CentraleSupélec

Statistique et apprentissage

Chargés de cours (ordre alphabétique) :

Julien Bect, Gilles Faÿ, Ziad Kobeissi, Laurent Le Brusquet,
Vincent Lescarret, Arshak Minasyan, Arthur Tenenhaus† & Xujia Zhu

† Coordinateur du cours

Cours 8/9

Régularisation et sélection de modèles

Objectifs du cours 8

- Introduire la régression/classification pénalisée
- Savoir estimer l'erreur de généralisation
- Savoir déterminer les hyper-paramètres d'un modèle ou choisir un modèle

Plan du cours

Plan du cours

Plan du cours

Limites des « moindres carrés ordinaires »

Rappel : matrice $\underline{X}$ de taille #individus $\times$ #variables $(n \times (p+1))$.

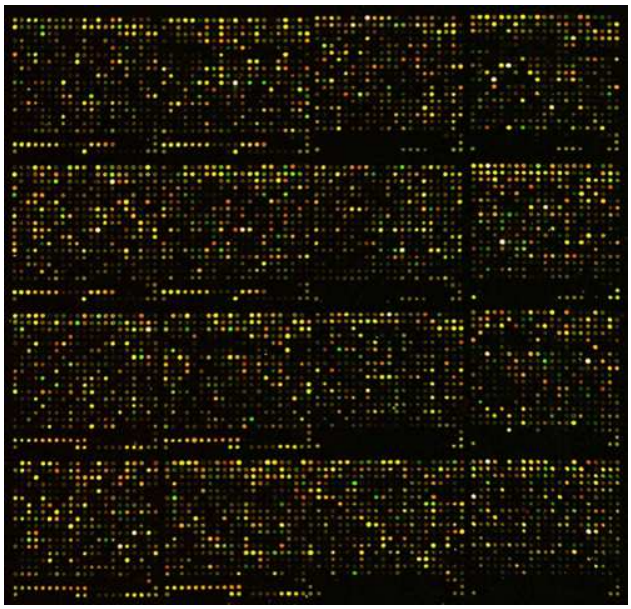
Situations critiques pour la régression linéaire :

- lorsque la matrice $\underline{X}^\top \underline{X}$ n'est pas inversible
- ou mal conditionnée

Cas typiques

1. lorsque le nombre de variables est important
2. lorsque il y a de fortes corrélations entre les variables explicatives

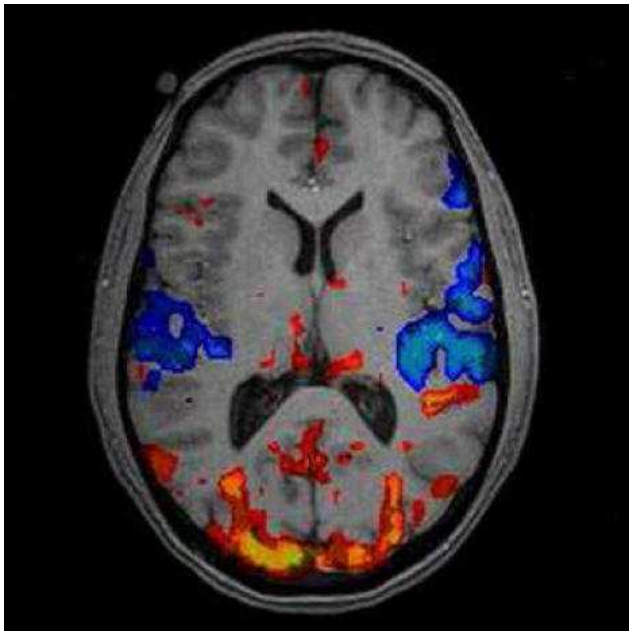
Exemple : $p \gg n$



Extrait d'une puce à ARN, $p \approx 25000$ pour un patient

Typiquement, $n \approx 10$ ou 100 !

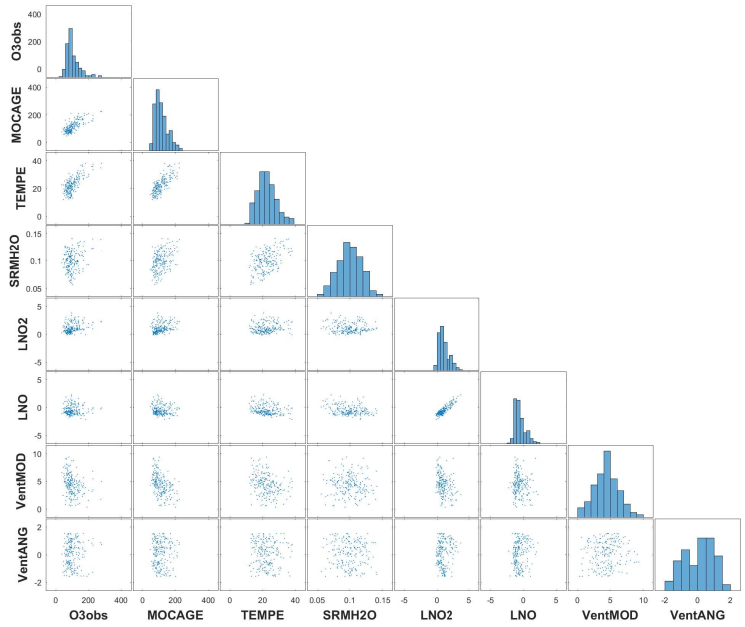
Exemple : $p \gg n$



Imagerie par Résonance Magnétique Fonctionnelle (IRMf),
$p \approx 300000$ voxels

Typiquement, $n \approx 10$ ou 100 !

Exemple : forte corrélation entre variables explicatives



Exemple « Ozone » $\longrightarrow$ correlation entre les variables NO et NO2

Exemple : forte corrélation. . . (suite)

Vecteur $\hat{\beta}$ obtenu par régression linéaire :

β_0	MOCAGE	TEMPE	RMH2O	NO2	NO	VentMOD	VentANG
103.4	28.9	22.5	-3.2	-34.4	37.9	1.4	2.6

Observations :

- Le coefficient négatif associé à NO2 est surprenant
  ➠ interprétation hasardeuse des coefficients de régression
- Les variables les moins influentes (petits coefficients) pourraient être supprimées du modèle ?

Solution possible : régression pénalisée

Au critère des moindres carrées (SCR), on ajoute une pénalité :

$$\hat{\beta} = \arg\min_{\beta} \underbrace{\|\underline{Y} - \underline{X}\beta\|^2}_{\text{« attache » aux données}} + \underbrace{\lambda}_{\text{hyperparamètre}} \underbrace{\Omega(\beta)}_{\text{pénalité}} . \quad (\star)$$

Intérêts de la pénalité.

- rendre la solution de $(\star)$ unique,
- apporter de l'a priori (lien avec l'approche bayésienne),
- pouvoir traiter les cas où $p \gg n$,
- faciliter l'interprétation des coefficients de régression.

Plan du cours

Régression ridge

Pénalité

$\Omega(\beta) = \|\beta\|^2$

$$\hat{\beta}^{\text{RIDGE}} = \arg\min_{\beta} \|\underline{Y} - \underline{X}\beta\|^2 + \lambda\|\beta\|^2$$

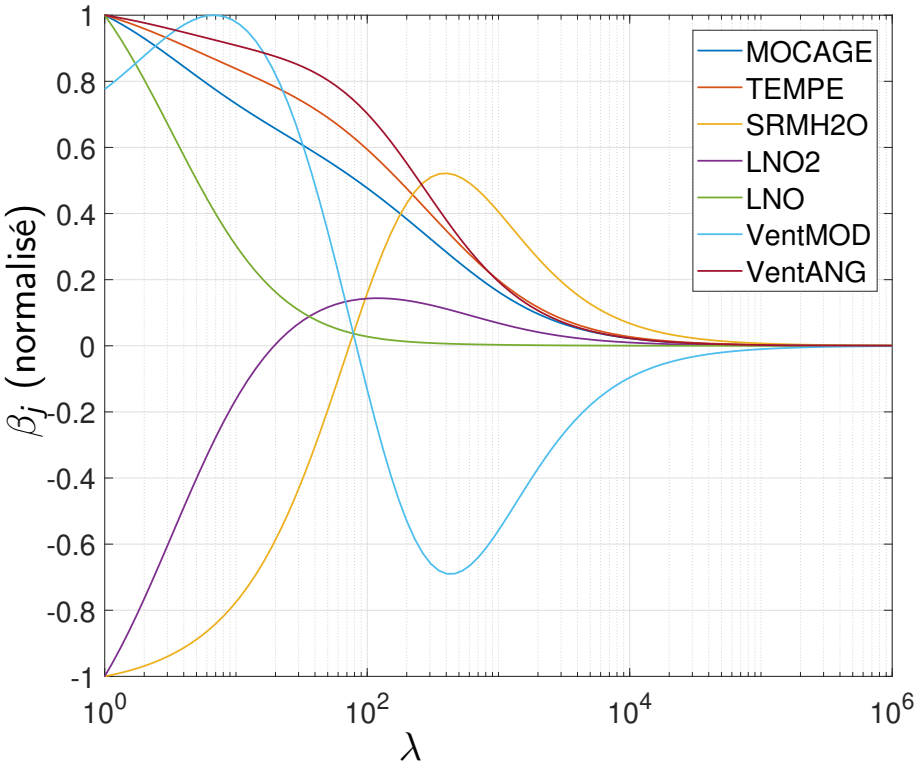
On montre que (➠ voir TD) :

$$\hat{\beta}^{\text{RIDGE}} = \left(\underline{X}^\top \underline{X} + \lambda I_{p+1}\right)^{-1} \underline{X}^\top \underline{Y}.$$

➠ Lorsque $\lambda \nearrow$, le conditionnement de $\left(\underline{X}^\top \underline{X} + \lambda I_{p+1}\right)$ s'améliore.

Remarque : $\hat{\beta}^{\text{RIDGE}}$ admet une interprétation bayésienne (➠ voir TD).

Exemple « Ozone » : Evolution de $\hat{\beta}^{RIDGE}$ en fonction de λ



Plan du cours

Régression LASSO

Pénalité

$\Omega(\beta) = \|\beta\|_1 = \sum_{j=1}^{n} |\beta_j|$

$$\hat{\beta}^{\text{LASSO}} = \arg\min_{\beta} \|\underline{Y} - \underline{X}\beta\|^2 + \lambda\|\beta\|_1 \qquad (\star)$$

Minimisation du critère.

- pas d'expression explicite de $\hat{\beta}^{\text{LASSO}}$ (sauf dans certains cas, exercice 1)
  ➠ algorithmes spécifiques

Régression LASSO : reformulation

$$\hat{\beta}^{\text{LASSO}} = \arg\min_{\beta} \|\underline{Y} - \underline{X}\beta\|^2 + \lambda\|\beta\|_1 \qquad (\star)$$

- Soit $\hat{\beta}^{\text{MCO}}$ l'estimateur de β au sens des moindres carrés (ordinaires) :

$$\hat{\beta}^{\text{LASSO}} = \hat{\beta}^{\text{MCO}} \qquad \text{pour} \lambda = 0$$

- Comme $\|\underline{Y} - \underline{X}\beta\|^2 = \|\underline{X}(\beta - \hat{\beta}^{\text{MCO}})\|^2 + c$, il vient :

$$\hat{\beta}^{\text{LASSO}} = \arg\min_{\beta} \|\underline{X}(\beta - \hat{\beta}^{\text{MCO}})\|^2 + \lambda\|\beta\|_1$$

- Reformulation à l'aide d'une contrainte : on peut montrer qu'il existe $c_\lambda \in \mathbb{R}^+$ telle que

$$\hat{\beta}^{\text{LASSO}} = \arg\min_{\beta} \|\underline{X}(\beta - \hat{\beta}^{\text{MCO}})\|^2 \text{ tel que} \|\beta\|_1 \leq c_\lambda$$

(et de même pour $\hat{\beta}^{\text{RIDGE}}$)

Régression LASSO : explication intuitive

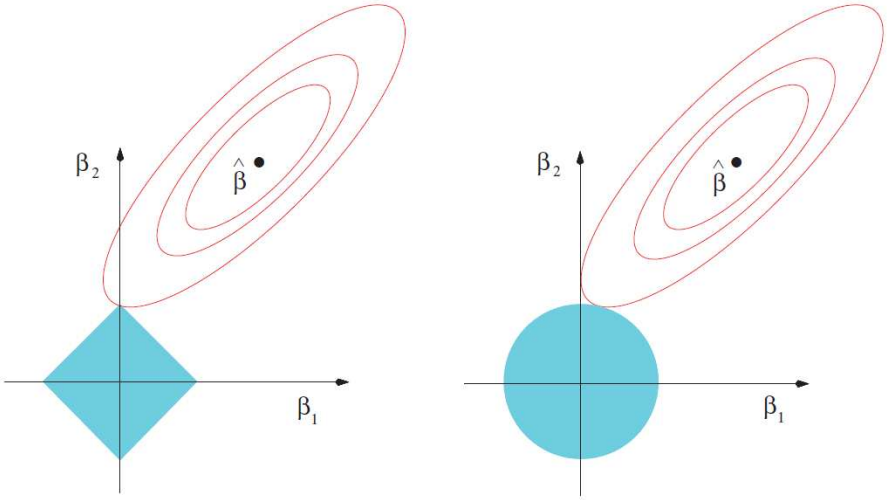
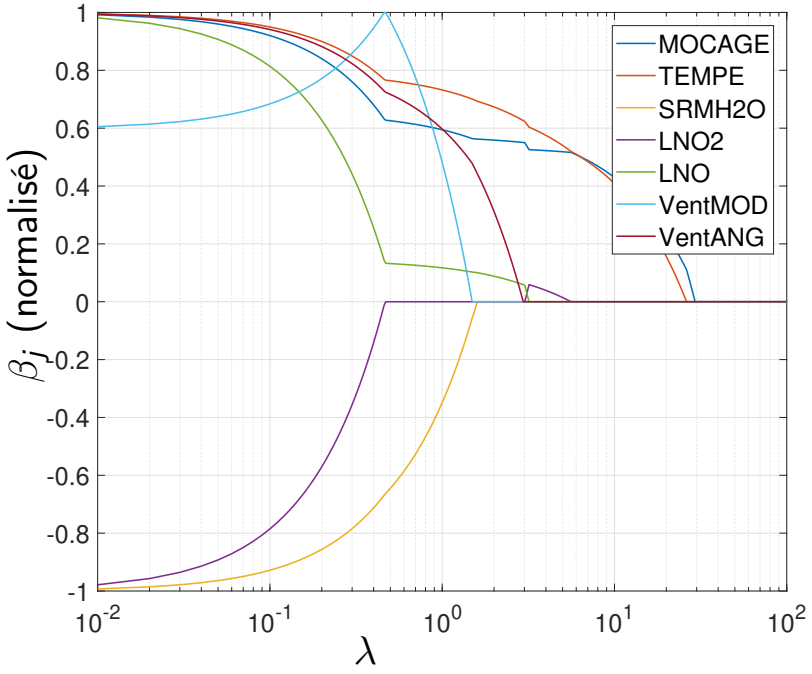


FIGURE 3.11. *Estimation picture for the lasso (left) and ridge regression (right). Shown are contours of the error and constraint functions. The solid blue areas are the constraint regions* $|\beta_1| + |\beta_2| \leq t$ *and* $\beta_1^2 + \beta_2^2 \leq t^2$, *respectively, while the red ellipses are the contours of the least squares error function.*

Elements of Statistical Learning (2nd Ed.) ©Hastie, Tibshirani & Friedman 2009 Chap 3

Exemple « Ozone » : $\hat{\beta}^{\text{LASSO}}$ en fonction de λ



Quand $\lambda \nearrow$, le nombre de coefficients égaux à 0 $\nearrow$

Exemple « Ozone » : $\hat{\beta}^{\text{LASSO}}$ pour différents λ

Avec $\lambda = 0$ (MCO)

β_0	MOCAGE	TEMPE	RMH2O	NO2	NO	VentMOD	VentANG
103.4	28.9	22.5	-3.2	-34.4	37.9	1.4	2.6

➠ Le coefficient associé à NO2 peut sembler surprenant

Avec $\lambda = 0.5$

β_0	MOCAGE	TEMPE	RMH2O	NO2	NO	VentMOD	VentANG
103.4	18.1	17.2	-2.1	0	4.9	2.2	1.9

➠ Conservation d'une des deux variables les plus corrélées, facilite l'interprétation des coefficients

Avec $\lambda = 3$

β_0	MOCAGE	TEMPE	RMH2O	NO2	NO	VentMOD	VentANG
103.4	15.9	14.1	0	0	2.2	0	0

➠ Mise à zéro progressive des coefficients restants

Choix de l'hyper-paramètre λ ?

Plan du cours

Plan du cours

Problème

Revenons à un cadre général (régression/classification).

Soit $\hat{h}$ un prédicteur $\mathcal{X} \to \mathcal{Y}$ appris à partir des données :

$$\hat{h}(x) \;=\; \hat{h}(x; (X_1, Y_1), \ldots, (X_n, Y_n)) \;=\; \hat{h}(x; \underline{X}, \underline{Y}).$$

Rappel : étant donnée une fonction de perte L, on définit le risque, ou erreur de généralisation :

$$\begin{aligned} \mathscr{R}(\hat{h}) \;&=\; \mathbb{E}\left(L(Y, \hat{h}(X)) \;\middle|\; \underline{X}, \underline{Y} \right) \\ &= \iint_{\mathcal{X}\times\mathcal{Y}} L(y, \hat{h}(x)) \, \mathrm{P}^{X,Y}(\mathrm{d}x, \mathrm{d}y). \end{aligned}$$

Exemples : $L(y, \tilde{y}) = (y - \tilde{y})^2$, $L(y, \tilde{y}) = |y - \tilde{y}|$, $L(y, \tilde{y}) = \mathbb{1}_{y \neq \tilde{y}}$, ...

Problème

Comment estimer ce risque (qui dépend de la loi $\mathrm{P}^{X,Y}$ inconnue) ?

Rappel : risque empirique

On appelle risque empirique le risque

$$\widehat{\mathscr{R}}_n \;=\; \iint_{\mathcal{X}\times\mathcal{Y}} L(y, \hat{h}(x)) \, \hat{\mathrm{P}}_n(\mathrm{d}x, \mathrm{d}y) \;=\; \frac{1}{n} \sum_{i=1}^{n} L(Y_i, \hat{h}(X_i))$$

calculé avec $\mathrm{P}^{X,Y}$ égal à la mesure empirique $\hat{\mathrm{P}}_n = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^{n} \delta_{X_i, Y_i}$.

Question

Le risque empirique $\widehat{\mathscr{R}}_n$ est-il, en général, un « bon » estimateur du risque réel $\mathscr{R}(\hat{h})$?

⚠ double utilisation des données !

Intuition : Il est « dangereux » d'estimer le risque à partir de l'erreur commise sur les données ayant servi à construire $\hat{h}$...

Plan du cours

Zoom sur un cas particulier instructif

Considérons le cas de la régression linéaire « ordinaire » :

- $h(x) = \beta_0 + \beta_1 x^{(1)} + \ldots + \beta_p x^{(p)}$,
- perte quadratique : $L(y, \tilde{y}) = (y - \tilde{y})^2$,
- $p + 1 \leq n$ et $\underline{X}^\top \underline{X}$ matrice $(p+1) \times (p+1)$ p.s. inversible.

Minimisation du risque empirique : $\hat{\beta} = \left(\underline{X}^\top \underline{X}\right)^{-1} \underline{X}^\top \underline{Y}$.

Remarque : lien entre $\hat{\mathscr{R}}_n$ et le coefficient de détermination R^2 :

$$R^2 = 1 - \frac{\mathrm{SCR}(\hat{\beta})}{\mathrm{SCT}} = 1 - \frac{\sum_{i=1}^n \left(Y_i - \hat{\beta}^\top X_i\right)^2}{\sum_{i=1}^n \left(Y_i - \bar{Y}\right)^2}$$

$$= 1 - \frac{\widehat{\mathscr{R}}_n}{\widehat{\mathrm{var}}_n(Y)} \qquad \text{avec } \widehat{\mathrm{var}}_n(Y) = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n \left(Y_i - \bar{Y}\right)^2.$$

Zoom sur un cas particulier instructif (suite)

Considérons l'erreur liée à la généralisation sur les réponses :

$$\widetilde{\mathscr{R}}_n \;=\; \mathbb{E}\left(\frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n}\left(\widetilde{Y}_i - \hat{\beta}^\top X_i\right)^2 \;\middle|\; \underline{X}, \underline{Y}\right),$$

avec, pour tout i, $\widetilde{Y}_i$ et Y_i iid conditionnellement à $\underline{X}$.

Proposition

Supposons la loi inconnue $\mathrm{P}^{X,Y}$ telle que $Y_i = \beta^\top X_i + \varepsilon_i$, avec $\varepsilon_i \sim \mathscr{N}(0, \sigma^2)$, indépendante de X_i. Alors

$$\mathbb{E}\left(\widetilde{\mathscr{R}}_n\right) \;=\; \sigma^2\left(1 + \frac{p+1}{n}\right),$$
$$\mathbb{E}\left(\widehat{\mathscr{R}}_n\right) \;=\; \sigma^2\left(1 - \frac{p+1}{n}\right).$$

Zoom sur un cas particulier instructif (suite)

Interprétation. En moyenne, le risque empirique sous-estime l'erreur de généralisation :

$$\mathbb{E}\left(\widetilde{\mathscr{R}}_n - \widehat{\mathscr{R}}_n\right) \;=\; 2\,\frac{p+1}{n}\,\sigma^2 \;>\; 0.$$

Autre façon de voir les choses : posons

$$\eta \;=\; \frac{p+1}{n} \;=\; \frac{\text{nombre de coefficients}}{\text{taille de l'échantillon}}.$$

Alors

$$\frac{\mathbb{E}\left(\widetilde{\mathscr{R}}_n\right)}{\mathbb{E}\left(\widehat{\mathscr{R}}_n\right)} \;=\; \frac{1+\eta}{1-\eta} \;\xrightarrow[\eta\to 1]{}\; +\infty.$$

Zoom sur un cas particulier instructif (suite)

Démonstration. Calculons d'abord $\mathbb{E}\left(\widetilde{\mathscr{R}}_n \mid \underline{X}\right)$ avec (rappel)

$$\widetilde{\mathscr{R}}_n \;=\; \mathbb{E}\left(\frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n}\left(\widetilde{Y}_i - \hat{\beta}^\top X_i\right)^2 \;\middle|\; \underline{X}, \underline{Y}\right).$$

On a $\mathbb{E}\left(\widetilde{Y}_i \mid \underline{X}\right) = \mathbb{E}\left(\hat{\beta}^\top X_i \mid \underline{X}\right) = \beta^\top X_i$, donc

$$\begin{aligned}\mathbb{E}\left(\widetilde{\mathscr{R}}_n \mid \underline{X}\right) \;&=\; \frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n}\operatorname{var}\left(\widetilde{Y}_i - \hat{\beta}^\top X_i \mid \underline{X}\right)\\ &=\; \frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n}\left(\underbrace{\operatorname{var}\left(\widetilde{Y}_i \mid \underline{X}\right)}_{=\sigma^2} + \underbrace{\operatorname{var}\left(\hat{\beta}^\top X_i \mid \underline{X}\right)}_{=\circledast}\right).\end{aligned}$$

Zoom sur un cas particulier instructif (suite)

On a vu que $\operatorname{var}\left(\hat{\beta} \mid \underline{X}\right) = \sigma^2\left(\underline{X}^\top\underline{X}\right)^{-1}$. Donc :

$$\begin{aligned}\circledast \;&=\; \operatorname{var}\left(\hat{\beta}^\top X_i \mid \underline{X}\right)\\ &=\; X_i^\top \operatorname{var}\left(\hat{\beta} \mid \underline{X}\right) X_i\\ &=\; \sigma^2 X_i^\top\left(\underline{X}^\top\underline{X}\right)^{-1} X_i\\ &=\; \sigma^2 \operatorname{tr}\left(\left(\underline{X}^\top\underline{X}\right)^{-1} X_i X_i^\top\right).\end{aligned}$$

En remarquant que $\underline{X}^\top\underline{X} = \sum_i X_i X_i^\top$, il vient :

$$\begin{aligned}\sum_i \operatorname{var}\left(\hat{\beta}^\top X_i \mid \underline{X}\right) \;&=\; \sigma^2 \operatorname{tr}\left(\left(\underline{X}^\top\underline{X}\right)^{-1}\sum_i X_i X_i^\top\right)\\ &=\; \sigma^2 \operatorname{tr}\left(I_{p+1}\right) \;=\; \sigma^2(p+1).\end{aligned}$$

Zoom sur un cas particulier instructif (suite)

Ainsi, on a :

$$\mathbb{E}\left(\widetilde{\mathscr{R}}_n \mid \underline{X}\right) = \frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n}\left(\underbrace{\text{var}\left(\widetilde{Y}_i \mid \underline{X}\right)}_{=\sigma^2} + \underbrace{\text{var}\left(\hat{\beta}^\top X_i \mid \underline{X}\right)}_{=\circledast}\right)$$
$$= \sigma^2 + \sigma^2\,\frac{p+1}{n} = \sigma^2\left(1+\frac{p+1}{n}\right).$$

D'où le résultat : $\mathbb{E}\left(\widetilde{\mathscr{R}}_n\right) = \sigma^2\left(1+\frac{p+1}{n}\right)$.

Exercice : prouver la deuxième égalité, à savoir

$$\mathbb{E}\left(\widehat{\mathscr{R}}_n\right) = \sigma^2\left(1-\frac{p+1}{n}\right).$$

➠ voir TD □

Plan du cours

Ensembles d'apprentissage et de test

Conclusion/extrapolation. Le risque empirique est en général

- un estimateur négativement biaisé du risque,
- avec un biais qui augmente lorsque $p \nearrow$.

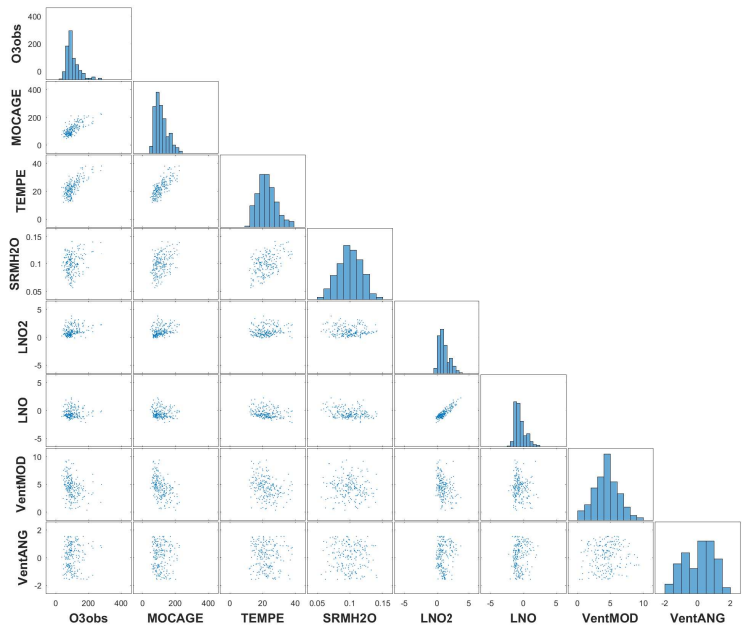
Solution : partager les données en deux ensembles

- données d'apprentissage : construction de $\hat{h}$,
- données de test : estimation de l'erreur de généralisation.

Exemple :

apprentissage (e.g., 80%)	**test** (20%)

Exemple « Ozone » (rappel)



Objectif : savoir prédire la concentration d'ozone du jour $t+1$ à partir des données disponible au jour t.

Exemple « Ozone » : 70/30

On considère les 7 variables explicatives + 21 interactions.

Résultat de 10 partitions aléatoires, 70% / 30% :

R^2	$\hat{\mathscr{R}}_n$	$\hat{\mathscr{R}}_n^{\text{test}}$
0.77185	345.1	573.32
0.76831	371.41	496.03
0.77292	343.96	608.62
0.76093	350.53	606.14
0.78584	345.45	669.66
0.75459	399.9	476.61
0.71367	343.72	643.72
0.77689	377.32	524.74
0.8176	317.83	695.86
0.79784	373.18	554.25

Plan du cours

Plan du cours

Problème 1 : choisir une « bonne » famille $\mathscr{H}$

Exemple. Sélection de k variables parmi p. Soit $J \subset \{1, \dots p\}$:

$$h(x) = \beta_0 + \sum_{j \in J} \beta_j x^{(j)}.$$

➠ Définit une famille $\mathscr{H}_J$ avec $k_J = \text{card}(J) + 1$ paramètres.

Exemple. Développement dans une base, tronqué à l'ordre J :

$$h(x) = \sum_{k=0}^{J} \beta_j \psi_j(x).$$

➠ Définit une famille $\mathscr{H}_J$ avec $k_J = J + 1$ paramètres. ➠ complément

Problème : choix de modèle

Comment choisir la famille $\mathscr{H}_J$ (et, en particulier, sa « taille » k_J) ?

Remarque : remplacer $h(x)$ par $\ln \frac{h(x)}{1-h(x)}$ pour la regression logistique.

Problème 2 : choisir un hyper-paramètre de régularisation

La plupart des méthodes nécessitent un « réglage » ...

- Regression ridge/LASSO : $\hat{\beta} = \operatorname{argmin} \hat{\mathscr{R}}^{\text{pen}}_{n,\lambda}$, avec

$$\hat{\mathscr{R}}^{\text{pen}}_{n,\lambda}(\beta) \;=\; \hat{\mathscr{R}}_n(\beta) + \lambda \sum_j |\beta_j|^q, \quad q \in \{1, 2\},$$

- Choix du nombre k de voisins dans un modèle k-NN :

$$h(x) = \frac{1}{k} \sum_{i \in \mathcal{V}_{n,k}(x)} y_i,$$

avec $\mathcal{V}_{n,k}(x)$ les indices des k plus proches voisins de x.

Problème : calibration

Comment choisir la valeur de ces paramètres de réglage ?

Attention au sur-apprentissage

Idée

Choisir la famille $\mathscr{H}_J$, ou l'hyperparamètre λ, de façon à minimiser (une estimation de) l'erreur de généralisation.

⚠ à nouveau, le risque empirique $\hat{\mathscr{R}}_n$ estimé sur les données d'apprentissage ne convient pas !

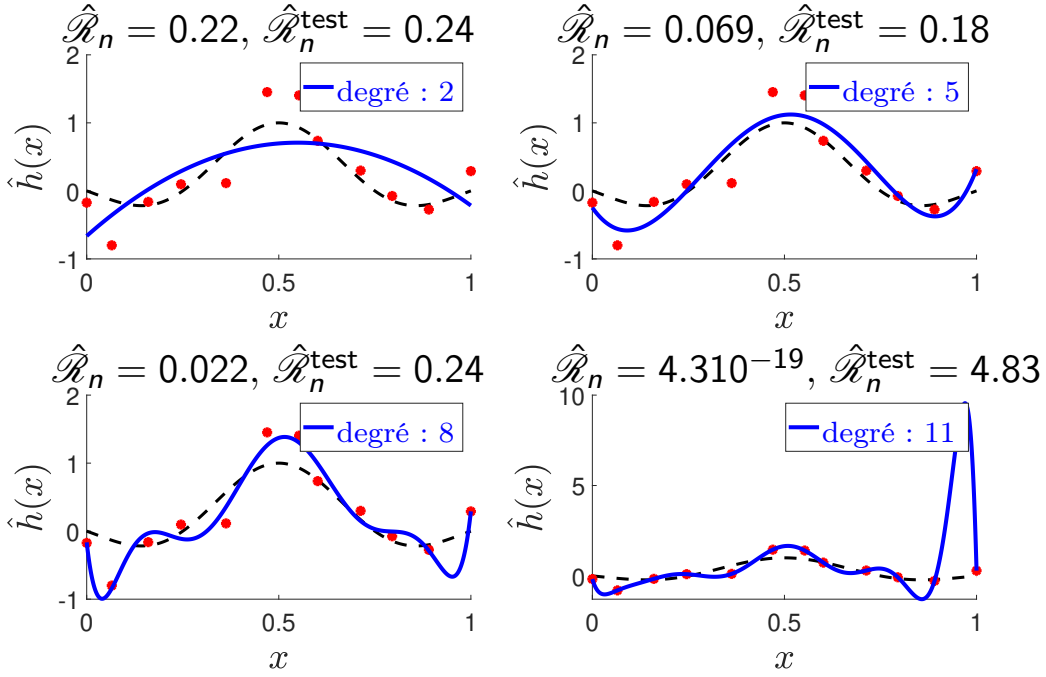
Exemple. Regression polynomiale, $x \in \mathbb{R}$, degré $\leq J$:

$$h(x) = \beta_0 + \beta_1 x + \ldots + \beta_J x^J,$$

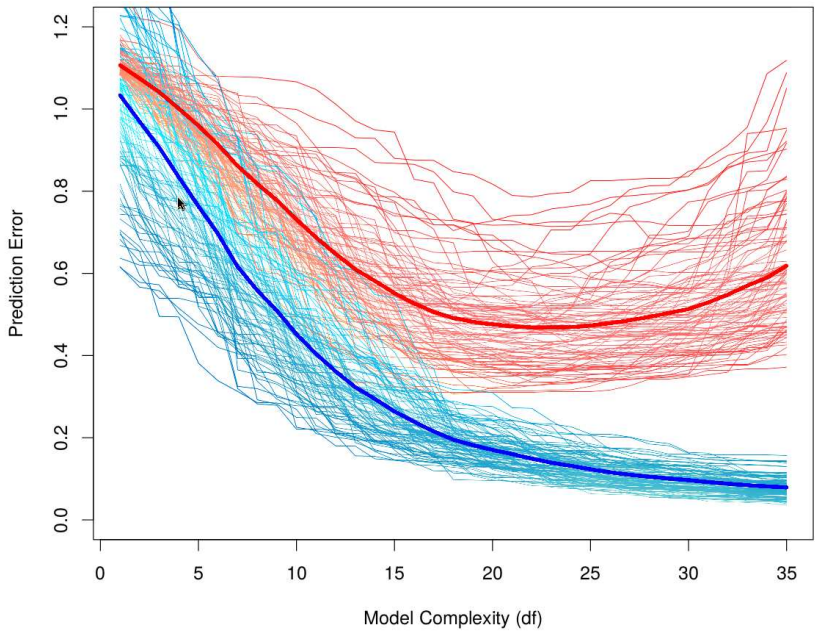
avec $J = 2, 5, 8, 11$.

Rappel : en regression linéaire, on a vu que le risque empirique souffre d'un biais proportionnel au nombre de paramètres dans le modèle.

Exemple : régression polynomiale



Comprendre le sur-apprentissage : simulations



Bleu : risque empirique $\hat{\mathcal{R}}_n$ / Rouge : erreur sur l'ensemble de test

Figure extraite de Hastie, Tibshirani & Friedman (2017).
The Elements of Statistical Learning (12th edition), Springer.

Résumons. . .

Problème. On veut estimer l'erreur pour choisir $\mathscr{H}$ ou λ mais. . .

- il ne faut pas le faire sur les données d'apprentissage
  (➠ problème du sur-apprentissage),
- il ne faut pas non plus le faire avec les données de test
  (➠ biais dans l'évaluation finale de l'erreur).

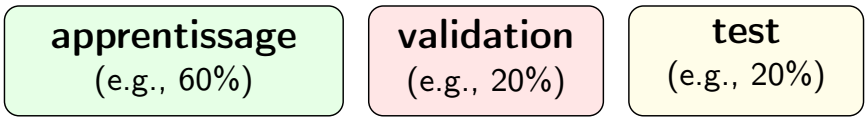
Plan du cours

Solution : ensemble de validation

Idée : partager les données en trois ensembles

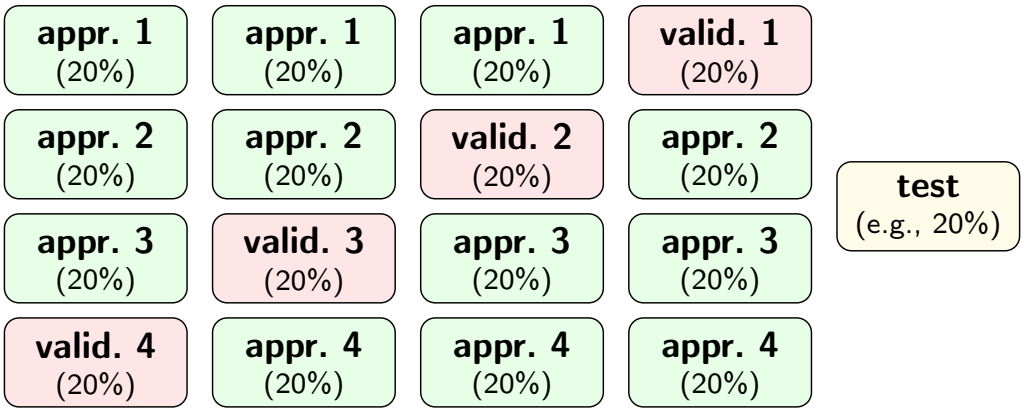
- données d'apprentissage : construction des $\hat{h}$ à $\mathscr{H}/\lambda$ fixés,
- données de validation : choix de $\mathscr{H}$, λ, etc.
- données de test : estimation de l'erreur de généralisation.

Validation simple (hold-out)



Amélioration : validation croisée

Validation croisée à k blocs (k-*fold*). Ici avec $k = 4$:



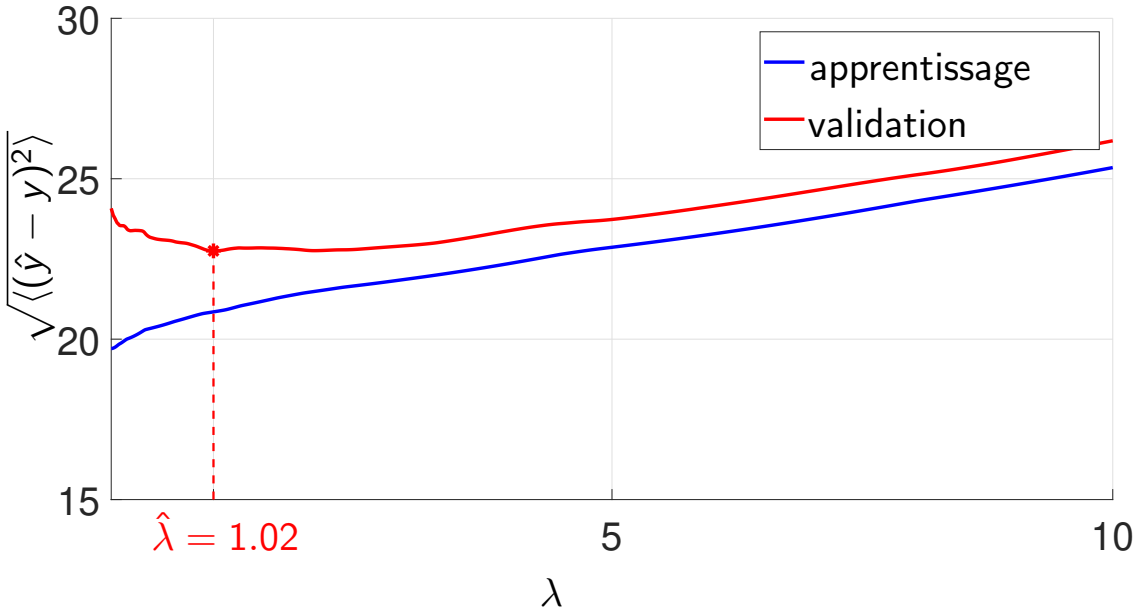
➠ on moyenne les erreurs sur les k ensembles de validation.

Cas particulier : validation croisée « leave one out »

- $k = n$ blocs (de taille $n/k = 1$).

Exemple « Ozone » : estimation du λ

- Prédicteur obtenu par une régression LASSO réalisée sur toutes les variables + leurs interactions
- $\hat{\lambda}$ obtenu par VC (LOO)



Exemple « Ozone » : interactions

- Ajout des variables de type $X^{(j)}X^{(j')}$ et $X^{(j)}X^{(j')}X^{(j'')}$.
- Régression LASSO (pénalisation L^1).
- Hyper-paramètre λ estimé par VC (10-fold).

modèle	$X^{(j)}$	$X^{(j)}\,X^{(j')}$	$X^{(j)}\,X^{(j')}\,X^{(j'')}$
nombre total de variables	7	35	119
nombre de variables sélectionnées ($\beta_j \neq 0$)	4	9	8
$\sqrt{MSE}$ VC (10-fold)	49.1	41.5	33.0
variables sélectionnées	MOCAGE TEMPE NO VentANG	MOCAGE TEMPE NO2 MOCAGE · TEMPE TEMPE^2 TEMPE · MH2O TEMPE · NO2 NO2 · VentANG VentANG · VentANG	MOCAGE TEMPE NO2 MOCAGE · TEMPE TEMPE^2 TEMPE · RMH2O TEMPE^2 · MOCAGE VentANG^2 · TEMPE

Plan du cours

Autre approche pour le choix de modèle : le critère AIC

Hypothèse : modèles statistiques paramétriques $\mathscr{M}_j$ pour $\mathrm{P}^{Y|X}$.

On note $\hat{\theta}_j^{\mathrm{EMV}}$ l'EMV de θ dans le modèle $\mathscr{M}_j$.

Alors le critère AIC peut être aussi utilisé pour le choix de modèle :

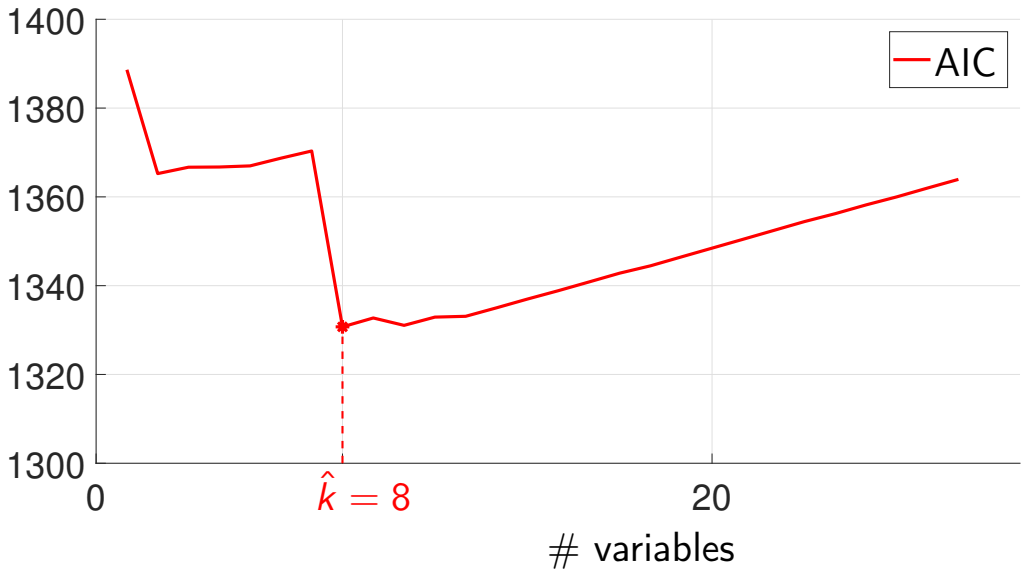
$$\hat{j} = \operatorname{argmin} \mathrm{AIC}(j), \qquad \mathrm{AIC}(j) \;=\; -2 \ln \mathcal{L}\left(\hat{\theta}_j^{\mathrm{EMV}}; \underline{X}, \underline{Y}\right) + 2k_j,$$

avec k_j le nombre de paramètres dans le modèle $\mathscr{M}_j$.

➠ voir TD pour une justification partielle (régression linéaire MCO)

Exemple « Ozone » : AIC

- Prédicteur obtenu par une régression OLS réalisée sur un nombre croissant de variables
  (d'abord les termes linéaires, puis les interactions)



Plan du cours

Plan du cours

Exercice 1 (Régression pénalisée)

corrigé

Soient $X_1, \ldots, X_n$ les exemples, à valeurs dans $\mathbb{R}^p$, et $Y_1, \ldots, Y_n$ les étiquettes, à valeurs dans $\mathbb{R}$. La relation liant Y_i à X_i est donnée par :

$$Y_i = \beta_1 X_i^{(1)} + \ldots + \beta_p X_i^{(p)} + \varepsilon_i,$$

où β est le vecteur de paramètres à estimer, et ε_i une variable aléatoire de loi $\mathcal{N}(0, \sigma^2)$, indépendante de X_i.
On se propose d'estimer β en minimisant un critère de la forme

$$\frac{1}{2} \sum_{i=1}^{n} \left(Y_i - \beta^\top X_i \right)^2 + \lambda \mathcal{P}(\beta) \qquad (1)$$

où $\mathcal{P}$ est un terme de pénalisation, et $\lambda \geq 0$ un hyper-paramètre.

Exercice 1 (Régression pénalisée)

corrigé

slide 12

On note $X = [X_1 \dots X_n]^\top$, la matrice $n \times p$ contenant les observations. **On se place dans le cas où $X^\top X = I_p$.**

Question

1. Donner l'expression de l'estimateur quand $\lambda = 0$. On notera cet estimateur $\hat{\beta}$.
2. On considère une pénalisation de la forme $\mathcal{P}(\beta) = \|\beta\|_2^2$. Donner l'expression de cet estimateur que l'on notera $\hat{\beta}^R$,et en déduire qu'il existe une constante $c_{1,\lambda}$ (que l'on explicitera) telle que $\hat{\beta}_j^R = c_{1,\lambda}\hat{\beta}_j$, $j = 1, \dots, p$.

Exercice 1 (Régression pénalisée)

corrigé

slide 12

Question

3. On considère une pénalisation de la forme $\mathcal{P}(\beta) = \|\beta\|_1$. En préambule, montrer que le minimum sur $\mathbb{R}$ de la fonction

$$f : \alpha \mapsto \frac{1}{2}(x - \alpha)^2 + \lambda |\alpha|$$

est atteint pour$\alpha^* = \text{sign}(x)\ \max(0, |x| - \lambda)$.

4. En déduire la solution du problème d'optimisation (1) pour $\mathcal{P}(\beta) = \|\beta\|_1$ que l'on exprimera en fonction de $\hat{\beta}$. On notera $\hat{\beta}^L$ cet estimateur.

Plan du cours

Corrigé de l'exercice 1

retour au sujet

1. On reconnait le critère des moindres carrés et l'on a :

$$\hat{\beta} = (X^\top X)^{-1} X^\top Y = X^\top Y$$

2. Il s'agit de la régression ridge.

$$\begin{aligned} \hat{\beta}^R &= (X^\top X + 2\lambda I)^{-1} X^\top Y \\ &= (1 + 2\lambda)^{-1} \hat{\beta} \end{aligned}$$

Il vient donc que $\hat{\beta}_j^R = (1 + 2\lambda)^{-1} \hat{\beta}_j$.

Corrigé de l'exercice 1

retour au sujet

3. La fonction f n'est pas dérivable, mais elle est dérivable en tout point $\alpha \neq 0$ *et continue en* $\alpha = 0$. On peut donc déterminer son minimum en faisant une analyse de ses variations au moyen du signe de la dérivée, comme si elle était dérivable partout.
La dérivée en tout $\alpha \neq 0$ s'écrit

$$f'(\alpha) = \begin{cases} \alpha - x + \lambda & \text{si } \alpha > 0, \\ \alpha - x - \lambda & \text{si } \alpha < 0, \end{cases}$$

d'où

$$f'(\alpha) > 0 \quad \Leftrightarrow \quad (\alpha > x - \lambda \text{ et } \alpha > 0) \text{ ou } (\alpha > x + \lambda \text{ et } \alpha < 0)\,. \tag{2}$$

Corrigé de l'exercice 1

retour au sujet

3. Supposons par exemple $x > 0$. Alors le deuxième cas dans le membre de droite de (2) est impossible, et il reste :

$$f'(\alpha) > 0 \quad \Leftrightarrow \quad \alpha > x - \lambda \text{ et } \alpha > 0 \quad \Leftrightarrow \quad \alpha > \max(0, x - \lambda)\,. \tag{3}$$

De même, toujours en supposant $x > 0$,

$$\begin{aligned} f'(\alpha) < 0 \quad &\Leftrightarrow \quad (\alpha < x - \lambda \text{ et } \alpha > 0) \text{ ou } (\alpha < x + \lambda \text{ et } \alpha < 0) \\ &\Leftrightarrow \quad (0 < \alpha < \max(0, x - \lambda)) \text{ ou } (\alpha < 0) \\ &\Leftrightarrow \quad (\alpha < \max(0, x - \lambda)) \text{ et } (\alpha \neq 0)\,. \end{aligned}$$

Ainsi f est strictement décroissante à gauche de $\max(0, x - \lambda)$, strictement croissante à droite, ce qui conclut le cas $x > 0$.
Le cas $x < 0$ s'en déduit comme précédemment.

Corrigé de l'exercice 1

retour au sujet

4. On va ici manipuler le problème d'optimisation initial de sorte à se ramener au problème d'optimisation de la question précédente :

$$\begin{aligned}\hat{\beta}^L &= \underset{\beta}{\text{argmin}} \frac{1}{2}\|Y - X\beta\|^2 + \lambda\|\beta\|_1 \\ &= \underset{\beta}{\text{argmin}} \frac{1}{2}\|Y - X\hat{\beta} + X\hat{\beta} - X\beta\|^2 + \lambda\|\beta\|_1 \\ &= \underset{\beta}{\text{argmin}} \frac{1}{2}\left\{\|Y - X\hat{\beta}\|^2 + \|X\hat{\beta} - X\beta\|^2\right\} + \lambda\|\beta\|_1\end{aligned}$$

Le produit croisé s'annule puisque le résidu $(Y - X\hat{\beta})$ est par construction, orthogonal à toute combinaison linéaire de colonnes de X et donc $(Y - X\hat{\beta})^\top(X\hat{\beta} - X\beta) = 0$.

Corrigé de l'exercice 1

retour au sujet

4. Le premier terme étant indépendant de β, il vient donc :

$$\begin{aligned}\hat{\beta}^L &= \underset{\beta}{\text{argmin}} \frac{1}{2}\|X\hat{\beta} - X\beta\|^2 + \lambda\|\beta\|_1 \\ &= \underset{\beta}{\text{argmin}} \frac{1}{2}(\hat{\beta} - \beta)^\top X^\top X(\hat{\beta} - \beta) + \lambda\|\beta\|_1 \\ &= \underset{\beta}{\text{argmin}} \frac{1}{2}(\hat{\beta} - \beta)^\top(\hat{\beta} - \beta) + \lambda\|\beta\|_1 \\ &= \underset{\beta}{\text{argmin}} \frac{1}{2}\sum_{j=1}^{p}(\hat{\beta}_j - \beta_j)^2 + \lambda|\beta_j|\end{aligned}$$

Le problème est séparable et, de la question précédente, il vient :

$$\hat{\beta}_j^L = \text{sign}(\hat{\beta}_j)\max(0, |\hat{\beta}_j| - \lambda)$$

Plan du cours

Plan du cours

1 – Régression (ou classification) régularisée : pénalisation

2 – Estimation du risque (erreur de généralisation)

3 – Hyper-paramètres, choix de modèle

4 – Exercices et corrections

5 – Annexes

5.1 – Construction de modèles : *feature engineering*

Non-linéarité dans les modèles linéaires...

Si le risque empirique $\hat{\mathscr{R}}(\hat{h})$ est élevé, plusieurs causes possibles :

- bruit : difficulté intrinsèque à prédire Y
  - ➠ erreur statistique irréductible.
- non-linéarité du prédicteur optimal par rapport aux $X^{(j)}$
  - ➠ erreur d'approximation, réductible.

Solution possible : $x^{(1)}, \ldots, x^{(p)} \mapsto \tilde{x}^{(1)}, \ldots, \tilde{x}^{(q)}$

- avec $\tilde{x}^{(j)}$ fonction de $x^{(1)}, \ldots, x^{(p)}$.
- Le modèle reste linéaire par rapport à β.

Exemples

Quelques exemples :

- transformations scalaires : $\ln(x^{(j)})$, $\sqrt{x^{(j)}}$, $(x^{(j)})^k \ldots$
- interactions (ici d'ordre deux) : $x^{(j)}x^{(k)}$, $j \neq k$,
- interactions d'ordre supérieur,
- développement (tronqué) dans une base...

si $q \gg p$, risque de sur-apprentissage.

Remarques : *feature engineering*

- Proposer de nouvelles variables pertinentes
  - ➠ expertise métier (ou choix de modèle...?)
- On peut utiliser ce principe pour *réduire* la dimension
  - ➠ extraction de caractéristiques (*features extraction*).

Développement dans une base

Principe

Soit $\{\psi_m\}_{m>0}$ une base de fonctions de $L^2(\mathcal{X})^\dagger$.

On considère $\tilde{X}^{(m)} = \psi_m(X)$, $m = 1, \ldots, M$

➠ décomposition tronquée dans la base $\{\psi_m\}$.

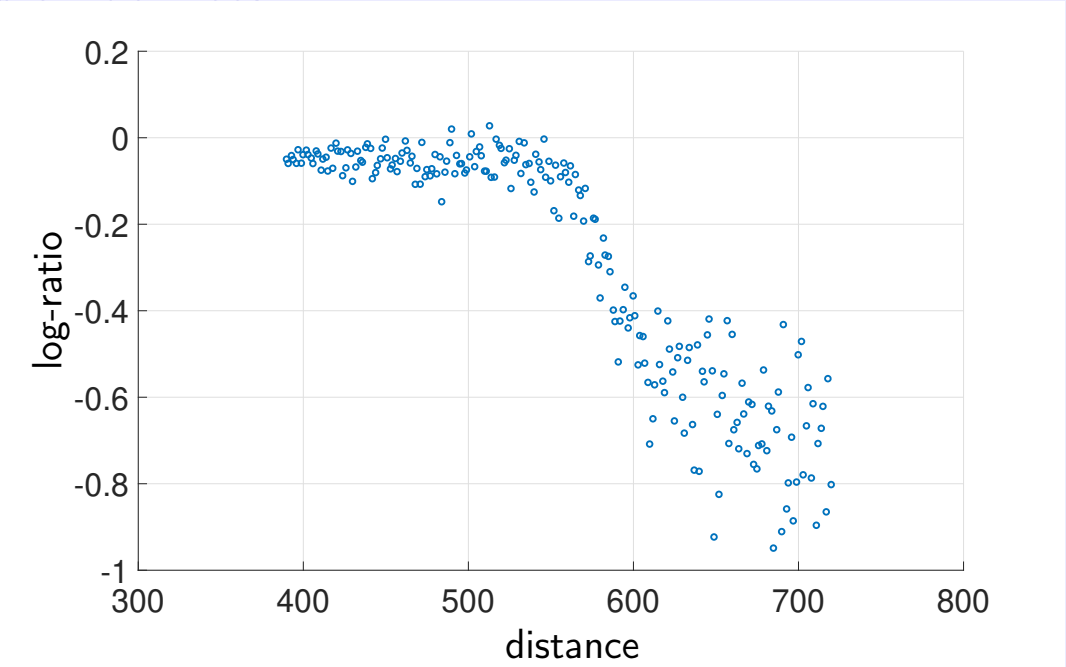
Exemples de bases (de préférence orthogonales) :

- bases de polynômes,
- bases d'ondelettes,
- base de Fourier...

† ou autre espace de fonctions sur $\mathcal{X}$ supposé contenir le h^* optimal.

➠ retour au slide 28

Exemple : données LIDAR



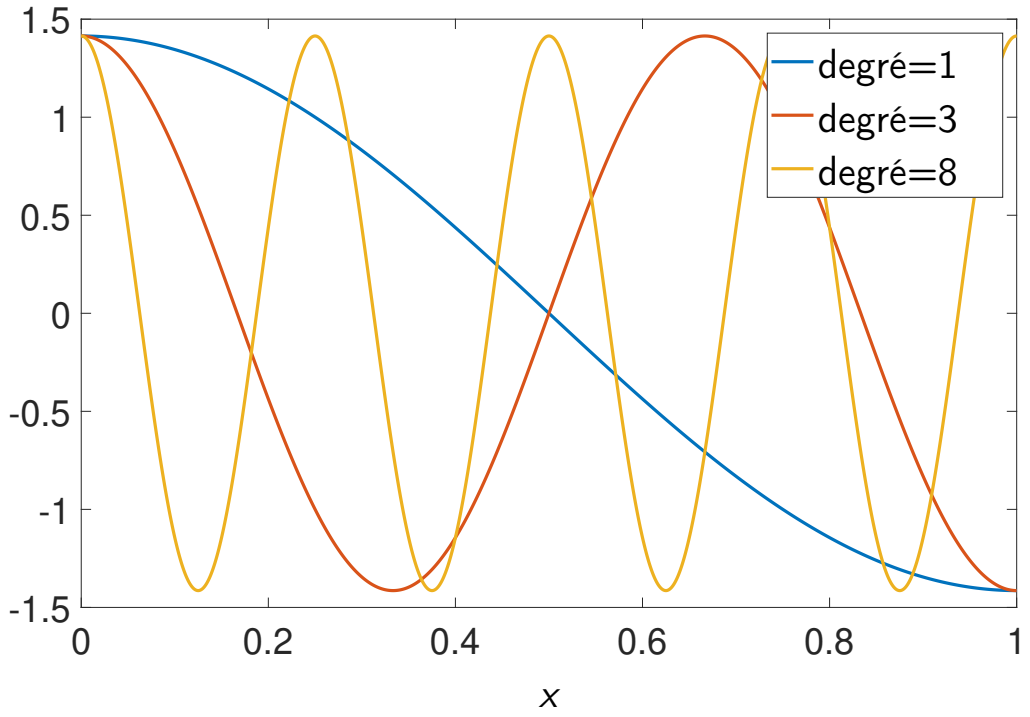
abscisse : distance entre le point de réflexion et la source laser
ordonnée : log-ratio de lumière reçue pour 2 sources de fréquences différentes

Données issues de `http://matt-wand.utsacademics.info/webspr/lidar.html`

LIDAR : LIght Detection And Ranging

➠ retour au slide 28

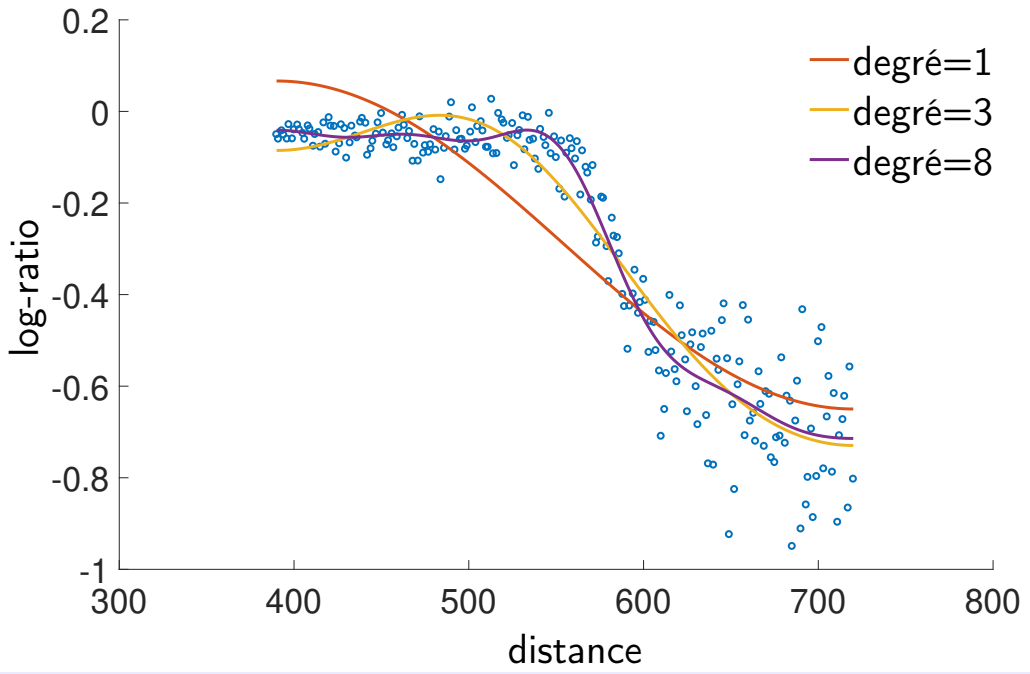
Base de cosinus orthogonaux (base de $L^2([0,1])$)



retour au slide 28

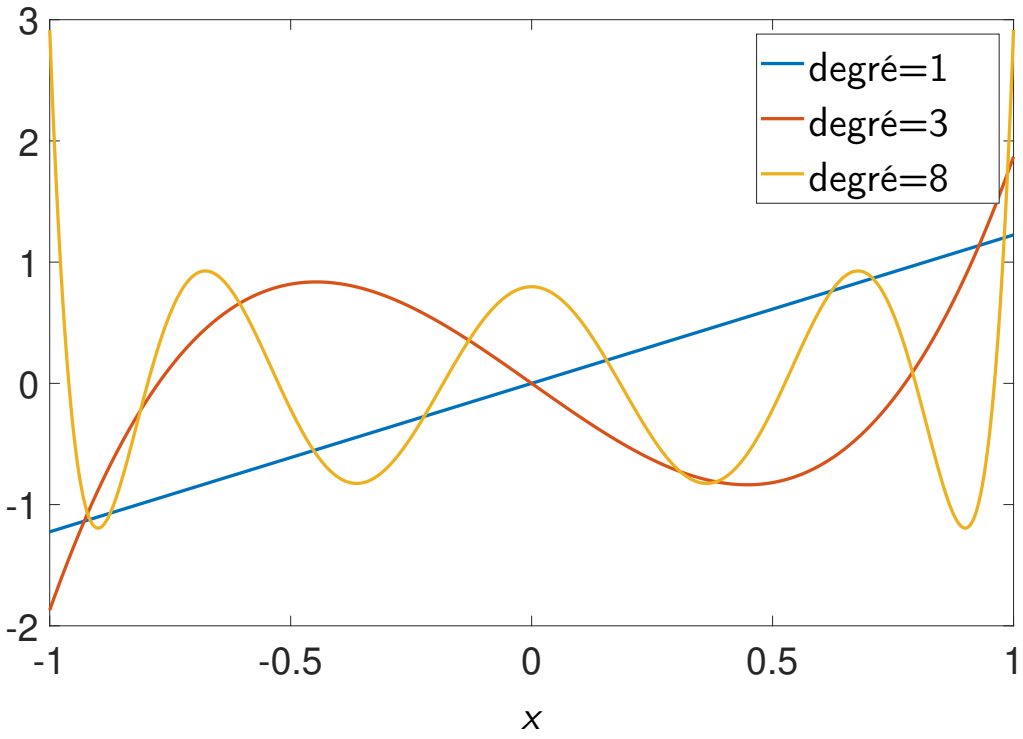
Exemple : données LIDAR (suite)

Fonction de perte quadratique, base de cosinus orthogonaux



retour au slide 28

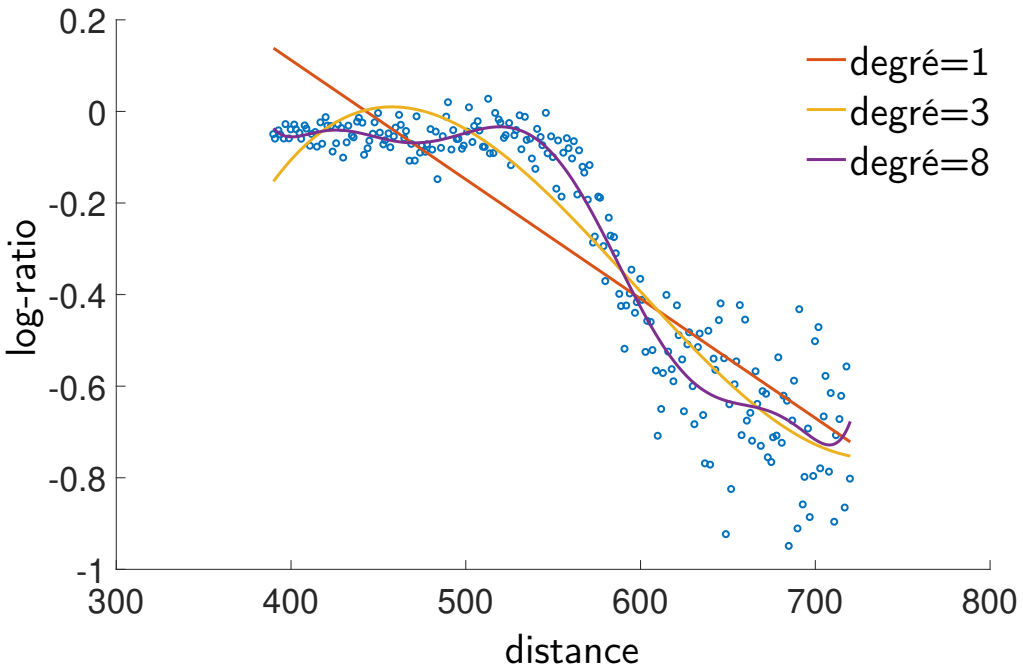
Polynômes de Legendre (base de $L^2([-1,1])$)



retour au slide 28

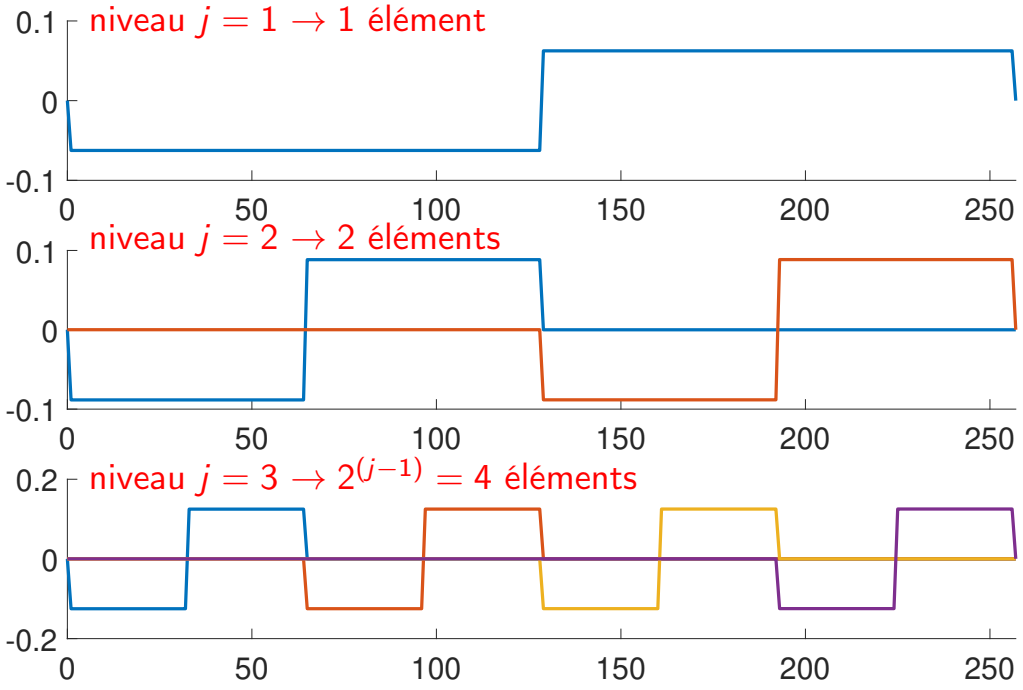
Exemple : données LIDAR (suite)

Fonction de perte quadratique + polynômes de Legendre



retour au slide 28

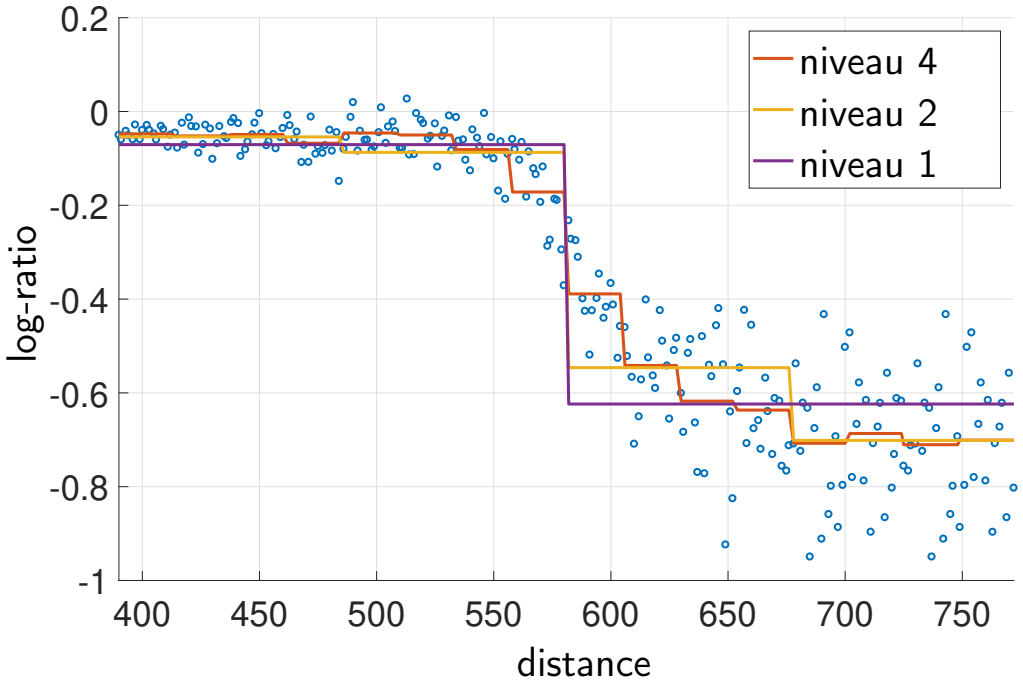
Base d'ondelettes de Haar



retour au slide 28

Exemple : données LIDAR (suite)

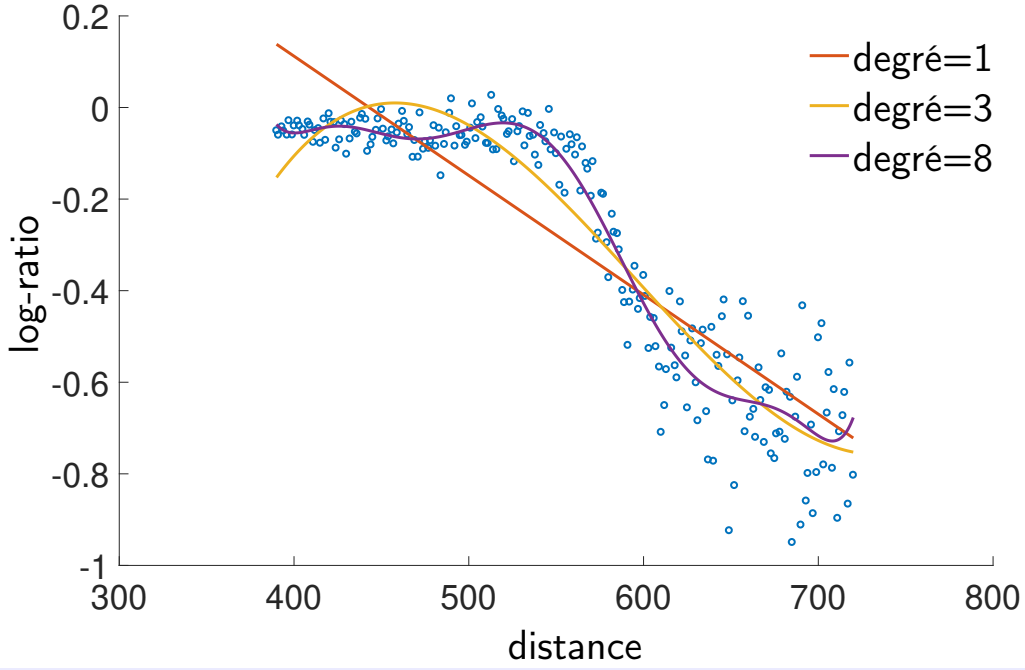
Fonction de perte quadratique + ondelettes de Haar



retour au slide 28

Exemple : données LIDAR (suite)

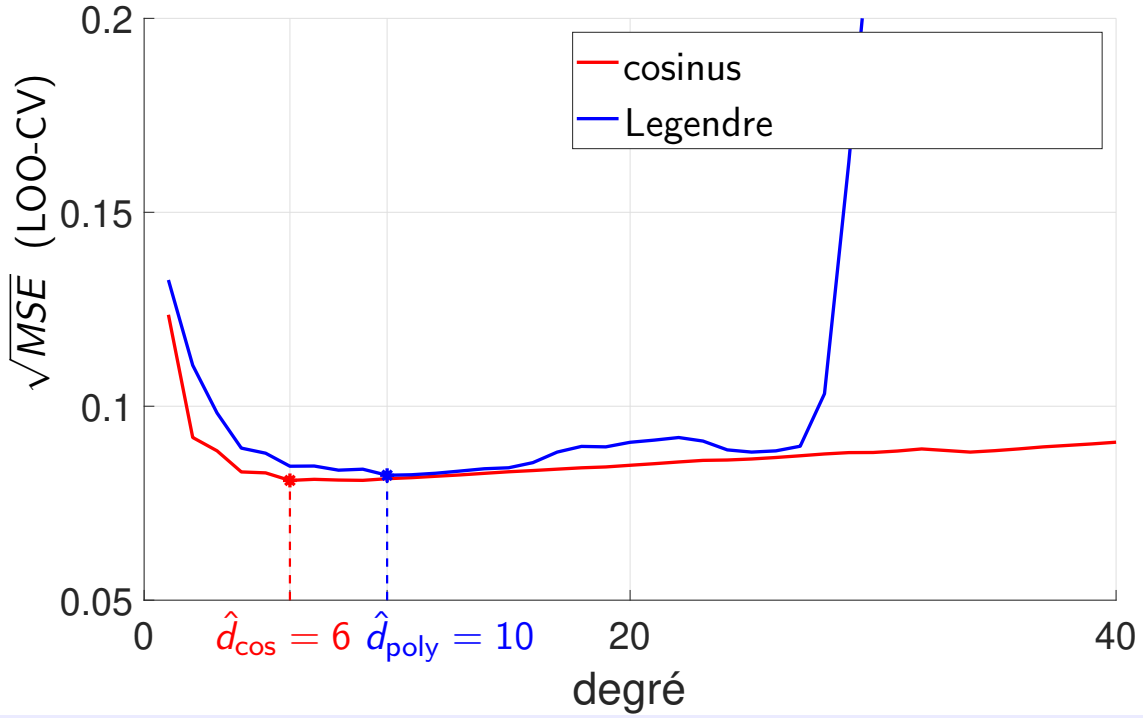
Fonction de perte quadratique + polynômes de Legendre



retour au slide 28

Exemple : données LIDAR (suite)

Choix de modèle



retour au slide 28