

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

1/54

Cours 6/9

Introduction à l'apprentissage supervisé Modèles linéaires pour la régression

Objectifs du cours 6

- ▶ Présenter les principes de base de l'apprentissage statistique
- ▶ Poser le cadre mathématique de la régression et de la classification
- ▶ Savoir construire et utiliser des modèles de régression linéaire

2/54

Plan du cours

- 1 – Introduction à l'apprentissage statistique (supervisé)
- 2 – Régression linéaire
- 3 – Exercices types
- 4 – Annexes

3/54

Plan du cours

- 1 – Introduction à l'apprentissage statistique (supervisé)
 - 1.1 – Apprentissage statistique
 - 1.2 – Cadre mathématique de l'apprentissage supervisé
- 2 – Régression linéaire
- 3 – Exercices types
- 4 – Annexes

Plan du cours

1 – Introduction à l'apprentissage statistique (supervisé)

1.1 – Apprentissage statistique

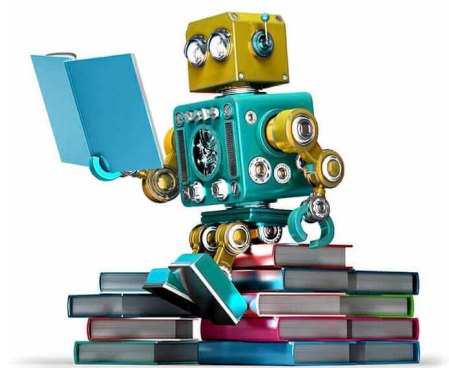
1.2 – Cadre mathématique de l'apprentissage supervisé

2 – Régression linéaire

3 – Exercices types

4 – Annexes

Apprentissage automatique (*machine learning*)



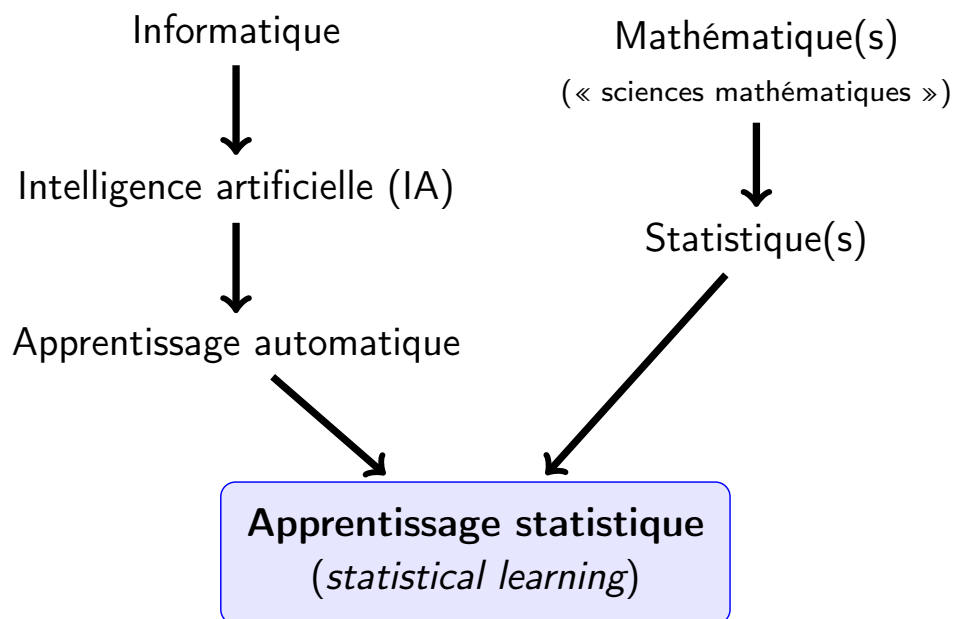
Une définition possible. . .

« *Machine learning is the study of computational methods for improving performance by mechanizing the acquisition of knowledge **from experience**.* » → **données !**

(P. Langley and H. A. Simon (1995). Comm. of the ACM, 38(11):54–64)

Image: J. Walsh (2016). Machine Learning: The Speed-of-Light Evolution of AI and Design.
<https://www.autodesk.com/redshift/machine-learning/>

Apprentissage statistique : une vision « disciplinaire »



Remarque : en pratique, « apprentissage automatique » (*machine learning*) et « apprentissage statistique » (*statistical learning*) sont très souvent utilisés de manière interchangeable.

5/54

Exemple : reconnaissance de caractères manuscrits



Sous-ensemble de la base de données MNIST
contenant 70 000 images[†] de 28 × 28 pixels

Problème d'apprentissage **supervisé** : exemples fournis avec une **étiquette**.

➡ Apprendre à **classer** une nouvelle image dans l'une des 10 classes.

[†] 60 000 pour l'apprentissage et 10 000 pour les tests
Source : <https://www.openml.org/search?type=data&id=554>

6/54

Exemple : évaluation de biens immobiliers à Ames (Iowa)



Data Description	
• SalePrice - the property's sale price in dollars.	This is the target variable that you're trying to predict.
• MSSubClass: The building class	
• MSZoning: The general zoning classification	
• LotFrontage: Linear feet of street connected to property	
• LotArea: Lot size in square feet	
• Street: Type of road access	
• Alley: Type of alley access	
• LotShape: General shape of property	
• ...	

Base de données de transactions immobilières
(prix de vente + 79 attributs ; 1460 transactions)

Prob. d'apprentissage **supervisé** : ici le prix joue le rôle d'une **étiquette**.

⇒ Apprendre à **prédire** le prix d'un bien à partir des 79 attributs.

Source : compétition Kaggle « House Prices : Advanced Regression Techniques »
(<https://www.kaggle.com/c/house-prices-advanced-regression-techniques>)

7/54

Différentes formes d'apprentissage

▶ Apprentissage **supervisé** : exemples avec des **étiquettes**

▶ analogie : apprentissage avec l'aide d'un enseignant.

⇒ cours 6 à 8

▶ Apprentissage **non supervisé** : exemples **sans étiquette**

▶ analogie : apprentissage sans enseignant, découverte.

⇒ cours 9

et aussi... (hors programme)

▶ Apprentissage **actif**

▶ les étiquettes sont obtenues séquentiellement, sur demande ;

▶ exemple : détection de fraudes bancaires → analyse en profondeur des dossiers « suspects » uniquement.

▶ Apprentissage **par renforcement**

▶ Apprentissage **par transfert**

▶ ...

8/54

Nombreux domaines d'application

- ▶ Vision par ordinateur
- ▶ Reconnaissance de la parole
- ▶ Traitement des langues naturelles
- ▶ Détection de fraude
- ▶ Médecine personnalisée
- ▶ Systèmes de recommandation & marketing ciblé
- ▶ ...

9/54

Plan du cours

1 – Introduction à l'apprentissage statistique (supervisé)

1.1 – Apprentissage statistique

1.2 – Cadre mathématique de l'apprentissage supervisé

2 – Régression linéaire

3 – Exercices types

4 – Annexes

Espace des exemples et espace des étiquettes

Espace des **exemples** : \mathcal{X}

► exemples $x_1, \dots, x_n \in \mathcal{X}$

Espace des **étiquettes** : \mathcal{Y}

► étiquettes $y_1, \dots, y_n \in \mathcal{Y}$

Exemple MNIST :



Classe : zéro, un, ... neuf

$$\mathcal{X} = [0, 1]^{28 \times 28}$$

$$\mathcal{Y} = \{\text{« zéro »}, \dots, \text{« neuf »}\}$$

Dans la suite du cours on supposera toujours :

$$\mathcal{X} = \mathbb{R}^p$$

$$\mathcal{Y} = \mathbb{R} \rightarrow \text{régression, ou}$$

$$\mathcal{Y} = \{0, 1\} \rightarrow \text{classification}^\dagger.$$

[†] plus précisément : classification *binaire*. Cependant, les méthodes de classification binaire peuvent également être utiles dans le cadre de problèmes « multi-classes » (par ex. MNIST)...

10/54

Modèle statistique

Modèle statistique de l'apprentissage supervisé

i) En apprentissage supervisé on considère un **n -échantillon iid** :

$$(X_1, Y_1), \dots, (X_n, Y_n) \stackrel{\text{iid}}{\sim} P^{X,Y}$$

avec $P^{X,Y}$ une mesure de probabilité sur $\mathcal{X} \times \mathcal{Y}$, inconnue.

ii) Sauf mention explicite du contraire, on ne fera **pas d'hypothèse sur la loi** : $\theta = P^{X,Y}$ et $\Theta = \{\text{mesures de probabilité sur } \mathcal{X} \times \mathcal{Y}\}$.

Notation. On notera (X, Y) un autre couple de VA, suivant la **même loi** $P^{X,Y}$ mais **non observé**.



au changement de notation (par rapport aux cours précédents)

► observations : $X_i \in \mathcal{X} \rightarrow (X_i, Y_i) \in \mathcal{X} \times \mathcal{Y}$

11/54

Objectif

Objectif (informel) de l'apprentissage supervisé

On veut "apprendre" des données[†] une **fonction de prédiction**[‡]

$$\begin{aligned}\hat{h} : \mathcal{X} &\rightarrow \mathcal{Y} \\ x &\mapsto y = \hat{h}(x)\end{aligned}$$

telle que les VA Y et $\hat{h}(X)$ soient aussi « **proches** » que possible.

[†] On devrait donc écrire $\hat{h}(x) = \hat{h}(x; (X_1, Y_1), \dots, (X_n, Y_n)) \dots$

[‡] Si \mathcal{Y} est fini, on parle plutôt de **fonction de classification** ou « classifieur ».

Pour cela, on se donne une **fonction de perte** :

$$\begin{aligned}L : \mathcal{Y} \times \mathcal{Y} &\rightarrow \mathbb{R}^+ \\ (y, \tilde{y}) &\mapsto L(y, \tilde{y}).\end{aligned}$$

⇒ $L(y, \hat{h}(x))$ traduit la perte lorsque l'on prédit y par $\hat{h}(x)$.

12/54

Objectif (suite)

Définition : risque (erreur de généralisation)

Étant donné une fonction de perte L et une fonction de prédiction h , on définit le **risque**, ou **erreur de généralisation** :

$$R(h) = \mathbb{E}(L(Y, h(X))),$$

l'espérance portant sur le couple (X, Y) .

(NB : le terme « risque » a ici un sens différent des cours précédents)



Ce risque **dépend de la loi $\theta = P^{X,Y}$ inconnue** :

$$R_{\theta}(h) = \iint_{\mathcal{X} \times \mathcal{Y}} L(y, h(x)) P^{X,Y}(dx, dy).$$

⇒ Dans la suite on notera simplement $R(h)$.

13/54

Objectif (suite)

La **fonction de prédiction optimale** dépend de la loi $P^{X,Y}$ inconnue :

$$h^* = h^*(P^{X,Y}) = \text{argmin}_h R(h).$$

(existence/unicité non garanties)

Objectif de l'apprentissage supervisé

On veut construire, à partir des données $(X_1, Y_1), \dots, (X_n, Y_n)$ une **fonction de prédiction**

$$\begin{aligned} \hat{h} : \mathcal{X} &\rightarrow \mathcal{Y} \\ x &\mapsto y = \hat{h}(x) \end{aligned}$$

telle que le risque $R(\hat{h})$ soit **aussi proche que possible** du **risque optimal**

$$R^* = \inf_h R(h)$$

(aussi appelé « risque bayésien »).

14/54

Plan du cours

1 – Introduction à l'apprentissage statistique (supervisé)

2 – Régression linéaire

2.1 – Introduction aux modèles pour la régression

2.2 – Modèle linéaire / perte quadratique

2.3 – Retour à l'inférence statistique

2.4 – Autres fonction de pertes

2.5 – Limites des « moindres carrés ordinaires »

3 – Exercices types

4 – Annexes

Plan du cours

1 – Introduction à l'apprentissage statistique (supervisé)

2 – Régression linéaire

2.1 – Introduction aux modèles pour la régression

2.2 – Modèle linéaire / perte quadratique

2.3 – Retour à l'inférence statistique

2.4 – Autres fonction de pertes

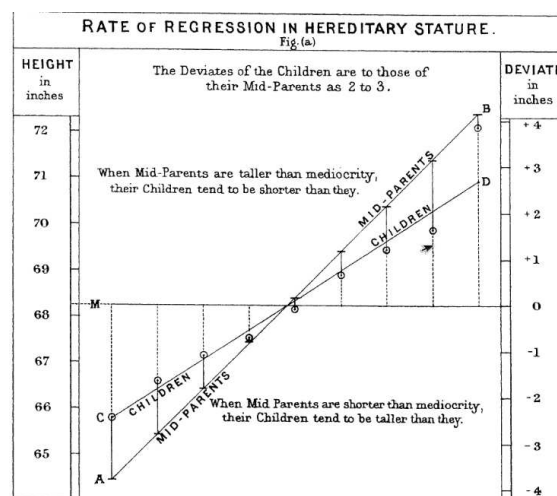
2.5 – Limites des « moindres carrés ordinaires »

3 – Exercices types

4 – Annexes

Régression

On s'intéresse dans la suite de ce cours à la **régression** : $\mathcal{Y} = \mathbb{R}$.



Francis Galton (1886). "Regression Towards Mediocrity in Hereditary Stature",
Journal of the Anthropological Institute, 15:246–263.

Vocab. stat. : **Y = variable expliquée / X = variables explicatives.**

Perte quadratique

Considérons pour commencer la perte quadratique :

$$L(y, \tilde{y}) = (y - \tilde{y})^2.$$

(la plus couramment utilisée en régression)

Proposition

Pour la perte quadratique, la fonction de prédiction optimale est

$$\forall x \in \mathcal{X}, \quad h^*(x) = \mathbb{E}(Y|X = x).$$

Vocab. : $x \mapsto \mathbb{E}(Y|X = x)$ est parfois appelée « fonction de régression ».

On considérera cette fonction de perte jusqu'à nouvel ordre.

16/54

Perte quadratique (suite)

Démonstration. Par la formule de l'espérance totale on a :

$$R(h) = \mathbb{E} \left(\underbrace{\mathbb{E} \left((Y - h(X))^2 \mid X \right)}_{(*)} \right).$$

Le terme $(*)$ se décompose :

$$\begin{aligned} \mathbb{E} \left((Y - h(X))^2 \mid X \right) &= \mathbb{E} \left((Y - \mathbb{E}(Y \mid X) + \mathbb{E}(Y \mid X) - h(X))^2 \mid X \right) \\ &= \text{var}(Y \mid X) + (\mathbb{E}(Y \mid X) - h(X))^2. \end{aligned}$$

Le premier terme ne dépend pas de h , et le second est minimal lorsque $h(X) = \mathbb{E}(Y \mid X)$ p.s. □

17/54

Risque empirique

Rappel : la loi jointe $P^{X,Y}$ est inconnue

⇒ le risque $R(h)$ ne peut être calculé.

Définition : risque empirique

On appelle **risque empirique** le risque

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

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

Avec la perte quadratique :

$$\hat{R}_n(h) = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n (Y_i - h(X_i))^2.$$

18/54

Minimisation du risque empirique

Une méthode générale d'apprentissage :

- 1 Choisir une famille \mathcal{H} de fonctions de prédiction.
- 2 Sélectionner la fonction h qui **minimise le risque empirique** :

$$\hat{h}^{\text{MRE}} = \operatorname{argmin}_{h \in \mathcal{H}} \hat{R}_n(h).$$

Exemple : fonctions de prédiction « linéaires » (affines)

$$\mathcal{H} = \left\{ h : \mathbb{R}^p \rightarrow \mathbb{R} \mid \exists \beta \in \mathbb{R}^{p+1}, \forall x \in \mathcal{X}, \right. \\ \left. h(x) = \beta_0 + \beta_1 x^{(1)} + \dots + \beta_p x^{(p)} \right\}$$



la méthode MRE est raisonnable si \mathcal{H} n'est « pas trop grande »

⇒ sinon, il faut *pénaliser* les modèles trop complexes (voir plus loin)

19/54

Autres exemples de familles de fonctions de prédiction

- ▶ **modèle linéaire** avec fonctions de base quelconques

$$h(x) = \beta_1 h_1(x) + \dots + \beta_K h_K(x),$$

les $h_k : \mathcal{X} \rightarrow \mathbb{R}$ étant connues ;

- ▶ **modèle additif**

$$h(x) = h_1(x^{(1)}) + \dots + h_p(x^{(p)}),$$

avec les h_k dans une famille de fonctions $\mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$ à préciser ;

- ▶ réseaux de neurones,
- ▶ arbres de décisions,
- ▶ modèles linéaires/additifs généralisés (GLM/GAM)
- ▶ ...

20/54

Plan du cours

1 – Introduction à l'apprentissage statistique (supervisé)

2 – Régression linéaire

2.1 – Introduction aux modèles pour la régression

2.2 – Modèle linéaire / perte quadratique

2.3 – Retour à l'inférence statistique

2.4 – Autres fonction de pertes

2.5 – Limites des « moindres carrés ordinaires »

3 – Exercices types

4 – Annexes

Somme des carrés des résidus

On considère des fonctions h de la forme :

$$h(x) = \beta_0 + \beta_1 x^{(1)} + \dots + \beta_p x^{(p)} = \beta^\top x$$

$$\text{avec } \beta = \begin{pmatrix} \beta_0 \\ \beta_1 \\ \vdots \\ \beta_p \end{pmatrix} \text{ et } x = \begin{pmatrix} 1 \\ x^{(1)} \\ \vdots \\ x^{(p)} \end{pmatrix}.$$

Définition : SCR / critère des moindres carrés

Risque empirique : $\hat{R}(h) = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n (Y_i - \beta^\top X_i)^2$.

On définit la **Somme des Carrés des Résidus** (SCR) :

$$\text{SCR}(\beta) = \sum_{i=1}^n (Y_i - \beta^\top X_i)^2$$

ou **critère des moindres carrés**.

21/54

Notations matricielles

$$\text{Soient } \underline{X} = \begin{pmatrix} 1 & X_1^{(1)} & \dots & X_1^{(p)} \\ 1 & X_2^{(1)} & \dots & X_2^{(p)} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 1 & X_n^{(1)} & \dots & X_n^{(p)} \end{pmatrix} \text{ et } \underline{Y} = \begin{pmatrix} Y_1 \\ Y_2 \\ \vdots \\ Y_n \end{pmatrix}.$$

⇒ \underline{X} de taille $n \times (p+1)$ et \underline{Y} de longueur n .

Écriture matricielle du critère

$$\begin{aligned} \text{SCR}(\beta) &= \|\underline{Y} - \underline{X}\beta\|^2 \\ &= (\underline{Y} - \underline{X}\beta)^\top (\underline{Y} - \underline{X}\beta) \\ &= \beta^\top \underline{X}^\top \underline{X} \beta - 2 \underline{Y}^\top \underline{X} \beta + \underline{Y}^\top \underline{Y} \end{aligned}$$

22/54

Minimisation du SCR

Hypothèse

On suppose : $\underline{X}^\top \underline{X}$ inversible

⇒ implique $p + 1 \leq n$.

Soit $\tilde{\beta} = (\underline{X}^\top \underline{X})^{-1} \underline{X}^\top \underline{Y}$. Alors :

$$\begin{aligned}\text{SCR}(\beta) &= \beta^\top \underline{X}^\top \underline{X} \beta - 2 \underline{Y}^\top \underline{X} \beta + \underline{Y}^\top \underline{Y} \\ &= (\beta - \tilde{\beta})^\top \underline{X}^\top \underline{X} (\beta - \tilde{\beta}) + c\end{aligned}$$

où c est une grandeur indépendante de β .

En effet : $\tilde{\beta}^\top \underline{X}^\top \underline{X} \beta = \underline{Y}^\top \underline{X} (\underline{X}^\top \underline{X})^{-1} \underline{X}^\top \underline{X} \beta = \underline{Y}^\top \underline{X} \beta$.

23/54

Minimisation du SCR

Rappel : $\text{SCR}(\beta) = (\beta - \tilde{\beta})^\top \underline{X}^\top \underline{X} (\beta - \tilde{\beta}) + c$.

On a :

- i $\forall a \in \mathbb{R}^{p+1}, a^\top \underline{X}^\top \underline{X} a = \|\underline{X}a\|^2 \geq 0$,
 - ii $\underline{X}^\top \underline{X}$ est inversible, donc définie positive.
- (i) implique que $\text{SCR}(\beta)$ est minimum en $\tilde{\beta}$;
- (ii) implique que le minimum est unique ($a^\top \underline{X}^\top \underline{X} a = 0 \implies a = 0$).

Proposition : estimateur des moindres carrés

Lorsque $\underline{X}^\top \underline{X}$ est inversible,

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

est l'unique vecteur qui minimise la fonction SCR.

⇒ complément : différentiation vectorielle

24/54

Quantifier l'apport des variables explicatives

Pour une régression sans variables explicatives, on aurait

$$\hat{h}(x) = \hat{\beta}_0, \quad \text{avec} \quad \hat{\beta}_0 = \bar{Y} = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n Y_i.$$

On définit : $\text{SCT} = \sum_{i=1}^n (Y_i - \bar{Y})^2 \rightarrow$ Somme des Carrés Totale.

Définition : coefficient de détermination R^2

Rappel : $\text{SCR}(\beta) = \sum_{i=1}^n (Y_i - \beta^\top X_i)^2$. On définit :

$$R^2 = 1 - \frac{\text{SCR}(\hat{\beta})}{\text{SCT}}.$$

Propriétés.

→ démonstration : voir exercice 1

- ▶ $0 \leq R^2 \leq 1$,
- ▶ $R^2 = 1 \iff \forall i, Y_i = \hat{\beta}^\top X_i$.

25/54

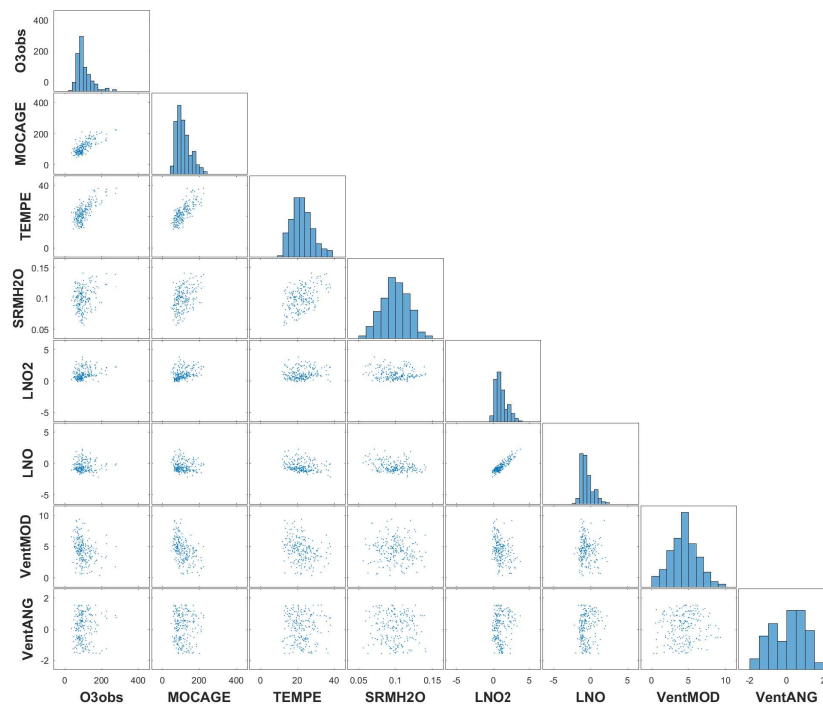
Exemple « Ozone » : présentation des données

variable	description
O3obs	concentration d'ozone observée au jour $t + 1$
MOCAGE	prévision de pollution obtenue par un modèle déterministe de mécanique des fluides
TEMPE	température prévue par MétéoFrance pour le jour $t + 1$
RMH2O	rapport d'humidité au jour t
NO2	concentration en dioxyde d'azote au jour t
NO	concentration en monoxyde d'azote au jour t
VentMOD	force du vent au jour t
VentANG	orientation du vent au jour t

Questions posées

- ▶ prédire la concentration d'ozone du jour $t + 1$ à partir des données disponibles au jour t
- ▶ prédire si la concentration dépassera le seuil de $150 \mu\text{g}/\text{m}^3$ (problème de classification traité au cours 7/9).

Exemple « Ozone » : exploration des données



27/54

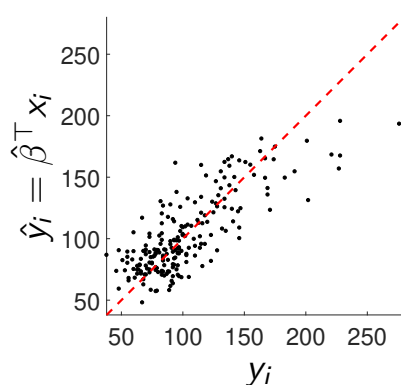
Exemple « Ozone » : coefficients de régression

Régression linéaire effectuée sur $n = 210$ jours.

Remarque. Les variables ont été  pour faciliter l'interprétation.

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

Coefficient de détermination. $R^2 = 65.7\%$



Observations :

- ▶ le coefficient négatif associé à NO2 est surprenant (mais NO2 est corrélée avec NO)
- ▶ RMH2O, VentMOD et VentANG semblent secondaires
- ▶ Le modèle explique en partie la variable à prédire (O3obs).

28/54

Plan du cours

1 – Introduction à l'apprentissage statistique (supervisé)

2 – Régression linéaire

2.1 – Introduction aux modèles pour la régression

2.2 – Modèle linéaire / perte quadratique

2.3 – Retour à l'inférence statistique

2.4 – Autres fonction de pertes

2.5 – Limites des « moindres carrés ordinaires »

3 – Exercices types

4 – Annexes

Propriétés de l'estimateur des moindres carrés

Rappel : jusqu'ici $(X_1, Y_1), \dots, (X_n, Y_n) \stackrel{\text{iid}}{\sim} P^{X,Y}$.

➡ dans cette partie, on suppose plutôt les X_i **déterministes**
(ou, de façon équivalente : on travaille « conditionnellement aux X_i »).

Supposons désormais qu'il existe $\beta \in \mathbb{R}^{p+1}$ tel que

$$(i) \quad \forall i, \quad Y_i = \beta^\top X_i + \epsilon_i$$

avec des erreurs ϵ_i

$$(ii) \quad \text{centrées : } \mathbb{E}(\epsilon_i) = 0,$$

$$(iii) \quad \text{décorrélées : } i \neq j \Rightarrow \text{cov}(\epsilon_i, \epsilon_j) = 0,$$

$$(iv) \quad \text{homoscédastiques : } \text{var}(\epsilon_i) = \sigma^2 \text{ pour un certain } \sigma^2 > 0.$$

Propriétés de l'estimateur des moindres carrés

Proposition

Sous ces hypothèses, l'estimateur $\hat{\beta}$ est **sans biais** :

$$\mathbb{E}(\hat{\beta}) = \beta,$$

et sa **matrice de covariance** s'écrit :

$$\text{var}(\hat{\beta}) = \sigma^2 (\underline{X}^\top \underline{X})^{-1}.$$

30/54

Propriétés de l'estimateur des moindres carrés

Démonstration.

Rappel : les X_i sont supposés déterministes.

On note $\underline{\epsilon} = (\epsilon_1, \dots, \epsilon_n)^\top$. Alors :

$$(i) \quad \Rightarrow \quad \begin{cases} \underline{Y} = \underline{X}\beta + \underline{\epsilon} \\ \hat{\beta} = (\underline{X}^\top \underline{X})^{-1} \underline{X}^\top \underline{Y} = \beta + (\underline{X}^\top \underline{X})^{-1} \underline{X}^\top \underline{\epsilon} \end{cases}$$

$$(ii) \quad \Rightarrow \quad \mathbb{E}(\hat{\beta}) = \beta + (\underline{X}^\top \underline{X})^{-1} \underline{X}^\top \mathbb{E}(\underline{\epsilon}) = \beta$$

$$(iii)+(iv) \quad \Rightarrow \quad \begin{aligned} \text{var}(\hat{\beta}) &= (\underline{X}^\top \underline{X})^{-1} \underline{X}^\top \text{var}(\underline{\epsilon}) \underline{X} (\underline{X}^\top \underline{X})^{-1} \\ &= \sigma^2 (\underline{X}^\top \underline{X})^{-1} \end{aligned}$$

□

31/54

Loi de l'estimateur $(\hat{\beta}, \hat{\sigma}^2)$ sous hypothèse gaussienne

On suppose de plus que $(\mathbf{v}) \in \text{est gaussien}$:

$$\log \mathcal{L}(\beta, \sigma^2; \underline{Y}) = -\frac{n}{2} \log(2\pi\sigma^2) - \frac{1}{2\sigma^2} \sum_{i=1}^n \left(Y_i - \beta^\top \mathbf{X}_i \right)^2.$$

Proposition : EMV de (β, σ^2)

(voir TD 6)

$$\text{L'EMV s'écrit : } \begin{cases} \hat{\beta} = \arg \min_{\beta} \sum_{i=1}^n \left(Y_i - \beta^\top \mathbf{X}_i \right)^2, \\ \hat{\sigma}^2 = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n \left(Y_i - \hat{\beta}^\top \mathbf{X}_i \right)^2. \end{cases}$$

⇒ On retrouve pour β l'estimateur des moindres carrés

Théorème de Student : loi de $(\hat{\beta}, \hat{\sigma}^2)$

(voir TD 6)

- ▶ $\hat{\beta} \sim \mathcal{N} \left(\beta, \sigma^2 (\underline{X}^\top \underline{X})^{-1} \right),$
- ▶ $\hat{\beta}$ et $\hat{\sigma}^2$ sont indépendants.
- ▶ $\hat{\sigma}^2 \sim \frac{\sigma^2}{n} \chi^2(n - p - 1),$

32/54

Tests / IC sur la valeur d'un élément β_j de β

On sait que $\hat{\beta}_j \sim \mathcal{N}(\beta_j, \sigma^2 \mathbf{v}_j)$ avec $\mathbf{v}_j = \left[(\underline{X}^\top \underline{X})^{-1} \right]_{j,j}$.

Fonction pivotale

$$T = \frac{\hat{\beta}_j - \beta_j}{\sqrt{\frac{n \hat{\sigma}^2 \mathbf{v}_j}{n - p - 1}}} \sim \mathcal{T}(n - p - 1)$$

avec $\mathcal{T}(n - p - 1)$: loi de Student à $n - p - 1$ degrés de liberté

⇒ Loi de Student

Remarque :

$$\frac{n \hat{\sigma}^2}{n - p - 1} = \frac{1}{n - p - 1} \sum_{i=1}^n \left(Y_i - \hat{\beta}^\top \mathbf{X}_i \right)^2$$

est un estimateur sans biais de σ^2 (voir TD 6).

33/54

Démonstration

D'après le théorème de Student,

- ▶ $U = \frac{\hat{\beta}_j - \beta_j}{\sigma \sqrt{v_j}} \sim \mathcal{N}(0, 1)$
- ▶ $V = \frac{n \hat{\sigma}^2}{\sigma^2} \sim \chi^2(n - p - 1),$
- ▶ et U et V sont indépendants.

Ainsi

$$T = \frac{\hat{\beta}_j - \beta_j}{\sqrt{\frac{n \hat{\sigma}^2 v_j}{n - p - 1}}} = \frac{U}{\sqrt{\frac{V}{n - p - 1}}} \sim \mathcal{T}(n - p - 1),$$

par définition de la loi de Student à $k = n - p - 1$ degrés de libertés. □

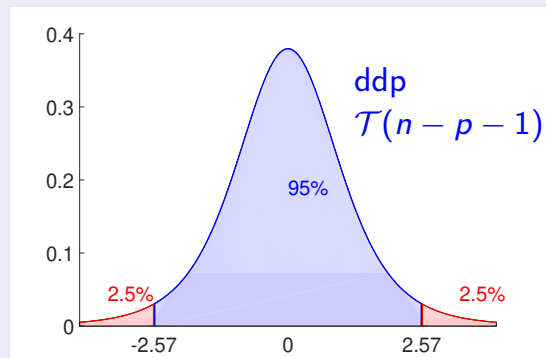
34/54

Test pour $H_0 : \beta_j = 0$ / $H_1 : \beta_j \neq 0$

Soit $0 < \alpha < 1$.

On prend $\beta_j = 0$ dans la déf. de T
(on se place sous H_0) et

$$\delta = \mathbb{1}_{|T| > q_{1 - \frac{\alpha}{2}}}$$



Intervalle de confiance exact pour β_j

$$\left[\hat{\beta}_j - \sqrt{\frac{n \hat{\sigma}^2 v_j}{n - p - 1}} q_{1 - \frac{\alpha}{2}}, \hat{\beta}_j + \sqrt{\frac{n \hat{\sigma}^2 v_j}{n - p - 1}} q_{1 - \frac{\alpha}{2}} \right]$$

q_r : quantile d'ordre r de la loi $\mathcal{T}(n - p - 1)$

35/54

Exemple « Ozone » : test des coefficients β_j

	IC _{95%}	t	pval
β_0	[100.1, 106.7]	62.9	$< 10^{-6}$
MOCAGE	[21.1, 36.8]	7.4	$< 10^{-6}$
TEMPE	[16.5, 28.5]	7.6	$< 10^{-6}$
RMH2O	[−7.0, 0.6]	-1.7	0.095
NO2	[−53.0, −15.7]	-3.7	$< 10^{-3}$
NO	[19.8, 55.4]	4.2	$< 10^{-3}$
VentMOD	[−2.7, 5.4]	0.7	0.49
VentANG	[−0.8, 6.0]	1.6	0.12

avec t : valeur réalisée de T pour le coefficient concerné

Remarque : régression sans les variables RMH2O, VentMOD et VentANG

⇒ le coefficient de détermination passe de 65.7% à 64.5%.

36/54

Plan du cours

1 – Introduction à l'apprentissage statistique (supervisé)

2 – Régression linéaire

2.1 – Introduction aux modèles pour la régression

2.2 – Modèle linéaire / perte quadratique

2.3 – Retour à l'inférence statistique

2.4 – Autres fonction de pertes

2.5 – Limites des « moindres carrés ordinaires »

3 – Exercices types

4 – Annexes

Exemple « Ozone » : cas d'un échantillon corrompu

Considérons que 5 mesures de concentration d'ozone sur n ($n = 210$) sont **corrompues**, soit environ 2% de l'échantillon.

Coefficients estimés avec/sans données corrompues :

	β_0	MOCAGE	TEMPE	RMH2O	NO2	NO	VentMOD	VentANG
sans	103.4	28.9	22.6	-3.2	-34.4	37.6	1.4	2.6
avec	125.2	79.2	-15.6	24.2	-155.1	141.4	4.7	24.9

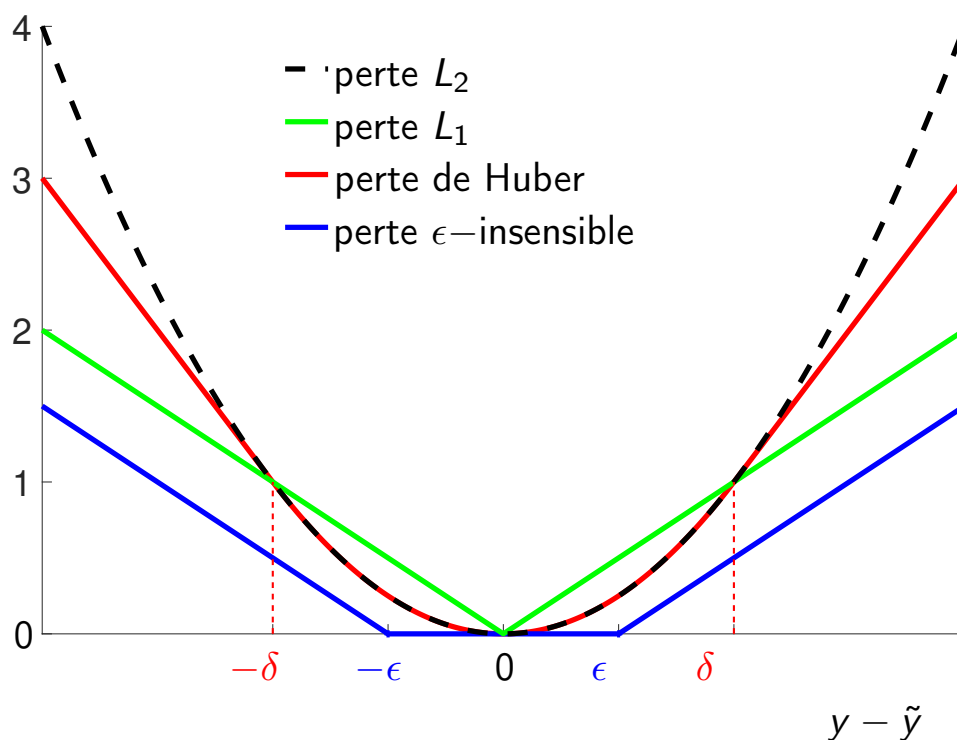
➡ Grande sensibilité des coefficients de régression aux « outliers ».

Solution

Utiliser une **fonction de perte** qui conduit à une fonction de prédiction **plus robuste** que la fonction de perte quadratique.

37/54

Fonctions de perte usuelles



38/54

Perte L_1

Fonction de perte : $L(y, \tilde{y}) = |y - \tilde{y}|$.

Proposition

(voir TD 6)

Pour la perte L_1 , la fonction de prédiction optimale est

$$\forall x \in \mathcal{X}, \quad h^*(x) = \text{med}(Y|X = x)$$

Exemple « Ozone »

	β_0	MOCAGE	TEMPE	RMH2O	NO2	NO	VentMOD	VentANG
sans	100.8	27.5	19.2	-3.3	-32.2	33.9	-1.0	3.9
avec	101.4	28.3	18.6	-1.6	-35.1	37.5	0.5	3.2

⇒ meilleure stabilité par rapport à la présence d'outliers.

39/54

Plan du cours

1 – Introduction à l'apprentissage statistique (supervisé)

2 – Régression linéaire

2.1 – Introduction aux modèles pour la régression

2.2 – Modèle linéaire / perte quadratique

2.3 – Retour à l'inférence statistique

2.4 – Autres fonction de pertes

2.5 – Limites des « moindres carrés ordinaires »

3 – Exercices types

4 – Annexes

Limites des « moindres carrés ordinaires »

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

Situations critiques les « moindres carrés ordinaires »

- ▶ lorsque la matrice $\underline{X}^T \underline{X}$ n'est pas inversible,
- ▶ ou mal conditionnée.

Cas typiques :

- ▶ lorsque le nombre de variables est important
($p + 1 > n$, voire $p \gg n$)

Exemple avec \underline{X} de taille $\# \text{patients} \times \# \text{gènes}$

- ▶ lorsque il y a de fortes corrélations entre les variables explicatives

Exemple « Ozone » avec les variables NO et NO2

⇒ interprétation hasardeuse des coefficients de régression

40/54

Solution possible : régression pénalisée

Au critère précédent (SCR), on ajoute une pénalité :

$$\hat{\beta} = \arg \min_{\beta} \underbrace{\text{SCR}(\beta)}_{\text{« attache » aux données}} + \underbrace{\lambda}_{\text{hyperparamètre}} \underbrace{\Omega(\beta)}_{\text{pénalité}}.$$

⇒ voir cours 8

41/54

Conclusion du cours et transition vers la séquence suivante

Nous avons vu et développerons en TD 6 :

- ▶ le cadre mathématique de la régression (et de la classification),
- ▶ la construction et l'utilisation des modèles de régression linéaire.
- ▶ les propriétés de l'estimateur des moindres carrés.

Nous aborderons dans la séquence 7 :

- ▶ les mesures de performance pour la tâche de classification,
- ▶ la construction et l'utilisation de la régression logistique,
- ▶ les méthodes d'arbres et de réseaux de neurones.

42/54

Plan du cours

1 – Introduction à l'apprentissage statistique (supervisé)

2 – Régression linéaire

3 – Exercices types

3.1 – Énoncés

3.2 – Corrigés

4 – Annexes

Plan du cours

1 – Introduction à l'apprentissage statistique (supervisé)

2 – Régression linéaire

3 – Exercices types


3.1 – Énoncés

3.2 – Corrigés

4 – Annexes

Exercice 1 (La régression vue comme une projection)

Soient, pour $1 \leq i \leq n$, des observations $(X_i, Y_i) \in \mathbb{R}^p \times \mathbb{R}$.

On considère le modèle de régression linéaire du  :

$$h(x) = \beta_0 + \sum_{j=1}^p \beta_j x^{(j)} = \beta^\top x, \quad x \in \mathbb{R}^{p+1},$$

et l'estimateur des moindres carrés associé :

$$\hat{\beta} = \operatorname{argmin}_{\beta} \sum_{i=1}^n \left(Y_i - \beta^\top X_i \right)^2.$$

Comme au , on note

- ▶ $\underline{X} \in \mathbb{R}^{n \times (p+1)}$ la matrice des régresseurs,
- ▶ $\underline{Y} \in \mathbb{R}^n$ le vecteur des réponses.

Exercice 1 (La régression vue comme une projection)

corrigé

Questions

- 1 On note $\hat{Y} = X\hat{\beta}$. Montrer que \hat{Y} est le projeté de Y sur l'image de X .
- 2 Donner l'expression de la matrice de projection dans le cas où $X^T X$ est inversible.
- 3 Montrer que le coefficient de détermination, défini au [slide 25](#), vérifie $0 \leq R^2 \leq 1$, avec $R^2 = 1$ ssi $\forall i, Y_i = \hat{\beta}^T X_i$.

44/54

Plan du cours

1 – Introduction à l'apprentissage statistique (supervisé)

2 – Régression linéaire

3 – Exercices types

3.1 – Énoncés

3.2 – Corrigés

4 – Annexes

❶ Rappels :

- ▶ Le projeté de $y \in \mathbb{R}^n$ sur un convexe fermé $C \subset \mathbb{R}^n$ est l'unique $y^* \in C$ tel que $\|y - y^*\| = \min_{v \in C} \|y - v\|$.
- ▶ L'image de \underline{X} , que nous noterons $\text{Im}(\underline{X})$, est le sous-espace vectoriel de \mathbb{R}^n engendré par les colonnes de \underline{X} :

$$\text{Im}(\underline{X}) = \left\{ v \in \mathbb{R}^n \mid \exists \beta \in \mathbb{R}^{(p+1)}, v = \underline{X}\beta \right\}.$$

On remarque pour commencer que

- ▶ $\text{Im}(\underline{X})$ est bien un convexe fermé (puisque'en dimension finie tous les sev sont fermés),
- ▶ $\underline{\hat{Y}} = \underline{X}\hat{\beta}$ est dans $\text{Im}(\underline{X})$.

De plus, pour tout $v = \underline{X}\beta \in \text{Im}(\underline{X})$, en utilisant que

$$\hat{\beta} = \underset{\beta}{\operatorname{argmin}} \quad \|\underline{Y} - \underline{X}\beta\|^2,$$

on trouve que

$$\begin{aligned} \|\underline{Y} - \underline{\hat{Y}}\| &= \|\underline{Y} - \underline{X}\hat{\beta}\| \\ &\leq \|\underline{Y} - \underline{X}\beta\| = \|\underline{Y} - v\|, \end{aligned}$$

donc $\underline{\hat{Y}}$ est bien le projeté de \underline{Y} sur $\text{Im}(\underline{X})$.

❷ En utilisant l'expression de $\hat{\beta}$ établie en cours, on peut exprimer le projeté de \underline{Y} sur $\text{Im}(\underline{X})$ comme

$$\underline{\hat{Y}} = \underline{X}\hat{\beta} = \underline{X} \left(\underline{X}^\top \underline{X} \right)^{-1} \underline{X}^\top \underline{Y}.$$

Ceci étant vrai pour tout $\underline{Y} \in \mathbb{R}^n$, on en déduit l'expression de la matrice de projection :

$$P = \underline{X} (\underline{X}^\top \underline{X})^{-1} \underline{X}^\top.$$

③ On rappelle la caractérisation du projeté sur un sev :

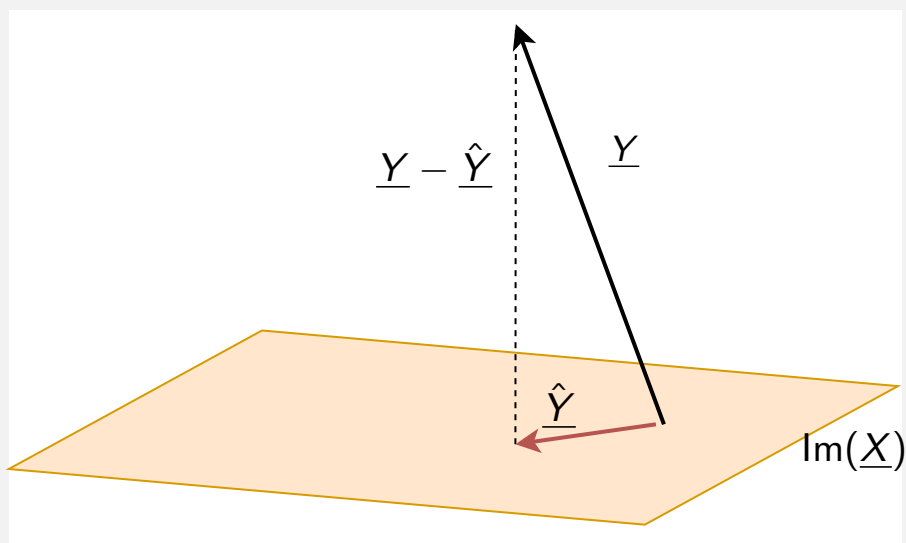
Théorème

Soit $y \in \mathbb{R}^n$ et soit F un sous-espace vectoriel de \mathbb{R}^n . Alors y^* est le projeté de y sur F si, et seulement si,

- ▶ $y^* \in F$,
- ▶ $y - y^* \in F^\perp$.

47/54

On applique le théorème avec $F = \text{Im}(\underline{X})$ et $y = \underline{Y}$.



48/54

Considérons maintenant le coefficient de détermination :

$$R^2 = 1 - \frac{SCR(\hat{\beta})}{SCT}, \quad \text{où} \quad \begin{cases} SCT &= \|\underline{Y} - \bar{Y}1_{n \times 1}\|^2 \\ SCR(\beta) &= \|\underline{Y} - \underline{X}\beta\|^2 \end{cases}$$

Décomposons le terme SCT :

$$SCT = \|\underline{Y} - \hat{\underline{Y}} + \hat{\underline{Y}} - \bar{Y}1_{n \times 1}\|^2 \quad (1)$$

$$= \|\underline{Y} - \hat{\underline{Y}}\|^2 + \|\hat{\underline{Y}} - \bar{Y}1_{n \times 1}\|^2 \quad (2)$$

$$= SCR(\hat{\beta}) + \|\hat{\underline{Y}} - \bar{Y}1_{n \times 1}\|^2.$$

Le passage de (1) à (2) découle du théorème Pythagore.

En effet,

- ▶ $\hat{\underline{Y}} \in \text{Im}(\underline{X})$ et $\underline{Y} - \hat{\underline{Y}} \in \text{Im}(\underline{X})^\perp$ puisque $\hat{\underline{Y}}$ est le projeté de \underline{Y} sur le sous-espace vectoriel $\text{Im}(\underline{X})$.
- ▶ $\hat{\underline{Y}} - \bar{Y}1_{n \times 1} \in \text{Im}(\underline{X})$ puisque $1_{n \times 1} \in \text{Im}(\underline{X})$.

Ainsi :

- i $0 \leq SCR(\hat{\beta}) \leq SCT$, donc $0 \leq R^2 \leq 1$,
- ii $R^2 = 1$ ssi $SCR(\hat{\beta}) = 0$ ssi $\underline{Y} = \underline{X}\hat{\beta}$.



Plan du cours

1 – Introduction à l'apprentissage statistique (supervisé)

2 – Régression linéaire

3 – Exercices types

4 – Annexes

Différentiation par rapport à un vecteur

Le résultat peut également être obtenu par « différentiation vectorielle ».

Soient $v \in \mathbb{R}^q$, $z \in \mathbb{R}^q$ et $M \in \mathbb{R}^{q \times q}$.

1) différentiation de $h(z) = v^\top z = \sum_{j=1}^q v_j z_j$

$$\nabla_z h(z) = \begin{pmatrix} \frac{\partial h}{\partial z_1} \\ \vdots \\ \frac{\partial h}{\partial z_q} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} v_1 \\ \vdots \\ v_q \end{pmatrix} = v \quad \text{donc} \quad \nabla_z (v^\top z) = v.$$

2) différentiation de $h(z) = z^\top M z = \sum_{i,j=1}^p z_i M_{i,j} z_j$

$$\nabla_z h(z) = \begin{pmatrix} \frac{\partial h}{\partial z_1} \\ \vdots \\ \frac{\partial h}{\partial z_q} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \sum_{j=1}^q M_{1,j} z_j + \sum_{i=1}^q M_{i,1} z_i \\ \vdots \\ \sum_{j=1}^q M_{1,j} z_j + \sum_{i=1}^q M_{i,1} z_i \end{pmatrix}$$

$$\text{donc} \quad \nabla_z (z^\top M z) = (M + M^\top)z.$$

Différentiation par rapport à un vecteur (suite)

Application à la minimisation du critère des moindres carrés.

Rappelons que

$$\text{SCR}(\beta) = \beta^\top \underline{X}^\top \underline{X} \beta - 2 \underline{Y}^\top \underline{X} \beta + \underline{Y}^\top \underline{Y}$$

On a donc

$$\nabla_\beta \text{SCR}(\beta) = 2 \underline{X}^\top \underline{X} \beta - 2 \underline{X}^\top \underline{Y} = 2 \left(\underline{X}^\top \underline{X} \beta - \underline{X}^\top \underline{Y} \right),$$

et finalement :

$$\nabla_\beta \text{SCR}(\hat{\beta}) = 0 \quad \implies \quad \hat{\beta} = \left(\underline{X}^\top \underline{X} \right)^{-1} \underline{X}^\top \underline{Y}.$$



[retour au slide ??](#)

52/54

Centrer et réduire les variables

Soit $\underline{X} = (X_1, \dots, X_n)$ un n -échantillon à valeurs dans \mathbb{R}^p .

Centrer et **réduire** les variables consiste à considérer les observations $\tilde{X}_i^{(j)}$ définies par

$$\tilde{X}_i^{(j)} = \frac{X_i^{(j)} - \bar{X}_n^{(j)}}{S_n^{(j)}}, \quad 1 \leq i \leq n, \quad 1 \leq j \leq p,$$

où $\bar{X}_n^{(j)}$ et $S_n^{(j)}$ sont respectivement la moyenne et l'écart-type empiriques de la j -ème variable :

$$\begin{aligned} \bar{X}_n^{(j)} &= \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n X_i^{(j)}, \\ \left(S_n^{(j)} \right)^2 &= \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n \left(X_i^{(j)} - \bar{X}_n^{(j)} \right)^2. \end{aligned}$$

[retour au slide 28](#)

53/54

Quelques mots sur la loi de Student $\mathcal{T}(k)$

Définition de $\mathcal{T}(k)$, k entier ≥ 1

Soient deux VA U et V tel que :

- ▶ $U \sim \mathcal{N}(0, 1)$
- ▶ $V \sim \chi^2(k)$
- ▶ U et V indépendantes

alors $T = \frac{U}{\sqrt{\frac{V}{k}}}$ suit une **loi de Student à k degrés de liberté**.

Propriété

$$\mathcal{T}(k) \xrightarrow[k \rightarrow \infty]{\text{loi}} \mathcal{N}(0, 1)$$

Exercice : le prouver.

Densité de probabilité

$$f(x) = \frac{1}{\sqrt{k\pi}} \frac{\Gamma(\frac{k+1}{2})}{\Gamma(\frac{k}{2})} \left(1 + \frac{x^2}{k}\right)^{-\frac{k+1}{2}}$$

Moyenne

- ▶ pour $k \geq 2$, $\mathbb{E}_k(T) = 0$

Variance

- ▶ pour $k \geq 3$, $\text{var}_k(T) = \frac{k}{k-2}$