

MAP 433 : Introduction aux méthodes statistiques. Cours 5

25 Septembre 2015

Aujourd'hui

1 Méthode d'estimation dans le modèle de régression

- Modèle de régression
- La droite des moindres carrés
- Régression linéaire multiple
- Propriétés de l'estimateur des Moindres Carrés
- Modèle linéaire gaussien

2 Prévission

3 Régression non-linéaire

Influence d'une variable sur une autre

- Principe : on part de l'observation d'un n -échantillon

$$Y_1, \dots, Y_n \quad (Y_i \in \mathbb{R})$$

- A chaque observation Y_i est associée une observation auxiliaire $\mathbf{X}_i \in \mathbb{R}^k$.
- On suspecte l'échantillon

$$\mathbf{X}_1, \dots, \mathbf{X}_n \quad (\mathbf{X}_i \in \mathbb{R}^k)$$

de contenir la « majeure partie de la variabilité des Y_i ».

Modélisation de l'influence

- Si \mathbf{X}_i contient toute la variabilité de Y_i , alors Y_i est mesurable par rapport à \mathbf{X}_i : il existe $r : \mathbb{R}^k \rightarrow \mathbb{R}$ telle que

$$Y_i = r(\mathbf{X}_i),$$

mais peu réaliste (ou alors problème d'interpolation numérique).

- Alternative : représentation précédente avec erreur additive : on postule

$$Y_i = r(\mathbf{X}_i) + \xi_i,$$

ξ_i erreur aléatoire centrée (pour des raisons d'identifiabilité).

Motivation : meilleure approximation L^2

- Meilleure approximation L^2 . Si $\mathbb{E}[Y^2] < +\infty$, la meilleure approximation de Y par une variable aléatoire \mathbf{X} -mesurable est donnée par l'**espérance conditionnelle** $\mathbb{E}[Y|\mathbf{X}]$:

$$\mathbb{E}[(Y - r(\mathbf{X}))^2] = \min_h \mathbb{E}[(Y - h(\mathbf{X}))^2]$$

- où

$$r(\mathbf{x}) = \mathbb{E}[Y|\mathbf{X} = \mathbf{x}], \quad \mathbf{x} \in \mathbb{R}^k.$$

- On appelle $r(\cdot)$ **fonction de régression de Y sur \mathbf{X}** .

Régression

- On définit :

$$\xi = Y - \mathbb{E}[Y | \mathbf{X}] \implies \mathbb{E}[\xi] = 0.$$

- On a alors naturellement la représentation désirée

$$Y = r(\mathbf{X}) + \xi, \quad \mathbb{E}[\xi] = 0$$

si l'on pose

$$r(\mathbf{x}) = \mathbb{E}[Y | \mathbf{X} = \mathbf{x}], \quad \mathbf{x} \in \mathbb{R}^k$$

- On observe alors un n -échantillon

$$(\mathbf{X}_1, Y_1), \dots, (\mathbf{X}_n, Y_n)$$

où

$$Y_i = r(\mathbf{X}_i) + \xi_i, \quad \mathbb{E}[\xi_i] = 0$$

avec comme paramètre la fonction $r(\cdot)$ + un jeu d'hypothèses

régresseurs aléatoires

Definition

Données : $(\mathbf{X}_1, Y_1), \dots, (\mathbf{X}_n, Y_n)$ avec $(Y_i, \mathbf{X}_i) \in \mathbb{R} \times \mathbb{R}^k$ *i.i.d.*, et

$$Y_i = r(\beta, \mathbf{X}_i) + \sigma \xi_i, \quad \mathbb{E}_\theta [\xi_i | \mathbf{X}_i] = 0$$

- $\mathbf{x} \rightsquigarrow r(\beta, \mathbf{x})$ fonction de régression, connue au paramètre β près ;
- \mathbf{X}_i = variables explicatives, co-variables, prédicteurs ;
- $\theta = (\beta, \sigma^2) \in \mathbb{R}^d \times \mathbb{R}_+^*$ paramètres.

régresseurs aléatoires

Definition

Données : $(\mathbf{X}_1, Y_1), \dots, (\mathbf{X}_n, Y_n)$ avec $(Y_i, \mathbf{X}_i) \in \mathbb{R} \times \mathbb{R}^k$ *i.i.d.*, et

$$Y_i = r(\beta, \mathbf{X}_i) + \sigma \xi_i, \quad \mathbb{E}_\theta [\xi_i | \mathbf{X}_i] = 0$$

- $\mathbf{x} \rightsquigarrow r(\beta, \mathbf{x})$ fonction de *régression*, connue au paramètre β près ;
- \mathbf{X}_i = variables explicatives, co-variables, prédicteurs ;
- $\theta = (\beta, \sigma^2) \in \mathbb{R}^d \times \mathbb{R}_+^*$ paramètres.

régresseurs aléatoires

Definition

Données : $(\mathbf{X}_1, Y_1), \dots, (\mathbf{X}_n, Y_n)$ avec $(Y_i, \mathbf{X}_i) \in \mathbb{R} \times \mathbb{R}^k$ *i.i.d.*, et

$$Y_i = r(\beta, \mathbf{X}_i) + \sigma \xi_i, \quad \mathbb{E}_\theta [\xi_i | \mathbf{X}_i] = 0$$

- $x \rightsquigarrow r(\beta, x)$ fonction de *régression*, connue au paramètre β près ;
- \mathbf{X}_i = variables explicatives, co-variables, prédicteurs ;
- $\theta = (\beta, \sigma^2) \in \mathbb{R}^d \times \mathbb{R}_+^*$ *paramètres*.

Modèle de régression à design déterministe

Definition

Données : $(\mathbf{x}_1, Y_1), \dots, (\mathbf{x}_n, Y_n)$ avec $Y_i \in \mathbb{R}, \mathbf{x}_i \in \mathbb{R}^k$, et

$$Y_i = r(\boldsymbol{\beta}, \mathbf{x}_i) + \sigma \xi_i, \quad \mathbb{E}_\theta [\xi_i] = 0,$$

- \mathbf{x}_i déterministes, donnés (ou choisis) : plan d'expérience.
- Hypothèses sur les ξ_i : à débattre. *Pour simplifier*, les variables ξ_i sont centrées, $\mathbb{E}_\theta[\xi_i] = 0$, décorrélées, $\mathbb{E}_\theta[\xi_i \xi_j] = 0$ si $i \neq j$ et de variance unité $\mathbb{E}[\xi_i^2] = 1$ (*homoscédasticité*).
- Attention ! Les Y_i ne sont pas identiquement distribués.
- $\theta = (\boldsymbol{\beta}, \sigma^2) \in \mathbb{R}^d \times \mathbb{R}_+$.

Question : Comment estimer $\theta = (\boldsymbol{\beta}, \sigma)$ dans ce modèle?

Modèle de régression à design déterministe

Definition

Données : $(\mathbf{x}_1, Y_1), \dots, (\mathbf{x}_n, Y_n)$ avec $Y_i \in \mathbb{R}, \mathbf{x}_i \in \mathbb{R}^k$, et

$$Y_i = r(\boldsymbol{\beta}, \mathbf{x}_i) + \sigma \xi_i, \quad \mathbb{E}_\theta [\xi_i] = 0,$$

- \mathbf{x}_i déterministes, donnés (ou choisis) : plan d'expérience.
- Hypothèses sur les ξ_i : à débattre. Pour simplifier, les variables ξ_i sont centrées, $\mathbb{E}_\theta[\xi_i] = 0$, décorrélées, $\mathbb{E}_\theta[\xi_i \xi_j] = 0$ si $i \neq j$ et de variance unité $\mathbb{E}[\xi_i^2] = 1$ (homoscédasticité).
- Attention ! Les Y_i ne sont pas identiquement distribués.
- $\theta = (\boldsymbol{\beta}, \sigma^2) \in \mathbb{R}^d \times \mathbb{R}_+$.

Question : Comment estimer $\theta = (\boldsymbol{\beta}, \sigma)$ dans ce modèle?

Modèle de régression à design déterministe

Definition

Données : $(\mathbf{x}_1, Y_1), \dots, (\mathbf{x}_n, Y_n)$ avec $Y_i \in \mathbb{R}, \mathbf{x}_i \in \mathbb{R}^k$, et

$$Y_i = r(\boldsymbol{\beta}, \mathbf{x}_i) + \sigma \xi_i, \quad \mathbb{E}_\theta [\xi_i] = 0,$$

- \mathbf{x}_i déterministes, donnés (ou choisis) : plan d'expérience.
- Hypothèses sur les ξ_i : à débattre. *Pour simplifier*, les variables ξ_i sont centrées, $\mathbb{E}_\theta[\xi_i] = 0$, décorrélées, $\mathbb{E}_\theta[\xi_i \xi_j] = 0$ si $i \neq j$ et de variance unité $\mathbb{E}[\xi_i^2] = 1$ (*homoscédasticité*).
- *Attention ! Les Y_i ne sont pas identiquement distribués.*
- $\theta = (\boldsymbol{\beta}, \sigma^2) \in \mathbb{R}^d \times \mathbb{R}_+$.

Question : Comment estimer $\theta = (\boldsymbol{\beta}, \sigma)$ dans ce modèle?

Modèle de régression à design déterministe

Definition

Données : $(\mathbf{x}_1, Y_1), \dots, (\mathbf{x}_n, Y_n)$ avec $Y_i \in \mathbb{R}, \mathbf{x}_i \in \mathbb{R}^k$, et

$$Y_i = r(\boldsymbol{\beta}, \mathbf{x}_i) + \sigma \xi_i, \quad \mathbb{E}_\theta [\xi_i] = 0,$$

- \mathbf{x}_i déterministes, donnés (ou choisis) : plan d'expérience.
- Hypothèses sur les ξ_i : à débattre. *Pour simplifier*, les variables ξ_i sont centrées, $\mathbb{E}_\theta[\xi_i] = 0$, décorrélées, $\mathbb{E}_\theta[\xi_i \xi_j] = 0$ si $i \neq j$ et de variance unité $\mathbb{E}[\xi_i^2] = 1$ (*homoscédasticité*).
- Attention ! Les Y_i ne sont pas identiquement distribués.
- $\theta = (\boldsymbol{\beta}, \sigma^2) \in \mathbb{R}^d \times \mathbb{R}_+$.

Question : Comment estimer $\theta = (\boldsymbol{\beta}, \sigma)$ dans ce modèle?

Régression gaussienne

- Modèle de régression à design déterministe :

$$Y_i = r(\beta, \mathbf{x}_i) + \sigma \xi_i, \quad \theta \in \Theta \subset \mathbb{R}^d \times \mathbb{R}_+.$$

- Supposons : $\xi_i \sim \mathcal{N}(0, 1)$, i.i.d.
- On a alors le modèle de **régression gaussienne**. Comment estimer θ ? **On sait expliciter la loi de l'observation**
 $Z = (Y_1, \dots, Y_n) \implies$ appliquer le principe du maximum de vraisemblance.
- La loi de Y_i :

$$\begin{aligned} \mathbb{P}^{Y_i}(dy) &= \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma^2}} \exp\left(-\frac{1}{2\sigma^2}(y - r(\beta, \mathbf{x}_i))^2\right) dy \\ &\ll dy. \end{aligned}$$

EMV pour régression gaussienne

- Le modèle $\{\mathbb{P}_\theta^n = \text{loi de } (Y_1, \dots, Y_n), \theta = (\beta, \sigma^2) \in \mathbb{R}^k \times \mathbb{R}_+^*\}$ est **dominé** par $\mu^n(dy_1 \dots dy_n) = dy_1 \dots dy_n$.
- D'où

$$\frac{d\mathbb{P}_\theta^n}{d\mu^n}(y_1, \dots, y_n) = \prod_{i=1}^n \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma^2}} \exp\left(-\frac{1}{2\sigma^2}(y_i - r(\beta, \mathbf{x}_i))^2\right)$$

- La fonction de vraisemblance

$$\mathcal{L}_n(\theta, Y_1, \dots, Y_n) = \frac{1}{(\sqrt{2\pi\sigma^2})^n} \exp\left(-\frac{1}{2\sigma^2} \sum_{i=1}^n (Y_i - r(\beta, \mathbf{x}_i))^2\right)$$

Estimateur des moindres carrés

Maximiser la **vraisemblance** en régression gaussienne

$$\hat{\beta}_n \in \operatorname{argmin}_{b \in \mathbb{R}^k} \sum_{i=1}^n (Y_i - r(b, \mathbf{x}_i))^2$$

$$\hat{\sigma}_n^2 = n^{-1} \sum_{i=1}^n (Y_i - r(\hat{\beta}_n, \mathbf{x}_i))^2$$

- L'estimateur $\hat{\beta}_n$ est appelé l'**estimateur des moindres carrés**. Il peut être appliqué même dans un cas non gaussien.
- **Existence, unicité.**

Droite de régression

- Modèle le plus simple $r(\beta, x) = \beta_0 + \beta_1 x$

$$Y_i = \beta_0 + \beta_1 x_i + \xi_i, \quad i = 1, \dots, n$$

avec $\beta = (\beta_0, \beta_1)^T \in \mathbb{R}^2$ et les (x_1, \dots, x_n) données.

- L'estimateur des moindres carrés :

$$\hat{\beta}_n = (\hat{\beta}_0, \hat{\beta}_1) = \arg \min_{(b_0, b_1) \in \mathbb{R}^2} \sum_{i=1}^n (Y_i - b_0 - b_1 x_i)^2.$$

- Solution explicite

Droite de régression

- Le minimum est caractérisé par les équations

$$\begin{cases} b_0 + b_1 n^{-1} \sum_{i=1}^n x_i &= n^{-1} \sum_{i=1}^n Y_i \\ b_0 n^{-1} \sum_{i=1}^n x_i + b_1 n^{-1} \sum_{i=1}^n x_i^2 &= n^{-1} \sum_{i=1}^n x_i Y_i. \end{cases}$$

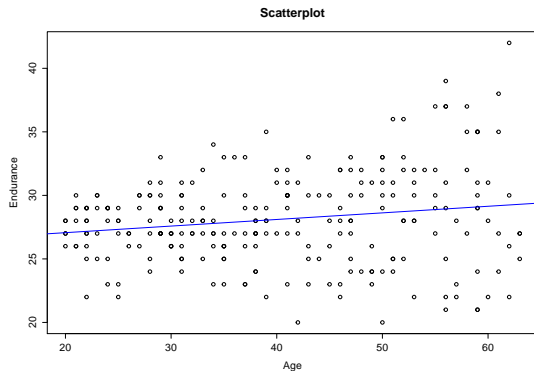
- Notons $\bar{x}_n = n^{-1} \sum_{i=1}^n x_i$. Si le déterminant $\Delta_n \neq 0$ où

$$\Delta_n = \begin{vmatrix} 1 & n^{-1} \sum_{i=1}^n x_i \\ n^{-1} \sum_{i=1}^n x_i & n^{-1} \sum_{i=1}^n x_i^2 \end{vmatrix} = S_{xx} = n^{-1} \sum_{i=1}^n (x_i^2 - \bar{x}_n)^2, \quad ,$$

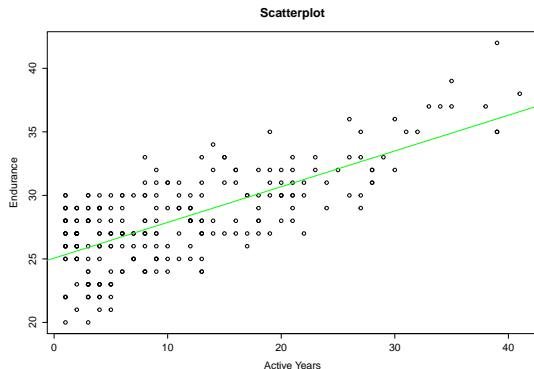
alors ce système d'équations a une solution unique :

$$\begin{cases} \hat{\beta}_{n0} &= \bar{Y}_n - \hat{\beta}_{n1} \bar{x}_n \\ \hat{\beta}_{n1} &= \frac{S_{xy}}{S_{xx}}, \quad S_{xy} = n^{-1} \sum_{i=1}^n (x_i - \bar{x}_n)(Y_i - \bar{Y}_n). \end{cases}$$

Régression linéaire simple



Régression linéaire simple



Régression linéaire multiple (=Modèle linéaire)

- La fonction de régression est $r(\beta, \mathbf{x}_i) = \mathbf{x}_i^T \beta$. On observe

$$(\mathbf{x}_1, Y_1), \dots, (\mathbf{x}_n, Y_n)$$

avec

$$Y_i = \mathbf{x}_i^T \beta + \sigma \xi_i, \quad i = 1, \dots, n$$

où $\theta \in \Theta = \mathbb{R}^k$, $\mathbf{x}_i \in \mathbb{R}^k$.

- Matriciellement

$$\mathbf{Y} = \mathbb{X}\beta + \sigma\xi$$

avec

- $\mathbf{Y} = (Y_1 \cdots Y_n)^T$,
- $\xi = (\xi_1 \cdots \xi_n)^T$
- \mathbb{X} la matrice $(n \times k)$ dont la i -ème ligne est $\mathbb{X}_{i,\cdot} = \mathbf{x}_i^T$.

Régression linéaire multiple (=Modèle linéaire)

- La fonction de régression est $r(\beta, \mathbf{x}_i) = \mathbf{x}_i^T \beta$. On observe

$$(\mathbf{x}_1, Y_1), \dots, (\mathbf{x}_n, Y_n)$$

avec

$$Y_i = \mathbf{x}_i^T \beta + \sigma \xi_i, \quad i = 1, \dots, n$$

où $\theta \in \Theta = \mathbb{R}^k$, $\mathbf{x}_i \in \mathbb{R}^k$.

- Matriciellement

$$\mathbf{Y} = \mathbb{X}\beta + \sigma \boldsymbol{\xi}$$

avec

- $\mathbf{Y} = (Y_1 \cdots Y_n)^T$,
- $\boldsymbol{\xi} = (\xi_1 \cdots \xi_n)^T$
- \mathbb{X} la matrice $(n \times k)$ dont la i -ème ligne est $\mathbb{X}_{i,\cdot} = \mathbf{x}_i^T$.

Régression linéaire multiple (=Modèle linéaire)

- La fonction de régression est $r(\beta, \mathbf{x}_i) = \mathbf{x}_i^T \beta$. On observe

$$(\mathbf{x}_1, Y_1), \dots, (\mathbf{x}_n, Y_n)$$

avec

$$Y_i = \mathbf{x}_i^T \beta + \sigma \xi_i, \quad i = 1, \dots, n$$

où $\theta \in \Theta = \mathbb{R}^k$, $\mathbf{x}_i \in \mathbb{R}^k$.

- Matriciellement

$$\mathbf{Y} = \mathbb{X}\beta + \sigma\xi$$

avec

- $\mathbf{Y} = (Y_1 \cdots Y_n)^T$,
- $\xi = (\xi_1 \cdots \xi_n)^T$
- \mathbb{X} la matrice $(n \times k)$ dont la i -ème ligne est $\mathbb{X}_{i,\cdot} = \mathbf{x}_i^T$.

EMC en régression linéaire multiple

- Estimateur des **moindres carrés** en régression linéaire multiple : tout estimateur $\hat{\beta}_n$ satisfaisant

$$\sum_{i=1}^n (Y_i - \mathbf{x}_i^T \hat{\beta}_n)^2 = \min_{\mathbf{b} \in \mathbb{R}^k} \sum_{i=1}^n (Y_i - \mathbf{x}_i^T \mathbf{b})^2.$$

- En notation matricielle :

$$\begin{aligned} \|\mathbf{Y} - \mathbb{X} \hat{\beta}_n\|^2 &= \min_{\mathbf{b} \in \mathbb{R}^k} \|\mathbf{Y} - \mathbb{X} \mathbf{b}\|^2 \\ &= \min_{\mathbf{v} \in V} \|\mathbf{Y} - \mathbf{v}\|^2 \end{aligned}$$

où $V = \text{Im}(\mathbb{X}) = \{\mathbf{v} \in \mathbb{R}^n : \mathbf{v} = \mathbb{X} \mathbf{b}, \mathbf{b} \in \mathbb{R}^k\}$. **Projection orthogonale sur V .**

Géométrie de l'EMC

- L'EMC vérifie

$$\mathbb{X} \hat{\beta}_n = P_V \mathbf{Y}$$

où P_V est le projecteur orthogonal sur V .

- Comme $\mathbf{Y} - P_V \mathbf{Y} \perp V$, on en déduit les équations normales des moindres carrés :

$$\mathbb{X}^T \mathbb{X} \hat{\beta}_n = \mathbb{X}^T \mathbf{Y}.$$

- Remarques.

- L'EMC est un Z -estimateur.
- **unicité** de $\hat{\beta}_n$ si la matrice de Gram $\mathbb{X}^T \mathbb{X}$ est inversible (la matrice \mathbb{X} est de rang complet).

Géométrie de l'EMC

Proposition

Si $\mathbb{X}^T \mathbb{X}$ (matrice $k \times k$) inversible, alors $\hat{\beta}_n$ est *unique* et

$$\boxed{\hat{\beta}_n = (\mathbb{X}^T \mathbb{X})^{-1} \mathbb{X}^T \mathbf{Y}} = \mathbb{X}^\# \mathbf{Y}$$

Contient le cas précédent de la droite de régression simple.

Géométrie de l'EMC

Proposition

Si $\mathbb{X}^T \mathbb{X}$ (matrice $k \times k$) inversible, alors $\hat{\beta}_n$ est *unique* et

$$\boxed{\hat{\beta}_n = (\mathbb{X}^T \mathbb{X})^{-1} \mathbb{X}^T \mathbf{Y}} = \mathbb{X}^\# \mathbf{Y}$$

Résultat géométrique, *non stochastique*. $\mathbb{X}^T \mathbb{X} \geq 0$; $\mathbb{X}^T \mathbb{X}$ inversible $\iff \mathbb{X}^T \mathbb{X} > 0$;

$$\mathbb{X}^T \mathbb{X} > 0 \iff \text{rang}(\mathbb{X}) = k \iff \dim(V) = k.$$

$$\mathbb{X}^T \mathbb{X} > 0 \implies n \geq k.$$

Géométrie de l'EMC

Supposons $\mathbb{X}^T \mathbb{X} > 0$. Alors, la matrice $n \times n$

$$A = \mathbb{X}(\mathbb{X}^T \mathbb{X})^{-1} \mathbb{X}^T = \mathbb{X} \mathbb{X}^\#$$

est dite **matrice chapeau** (hat matrix).

Proposition

Si $\mathbb{X}^T \mathbb{X} > 0$, alors A est le projecteur sur V : $A = P_V$ et $\text{rang}(A) = k$.

Démonstration.

$A = A^T$, $A = A^2$, donc A est un projecteur. $\text{Im}(A) = V$, donc $A = P_V$; $\text{rang}(P_V) = \dim(V) = k$. □

Géométrie de l'EMC

Supposons $\mathbb{X}^T \mathbb{X} > 0$. Alors, la matrice $n \times n$

$$A = \mathbb{X}(\mathbb{X}^T \mathbb{X})^{-1} \mathbb{X}^T = \mathbb{X} \mathbb{X}^\#$$

est dite **matrice chapeau** (hat matrix).

Proposition

Si $\mathbb{X}^T \mathbb{X} > 0$, alors A est le projecteur sur V : $A = P_V$ et $\text{rang}(A) = k$.

Chapeau, car A génère la prévision de $\mathbb{X}\theta$ notée $\hat{\mathbf{Y}}$:

$$\hat{\mathbf{Y}} = \mathbb{X} \hat{\boldsymbol{\beta}}_n = A \mathbf{Y}.$$

Pseudo-inverse de Moore-Penrose

Soit \mathbb{X} une matrice $n \times k$ avec $k \leq n$. On suppose que \mathbb{X} est de rang k .

- $\mathbb{X}^\# = (\mathbb{X}^T \mathbb{X})^{-1} \mathbb{X}^T$ est la **pseudo-inverse** de Moore-Penrose.
- $\mathbb{X}^\# \mathbb{X} = \text{Id}_k$: \mathbb{X} est un inverse à gauche de la matrice \mathbb{X} .
- $\mathbb{X} \mathbb{X}^\# = \mathbb{X} (\mathbb{X}^T \mathbb{X})^{-1} \mathbb{X}^T$ est le projecteur sur l'espace image (l'espace vectoriel engendré par les colonnes de \mathbb{X}).
- Méthode de calcul : décomposition QR ou décomposition en valeurs singulières.

Hypothèses

$$Y = X\beta + \sigma\xi$$

- 1 X est de rang complet.
- 2 $\mathbb{E}_\theta[\xi] = 0$ pour tout $\theta \in \Theta$ (les erreurs sont centrées)
- 3 La variance des erreurs est constante et les erreurs sont décorrélées $\mathbb{E}_\theta[\xi\xi^T] = \text{Id}_n$ (homoscédasticité)

Hypothèses

$$Y = X\beta + \sigma\xi$$

- 1 X est de rang complet.
- 2 $\mathbb{E}_\theta[\xi] = 0$ pour tout $\theta \in \Theta$ (les erreurs sont centrées)
- 3 La variance des erreurs est constante et les erreurs sont décorrélées $\mathbb{E}_\theta[\xi\xi^T] = \text{Id}_n$ (homoscédasticité)

Hypothèses

$$Y = X\beta + \sigma\xi$$

- 1 X est de rang complet.
- 2 $\mathbb{E}_\theta[\xi] = 0$ pour tout $\theta \in \Theta$ (les erreurs sont centrées)
- 3 La variance des erreurs est constante et les erreurs sont décorrélées $\mathbb{E}_\theta[\xi\xi^T] = \text{Id}_n$ (homoscédasticité)

Estimateur sans biais

Théorème

L'estimateur $\hat{\beta}_n$ est sans biais, i.e. pour tout $\theta \in \Theta$,

- $\mathbb{E}_\theta[\hat{\beta}_n] = \theta$
- $\text{Cov}_\theta(\hat{\beta}_n) = \sigma^2(\mathbb{X}^T \mathbb{X})^{-1}.$

$$\hat{\beta}_n = \mathbb{X}^\# \mathbf{Y} = \beta + \sigma \mathbb{X}^\# \xi.$$

$$\begin{aligned}\mathbb{E}_\theta[\hat{\beta}_n] &= \beta + \sigma \mathbb{X}^\# \mathbb{E}_\theta[\xi] \\ &= \beta\end{aligned}$$

Estimateur sans biais

Théorème

L'estimateur $\hat{\beta}_n$ est sans biais, i.e. pour tout $\theta \in \Theta$,

- $\mathbb{E}_\theta[\hat{\beta}_n] = \theta$
- $\text{Cov}_\theta(\hat{\beta}_n) = \sigma^2(\mathbb{X}^T \mathbb{X})^{-1}$.

$$\hat{\beta}_n = \mathbb{X}^\# \mathbf{Y} = \beta + \sigma \mathbb{X}^\# \boldsymbol{\xi}.$$

$\hat{\beta}_n - \beta = \sigma \mathbb{X}^\# \boldsymbol{\xi}$ ce qui implique

$$\begin{aligned} \text{Cov}_\theta(\hat{\beta}_n) &= \sigma^2 \mathbb{E}_\theta [\{\mathbb{X}^\# \boldsymbol{\xi}\} \{\mathbb{X}^\# \boldsymbol{\xi}\}^T] \\ &= \sigma^2 \{\mathbb{X}^\#\} \{\mathbb{X}^\#\}^T = \sigma^2 (\mathbb{X}^T \mathbb{X})^{-1}. \end{aligned}$$

Erreur de prédiction

■ Erreur de prédiction :

$$\begin{aligned}\hat{\xi} &= \mathbf{Y} - \mathbb{X}\hat{\beta}_n = \mathbf{Y} - \mathbb{X}\mathbb{X}^\# \mathbf{Y} \\ &= (\text{Id}_n - A) \mathbf{Y} \quad \text{car } A = \mathbb{X}\mathbb{X}^\# = \mathbb{X}(\mathbb{X}^T \mathbb{X})^{-1} \mathbb{X}^T\end{aligned}$$

■ Sous \mathbb{P}_θ , $\mathbf{Y} = \mathbb{X}\beta + \sigma\xi$. Donc,

$$\begin{aligned}\hat{\xi} &= (\text{Id}_n - A)\mathbb{X}\beta + \sigma(\text{Id}_n - A)\xi \\ &= \sigma(\text{Id}_n - A)\xi\end{aligned}$$

car $A\mathbb{X} = \mathbb{X}$ (A is the orthogonal projector on the image of \mathbb{X}).

Résidus et variance résiduelle

Theorem

Pour tout $\theta \in \Theta$

- 1 $\mathbb{E}_\theta[\hat{\xi}] = 0.$
- 2 $\text{Cov}_\theta(\hat{\xi}) = \sigma^2(\text{Id}_n - A).$
- 3 $\mathbb{E}_\theta[\hat{Y}] = X\beta.$
- 4 $\text{Cov}_\theta(\hat{\xi}, \hat{Y}) = 0.$

Démonstration.

$$\begin{aligned}\mathbb{E}_\theta[\hat{\xi}] &= \sigma \mathbb{E}_\theta[(\text{Id}_n - A)\xi] \\ &= \sigma(\text{Id}_n - A) \mathbb{E}_\theta[\xi].\end{aligned}$$

Résidus et variance résiduelle

Theorem

Pour tout $\theta \in \Theta$

- 1 $\mathbb{E}_\theta[\hat{\xi}] = 0.$
- 2 $\text{Cov}_\theta(\hat{\xi}) = \sigma^2(\text{Id}_n - A).$
- 3 $\mathbb{E}_\theta[\hat{\mathbf{Y}}] = \mathbb{X}\beta.$
- 4 $\text{Cov}_\theta(\hat{\xi}, \hat{\mathbf{Y}}) = 0.$

Démonstration.

$$\begin{aligned}\text{Cov}_\theta(\hat{\xi}) &= \sigma^2(\text{Id}_n - A) \mathbb{E}_\theta[\xi \xi^T](\text{Id}_n - A) \\ &= \sigma^2(\text{Id}_n - A).\end{aligned}$$

Résidus et variance résiduelle

Theorem

Pour tout $\theta \in \Theta$

- 1 $\mathbb{E}_\theta[\hat{\xi}] = 0.$
- 2 $\text{Cov}_\theta(\hat{\xi}) = \sigma^2(\text{Id}_n - A).$
- 3 $\mathbb{E}_\theta[\hat{\mathbf{Y}}] = \mathbb{X}\beta.$
- 4 $\text{Cov}_\theta(\hat{\xi}, \hat{\mathbf{Y}}) = 0.$

Démonstration.

$$\begin{aligned}\mathbb{E}_\theta[\hat{\mathbf{Y}}] &= \mathbb{E}_\theta[A(\mathbb{X}\beta + \sigma\xi)] \\ &= A\mathbb{X}\beta + \sigma \mathbb{E}_\theta[\xi] \\ &= \mathbb{X}\beta.\end{aligned}$$

Résidus et variance résiduelle

Theorem

Pour tout $\theta \in \Theta$

- 1 $\mathbb{E}_\theta[\hat{\xi}] = 0.$
- 2 $\text{Cov}_\theta(\hat{\xi}) = \sigma^2(\text{Id}_n - A).$
- 3 $\mathbb{E}_\theta[\hat{\mathbf{Y}}] = \mathbb{X}\beta.$
- 4 $\text{Cov}_\theta(\hat{\xi}, \hat{\mathbf{Y}}) = 0.$

Démonstration.

On a $\hat{\mathbf{Y}} - \mathbb{E}_\theta[\hat{\mathbf{Y}}] = \sigma A\xi$ et donc

$$\begin{aligned}\text{Cov}_\theta(\hat{\xi}, \hat{\mathbf{Y}}) &= \sigma^2 \mathbb{E}_\theta[(\text{Id}_n - A)\xi\xi^T A] \\ &= \sigma^2(\text{Id}_n - A)A = 0.\end{aligned}$$

Estimateur sans biais de la variance de l'erreur de prédiction

Théorème

$\hat{\sigma}_n^2 = (n - p)^{-1} \|\hat{\xi}\|^2$ est un estimateur sans biais de la variance de l'erreur.

Démonstration.

$\hat{\xi} = (\text{Id}_n - A) \mathbf{Y} = \sigma(\text{Id}_n - A)\xi$. Comme $(\text{Id}_n - A)^2 = (\text{Id}_n - A)$, nous avons

$$\begin{aligned} \mathbb{E}_\theta[\hat{\sigma}_n^2] &= \sigma^2(n - p)^{-1} \mathbb{E}_\theta[\xi^T (\text{Id}_n - A)\xi] \\ &= \sigma^2(n - p)^{-1} \mathbb{E}_\theta[\text{Tr}((\text{Id}_n - A)\xi\xi^T)] \quad \text{car } \mathbf{u}^T \mathbf{v} = \text{Tr}(\mathbf{v}\mathbf{u}^T) \\ &= \sigma^2(n - p)^{-1} \text{Tr}(\text{Id}_n - A) = \sigma^2. \end{aligned}$$



Coefficient de détermination

■ Pythagore

$$\begin{aligned}\| \mathbf{Y} \|^2 &= \| A \mathbf{Y} \|^2 + \| (\text{Id}_n - A) \mathbf{Y} \|^2 \\ &= \| \hat{\mathbf{Y}} \|^2 + \| \hat{\boldsymbol{\xi}} \|^2\end{aligned}$$

■ Coefficient de détermination

$$\begin{aligned}R^2 &= \frac{\| \hat{\mathbf{Y}} \|^2}{\| \mathbf{Y} \|^2} \\ &= 1 - \frac{\| \hat{\boldsymbol{\xi}} \|^2}{\| \mathbf{Y} \|^2} = 1 - \frac{\text{SCR}}{\text{SCT}}\end{aligned}$$

où **SCR** est la somme des carrés résiduels (RSS : residual sum of squares) et **SCT** est la somme des carrés totaux.

Diagnostic de régression

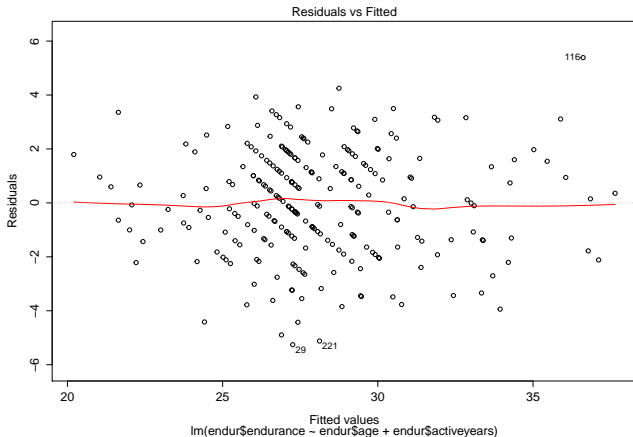
	Min	1Q	Median	3Q	Max
Residuals :	-5.2585	-1.3536	-0.0403	1.4752	5.3874

	Estimate	Std. Error	t value	Pr(> t)
(Intercept)	30.14524	0.45829	65.78	< 2e - 16 * **
age	-0.16728	0.01369	-12.22	< 2e - 16 * **
activeyears	0.43177	0.01823	23.69	< 2e - 16 * **

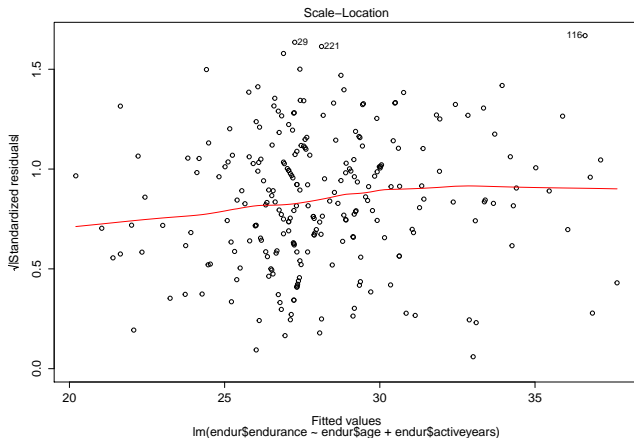
Residual standard error : 1.977 on 247 degrees of freedom

Multiple R-squared : 0.7041, Adjusted R-squared : 0.7017

Diagnostic de régression



Diagnostic de régression



Régression gaussienne

Régression gaussienne : on suppose $\xi \sim \mathcal{N}(0, \text{Id}_n)$. Alors on a plusieurs propriétés remarquables :

- On sait expliciter la loi **exacte** (non-asymptotique !) de $(\hat{\beta}_n, \hat{\sigma}^2)$.
- **Ingrédient** :
 - loi des vecteurs gaussiens sont caractérisés par leur moyenne et matrice de variance-covariance.
 - pour des vecteurs gaussiens, la décorrélation implique l'indépendance.

Cadre gaussien : loi des estimateurs

Proposition

- 1 $\hat{\beta}_n \sim \mathcal{N}(\beta, \sigma^2 (\mathbb{X}^T \mathbb{X})^{-1})$
- 2 $\|(\text{Id}_n - A) \mathbf{Y}\|^2 \sim \sigma^2 \chi^2(n - k)$ *loi du Chi 2 à $n - k$ degrés de liberté*
- 3 $\hat{\beta}_n$ et $(\text{Id}_n - A) \mathbf{Y}$ sont indépendants.

Théorème de Cochran

Théorème

Soit $\mathbf{Y} \sim N(\mu, \sigma^2 \text{Id}_n)$, \mathcal{M} un sous espace de \mathbb{R}^n de dimension k , Π la matrice de projection orthogonale sur \mathcal{M} et $\Pi_\perp = \text{Id}_n - \Pi$ la matrice de projection orthogonale sur \mathcal{M}^\perp . Nous avons

- 1 $\Pi \mathbf{Y} \sim \mathcal{N}(\Pi \mu, \sigma^2 \Pi)$, $\Pi_\perp \mathbf{Y} \sim \mathcal{N}(\Pi_\perp \mu, \sigma^2 \Pi_\perp)$
- 2 les vecteurs $\Pi \mathbf{Y}$ et $\Pi_\perp \mathbf{Y}$ sont indépendants
- 3 $\|\Pi(\mathbf{Y} - \mu)\|^2 / \sigma^2 \sim \chi_k^2$ et $\|\Pi_\perp(\mathbf{Y} - \mu)\|^2 / \sigma^2 \sim \chi_{n-k}^2$.

Théorème de Cochran

Théorème

Soit $\mathbf{Y} \sim N(\mu, \sigma^2 \text{Id}_n)$, \mathcal{M} un sous espace de \mathbb{R}^n de dimension k , Π la matrice de projection orthogonale sur \mathcal{M} et $\Pi_{\perp} = \text{Id}_n - \Pi$ la matrice de projection orthogonale sur \mathcal{M}^{\perp} . Nous avons

- 1 $\Pi \mathbf{Y} \sim \mathcal{N}(\Pi \mu, \sigma^2 \Pi)$, $\Pi_{\perp} \mathbf{Y} \sim \mathcal{N}(\Pi_{\perp} \mu, \sigma^2 \Pi_{\perp})$
- 2 les vecteurs $\Pi \mathbf{Y}$ et $\Pi_{\perp} \mathbf{Y}$ sont indépendants
- 3 $\|\Pi(\mathbf{Y} - \mu)\|^2 / \sigma^2 \sim \chi_k^2$ et $\|\Pi_{\perp}(\mathbf{Y} - \mu)\|^2 / \sigma^2 \sim \chi_{n-k}^2$.

Théorème de Cochran

Théorème

Soit $\mathbf{Y} \sim N(\mu, \sigma^2 \text{Id}_n)$, \mathcal{M} un sous espace de \mathbb{R}^n de dimension k , Π la matrice de projection orthogonale sur \mathcal{M} et $\Pi_{\perp} = \text{Id}_n - \Pi$ la matrice de projection orthogonale sur \mathcal{M}^{\perp} . Nous avons

- 1 $\Pi \mathbf{Y} \sim \mathcal{N}(\Pi \mu, \sigma^2 \Pi)$, $\Pi_{\perp} \mathbf{Y} \sim \mathcal{N}(\Pi_{\perp} \mu, \sigma^2 \Pi_{\perp})$
- 2 les vecteurs $\Pi \mathbf{Y}$ et $\Pi_{\perp} \mathbf{Y}$ sont indépendants
- 3 $\|\Pi(\mathbf{Y} - \mu)\|^2 / \sigma^2 \sim \chi_k^2$ et $\|\Pi_{\perp}(\mathbf{Y} - \mu)\|^2 / \sigma^2 \sim \chi_{n-k}^2$.

Cadre gaussien : loi des estimateurs

Proposition

- 1 $\hat{\beta}_n \sim \mathcal{N}(\beta, \sigma^2 (\mathbb{X}^T \mathbb{X})^{-1})$
- 2 $\|(\text{Id}_n - A) \mathbf{Y}\|^2 \sim \sigma^2 \chi^2(n - k)$ loi du Chi 2 à $n - k$ degrés de liberté
- 3 $\hat{\beta}_n$ et $(\text{Id}_n - A) \mathbf{Y}$ sont indépendants.

- Définition : $\hat{\beta}_n = \mathbb{X}^\# \mathbf{Y}$ et $\mathbf{Y} \sim N(\mathbb{X}\beta, \sigma^2 \text{Id}_n)$.
- $\hat{\beta}_n \sim N(\mathbb{X}^\# \mathbb{X} \beta, \sigma^2 \{\mathbb{X}^\#\} \{\mathbb{X}^\#\}^T)$
- On conclut en remarquant $\mathbb{X}^\# \mathbb{X} = \text{Id}_k$ et $\{\mathbb{X}^\#\} \{\mathbb{X}^\#\}^T = (\mathbb{X}^T \mathbb{X})^{-1}$

Cadre gaussien : loi des estimateurs

Proposition

- 1 $\hat{\beta}_n \sim \mathcal{N}(\beta, \sigma^2 (\mathbb{X}^T \mathbb{X})^{-1})$
- 2 $\|(\text{Id}_n - A) \mathbf{Y}\|^2 \sim \sigma^2 \chi^2(n - k)$ *loi du Chi 2 à $n - k$ degrés de liberté*
- 3 $\hat{\beta}_n$ et $(\text{Id}_n - A) \mathbf{Y}$ sont indépendants.

Application directe de Cochran en remarquant que

$$(\text{Id}_n - A) \mathbb{E}_\theta[\mathbf{Y}] = (\text{Id}_n - A) \mathbf{X} \beta = 0.$$

Cadre gaussien : loi des estimateurs

Proposition

- 1 $\hat{\beta}_n \sim \mathcal{N}(\beta, \sigma^2 (\mathbb{X}^T \mathbb{X})^{-1})$
- 2 $\|(\text{Id}_n - A) \mathbf{Y}\|^2 \sim \sigma^2 \chi^2(n - k)$ loi du Chi 2 à $n - k$ degrés de liberté
- 3 $\hat{\beta}_n$ et $(\text{Id}_n - A) \mathbf{Y}$ sont indépendants.

- Le théorème de Cochran montre que $A \mathbf{Y}$ et $(\text{Id}_n - A) \mathbf{Y}$ sont indépendants.
- On conclut en remarquant que $\hat{\beta}_n = \mathbb{X}^\# \mathbf{Y} = \mathbb{X}^\# A \mathbf{Y}$.

Estimateur de la variance σ^2 : cadre gaussien

$$\hat{\sigma}_n^2 = \frac{\|(\text{Id}_n - A) \mathbf{Y}\|^2}{n - k} = \frac{1}{n - k} \sum_{i=1}^n (Y_i - \mathbf{x}_i^T \hat{\boldsymbol{\beta}}_n)^2$$

D'après la dernière Proposition :

- $\hat{\sigma}_n^2 / \sigma^2 \sim \chi^2(n - k)$ loi du Chi 2 à $n - k$ degrés de liberté
- C'est un estimateur sans biais :

$$\mathbb{E}_\theta [\hat{\sigma}_n^2] = \sigma^2.$$

- $\hat{\sigma}_n^2$ est indépendant de $\hat{\boldsymbol{\beta}}_n$.

Lois des coordonnées de $\hat{\beta}_n$: cadre gaussien

$$\hat{\beta}_{nj} - \beta_j \sim \mathcal{N}(0, \sigma^2 b_j)$$

où b_j est le j ème élément diagonal de $(\mathbb{X}^T \mathbb{X})^{-1}$.

$$\frac{\hat{\beta}_{nj} - \beta_j}{\hat{\sigma}_n \sqrt{b_j}} \sim t_{n-k}$$

loi de Student à $n - k$ degrés de liberté.

$$t_q = \frac{\xi}{\sqrt{\eta/q}}$$

où $q \geq 1$ un entier, $\xi \sim \mathcal{N}(0, 1)$, $\eta \sim \chi^2(q)$ et ξ **indépendant** de η .

Prévion

Modèle de régression

$$Y_i = r(\beta, \mathbf{x}_i) + \sigma \xi_i, \quad i = 1, \dots, n.$$

Régression **linéaire** : $r(\beta, \mathbf{x}_i) = \beta^T \mathbf{x}_i$.

- **Problème de prévion** : Donner la prévion de la valeur de fonction de régression $r(\beta, \mathbf{x}) = \beta^T \mathbf{x}$
- Soit $\hat{\beta}_n$ un estimateur de β . **Prévion par substitution** :

$$\hat{Y}(\mathbf{x}) = r(\hat{\beta}_n, \mathbf{x}).$$

- Question statistique : quelle est la qualité de la prévion ?
Intervalle de confiance pour $r(\hat{\beta}_n, \mathbf{x})$?

Moyenne et variance de la prévision

Theorem

- $\mathbb{E}_\theta[\hat{Y}_n(\mathbf{x})] = \mathbf{x}^T \boldsymbol{\beta}$
- $\text{Var}_\theta(\hat{Y}_n(\mathbf{x})) = \sigma^2 \mathbf{x}^T (\mathbb{X}^T \mathbb{X})^{-1} \mathbf{x}$
- $\mathbb{E}_\theta[(Y(\mathbf{x}) - \hat{Y}_n(\mathbf{x}))^2] = \sigma^2(1 + \mathbf{x}'(\mathbb{X}^T \mathbb{X})^{-1} \mathbf{x})$

$$\hat{Y}_n(\mathbf{x}) = \mathbf{x}^T \hat{\boldsymbol{\beta}}_n \text{ et } \mathbb{E}_\theta[\hat{\boldsymbol{\beta}}_n] = \boldsymbol{\beta}$$

Moyenne et variance de la prédiction

Theorem

- $\mathbb{E}_\theta[\hat{Y}_n(\mathbf{x})] = \mathbf{x}^T \boldsymbol{\beta}$
- $\text{Var}_\theta(\hat{Y}_n(\mathbf{x})) = \sigma^2 \mathbf{x}^T (\mathbb{X}^T \mathbb{X})^{-1} \mathbf{x}$
- $\mathbb{E}_\theta[(Y(\mathbf{x}) - \hat{Y}_n(\mathbf{x}))^2] = \sigma^2(1 + \mathbf{x}'(\mathbb{X}^T \mathbb{X})^{-1} \mathbf{x})$

$$\begin{aligned} \hat{Y}_n(\mathbf{x}) - \mathbf{x}^T \boldsymbol{\beta} &= \mathbf{x}^T \mathbb{X}^\# \mathbf{Y} - \mathbf{x}^T \boldsymbol{\beta} \\ &= \mathbf{x}^T \mathbb{X}^\# (\mathbb{X} \boldsymbol{\beta} + \sigma \boldsymbol{\xi}) - \mathbf{x}^T \boldsymbol{\beta} = \sigma \mathbf{x}^T \mathbb{X}^\# \boldsymbol{\xi} \end{aligned}$$

car $\mathbb{X}^\# \mathbb{X} = I$. Par conséquent, comme $\mathbf{X}^\# \{\mathbf{X}^\#\}^T = (\mathbf{X}^T \mathbf{X})^{-1}$,

$$\text{Var}_\theta(\hat{Y}_n(\mathbf{x})) = \sigma^2 \mathbf{x}^T \mathbb{X}^\# \mathbb{E}_\theta[\boldsymbol{\xi} \boldsymbol{\xi}^T] \{\mathbb{X}^\#\}^T \mathbf{x}$$

Moyenne et variance de la prévision

Theorem

- $\mathbb{E}_\theta[\hat{Y}_n(\mathbf{x})] = \mathbf{x}^T \boldsymbol{\beta}$
- $\text{Var}_\theta(\hat{Y}_n(\mathbf{x})) = \sigma^2 \mathbf{x}^T (\mathbb{X}^T \mathbb{X})^{-1} \mathbf{x}$
- $\mathbb{E}_\theta[(Y(\mathbf{x}) - \hat{Y}_n(\mathbf{x}))^2] = \sigma^2(1 + \mathbf{x}'(\mathbb{X}^T \mathbb{X})^{-1} \mathbf{x})$

$$\begin{aligned}\mathbb{E}_\theta[(Y(\mathbf{x}) - \hat{Y}_n(\mathbf{x}))^2] &= \mathbb{E}_\theta[(Y(\mathbf{x}) - \mathbb{E}_\theta[\hat{Y}_n(\mathbf{x})])^2] + \text{Var}_\theta(\hat{Y}_n(\mathbf{x})) \\ &= \mathbb{E}_\theta[(Y(\mathbf{x}) - \mathbf{x}^T \boldsymbol{\beta})^2] + \sigma^2 \mathbf{x}^T (\mathbb{X}^T \mathbb{X})^{-1} \mathbf{x}\end{aligned}$$

Préviation : modèle linéaire gaussienne

Proposition

Supposons que $\boldsymbol{\xi} \sim \mathcal{N}(0, \sigma^2 \text{Id}_n)$.

- 1 $\hat{Y}(\mathbf{x}) \sim \mathcal{N}(\mathbf{x}^T \boldsymbol{\beta}, \sigma^2 \mathbf{x}^T (\mathbb{X}^T \mathbb{X})^{-1} \mathbf{x})$
- 2 $\hat{Y}(\mathbf{x})$ et $(\text{Id}_n - A) \mathbf{Y}$ sont indépendants.

Prévion : modèle linéaire gaussienne

- D'après la Proposition,

$$\eta := \frac{\hat{Y}(\mathbf{x}) - \mathbf{x}^T \boldsymbol{\beta}}{\sqrt{\sigma^2 \mathbf{x}^T (\mathbb{X}^T \mathbb{X})^{-1} \mathbf{x}}} \sim \mathcal{N}(0, 1).$$

- On replace σ^2 inconnu par $\hat{\sigma}_n^2 = \|(\text{Id}_n - A) \mathbf{Y}\|^2 / (n - k)$.
- t -statistique :

$$t := \frac{\hat{Y}(\mathbf{x}) - \mathbf{x}^T \boldsymbol{\beta}}{\sqrt{\hat{\sigma}_n^2 \mathbf{x}^T (\mathbb{X}^T \mathbb{X})^{-1} \mathbf{x}}} = \frac{\eta}{\sqrt{\chi / (n - k)}} \sim t_{n-k},$$

loi de Student à $n - k$ degrés de liberté, car $\eta \sim \mathcal{N}(0, 1)$,
 $\chi := \|\mathbf{Y} - \mathbb{X} \hat{\boldsymbol{\beta}}_n\|^2 / \sigma^2 \sim \chi^2(n - k)$ et $\eta \perp \chi$.

Prévion : intervalle de confiance

$$\begin{aligned} \mathbb{P} \left(-q_{1-\frac{\alpha}{2}}(t_{n-k}) \leq \frac{\hat{Y} - \mathbf{x}^T \boldsymbol{\beta}}{\sqrt{\hat{\sigma}_n^2 \mathbf{x}^T (\mathbb{X}^T \mathbb{X})^{-1} \mathbf{x}}} \leq q_{1-\frac{\alpha}{2}}(t_{n-k}) \right) \\ = \mathbb{P}(-q_{1-\frac{\alpha}{2}}(t_{n-k}) \leq t \leq q_{1-\frac{\alpha}{2}}(t_{n-k})) = 1 - \alpha. \end{aligned}$$

\implies **intervalle de confiance** de niveau $1 - \alpha$ pour $r(\boldsymbol{\beta}, \mathbf{x}) = \mathbf{x}^T \boldsymbol{\beta}$ est $[r_L, r_U]$, où :

$$\begin{aligned} r_L &= \hat{Y} - q_{1-\frac{\alpha}{2}}(t_{n-k}) \sqrt{\hat{\sigma}_n^2 \mathbf{x}^T (\mathbb{X}^T \mathbb{X})^{-1} \mathbf{x}}, \\ r_U &= \hat{Y} + q_{1-\frac{\alpha}{2}}(t_{n-k}) \sqrt{\hat{\sigma}_n^2 \mathbf{x}^T (\mathbb{X}^T \mathbb{X})^{-1} \mathbf{x}}. \end{aligned}$$

Limites des moindres carrés et du cadre gaussien

- Calcul **explicite** (et efficace) de l'EMC limité à une fonction de régression **linéaire**.
- Modèle linéaire donne un cadre assez général :
 - Modèle polynomial,
 - **Modèles avec interactions...**
- **Hypothèse de gaussianité** = cadre asymptotique implicite.
- Besoin d'outils pour les modèles à réponse **Y discrète**.

Régression linéaire non-gaussienne

Modèle de régression linéaire

$$Y_i = \theta^T \mathbf{x}_i + \xi_i, \quad i = 1, \dots, n.$$

- Hyp. 1' : ξ_i i.i.d., $\mathbb{E}[\xi_i] = 0$, $\mathbb{E}[\xi_i^2] = \sigma^2 > 0$.
- Hyp. 2' : $\mathbb{X}^T \mathbb{X} > 0$, $\lim_n \max_{1 \leq i \leq n} \mathbf{x}_i^T (\mathbb{X}^T \mathbb{X})^{-1} \mathbf{x}_i = 0$.

Proposition (Normalité asymptotique de l'EMC)

$$\sigma^{-1} (\mathbb{X}^T \mathbb{X})^{1/2} (\hat{\beta}_n - \beta) \xrightarrow{d} \mathcal{N}(0, \text{Id}_k), \quad n \rightarrow \infty.$$

- A comparer avec le cadre gaussien :

$$\sigma^{-1} (\mathbb{X}^T \mathbb{X})^{1/2} (\hat{\beta}_n - \theta) \sim \mathcal{N}(0, \text{Id}_k) \text{ pour tout } n.$$

Régression non-linéaire

On observe

$$(\mathbf{x}_1, Y_1), \dots, (\mathbf{x}_n, Y_n),$$

où

$$Y_i = r(\beta, \mathbf{x}_i) + \sigma \xi_i, \quad i = 1, \dots, n$$

avec $\mathbf{x}_i \in \mathbb{R}^k$, et $\beta \in \Theta \subset \mathbb{R}^d$, $\sigma \in \mathbb{R}^+$.

Si $\xi_i \sim_{\text{i.i.d.}} \mathcal{N}(0, 1)$, la fonction de vraisemblance est donnée par

$$\mathcal{L}_n(\theta, Y_1, \dots, Y_n) \propto \exp \left(-\frac{1}{2\sigma^2} \sum_{i=1}^n (Y_i - r(\beta, \mathbf{x}_i))^2 \right)$$

Régression non-linéaire

On observe

$$(\mathbf{x}_1, Y_1), \dots, (\mathbf{x}_n, Y_n),$$

où

$$Y_i = r(\beta, \mathbf{x}_i) + \sigma \xi_i, \quad i = 1, \dots, n$$

avec $\mathbf{x}_i \in \mathbb{R}^k$, et $\beta \in \Theta \subset \mathbb{R}^d$, $\sigma \in \mathbb{R}^+$.

L'estimateur du **maximum de vraisemblance** $\hat{\beta}_n$ de β est obtenu en minimisant la fonction

$$b \rightsquigarrow \sum_{i=1}^n (Y_i - r(b, \mathbf{x}_i))^2.$$

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

$$\hat{\sigma}_n^2 = n^{-1} \sum_{i=1}^n (Y_i - r(\hat{\beta}_n, \mathbf{x}_i))^2.$$

Moindre carrés non-linéaires

Definition

- *M-estimateur associé à la **fonction de contraste***
 $\psi : \Theta \times \mathbb{R}^k \times \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R} : \text{tout estimateur } \hat{\beta}_n \text{ satisfaisant}$

$$\sum_{i=1}^n \psi(\hat{\beta}_n, \mathbf{x}_i, Y_i) = \max_{b \in \Theta} \sum_{i=1}^n \psi(b, \mathbf{x}_i, Y_i).$$

- *Estimateur des **moindres carrés non-linéaires** : associé au contraste $\psi(b, \mathbf{x}, y) = (y - r(b, \mathbf{x}))^2$.*

- **Extension** des résultats en densité \rightarrow théorèmes limites pour des sommes de v.a. indépendantes **non-équidistribuées**.

Modèle à réponse binaire

- On observe

$$(\mathbf{x}_1, Y_1), \dots, (\mathbf{x}_n, Y_n), \quad Y_i \in \{0, 1\}, \quad \mathbf{x}_i \in \mathbb{R}^k.$$

- Modélisation via la fonction de régression

$$\mathbf{x} \rightsquigarrow p_{\mathbf{x}}(\theta) = \mathbb{E}_{\theta} [Y | \mathbf{X} = \mathbf{x}] = \mathbb{P}_{\theta} [Y = 1 | \mathbf{X} = \mathbf{x}]$$

- Représentation

$$\begin{aligned} Y_i &= p_{\mathbf{x}_i}(\theta) + (Y_i - p_{\mathbf{x}_i}(\theta)) \\ &= r(\theta, \mathbf{x}_i) + \xi_i \end{aligned}$$

avec $r(\theta, \mathbf{x}_i) = p_{\mathbf{x}_i}(\theta)$ et $\xi_i = Y_i - p_{\mathbf{x}_i}(\theta)$.

- $\mathbb{E}_{\theta} [\xi_i] = 0$ mais structure des ξ_i compliquée (dépendance en θ).

Modèle à réponse discrète

- Y_i v.a. de Bernoulli de paramètre $p_{\mathbf{x}_i}(\theta)$.

Vraisemblance

$$\mathcal{L}_n(\theta, Y_1, \dots, Y_n) = \prod_{i=1}^n p_{\mathbf{x}_i}(\theta)^{Y_i} (1 - p_{\mathbf{x}_i}(\theta))^{1-Y_i}$$

→ méthodes de résolution numérique.

- **Régression logistique** (très utile dans les applications)

$$p_{\mathbf{x}}(\theta) = \psi(\mathbf{x}^T \theta),$$

$$\psi(t) = \frac{e^t}{1 + e^t}, \quad t \in \mathbb{R} \quad \text{fonction logistique.}$$

Régression logistique et modèles latents

- Représentation équivalente de la régression logistique : on observe

$$Y_i = 1_{\{Y_i^* > 0\}}, \quad i = 1, \dots, n$$

(les \mathbf{x}_i sont donnés), et Y_i^* est une **variable latente** ou cachée,

$$Y_i^* = \theta^T \mathbf{x}_i + U_i, \quad i = 1, \dots, n$$

avec $U_i \sim \text{i.i.d. } F$, où

$$F(t) = \frac{1}{1 + e^{-t}}, \quad t \in \mathbb{R}.$$

■

$$\begin{aligned} \mathbb{P}_\theta [Y_i^* > 0] &= \mathbb{P}_\theta [\mathbf{x}_i^T \theta + U_i > 0] \\ &= 1 - \mathbb{P}_\theta [U_i \leq -\mathbf{x}_i^T \theta] \end{aligned}$$