MAP 433 : Introduction aux méthodes statistiques. Cours 5

7 mars 2014

Aujourd'hui

1. Méthode d'estimation dans le modèle de régression
   - Modèle de régression, notion de « design »
   - Régression à design déterministe
   - La droite des moindres carrés
   - Régression linéaire multiple
   - Le cas gaussien
   - Modèle linéaire gaussien
2. Sélection de variables
   - Backward Stepwise Regression
   - LASSO
3. Régression non-linéaire
4. Bilan provisoire : modèles paramétriques dominés

Influence d'une variable sur une autre

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

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

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

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

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

Modélisation de l'influence

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

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

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

- Alternative : représentation précédente avec erreur additive : on postule

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

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

Motivation : meilleure approximation L^2

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

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

- où

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

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

Régression

- On définit :

$$\xi = Y - \mathbb{E}\left[Y \middle| \boldsymbol{X}\right] \implies \mathbb{E}\left[\xi\right] = 0.$$

- On a alors naturellement la représentation désirée

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

si l'on pose

$$\boxed{r(\boldsymbol{x}) = \mathbb{E}\left[Y \middle| \boldsymbol{X} = \boldsymbol{x}\right], \ \ \boldsymbol{x} \in \mathbb{R}^k}$$

- On observe alors un n-échantillon

$$(\boldsymbol{X}_1, Y_1), \ldots, (\boldsymbol{X}_n, Y_n)$$

où

$$Y_i = r(\boldsymbol{X}_i) + \xi_i, \ \ \mathbb{E}\left[\xi_i\right] = 0$$

avec comme paramètre la fonction $r(\cdot)+$ un jeu d'hypothèses sur la loi des ξ_i.

Modèle de régression à design aléatoire

Définition

Modèle de régression **à design aléatoire** = *donnée de l'observation*

$$(\boldsymbol{X}_1, Y_1), \ldots, (\boldsymbol{X}_n, Y_n)$$

avec $(Y_i, \boldsymbol{X}_i) \in \mathbb{R} \times \mathbb{R}^k$ *i.i.d., et*

$$Y_i = r(\vartheta, \boldsymbol{X}_i) + \xi_i, \quad \mathbb{E}\left[\xi_i | \boldsymbol{X}_i\right] = 0, \quad \vartheta \in \Theta \subset \mathbb{R}^d.$$

- $\boldsymbol{x} \rightsquigarrow r(\vartheta, \boldsymbol{x})$ *fonction de régression, connue au paramètre* ϑ *près.*
- $\boldsymbol{X}_i$ = *variables explicatives, co-variables, prédicteurs ;* $(\boldsymbol{X}_1, \ldots, \boldsymbol{X}_n)$ = **design**.

Modèle alternatif : signal+bruit

- Principe : sur un exemple. On observe

$$Y_i = r(\vartheta, i/n) + \xi_i, \quad i = 1, \ldots, n$$

où $r(\vartheta, \cdot) : [0,1] \to \mathbb{R}$ est une fonction connue au paramètre $\vartheta \in \Theta \subset \mathbb{R}^d$ près, et les ξ_i sont i.i.d., $\mathbb{E}\left[\xi_i\right] = 0$.

- But : reconstruire $r(\vartheta, \cdot)$ c'est-à-dire estimer ϑ.
- Plus généralement, on observe

$$Y_i = r(\vartheta, \boldsymbol{x}_i) + \xi_i, \; i = 1, \ldots, n$$

où $\boldsymbol{x}_1, \ldots, \boldsymbol{x}_n$ sont des points de $\mathbb{R}^k$ déterministes.

Modèle de régression à design déterministe

Définition

Modèle de régression **à design déterministe** $=$ *donnée de l'observation*

$$(\boldsymbol{x}_1, Y_1), \ldots, (\boldsymbol{x}_n, Y_n)$$

avec $Y_i \in \mathbb{R}, \boldsymbol{x}_i \in \mathbb{R}^k$, *et*

$$Y_i = r(\vartheta, \boldsymbol{x}_i) + \xi_i, \;\; \mathbb{E}\left[\xi_i\right] = 0, \;\; \vartheta \in \Theta \subset \mathbb{R}^d.$$

- $\boldsymbol{x}_i$ *déterministes, donnés (ou choisis) : plan d'expérience, points du « design ».*
- *Hypothèses sur les* ξ_i *: à débattre. Pour simplifier, les* ξ_i *sont i.i.d. (hypothèse restrictive).*
- *Attention ! Les* Y_i *ne sont pas identiquement distribuées.*

Question : Comment estimer ϑ dans ce modèle ?

Régression gaussienne

- Modèle de régression à design déterministe :

$$Y_i = r(\vartheta, \boldsymbol{x}_i) + \xi_i, \quad \vartheta \in \Theta \subset \mathbb{R}^d \,.$$

- Supposons : $\xi_i \sim \mathcal{N}(0, \sigma^2)$, i.i.d.
- On a alors le modèle de régression gaussienne. Comment estimer ϑ ? On sait expliciter la loi de l'observation $Z = (Y_1, \ldots, Y_n) \Longrightarrow$ appliquer le principe du maximum de vraisemblance.
- La loi de Y_i :

$$\mathbb{P}^{Y_i}(dy) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma^2}} \exp\big(-\frac{1}{2\sigma^2}(y - r(\vartheta, \boldsymbol{x}_i))^2\big)\,dy \\ \ll dy.$$

EMV pour régression gaussienne

- Le modèle $\{\mathbb{P}_\vartheta^n = \text{loi de } (Y_1, \ldots, Y_n), \vartheta \in \mathbb{R}^k\}$ est dominé par $\mu^n(dy_1 \ldots dy_n) = dy_1 \ldots dy_n$.
- D'où

$$\frac{d\,\mathbb{P}_\vartheta^n}{d\mu^n}(y_1, \ldots, y_n) = \prod_{i=1}^n \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma^2}} \exp\Big(-\frac{1}{2\sigma^2}(y_i - r(\vartheta, \boldsymbol{x}_i))^2 \Big)$$

$$= \frac{1}{(\sqrt{2\pi\sigma^2})^n} \exp\Big(-\frac{1}{2\sigma^2} \sum_{i=1}^n \big(y_i - r(\vartheta, \boldsymbol{x}_i)\big)^2 \Big).$$

- La fonction de vraisemblance

$$\boxed{\mathcal{L}_n(\vartheta, Y_1, \ldots, Y_n) \propto \exp\Big(-\frac{1}{2\sigma^2} \sum_{i=1}^n \big(Y_i - r(\vartheta, \boldsymbol{x}_i)\big)^2 \Big)}$$

Estimateur des moindres carrés

Maximiser la vraisemblance en régression gaussienne = minimiser la somme des carrés :

$$\sum_{i=1}^{n} \left(Y_i - r(\vartheta, \boldsymbol{x}_i)\right)^2 \to \min_{\vartheta \in \Theta}.$$

Définition

Estimateur des moindres carrés : tout estimateur $\widehat{\vartheta}_{\mathrm{n}}^{\,\mathtt{mc}}$ t.q.

$$\widehat{\vartheta}_{\mathrm{n}}^{\,\mathtt{mc}} \in \arg\min_{\vartheta \in \Theta} \sum_{i=1}^{n} \left(Y_i - r(\vartheta, \boldsymbol{x}_i)\right)^2.$$

- L'EMC est un M-estimateur. Pour le modèle de régression gaussienne : $\boxed{\mathrm{EMV} = \mathrm{EMC}}$.
- Existence, unicité.
- Propriétés remarquables si la régression est linéaire : $r(\vartheta, \boldsymbol{x}_i) = \vartheta^T \boldsymbol{x}_i$.

Droite de régression

- Modèle le plus simple $\boxed{r(\vartheta, x) = a + bx}$

$$\boxed{Y_i = a + b\,x_i + \xi_i, \quad i = 1, \ldots, n}$$

avec $\vartheta = (a, b)^T \in \Theta = \mathbb{R}^2$ et les $(x_1, \ldots, x_n)$ donnés.

- L'estimateur des moindres carrés :

$$\widehat{\vartheta}_{\mathtt{n}}^{\mathtt{mc}} = (\hat{a}, \hat{b}) = \arg \min_{(a,b)\in\mathbb{R}^2} \sum_{i=1}^{n} \big(Y_i - a - bx_i\big)^2.$$

- Solution explicite existe toujours, sauf cas pathologique quand tous les x_i sont les mêmes (Poly, page 112).

Régression linéaire simple

Régression linéaire simple

Régression linéaire multiple (=Modèle linéaire)

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

$$(\boldsymbol{x}_1, Y_1), \ldots, (\boldsymbol{x}_n, Y_n)$$

avec

$$\boxed{Y_i = \vartheta^T \boldsymbol{x}_i + \xi_i, \quad i = 1, \ldots, n}$$

où $\vartheta \in \Theta = \mathbb{R}^k, \quad \boldsymbol{x}_i \in \mathbb{R}^k$.

- Matriciellement

$$\boxed{\boldsymbol{Y} = \mathbb{M}\vartheta + \boldsymbol{\xi}}$$

avec $\boldsymbol{Y} = (Y_1 \cdots Y_n)^T$, $\boldsymbol{\xi} = (\xi_1 \cdots \xi_n)^T$ et $\mathbb{M}$ la matrice $(n \times k)$ dont les lignes sont les $\boldsymbol{x}_i$.

EMC en régression linéaire multiple

- Estimateur des moindres carrés en régression linéaire multiple : tout estimateur $\widehat{\vartheta}_{\mathsf{n}}^{\,\mathtt{mc}}$ satisfaisant

$$\sum_{i=1}^{n} \left(Y_i - (\widehat{\vartheta}_{\mathsf{n}}^{\,\mathtt{mc}})^T \boldsymbol{x}_i\right)^2 = \min_{\vartheta \in \mathbb{R}^k} \sum_{i=1}^{n} \left(Y_i - \vartheta^T \boldsymbol{x}_i\right)^2.$$

- En notation matricielle :

$$\begin{aligned} \|\boldsymbol{Y} - \mathbb{M}\,\widehat{\vartheta}_{\mathsf{n}}^{\,\mathtt{mc}}\|^2 &= \min_{\vartheta \in \mathbb{R}^k} \|\boldsymbol{Y} - \mathbb{M}\,\vartheta\|^2 \\ &= \min_{v \in V} \|\boldsymbol{Y} - v\|^2 \end{aligned}$$

où $V = \mathrm{Im}(\mathbb{M}) = \{v \in \mathbb{R}^n : v = \mathbb{M}\,\vartheta,\ \vartheta \in \mathbb{R}^k\}$.
Projection orthogonale sur V.

Géométrie de l'EMC

- L'EMC vérifie
$$\boxed{\mathbb{M}\,\widehat{\vartheta}_{\mathsf{n}}^{\,\mathtt{mc}} = P_V\,\boldsymbol{Y}}$$
où P_V est le projecteur orthogonal sur V.
- Mais $\mathbb{M}^T P_V = \mathbb{M}^T P_V^T = (P_V\,\mathbb{M})^T = \mathbb{M}^T$. On en déduit les équations normales des moindres carrés :
$$\boxed{\mathbb{M}^T\,\mathbb{M}\,\widehat{\vartheta}_{\mathsf{n}}^{\,\mathtt{mc}} = \mathbb{M}^T\,\boldsymbol{Y}.}$$
- Remarques.
  - L'EMC est un Z-estimateur.
  - Pas d'unicité de $\widehat{\vartheta}_{\mathsf{n}}^{\,\mathtt{mc}}$ si la matrice $\mathbb{M}^T\,\mathbb{M}$ n'est pas inversible.

Géométrie de l'EMC

Proposition

Si $\mathbb{M}^T \mathbb{M}$ (matrice $k \times k$) inversible, alors $\widehat{\vartheta}_{\mathsf{n}}^{\mathtt{mc}}$ est unique et

$$\boxed{\widehat{\vartheta}_{\mathsf{n}}^{\mathtt{mc}} = \left(\mathbb{M}^T \mathbb{M}\right)^{-1} \mathbb{M}^T \boldsymbol{Y}}$$

- Contient le cas précédent de la droite de régression simple.
- Résultat géometrique, non stochastique.
- $\mathbb{M}^T \mathbb{M} \geq 0$; $\mathbb{M}^T \mathbb{M}$ inversible $\Longleftrightarrow \mathbb{M}^T \mathbb{M} > 0$;

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

$$\mathbb{M}^T \mathbb{M} > 0 \quad \Longrightarrow \quad n \geq k.$$

Géométrie de l'EMC

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

$$A = \mathbb{M}\left(\mathbb{M}^T\mathbb{M}\right)^{-1}\mathbb{M}^T$$

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

Proposition

Si $\mathbb{M}^T\mathbb{M} > 0$, *alors* A *est le projecteur sur* V *:*

$$A = P_V$$

et $\mathrm{rang}(A) = k$.

Preuve :

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

« Chapeau », car A génère la prévison de $\mathbb{M}\vartheta$ notée $\widehat{\boldsymbol{Y}}$:

$$\widehat{\boldsymbol{Y}} = \mathbb{M}\,\widehat{\vartheta}_{\mathtt{n}}^{\mathtt{mc}} = A\boldsymbol{Y}.$$

Régression gaussienne

Régression gaussienne : on suppose $\boldsymbol{\xi} \sim \mathcal{N}(0, \sigma^2 \mathrm{Id}_n)$. Alors on a plusieurs proriétés remarquables :

- Estimateur des moindres carrés $\widehat{\vartheta}_{\mathsf{n}}^{\,\mathtt{mc}}$ et estimateur du maximum de vraisemblance coïncident.

  Preuve : écriture de la fonction de vraisemblance.

- On sait expliciter la loi exacte (non-asymptotique !) de $\widehat{\vartheta}_{\mathsf{n}}^{\,\mathtt{mc}}$.

  Ingrédient : loi des vecteurs gaussiens sont caractérisés par leur moyenne et matrice de variance-covariance.

Cadre gaussien : loi des estimateurs

- Hyp. 1 : $\boldsymbol{\xi} \sim \mathcal{N}(0, \sigma^2 \mathrm{Id}_n)$.
- Hyp. 2 : $\mathbb{M}^T \mathbb{M} > 0$.

Proposition

(i) $\widehat{\vartheta}_n^{\,\mathtt{mc}} \sim \mathcal{N}\big(\vartheta, \sigma^2 \big(\mathbb{M}^T \mathbb{M}\big)^{-1}\big)$

(ii) $\| \boldsymbol{Y} - \mathbb{M}\, \widehat{\vartheta}_n^{\,\mathtt{mc}} \|^2 \sim \sigma^2 \chi^2(n-k)$ *loi du Chi 2 à $n-k$ degrés de liberté*

(iii) $\widehat{\vartheta}_n^{\,\mathtt{mc}}$ *et* $\boldsymbol{Y} - \mathbb{M}\, \widehat{\vartheta}_n^{\,\mathtt{mc}}$ *sont indépendants.*

- Preuve : Thm. de Cochran (Poly, page 18). Si $\boldsymbol{\xi} \sim \mathcal{N}(0, \mathrm{Id}_n)$ et A_j matrices $n \times n$ projecteurs t.q. $A_j A_i = 0$ pour $i \neq j$, alors : $A_j \boldsymbol{\xi} \sim \mathcal{N}\big(0, A_j\big)$, indépendants, $\|A_j \boldsymbol{\xi}\|^2 \sim \chi^2(\mathrm{Rang}(A_j))$.

Preuve de la proposition

- (i) $\widehat{\vartheta}_{\mathsf{n}}^{\,\mathtt{mc}} = \vartheta + \left(\mathbb{M}^T\,\mathbb{M}\right)^{-1}\mathbb{M}^T\,\boldsymbol{\xi}$.
  On vérifie : $\mathbb{E}[\widehat{\vartheta}_{\mathsf{n}}^{\,\mathtt{mc}}] = \vartheta$,

$$\mathbb{E}\left[\left(\mathbb{M}^T\,\mathbb{M}\right)^{-1}\mathbb{M}^T\,\boldsymbol{\xi}\left(\left(\mathbb{M}^T\,\mathbb{M}\right)^{-1}\mathbb{M}^T\,\boldsymbol{\xi}\right)^T\right]$$
$$= \sigma^2\left(\mathbb{M}^T\,\mathbb{M}\right)^{-1}.$$

- (ii)

$$\begin{aligned}
\boldsymbol{Y} - \mathbb{M}\,\widehat{\vartheta}_{\mathsf{n}}^{\,\mathtt{mc}} &= \mathbb{M}\left(\vartheta - \widehat{\vartheta}_{\mathsf{n}}^{\,\mathtt{mc}}\right) + \boldsymbol{\xi} \\
&= -\,\mathbb{M}\left(\mathbb{M}^T\,\mathbb{M}\right)^{-1}\mathbb{M}^T\,\boldsymbol{\xi} + \boldsymbol{\xi} \\
&= \sigma(\mathrm{Id}_n - A)\boldsymbol{\xi}',\ \boldsymbol{\xi}' \sim \mathcal{N}(0, \mathrm{Id}_n).
\end{aligned}$$

- (iii) le vecteur $(\widehat{\vartheta}_{\mathsf{n}}^{\,\mathtt{mc}}, \boldsymbol{Y} - \mathbb{M}\,\widehat{\vartheta}_{\mathsf{n}}^{\,\mathtt{mc}})$ est gaussien. On calcule explicitement sa matrice de variance-covariance.

Propriétés de l'EMC : cadre gaussien

Estimateur de la variance σ^2 :

$$\boxed{\widehat{\sigma}_n^2 = \frac{\| \boldsymbol{Y} - \mathbb{M}\,\widehat{\vartheta}_{\mathrm{n}}^{\,\mathtt{mc}}\, \|^2}{n - k} = \frac{1}{n-k}\sum_{i=1}^{n}\Big(Y_i - \big(\widehat{\vartheta}_{\mathrm{n}}^{\,\mathtt{mc}}\big)^T \boldsymbol{x}_i\,\Big)^2}$$

D'après la dernière Proposition :

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

$$\mathbb{E}_\vartheta\left[\widehat{\sigma}_n^2\right] = \sigma^2.$$

- $\widehat{\sigma}_n^2$ est indépendant de $\widehat{\vartheta}_{\mathrm{n}}^{\,\mathtt{mc}}$.

Propriétés de l'EMC : cadre gaussien

- Lois des coordonnées de $\widehat{\vartheta}_{\mathsf{n}}^{\,\mathtt{mc}}$:

$$(\widehat{\vartheta}_{\mathsf{n}}^{\,\mathtt{mc}})_j - \vartheta_j \sim \mathcal{N}\big(0, \sigma^2 b_j\big)$$

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

$$\frac{(\widehat{\vartheta}_{\mathsf{n}}^{\,\mathtt{mc}})_j - \vartheta_j}{\widehat{\sigma}_n \sqrt{b_j}} \sim t_{n-k}$$

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

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

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

Exemple de données de régression

cours4_data1.pdf

Résultats de traitement statistique initial

	Estimate	Std. Error	t value	$\Pr(>\|t\|)$
(Intercept)	152.133	2.576	59.061	$< 2e-16 ***$
age	-10.012	59.749	-0.168	0.867000
sex	-239.819	61.222	-3.917	$0.000104 ***$
bmi	519.840	66.534	7.813	$4.30e-14 ***$
map	324.390	65.422	4.958	$1.02e-06 ***$
tc	-792.184	416.684	-1.901	0.057947
ldl	476.746	339.035	1.406	0.160389
hdl	101.045	212.533	0.475	0.634721
tch	177.064	161.476	1.097	0.273456
ltg	751.279	171.902	4.370	$1.56e-05 ***$
glu	67.625	65.984	1.025	0.305998

Questions statistiques

- **Sélection de variables.** Lesquelles parmi les 10 variables :

  `age,sex,bmi,map,tc,ldl,hdl,tch,ltg,glu`

  sont significatives ? Formalisation mathématique : trouver (estimer) l'ensemble $N = \{j : \vartheta_j \neq 0\}$.

- **Prévison.** Un nouveau patient arrive avec son vecteur des 10 variables $\mathbf{x}_0 \in \mathbb{R}^{10}$. Donner la prévison de la réponse Y $=$état du patient dans 1 an.

RSS (Residual Sum of Squares)

Modèle de régression

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

- **Résidu :** si $\widehat{\vartheta}_n$ est un estimateur de ϑ,

$$\widehat{\xi}_i = Y_i - r(\widehat{\vartheta}_n, \mathbf{x}_i) \text{ résidu au point } i.$$

- **RSS :** Residual Sum of Squares, somme résiduelle des carrés. Caractérise la qualité d'approximation.

$$\mathrm{RSS}(= \mathrm{RSS}_{\widehat{\vartheta}_n}) = \|\widehat{\xi}\|^2 = \sum_{i=1}^{n} \big(Y_i - r(\widehat{\vartheta}_n, \mathbf{x}_i)\big)^2.$$

- En régression linéaire : $\boxed{\mathrm{RSS} = \|\mathbf{Y} - \mathbb{M}\,\widehat{\vartheta}_n\|^2.}$

Sélection de variables : Backward Stepwise Regression

- On se donne un critère d'élimination de variables (plusieurs choix de critère possibles...).
- On élimine une variable, la moins significative du point de vue du critère choisi.
- On calcule l'EMC $\widehat{\vartheta}^{\mathrm{mc}}_{n,k-1}$ dans le nouveau modèle, avec seulement les $k-1$ paramétres restants, ainsi que le RSS :
$$\mathrm{RSS}_{k-1} = \|\mathbf{Y} - \mathbb{M}\,\widehat{\vartheta}^{\mathrm{mc}}_{n,k-1}\|^2.$$
- On continue à éliminer des variables, une par une, jusqu'à la stabilisation de RSS : $\mathrm{RSS}_m \approx \mathrm{RSS}_{m-1}$.

Données de diabète : Backward Regression

- **Sélection "naïve"** : $\{\texttt{sex,bmi,map,ltg}\}$
- **Sélection par Backward Regression** :
  Critère d'élimination : plus grande valeur de $\Pr(>|t|)$.

	Estimate	Std. Error	t value	$\Pr(>\|t\|)$
(Intercept)	152.133	2.576	59.061	$< 2e-16$ ***
age	-10.012	59.749	-0.168	0.867000
sex	-239.819	61.222	-3.917	0.000104 ***
bmi	519.840	66.534	7.813	$4.30e-14$ ***
map	324.390	65.422	4.958	$1.02e-06$ ***
tc	-792.184	416.684	-1.901	0.057947
ldl	476.746	339.035	1.406	0.160389
hdl	101.045	212.533	0.475	0.634721
tch	177.064	161.476	1.097	0.273456
ltg	751.279	171.902	4.370	$1.56e-05$ ***
glu	67.625	65.984	1.025	0.305998

Données de diabète : Backward Regression

Backward Regression : Itération 2.

Critère d'élimination : plus grande valeur de $\Pr(>|t|)$.

	Estimate	Std. Error	t value	$\Pr(>\|t\|)$
(Intercept)	152.133	2.573	59.128	$< 2e-16$
sex	-240.835	60.853	-3.958	0.000104
bmi	519.905	64.156	5.024	$8.85e-05$
map	322.306	65.422	4.958	$7.43e-07$
tc	-790.896	416.144	-1.901	0.058
ldl	474.377	338.358	1.402	0.162
hdl	99.718	212.146	0.470	0.639
tch	177.458	161.277	1.100	0.272
ltg	749.506	171.383	4.373	$1.54e-05$
glu	67.170	65.336	1.013	0.312

Données de diabète : Backward Regression

Backward Regression : Itération 5 (dernière).

Variables sélectionnées :

{`sex`,`bmi`,`map`,`tc`,`ldl`,`ltg`}

	Estimate	Std. Error	t value	$\Pr(> \lvert t \rvert)$
(Intercept)	152.133	2.572	59.159	$< 2e-16$
sex	-226.511	59.857	-3.784	0.000176
bmi	529.873	65.620	8.075	$6.69e-15$
map	327.220	62.693	5.219	$2.79e-07$
tc	-757.938	160.435	-4.724	$3.12e-06$
ldl	538.586	146.738	3.670	0.000272
ltg	804.192	80.173	10.031	$< 2e-16$

Sélection de variables : Backward Regression

Discussion de `Backward Regression` :

- Méthode de sélection purement empirique, pas de justification théorique.
- Application d'autres critères d'élimination en `Backward Regression` peut amener aux résultats différents. Exemple. Critère C_p de Mallows–Akaike : on élimine la variable j qui réalise

$$\min_j \left(\mathrm{RSS}_{m,(-j)} + 2\widehat{\sigma}_n^2 m\right).$$

Sélection de variables : LASSO

LASSO = Least Absolute Shrinkage and Selection Operator

- Estimateur LASSO : tout estimateur $\widehat{\vartheta}_n^L$ vérifiant

$$\widehat{\vartheta}_n^L \in \arg\min_{\vartheta \in \mathbb{R}^k} \left(\sum_{i=1}^{n} \left(Y_i - \vartheta^T \boldsymbol{x}_i\right)^2 + \lambda \sum_{j=1}^{k} |\vartheta_j| \right) \quad \text{avec } \lambda > 0.$$

- Si $\mathbb{M}^T \mathbb{M} > 0$, l'estimateur LASSO $\widehat{\vartheta}_n^L$ est unique.
- Estimateur des moindres carrés pénalisé. Pénalisation par $\sum_{j=1}^{k} |\vartheta_j|$, la norme ℓ_1 de ϑ.

Sélection de variables : LASSO

- Deux utilisations de LASSO :
  - Estimation de ϑ : alternative à $\widehat{\vartheta}_n^{\,\mathrm{mc}}$ si $k > n$.
  - Sélection de variables : on ne retient que les variables qui correspondent aux coordonnées non-nulles du vecteur $\widehat{\vartheta}_n^L$.
- LASSO admet une justification théorique : sous certaines hypothèses sur la matrice $\mathbb{M}$,

$$\lim_{n\to\infty} \mathbb{P}\{\widehat{N}_n = N\} = 1,$$

où $N = \{j : \vartheta_j \neq 0\}$ et $\widehat{N}_n = \{j : \widehat{\vartheta}^L_{n,j} \neq 0\}$.

Application de LASSO : "regularization path"

Données de diabète : LASSO

Application aux données de diabète.

- L'ensemble de variables sélectionné par LASSO :

$$\{\texttt{sex},\texttt{bmi},\texttt{map},\texttt{tc},\texttt{hdl},\texttt{ltg},\texttt{glu}\}$$

- `Backward Regression` :

$$\{\texttt{sex},\texttt{bmi},\texttt{map},\texttt{tc},\texttt{ldl},\texttt{ltg}\}$$

- Sélection naïve :

$$\{\texttt{sex},\texttt{bmi},\texttt{map},\texttt{tc}\}$$

Prévision

Modèle de régression

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

Régression linéaire : $r(\vartheta, \mathbf{x}_i) = \vartheta^T \mathbf{x}_i$. Exemple : $\mathbf{x}_i$ vecteur de 10 variables explicatives (`age`,`sex`,`bmi`,...) pour patient i.

- **Problème de prévision** : Un nouveau patient arrive avec son vecteur des 10 variables $\mathbf{x}_0 \in \mathbb{R}^{10}$. Donner la prévison de la valeur de fonction de régression $r(\vartheta, \mathbf{x}_0) = \vartheta^T \mathbf{x}_0$ (=état du patient dans 1 an).
- Soit $\widehat{\vartheta}_n$ un estimateur de ϑ. Prévision par substitution :

$$\boxed{\widehat{Y} = r(\widehat{\vartheta}_n, \mathbf{x}_0).}$$

- Question statistique : quelle est la qualité de la prévision ? Intervalle de confiance pour $r(\vartheta, \mathbf{x}_0)$ basé sur $\widehat{Y}$?

Prévision : modèle linéaire gaussienne

- Traitement sur l'exemple : $r(\vartheta, \mathbf{x}) = \vartheta^T \mathbf{x}$, régression linéaire gaussienne et $\widehat{\vartheta}_n = \widehat{\vartheta}_{\mathsf{n}}^{\,\mathtt{mc}}$. $\Longrightarrow$ $\boxed{\widehat{Y} = \mathbf{x}_0^T\, \widehat{\vartheta}_{\mathsf{n}}^{\,\mathtt{mc}}}$
- Hyp. 1 : $\boldsymbol{\xi} \sim \mathcal{N}(0, \sigma^2 \mathrm{Id}_n)$.
- Hyp. 2 : $\mathbb{M}^T \mathbb{M} > 0$.

Proposition

(i) $\widehat{Y} \sim \mathcal{N}\big(\mathbf{x}_0^T \vartheta, \sigma^2 \mathbf{x}_0^T \left(\mathbb{M}^T \mathbb{M}\right)^{-1} \mathbf{x}_0\big)$

(ii) *$\widehat{Y} - \mathbf{x}_0^T \vartheta$ et $\boldsymbol{Y} - \mathbb{M}\, \widehat{\vartheta}_{\mathsf{n}}^{\,\mathtt{mc}}$ sont indépendants.*

Rappel : $\| \boldsymbol{Y} - \mathbb{M}\, \widehat{\vartheta}_{\mathsf{n}}^{\,\mathtt{mc}} \|^2 \sim \sigma^2 \chi^2(n-k)$ loi du Chi 2 à $n-k$ degrés de liberté.

Prévision : modèle linéaire gaussienne

- D'après la Proposition,

$$\eta := \frac{\widehat{Y} - \mathbf{x}_0^T \vartheta}{\sqrt{\sigma^2 \mathbf{x}_0^T \left(\mathbb{M}^T \mathbb{M}\right)^{-1} \mathbf{x}_0}} \sim \mathcal{N}(0,1).$$

- On replace σ^2 inconnu par $\widehat{\sigma}_n^2 = \| \boldsymbol{Y} - \mathbb{M}\, \widehat{\vartheta}_{\mathrm{n}}^{\,\mathtt{mc}} \|^2 / (n-k)$.
- *t*-statistique :

$$t := \frac{\widehat{Y} - \mathbf{x}_0^T \vartheta}{\sqrt{\widehat{\sigma}_n^2 \mathbf{x}_0^T \left(\mathbb{M}^T \mathbb{M}\right)^{-1} \mathbf{x}_0}} = \frac{\eta}{\sqrt{\chi/(n-k)}} \sim t_{n-k},$$

loi de Student à $n-k$ degrés de liberté, car $\eta \sim \mathcal{N}(0,1)$, $\chi := \| \boldsymbol{Y} - \mathbb{M}\, \widehat{\vartheta}_{\mathrm{n}}^{\,\mathtt{mc}} \|^2 / \sigma^2 \sim \chi^2(n-k)$ et $\eta \perp\!\!\!\perp \chi$.

Prévision : intervalle de confiance

$$\mathbb{P}\Bigg(-q_{1-\frac{\alpha}{2}}(t_{n-k}) \leq \frac{\widehat{Y} - \mathbf{x}_0^T \vartheta}{\sqrt{\widehat{\sigma}_n^2 \mathbf{x}_0^T \left(\mathbb{M}^T \mathbb{M}\right)^{-1} \mathbf{x}_0}} \leq q_{1-\frac{\alpha}{2}}(t_{n-k}) \Bigg)$$

$$= \mathbb{P}(-q_{1-\frac{\alpha}{2}}(t_{n-k}) \leq t \leq q_{1-\frac{\alpha}{2}}(t_{n-k})) = 1 - \alpha.$$

$\Longrightarrow$ intervalle de confiance de niveau $1-\alpha$ pour $r(\vartheta, \mathbf{x}_0) = \mathbf{x}_0^T \vartheta$ est $[r_L, r_U]$, où :

$$r_L = \widehat{Y} - q_{1-\frac{\alpha}{2}}(t_{n-k}) \sqrt{\widehat{\sigma}_n^2 \mathbf{x}_0^T \left(\mathbb{M}^T \mathbb{M}\right)^{-1} \mathbf{x}_0},$$

$$r_U = \widehat{Y} + q_{1-\frac{\alpha}{2}}(t_{n-k}) \sqrt{\widehat{\sigma}_n^2 \mathbf{x}_0^T \left(\mathbb{M}^T \mathbb{M}\right)^{-1} \mathbf{x}_0}.$$

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

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

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

Proposition (Normalité asymptotique de l'EMC)

$$\sigma^{-1}\left(\mathbb{M}^T \mathbb{M}\right)^{1/2}(\widehat{\vartheta}_n^{\,\mathrm{mc}} - \vartheta) \xrightarrow{d} \mathcal{N}(0, \mathrm{Id}_k), \quad n \to \infty.$$

- A comparer avec le cadre gaussien :

$$\sigma^{-1}\left(\mathbb{M}^T \mathbb{M}\right)^{1/2}(\widehat{\vartheta}_n^{\,\mathrm{mc}} - \vartheta) \sim \mathcal{N}(0, \mathrm{Id}_k) \text{ pour tout } n.$$

Régression non-linéaire

- On observe
$$(\boldsymbol{x}_1, Y_1), \ldots, (\boldsymbol{x}_n, Y_n),$$
où
$$\boxed{Y_i = r(\vartheta, \boldsymbol{x}_i) + \xi_i, \quad i = 1, \ldots, n}$$
avec
$$\boldsymbol{x}_i \in \mathbb{R}^k, \quad \text{et} \quad \vartheta \in \Theta \subset \mathbb{R}^d.$$
- Si $\xi_i \sim_{\text{i.i.d.}} \mathcal{N}(0, \sigma^2)$,
$$\mathcal{L}_n(\vartheta, Y_1, \ldots, Y_n) \propto \exp\Big(-\frac{1}{2\sigma^2}\sum_{i=1}^n \big(Y_i - r(\vartheta, \boldsymbol{x}_i)\big)^2\Big)$$
et l'estimateur du maximum de vraisemblance est obtenu en minimisant la fonction
$$\vartheta \rightsquigarrow \sum_{i=1}^n \big(Y_i - r(\vartheta, \boldsymbol{x}_i)\big)^2.$$

Moindre carrés non-linéaires

Définition

- *M-estimateur associé à la fonction de contraste* $\psi : \Theta \times \mathbb{R}^k \times \mathbb{R} \to \mathbb{R}$ *: tout estimateur* $\widehat{\vartheta}_n$ *satisfaisant*

$$\sum_{i=1}^{n} \psi(\widehat{\vartheta}_n, \boldsymbol{x}_i, Y_i) = \max_{a \in \Theta} \sum_{i=1}^{n} \psi(a, \boldsymbol{x}_i, Y_i).$$

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

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

Modèle à réponse binaire

- On observe

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

- Modélisation via la fonction de régression

$$\boldsymbol{x} \rightsquigarrow p_{\boldsymbol{x}}(\vartheta) = \mathbb{E}_\vartheta\left[Y \middle| \boldsymbol{X} = \boldsymbol{x}\right] = \mathbb{P}_\vartheta\left[Y = 1 \middle| \boldsymbol{X} = \boldsymbol{x}\right]$$

- Représentation

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

  avec $r(\vartheta, \boldsymbol{x}_i) = p_{\boldsymbol{x}_i}(\vartheta)$ et $\xi_i = Y_i - p_{\boldsymbol{x}_i}(\vartheta)$.
- $\mathbb{E}_\vartheta\left[\xi_i\right] = 0$ mais structure des ξ_i compliquée (dépendance en ϑ).

Modèle à réponse discrète

- Y_i v.a. de Bernoulli de paramètre $p_{\boldsymbol{x}_i}(\vartheta)$.
  Vraisemblance

$$\mathcal{L}_n(\vartheta, Y_1, \ldots, Y_n) = \prod_{i=1}^{n} p_{\boldsymbol{x}_i}(\vartheta)^{Y_i}\big(1 - p_{\boldsymbol{x}_i}(\vartheta)\big)^{1-Y_i}$$

  $\rightarrow$ méthodes de résolution numérique.

- Régression logistique (très utile dans les applications)

$$p_{\boldsymbol{x}}(\vartheta) = \psi(\boldsymbol{x}^T\,\vartheta),$$

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

Régression logistique et modèles latents

- Représentation équivalente de la régression logistique : on observe

$$\boxed{Y_i = 1_{\left\{Y_i^\star > 0\right\}}, \quad i = 1, \ldots, n}$$

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

$$\boxed{Y_i^\star = \vartheta^T \boldsymbol{x}_i + U_i, \quad i = 1, \ldots, n}$$

avec $U_i \sim_{\text{i.i.d.}} F$, où

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

-
$$\begin{aligned}
\mathbb{P}_\vartheta\left[Y_i^\star > 0\right] &= \mathbb{P}_\vartheta\left[\boldsymbol{x}_i^T\vartheta + U_i > 0\right] \\
&= 1 - \mathbb{P}_\vartheta\left[U_i \leq -\boldsymbol{x}_i^T\vartheta\right] \\
&= 1 - \left(1 + \exp(-\boldsymbol{x}_i^T\vartheta)\right)^{-1} = \psi(\boldsymbol{x}_i^T\vartheta).
\end{aligned}$$

Bilan provisoire : modèles paramétriques dominés

- Modèle de densité : on observe

$$X_1, \ldots, X_n \sim_{\text{i.i.d ?}} \mathbb{P}_\vartheta, \quad \vartheta \in \Theta \subset \mathbb{R}^d\,.$$

Estimateurs : moments, Z- et M-estimateurs, EMV.

- Modèle de régression : on observe

$$Y_i = r(\vartheta, \boldsymbol{x}_i) + \xi_i, \quad i = 1, \ldots, n, \quad \xi_i \text{ i.i.d.}, \ \vartheta \in \Theta \subset \mathbb{R}^d\,.$$

Estimateurs :

  - Si $r(\vartheta, \boldsymbol{x}) = \vartheta^T \boldsymbol{x}$, EMC (coïncide avec l'EMV si les ξ_i gaussiens)
  - Sinon, M-estimateurs, EMV...
  - Autres méthodes selon des hypothèses sur le « design »...

Bilan provisoire (cont.) : précision d'estimation

$\widehat{\vartheta}_n$ estimateur de ϑ : précision, qualité de $\widehat{\vartheta}_n$? Approche par région-intervalle de confiance

- Pour $\alpha \in (0,1)$, on construit $\mathcal{C}_{n,\alpha}(\widehat{\vartheta}_n)$ ne dépendant pas de ϑ (observable) tel que

$$\mathbb{P}_\vartheta\left[\vartheta \in \mathcal{C}_{n,\alpha}(\widehat{\vartheta}_n)\right] \geq 1-\alpha$$

  asymptotiquement lorsque $n \to \infty$, uniformément en ϑ... La précision de l'estimateur est le diamètre (moyen) de $\mathcal{C}_{n,\alpha}(\widehat{\vartheta}_n)$.
- Par exemple : $\mathcal{C}_{n,\alpha}(\widehat{\vartheta}_n) =$ boule de centre $\widehat{\vartheta}_n$ et de rayon à déterminer.

En pratique, une information non-asymptotique de type

$$\mathbb{E}\left[\|\,\widehat{\vartheta}_n - \vartheta\|^2\right] \leq c_n(\vartheta)^2,$$

ou bien asymptotique de type

$$v_n(\widehat{\vartheta}_n - \vartheta) \xrightarrow{d} Z_\vartheta, \quad n \to \infty$$

(avec $v_n \to \infty$) permet « souvent » de construire un(e) région-intervalle de confiance.