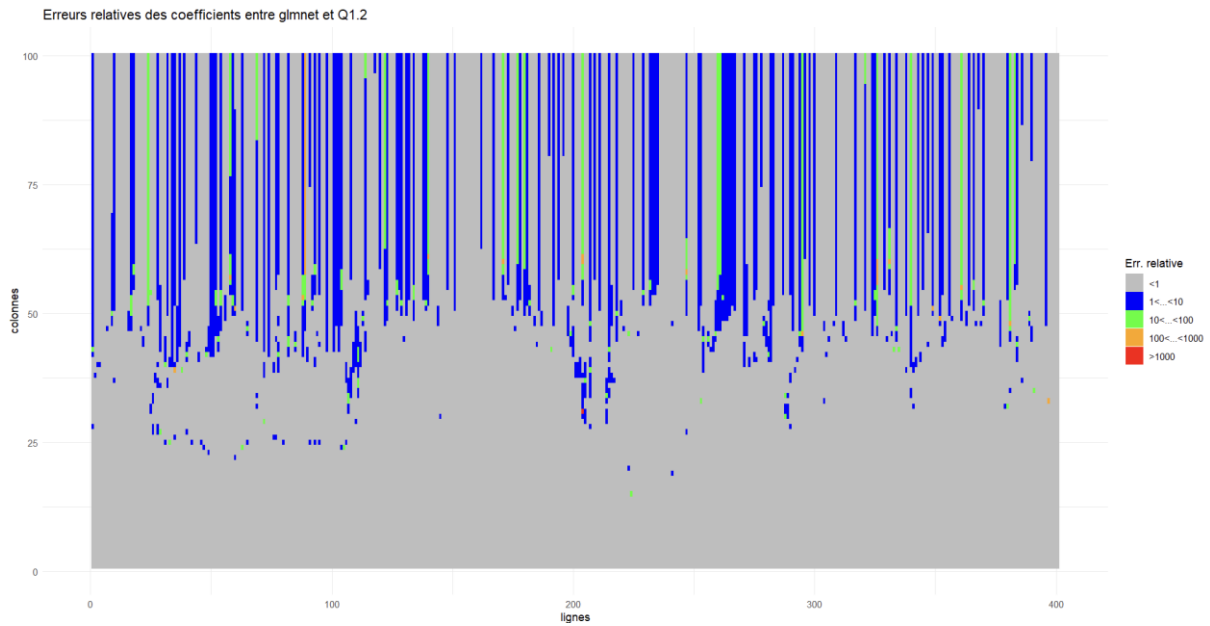
```
(ridge.fit.glmnet.coef)[1,1] # -1.969142e-07
```

Maintenant, on implémente le calcul matriciel de l'optimum (issu de la question 1.2) en utilisant l'expression  $\theta^* = (X'X + n_{obs}k * Id_p)^{-1} X'Y$ .

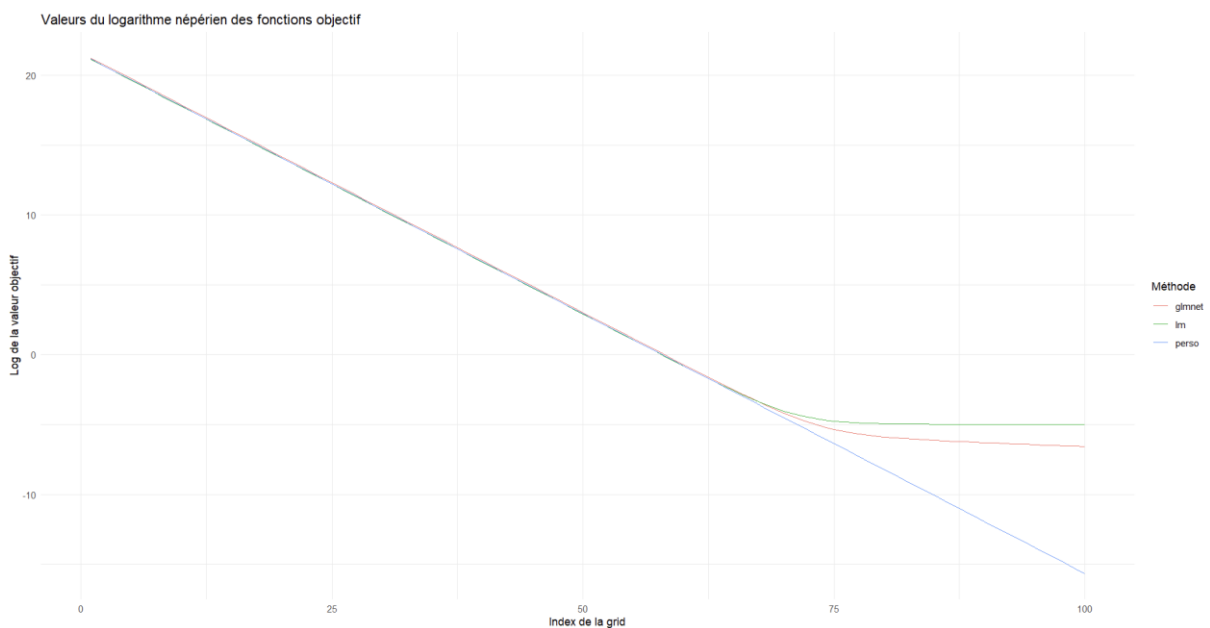
On peut comparer terme à terme avec les autres méthodes :

```
(ridge.fit.perso.coef)[1,1] # -1.940875e-07
```

Pour vérifier la cohérence, on peut aussi représenter l'erreur relative :



Enfin, un autre moyen de comparer les trois méthodes de manière globale est de représenter les valeurs des fonctions objectif en fonction de lambda :



Interprétation : Avec cette dernière courbe, il n'y a aucun doute : les trois méthodes calculent bien les mêmes estimateurs, mais lorsque lambda est trop faible, les différences d'implémentation se ressentent davantage.

**3.3** Faisons une remarque évidente pour commencer cette question :  $\lambda_{opt} = n_{obs} \lambda_{opt}^{glmnet}$

En effet, rappelons que glmnet utilise le lagrangien  $L(k, \theta_0, \theta) = \frac{1}{2n_{obs}} \|Y - \theta_0 1_n - X\theta\|^2 + k \left( \frac{1}{2} \|\theta\|^2 - \delta \right)$  au lieu du lagrangien utilisé dans la modélisation depuis le début :  $L(k, \theta_0, \theta) = \|Y - \theta_0 1_n - X\theta\|^2 + k(\|\theta\|^2 - \delta)$ .

**Rappel** : les notations  $k$  et  $\lambda$  désignent la même chose

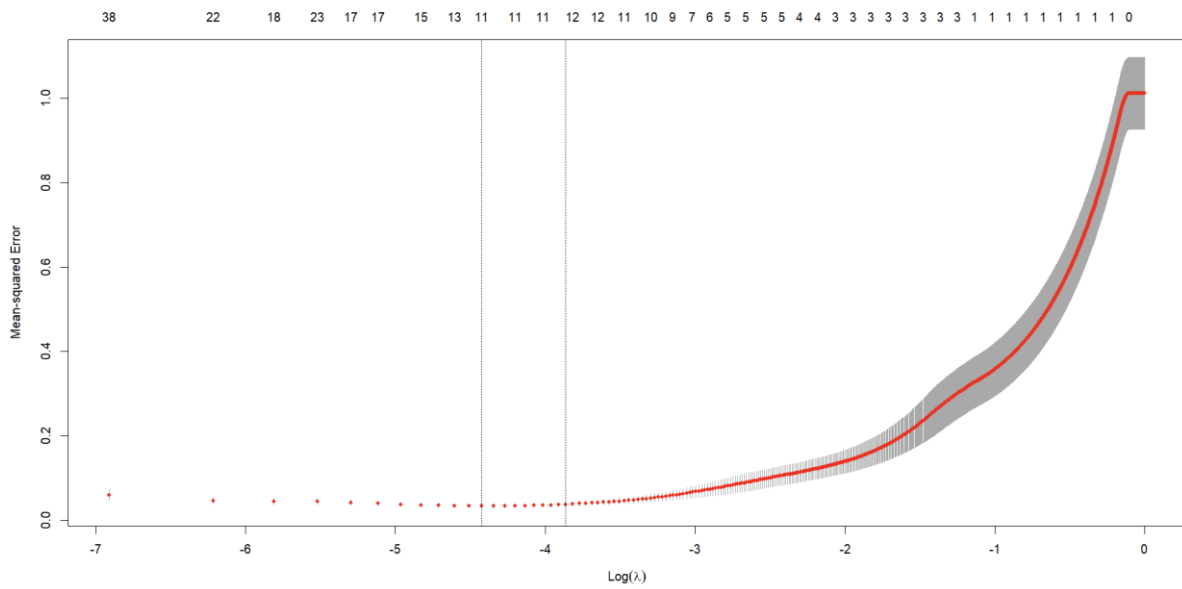
C'est  $\lambda_{opt}$  qui nous intéresse, et il faut garder à l'esprit que la fonction `cv.glmnet` renverra  $\lambda_{opt}^{glmnet}$ .

Commençons par approcher  $\lambda_{opt}^{glmnet}$  par la fonction `cv.glmnet`. Pour cela, créons une grille :

`gridglmnet=seq(0,1,0.001)`

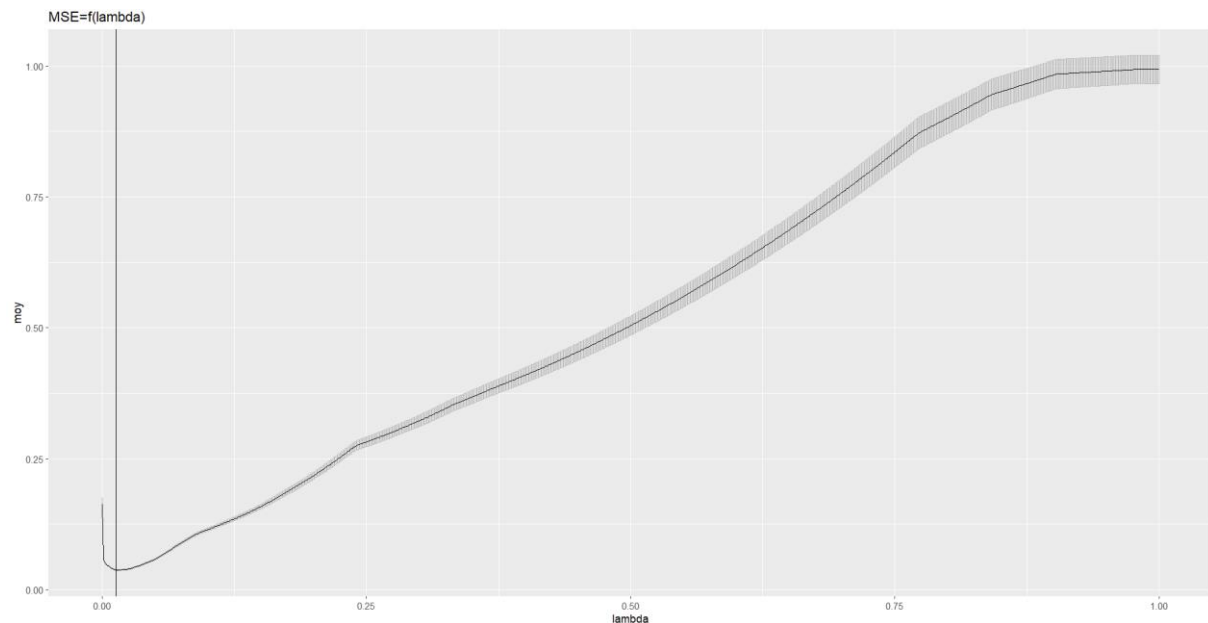
Par `cv.glmnet` appliquée à cette grille, nous obtenons  $\lambda_{opt}^{glmnet} = 0,013$ .

Intervalle de confiance à 95% de la MSE en fonction de  $\lambda^{glmnet}$



Donc a priori,  $\lambda_{opt} = n_{obs} \lambda_{opt}^{glmnet} = 36 \lambda_{opt}^{glmnet} = 0,468$  par `cv.glmnet`.

Maintenant, nous allons réobtenir ce résultat de manière indépendante en écrivant notre propre fonction (dans laquelle nous utilisons `glmnet`, mais pas `cv.glmnet`).



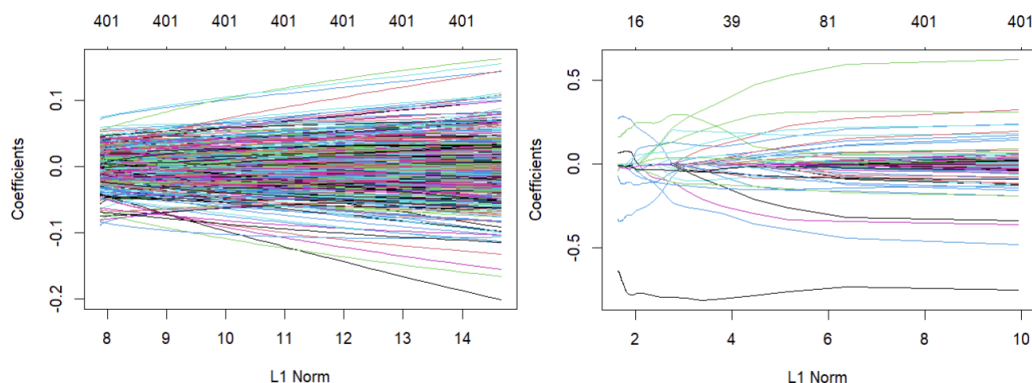
Nous obtenons  $\lambda_{opt}^{glmnet} = 0.014$  ce qui est cohérent avec `cv.glmnet`.



Ensuite, on réajuste sur le jeu d'apprentissage, puis on calcule l'erreur de généralisation, qui vaut 0,96 pour  $\lambda_{opt}^{glmnet} = 0.014$ .

### **Bonus. Comparaison des régressions Ridge et Lasso**

A gauche, on voit l'évolution des estimateurs de coefficients en fonction de l'indice de la grille pour la régression Ridge et à droite, on voit l'évolution des estimateurs de coefficients en fonction de l'indice de la grille pour la régression Lasso.



Comme en témoignent très nettement ces courbes, la méthode Ridge tend à homogénéiser les coefficients tandis que la méthode Lasso tend à sélectionner et désélectionner des coefficients.

### **Partie IV : Régression logistique pénalisée**

**4.1** En régression logistique, il y a deux niveaux :

- Niveau 0 : la teneur en octane est inférieure ou égale à 88 :  $Z = 0$
- Niveau 1 : la teneur en octane est strictement supérieure à 88 :  $Z = 1$

On possède  $n$  échantillons aléatoires  $x_i \in \mathbb{R}^p$  tel que pour tout  $i \leq n$ ,  $Z_i \sim \mathcal{B}(\pi(x_i))$

Notre objectif est de choisir le meilleur  $\pi(x)$  compte des données  $\pi(x_i)$ .

La fonction logit étant bijective de  $]0,1[$  dans  $\mathbb{R}$ , on modélise la régression linéaire :

$$\text{logit}(\pi(x_i)) = x_i \theta$$

Pour calculer  $z$  et  $z_{\text{test}}$ , on applique donc à  $y_{\text{train}}$  et  $y_{\text{test}}$  la fonction réciproque de la fonction logit, la fonction sigmoïde :  $f(x) = \frac{1}{1+e^{-x}}$

**4.2** Les méthodes Ridge et Lasso donnent des erreurs de généralisation équivalentes :

	Lambda	Erreur de généralisation
Ridge	2.077	0.0123163
Lasso	0.006055	0.008750137

### **Conclusion**

Ce mini-projet m'a permis d'étudier en détail toute la théorie sur la régression linéaire pénalisée et de voir plusieurs fonctions R proposant d'effectuer une telle régression.