Diagnostic de la Régression

Benoit Gaüzère, Stéphane Canu
benoit.gauzere@insa-rouen.fr

INSA Rouen Normandie - ITI

April 15, 2024

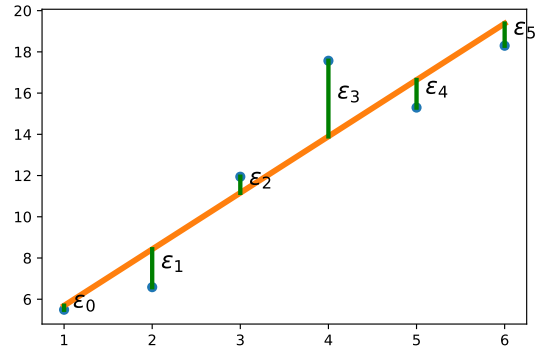
Diagnostic de la régression

Plan

Rappels

- Les données : $(\mathbf{x}_i, y_i)$ (n observations)
- Le Modèle ($p+1$ inconnues)

$$\mathbf{y} = X\boldsymbol{\alpha}+\boldsymbol{\varepsilon} \qquad y = a_0+a_1x_1+\cdots+a_px_p+\varepsilon$$



- Le principe de projection

$$X^\top\boldsymbol{\varepsilon} = 0 \quad \Leftrightarrow \quad X^\top(\mathbf{y} - X\alpha^\star) = 0$$

- Les coefficients de la régression

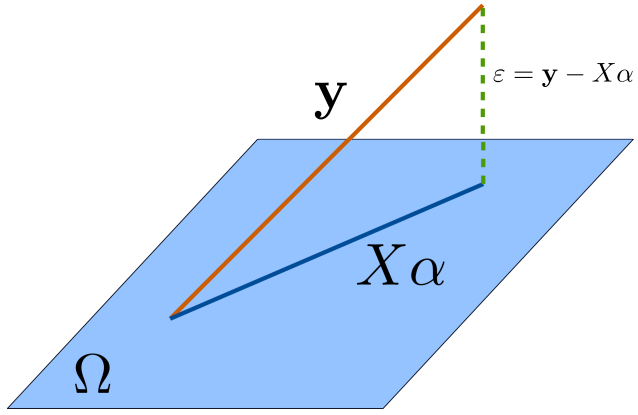
$$\alpha^\star = (X^\top X)^{-1}X^\top\mathbf{y}$$

- Les valeurs estimées

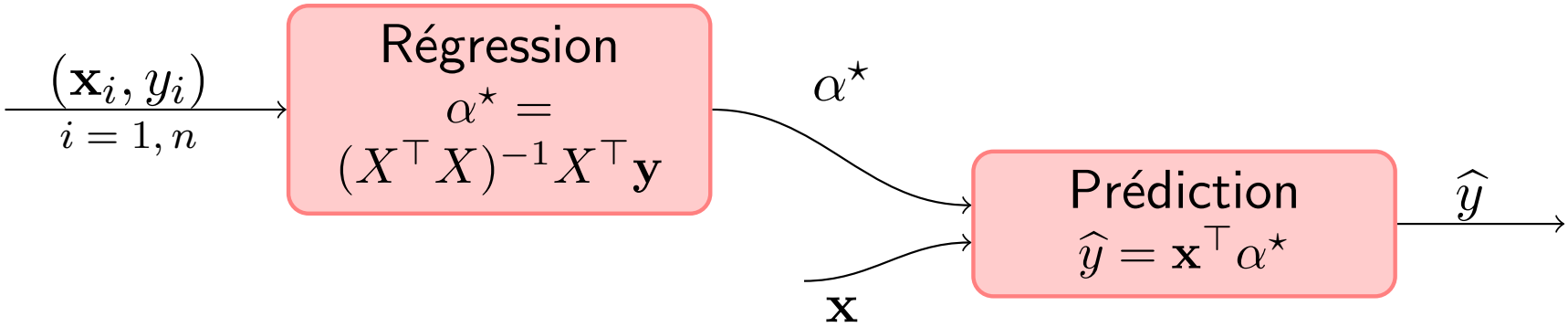
$$\mathbf{z} = X\alpha^\star = X(X^\top X)^{-1}X^\top\mathbf{y} = H\mathbf{y}$$

- Les résidus

$$\boldsymbol{\varepsilon} = \mathbf{y} - \mathbf{z} = \mathbf{y} - H\mathbf{y} = (I - H)\mathbf{y}$$

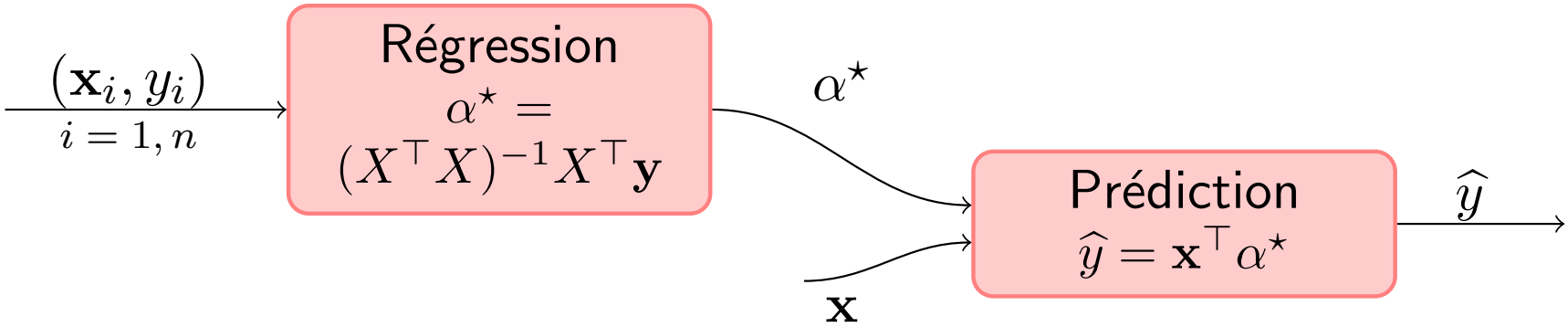


Diagnostic de la régression : les questions



Le diagnostic du modèle : $\widehat{y} \pm \delta_y$

Diagnostic de la régression : les questions



Le diagnostic du modèle : $\widehat{y} \pm \delta_y$

le modèle le modèle que l'on a posé est-il adapté ?

- part d'aléa : observation = information + bruit
- vérifier les hypothèses du modèle : linéaire ?

les observations y a t-il une ou plusieurs observations qui ne conviennent pas ?

- mauvais x
- mauvais y
- mauvais (x, y)

les variables y a t'il une ou plusieurs variables (nuisibles) à éliminer ?

Etude de cas : les données sur le ciment

- x_1 : Amount of tricalcium aluminate
- x_2 : Amount of tricalcium silicate
- x_3 : Amount of tetracalcium alumino ferrite
- x_4 : Amount of dicalcium silicate
- y : Heat evolved per gram of cement (in calories)

```
a  =   62.4054    1.5511    0.5102    0.1019   -0.1441
R2 =    0.9824
```

x1	x2	x3	x4	y	e	h	r	c
7.00	26.00	6.00	60.00	78.50	0.00	0.55	0.00	0.00
1.00	29.00	15.00	52.00	74.30	1.51	0.33	0.71	0.05
11.00	56.00	8.00	20.00	104.30	-1.67	0.58	-0.98	0.26
11.00	31.00	8.00	47.00	87.60	-1.73	0.30	-0.79	0.05
7.00	52.00	6.00	33.00	95.90	0.25	0.36	0.12	0.00
11.00	55.00	9.00	22.00	109.20	3.93	0.12	1.60	0.07
3.00	71.00	17.00	6.00	102.70	-1.45	0.37	-0.70	0.06
1.00	31.00	22.00	44.00	72.50	-3.17	0.41	-1.58	0.34
2.00	54.00	18.00	22.00	93.10	1.38	0.29	0.63	0.03
21.00	47.00	4.00	26.00	115.90	0.28	0.70	0.20	0.02
1.00	40.00	23.00	34.00	83.80	1.99	0.43	1.00	0.15
11.00	66.00	9.00	12.00	113.30	0.97	0.26	0.43	0.01
10.00	68.00	8.00	12.00	109.40	-2.29	0.30	-1.05	0.10

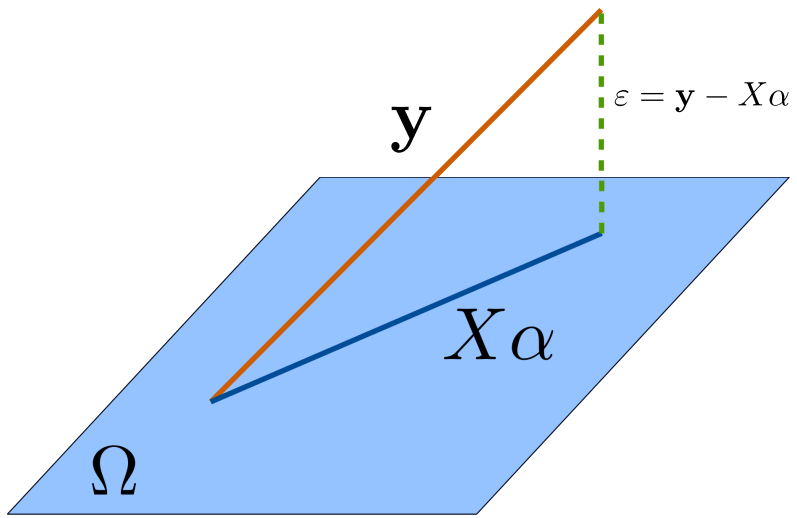
http://search.r-project.org/library/monomvn/html/cement.html

Plan

Décomposition de la variance

$$\underbrace{\sum_{i=1}^{n}(y_i-\overline{y})^2}_{SCT}=\underbrace{\sum_{i=1}^{n}(y_i-\widehat{y}_i)^2}_{SCE}+\underbrace{\sum_{i=1}^{n}(\widehat{y}_i-\overline{y})^2}_{SCM}$$

$$\|\mathbf{y}-\overline{y}\mathbf{e}\|^2=\underbrace{\|\mathbf{y}-\mathbf{z}\|^2}_{\|\boldsymbol{\varepsilon}\|^2}+\|\mathbf{z}-\overline{y}\mathbf{e}\|^2$$



Relation entre les variables : décomposition de la variance

Posons $z_i = \mathbf{x}_i\alpha^\star = \alpha^\star\mathbf{x}_i + b^\star$, on obtient la décomposition :

$$
\begin{aligned}
SCT &= \sum_{i=1}^{n}(y_i - \overline{y})^2 \\
&= \sum_{i=1}^{n}(y_i - z_i + z_i - \overline{y})^2 \\
&= \sum_{i=1}^{n}(y_i - z_i)^2 + \sum_{i=1}^{n}(z_i - \overline{y})^2 + 2\underbrace{\sum_{i=1}^{n}(y_i - z_i)(z_i - \overline{y})}_{=0} \\
&= \underbrace{\sum_{i=1}^{n}(y_i - z_i)^2}_{SCE} + \underbrace{\sum_{i=1}^{n}(z_i - \overline{y})^2}_{SCM}
\end{aligned}
$$

Décomposition de la variance :

$$SCT = SCM + SCE$$

observations = modèle + bruit

Degrès de liberté

ddl ?

- Degré de liberté(ddl) : dimension du sous espace dans lequel se trouve le vecteur
- Nb d'éléments "libres"
- Nb de valeurs suffisantes pour déterminer entièrement le vecteur

Source de la variation	nom	ddl
Modèle	SCM	p
Résidus	SCE	$n-(p+1)$
Totale	SCT	$n-1$

le coefficient de détermination R^2

Définition : le coefficient de détermination R^2

$$R^2 = \frac{\text{variance expliquée}}{\text{variance totale}} = \frac{SCM}{SCT} = \frac{SCT - SCE}{SCT} = 1 - \frac{SCE}{SCT}$$

- R^2 varie entre 0 et 1
- R^2 proche de 1 signifie que la modèle est bon
- R^2 proche de 0 c'est que le modèle est inadapté

En python

```
my = np.mean(y)
SCM = np.sum((yp - my)**2)
SCT = np.sum((y - my)**2)
SCE = np.sum((yp - y)**2)
print(SCT, SCE,SCM, SCE+SCM)
```

R^2 pour la régression simple

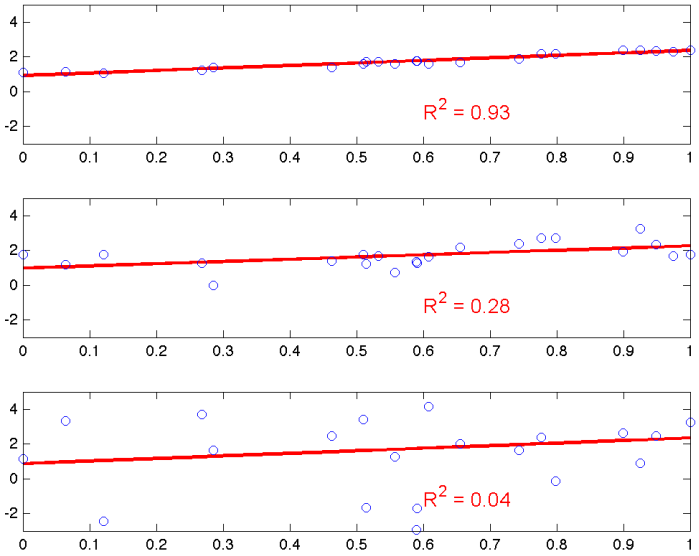
Régression Simple

$$
\begin{aligned}
R^2 &= \frac{\sum_{i=1}^{n}(z_i-\overline{y})^2}{\sum_{i=1}^{n}(y_i-\overline{y})^2} \\
&= \frac{\sum_{i=1}^{n}\mathbf{a}^2(x_i-\overline{x})^2}{s_y^2} \\
&= \frac{\sum_{i=1}^{n}\frac{\mathsf{COV}(\mathbf{x},\mathbf{y})^2}{s_x^4}(x_i-\overline{x})^2}{s_y^2} \\
&= \frac{\mathsf{cov}(\mathbf{x},\mathbf{y})^2}{s_x^2 s_y^2} \qquad\qquad = r_{xy}^2
\end{aligned}
$$

Trois façons de calculer R^2

```
R_2_cos = (((yp - my)@(y - my))/
      (np.linalg.norm(y-my) * np.linalg.norm(yp - my)))**2
R_2_corr = (np.corrcoef(y,yp)[0,1]**2)
R_2_SC = SCM/SCT
print(R_2_cos,R_2_corr,R_2_SC)
```

le coefficient de détermination R^2 : exemples



- $\alpha^\star = 1,2 \quad b^\star = 0,95$
- R^2 différents

Interprétation de R^2

- Dépend de n (le nombre d'observations) et p (le nombre de variables)
- R^2 proche de 1 signifie que la modèle est bon
- R^2 proche de 0 c'est que le modèle est inadapté

Examen des Résidus

Définition : Résidus

Dans le cas de la régression simple on a :

$$\varepsilon_i = y_i - \left(\alpha^\star x_i + b^\star\right), \forall i = 1, \ldots, n$$

Dans le cas général, le vecteur des résidus est :

$$\boldsymbol{\varepsilon} = \mathbf{y} - X\alpha^\star$$

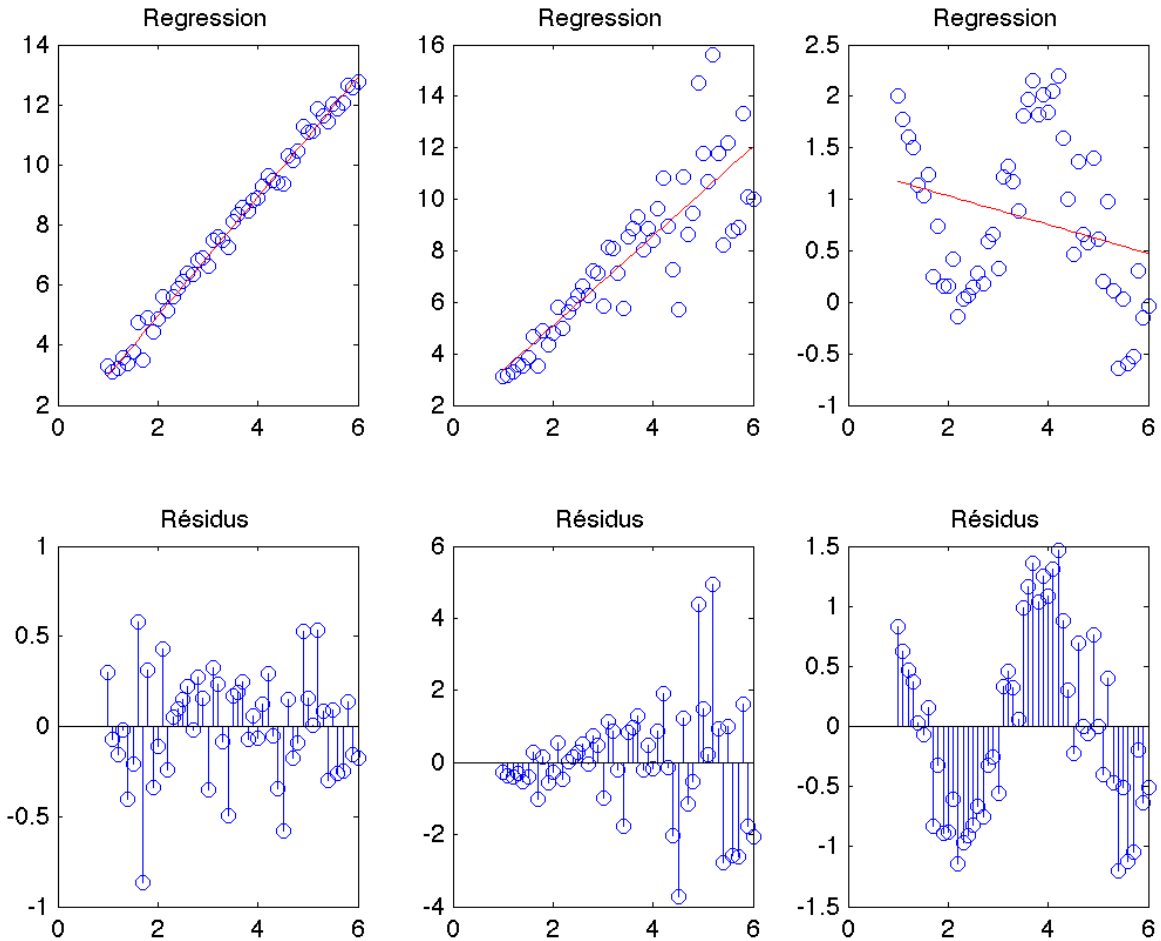
Qu'est ce qu'un bon résidu ?

- Les résidus sont non structurés
- Leur variance est constante
- Ils sont indépendants des observations ($\mathbf{x}$ et y)
- leur distribution est normale
- il n'y a pas de point aberrant

Exemples d'Analyse de Résidus

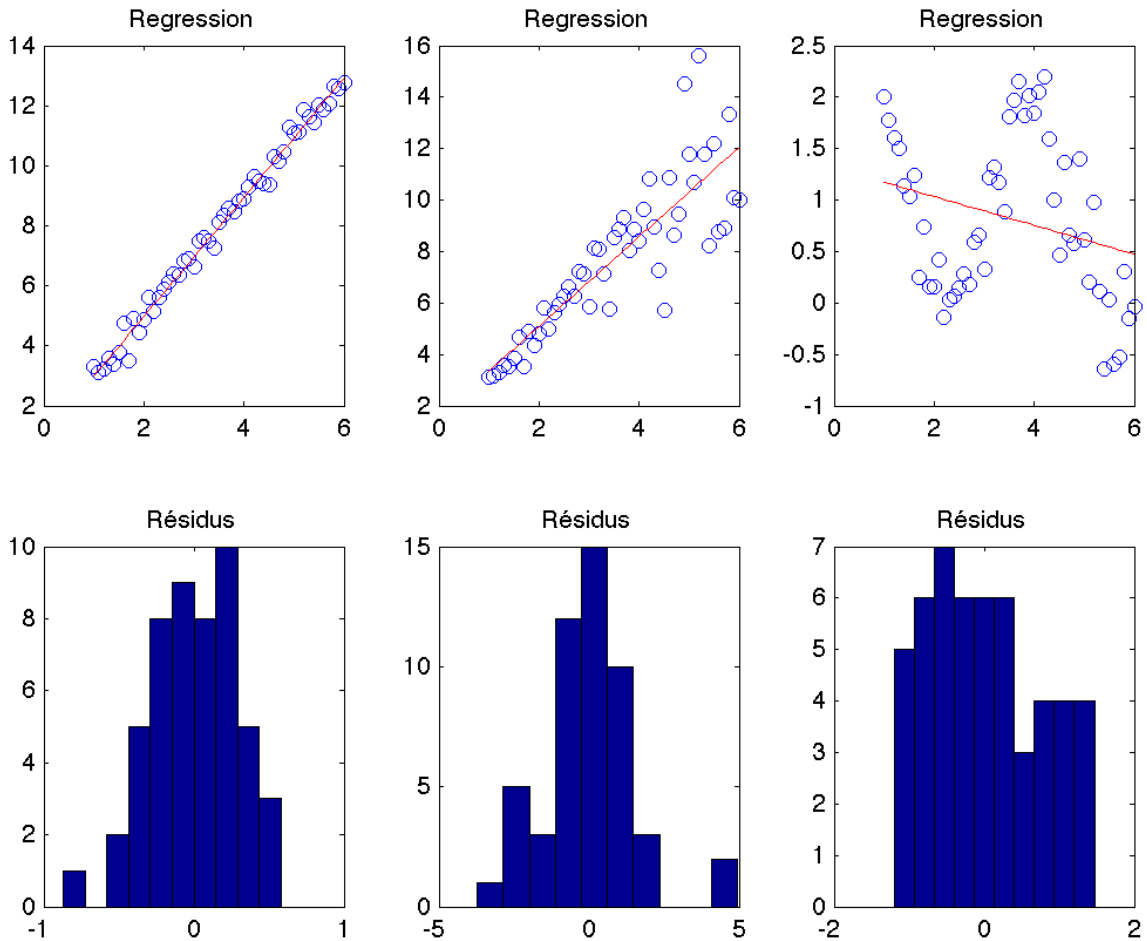
Les différentes figures à examiner sont :

- ε vs $\mathbf{x}$, ε vs $\mathbf{y}$
- Histogramme de ε



Exemples d'Analyse de Résidus

Par hypothèse, les résidus suivent une loi normale $\mathcal{N}(0, \sigma^2)$



Plan

La Contribution des Individus

Contribution

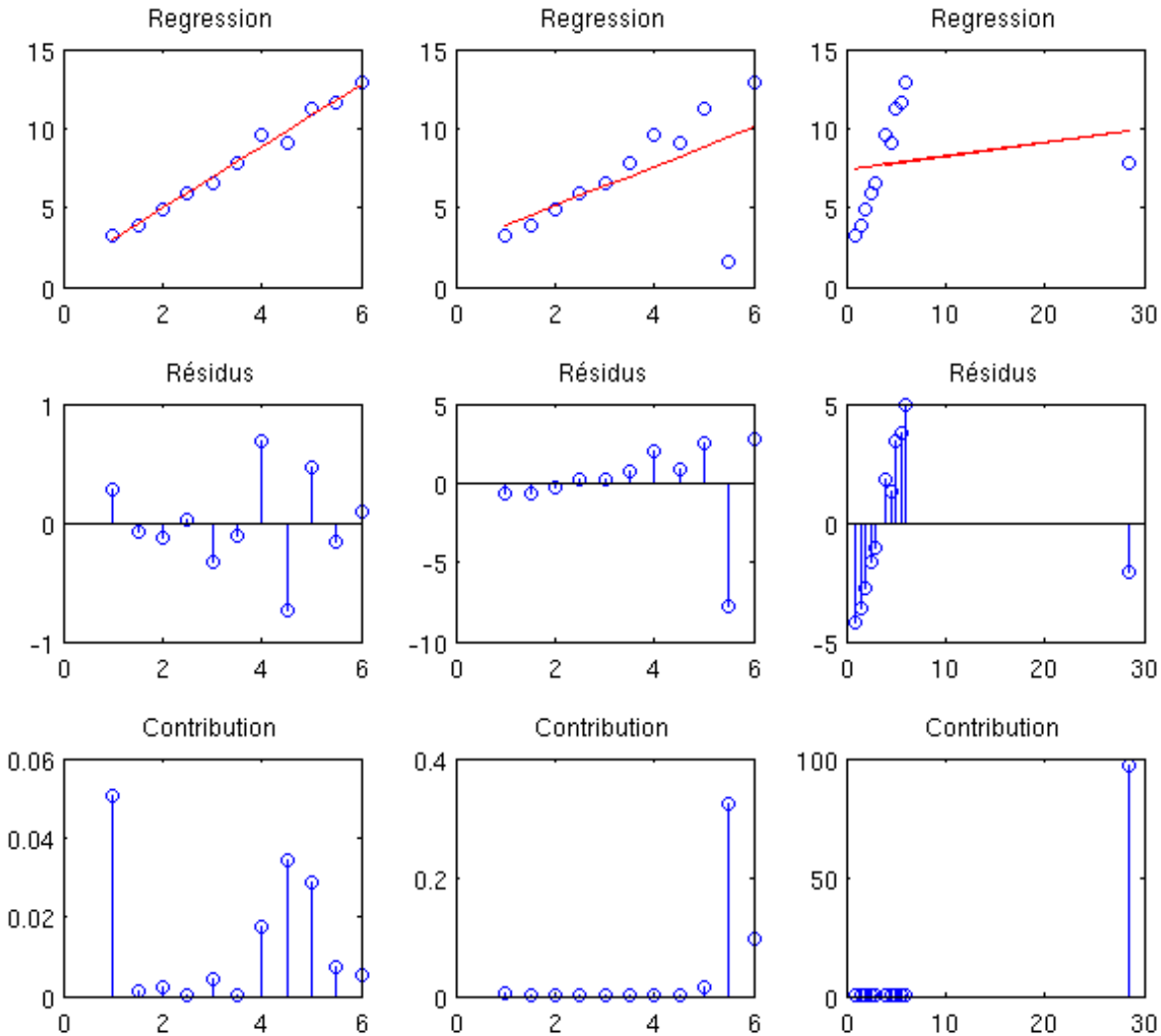
L'influence (la contribution) d'un point se mesure à travers 2 facteurs :

- Levier: $\mathbf{x}_i - \overline{x}$
- Divergence: $y_i - z_i^{\{-i\}}$,
  avec $z_i^{\{-i\}}$ la valeur obtenue **SANS** l'observation $(\mathbf{x}_i, y_i)$

contribution : levier et divergence

Différents types de mesures aberrantes

Modèle correct, problème sur une valeur de y, problème sur une valeur de x.



Plan

L'influence des x et des y

$\mathbf{y}$ valeurs observées / $\mathbf{z}$ valeurs estimées

$$\mathbf{y} = \underbrace{X\alpha^\star}_{\mathbf{z}} + \boldsymbol{\varepsilon}, \text{ avec } \alpha^\star = (X^\top X)^{-1} X^\top \mathbf{y}$$

$$\underbrace{\mathbf{z}}_{\text{estimation}} = X \quad \alpha^\star$$

$$= \underbrace{X\,(X^\top X)^{-1} X^\top}_{\text{ce terme ne dépend que de } X} \quad \mathbf{y} \qquad = H\,\mathbf{y}$$

Influence des $\mathbf{x}_i \Leftrightarrow$ Lignes de H

$$z_i = H(i,:)\mathbf{y} = \sum_{j=1}^{n} H_{ij} y_j, \qquad \forall i = 1, \ldots, n$$

avec H la matrice dite d'influence $n \times n$:

$$H = X\,(X^\top X)^{-1} X^\top$$

Matrice d'Influence et Effet Levier

Définition : Effet levier de l'observation i

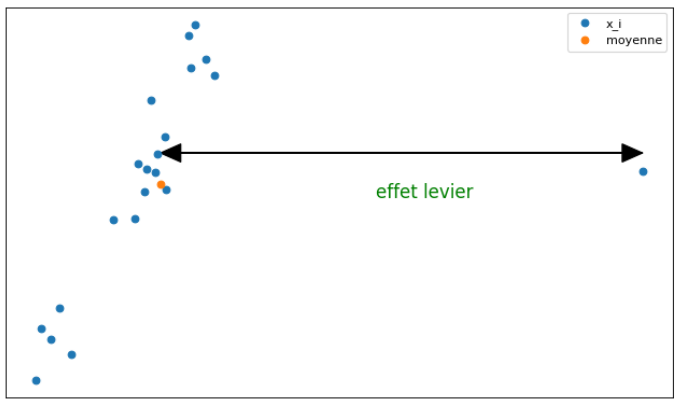
En considérant $z_i = H(i,:)\mathbf{y}$, L'influence de l'observation i, appelée effet levier, est mesurée par:

$$\text{L'Effet levier de l'observation } i = \|H(i,:)\|^2 = H_{ii}$$

NB : $HH = H$, $H^\top = H$

Dans le cas de la régression simple (p=1)

$$H_{ii} = \frac{1}{n} + \frac{(x_i - \bar{x})^2}{\hat{\sigma}_x^2}$$



L'effet levier

Propriétés

$$\sum_{i=1}^{n} H_{ii} = p + 1 \qquad \frac{1}{n} \leq H_{ii} \leq 1$$

Règle d'usage

Un point x_i à un effet levier important si

$$H_{ii} > 2(p+1)/n$$

si on faisait l'hypothèse que toutes les variables ont la même influence, tous les $H_{ii} = (p+1)/n$. En d'autres termes, en moyenne $H_{ii} = (p+1)/n$. Un point admettent un levier dépassant deux fois sa moyenne (trois fois pour les petits échantillons) est suspect.

Une observation avec un H_{ii} proche de 1 est une observation avec un levier extrêmement important.

Plan

La Divergence d'un Individu

Importance d'une observation ?

- Mesurer comment le modèle évolue lorsque l'on retire chacune des observations.
- Attention : les points aberrants ont tendance à tirer la droite de régression vers eux !
- Soit $X_{\{-i\}}$ la matrice des observations sans $\mathbf{x}_i$
- $z_i^{\{-i\}}$ la prédiction de $\mathbf{x}_i$ à partir de $X_{\{-i\}}$

Évaluation de l'erreur sans x_i

Résidus de Validation Croisée

Définition : Les résidus de validation croisée

$$\varepsilon_i^{\{-i\}} = y_i - \mathbf{z}_i^{\{-i\}}$$

Remarques

- $X^\top X = X_{\{-i\}}^\top X_{\{-i\}} + (\mathbf{x}_i \mathbf{x}_i^\top)$
- $\mathbf{z}_i^{\{-i\}} = X_{\{-i\}}\ \alpha_{\{-i\}}^\star$
- $\alpha_{\{-i\}}^\star = \left(X_{\{-i\}}^\top X_{\{-i\}}\right)^{-1} X_{\{-i\}}^\top \mathbf{y}^{\{-i\}}$

Calculer n modèles ?

Fonction $\boldsymbol{\varepsilon}^{\{-i\}} \leftarrow$ `Validation_croisée`$(X, \mathbf{y})$

For $i = 1, n$ **do**

1. Construction des données : $X_{\{-i\}}$ et $\mathbf{y}^{\{-i\}}$
2. Estimation du modèle
   $\alpha^{\star}_{\{-i\}} = \left(X^{\top}_{\{-i\}} X_{\{-i\}}\right)^{-1} X^{\top}_{\{-i\}} \mathbf{y}^{\{-i\}}$
3. Estimation de l'erreur $\varepsilon_i^{\{-i\}} = y_i - \mathbf{x}_i^{\top} \alpha^{\star}_{\{-i\}}$

end For

Faut-il calculer n modèles ? NON !

Théorème : Les Résidus Normalisés

$$\varepsilon_i^{\{-i\}} = \frac{\varepsilon_i}{1 - H_{ii}}$$

Lemme : L'estimateur de validation croisée

$$\alpha^\star_{\{-i\}} = \alpha^\star - \frac{(X^\top X)^{-1}\mathbf{x}_i^\top \varepsilon_i}{1 - H_{ii}}$$

NB: Les ε_i constituent une estimation sans biais de la qualité de prévision d'un modèle car une même observation n'est pas utilisée à la fois pour estimer le modèle et l'erreur de prévision.

Éléments de Preuve

1. $\alpha^{\star}_{\{-i\}} = \alpha^{\star} - \frac{(X^\top X)^{-1}\mathbf{x}_i^\top \varepsilon_i}{1-H_{ii}}$:

$$\left(X^{\{-i\}\top} X^{\{-i\}}\right)^{-1} = (X^\top X)^{-1} + \frac{(X^\top X)^{-1}\mathbf{x}_i\mathbf{x}_i^\top (X^\top X)^{-1}}{1-H_{ii}}$$

avec $H_{ii} = \mathbf{x}_i^\top (X^\top X)^{-1}\mathbf{x}_i$.
La démonstration de ce résultat utilise la formule de Sherman-Morrison qui stipule que

$$(A+uu^\top)^{-1} = A^{-1} + \frac{A^{-1}uu^\top A^{-1}}{1+u^\top A^{-1}u}$$

on l'utilise avec $A = X^\top X$.

2. $\varepsilon_i^{\{-i\}} = \frac{\varepsilon_i}{1-H_{ii}}$:

$$\begin{aligned}
\varepsilon_i^{\{-i\}} &= y_i - \widehat{y}_i^{\{-i\}} \\
&= y_i - \mathbf{x}_i^\top \alpha^{\star}_{\{-i\}} \\
&= y_i - \mathbf{x}_i^\top \left(\alpha^{\star} - \frac{(X^\top X)^{-1}\mathbf{x}_i^\top \varepsilon_i}{1-H_{ii}}\right) \\
&= y_i - \mathbf{x}_i^\top \alpha^{\star} + \frac{\mathbf{x}_i^\top (X^\top X)^{-1}\mathbf{x}_i \varepsilon_i}{1-H_{ii}} \\
&= \varepsilon_i + \frac{H_{ii}\varepsilon_i}{1-H_{ii}} = \frac{\varepsilon_i}{1-H_{ii}}
\end{aligned}$$

Pour plus de détails voir :

- R. Christiansen "Plane answers to complex questions : the theory of linear models" Springer, 2002, p 360
- p. 291 de Applied Linear Regression, Weisberg

Calcul des Contributions (Distance de Cook)

Distance entre $\alpha^\star_{\{-i\}}$ et $\alpha^\star$

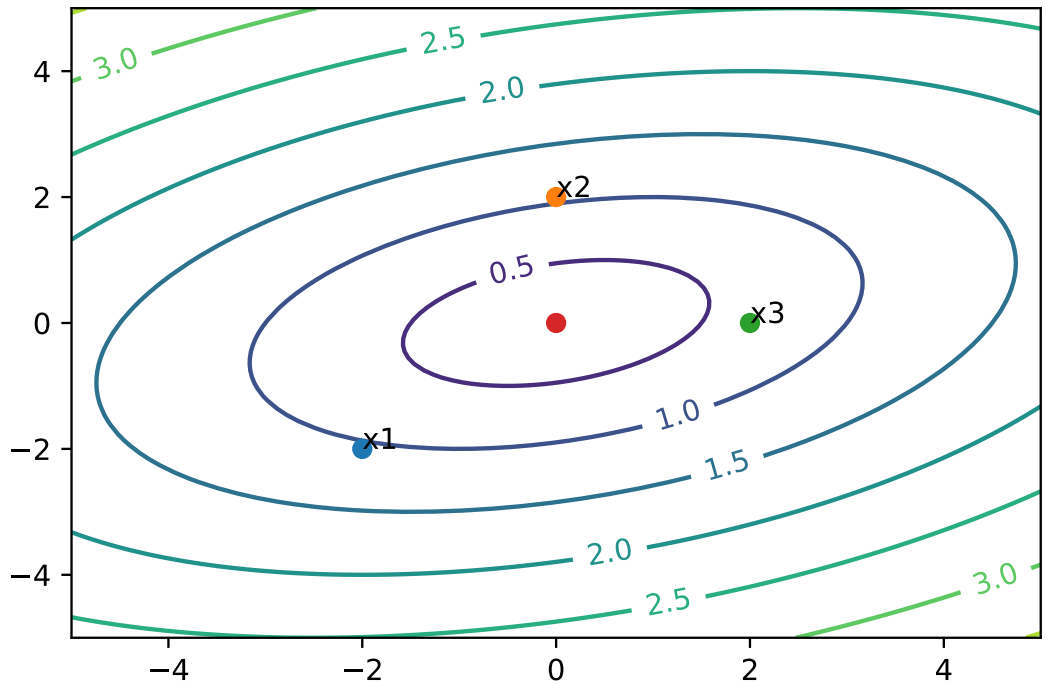
- Grande différence $\Leftrightarrow$ Forte influence
- Mauvaise idée : $\|\alpha^\star_{\{-i\}} - \alpha^\star\|^2$
- Bonne idée : normaliser $\Rightarrow$ Distance de Mahalanobis

Définition : Distance de Mahalanobis)

Soient $\mathbf{x}_1$ et $\mathbf{x}_2$ deux réalisations d'une variable aléatoire gaussienne multidimensionelle, ayant pour espérance le vecteur μ et pour matrice de variance/covariance Σ. On appelle distance de Mahalanobis entre $\mathbf{x}_1$ et $\mathbf{x}_2$ la quantité:

$$d_M(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2) = \sqrt{(\mathbf{x}_1 - \mathbf{x}_2)^\top \Sigma^{-1} (\mathbf{x}_1 - \mathbf{x}_2)}$$

Distance de Mahalanobis



- $d_E(x_1, [0,0]) \simeq 2,83$; $d_M(\mathbf{x}_1, [0,0]) = 3$
- $d_E(x_2, [0,0]) = 2$; $d_M(\mathbf{x}_2, [0,0]) = 1$
- $d_E(x_3, [0,0]) = 2$; $d_M(\mathbf{x}_3, [0,0]) \simeq 2,83$

Analyse de $\alpha^\star$

$$
\begin{aligned}
\alpha^\star &= (X^\top X)^{-1} X^\top \mathbf{y} \\
&= (X^\top X)^{-1} X^\top (X\boldsymbol{\alpha} + \boldsymbol{\varepsilon}) \\
&= (X^\top X)^{-1} X^\top X\boldsymbol{\alpha} + (X^\top X)^{-1} X^\top \boldsymbol{\varepsilon} \\
&= \boldsymbol{\alpha} + (X^\top X)^{-1} X^\top \boldsymbol{\varepsilon}
\end{aligned}
$$

$$
\begin{aligned}
\mathbb{E}(\alpha^\star) &= \boldsymbol{\alpha} && \text{car } \mathbb{E}(\boldsymbol{\varepsilon}) = 0 \\
V(\alpha^\star) &= V((X^\top X)^{-1} X^\top \boldsymbol{\varepsilon}) \\
&= (X^\top X)^{-1} X^\top V(\boldsymbol{\varepsilon}) X (X^\top X)^{-1} && \text{car } V(\boldsymbol{\varepsilon}) = \sigma^2 I \\
&= \sigma^2 (X^\top X)^{-1} X^\top X (X^\top X)^{-1} && = \sigma^2 (X^\top X)^{-1}
\end{aligned}
$$

$$
\alpha^\star \sim \mathcal{N}\left(\boldsymbol{\alpha}, \sigma^2 (X^\top X)^{-1}\right)
$$

Contributions (Distance de Cook)

Définition : Contributions (Distance de Cook)

On appelle contribution de l'individu i à la régression, la quantité c_i:

$$c_i = \frac{d_M^2(\alpha^\star_{\{-i\}}, \alpha^\star)}{p+1} = \frac{(\alpha^\star_{\{-i\}} - \alpha^\star)^\top X^\top X (\alpha^\star_{\{-i\}} - \alpha^\star)}{(p+1)\, s^2}$$

où $\alpha^\star_{\{-i\}}$ est le vecteur des coefficients obtenu sans l'exemple $(\mathbf{x}_i, y_i)$, $p+1$ la dimension du vecteur $\alpha^\star$ et $s^2 = \frac{1}{n-p-1} \sum_{i=1}^n \varepsilon_i^2$

Contributions (Distance de Cook)

On peut montrer que les contributions peuvent se réécrire :

$$c_i = \frac{\|\mathbf{z}^{\{-i\}} - \mathbf{z}\|^2}{(p+1)\, s^2}$$

Pour le calcul pratique on montre que :

Théorème : Calcul pratique de la distance de Cook

$$c_i = \frac{\varepsilon_i^2}{(p+1)s^2}\Big[\frac{H_{ii}}{(1-H_{ii})^2}\Big]$$

- Certains auteurs préconisent de se méfier d'une contribution supérieure à un.

Démonstration

Puisque $\alpha^\star_{\{-i\}} = \alpha^\star - \frac{(X^\top X)^{-1}\mathbf{x}_i^\top \varepsilon_i}{1-H_{ii}}$ on a

$$\begin{aligned}(\alpha^\star_{\{-i\}} - \alpha^\star)^\top X^\top X(\alpha^\star_{\{-i\}} - \alpha^\star) &= \frac{(X^\top X)^{-1}\mathbf{x}_i^\top \varepsilon_i}{1-H_{ii}} X^\top X \frac{(X^\top X)^{-1}\mathbf{x}_i^\top \varepsilon_i}{1-H_{ii}} \\ &= \frac{\varepsilon_i^2}{(1-H_{ii})^2}\mathbf{x}_i(X^\top X)^{-1}\mathbf{x}_i^\top \\ &= \frac{\varepsilon_i^2}{(1-H_{ii})^2} H_{ii}\end{aligned}$$

Tableau de Résultats de la Régression

$$\alpha^\star = (X^\top X)^{-1} X \mathbf{y}$$

$$\varepsilon_i = y_i - \mathbf{x}_i \alpha^\star \qquad s^2 = \frac{1}{n-p} \sum_{i=1}^{n} \varepsilon_i^2 \qquad H = X(X^\top X)^{-1} X^\top$$

- Résidus de validation croisée : $\varepsilon_i^{\{-i\}} = \frac{\varepsilon_i}{1 - H_{ii}}$
- Résidus standardisés : $r_i = \dfrac{\varepsilon_i}{s\sqrt{1 - H_{ii}}}$
- Résidus studentisés : $t_i = \dfrac{\varepsilon_i}{s^{\{-i\}}\sqrt{1 - H_{ii}}}$

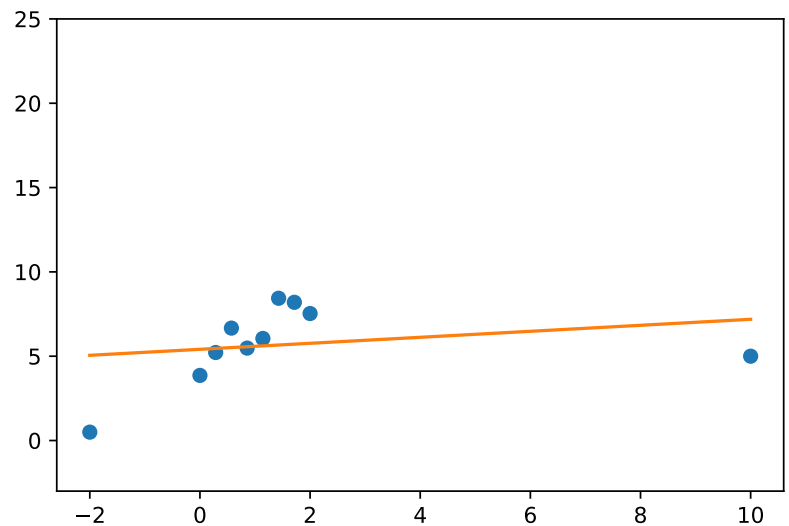
$$c_i = \frac{H_{ii}}{p(1 - H_{ii})^2} \frac{\varepsilon_i^2}{s^2}$$

variable explicatives	variables à expliquer	résidus erreurs	résidus de VC	contributions
X	y_i	ε	$\varepsilon^{\{-i\}}$	c

Exemple

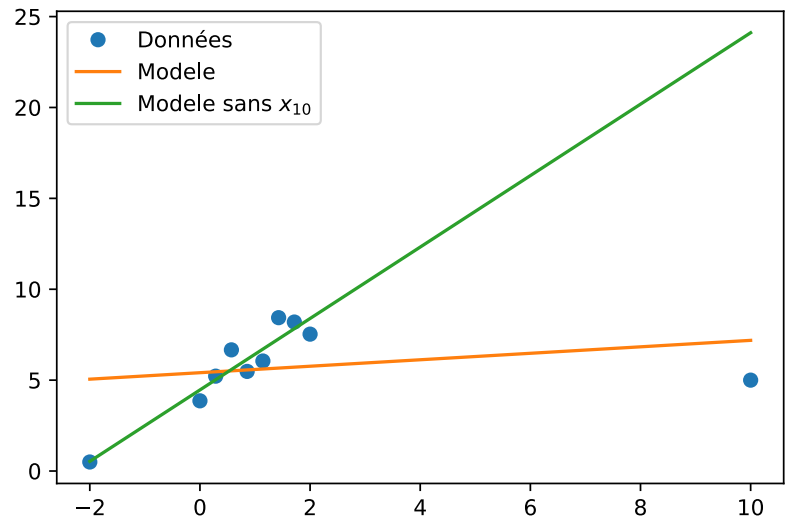
	x	y	z	e	e_n	h	c
0	-2	0.893605	4.35849	-3.46488	-4.58485	0.244275	0.798133
1	0	4.19674	4.73943	-0.542688	-0.622705	0.128499	0.00774482
2	0.285714	4.30322	4.79385	-0.490628	-0.557044	0.119229	0.00575055
3	0.571429	5.10903	4.84827	0.260765	0.29358	0.111778	0.00149746
4	0.857143	4.85229	4.90268	-0.0503969	-0.0563814	0.106143	5.24459e-05
5	1.14286	5.96273	4.9571	1.00562	1.12026	0.102326	0.0199604
6	1.42857	7.2051	5.01152	2.19358	2.4382	0.100327	0.0927051
7	1.71429	5.77542	5.06594	0.709478	0.788436	0.100145	0.00967635
8	2	7.14363	5.12036	2.02326	2.25253	0.101781	0.0802704
9	10	5	6.64411	-1.64411	-14.3586	0.885496	28.3765

- x_4, y_4 : Résidu et résidu similaires, Faible contribution
- x_0, y_0 : Résidu élevé, Lever moyen, Contribution moyenne
- x_9, y_9 : Résidu moyen, Fort levier, Forte contribution



Exemple

	x	y	z	e	e_n	h	c
0	-2	0.893605	0.960652	-0.0670465	-0.251425	0.733333	0.0762761
1	0	4.19674	4.02698	0.169761	0.199719	0.15	0.00984468
2	0.285714	4.30322	4.46502	-0.161805	-0.184669	0.12381	0.00694726
3	0.571429	5.10903	4.90307	0.205961	0.231913	0.111905	0.00990308
4	0.857143	4.85229	5.34112	-0.488827	-0.551902	0.114286	0.057278
5	1.14286	5.96273	5.77916	0.183567	0.211227	0.130952	0.0096136
6	1.42857	7.2051	6.21721	0.987896	1.17874	0.161905	0.370141
7	1.71429	5.77542	6.65525	-0.879833	-1.1097	0.207143	0.419713
8	2	7.14363	7.0933	0.0503268	0.0686274	0.266667	0.0020665



Résumons nous

Étant donné des observations $(\mathbf{x}_i, y_i)$, $\mathbf{x}_i \in \mathbb{R}^p$, $i \in \{1, \ldots, n\}$,

1. Construire la matrice des données $X = [\mathbf{e} \;\; \mathbf{x}]$
2. Calculer les coefficients : $\alpha^\star = (X^\top X)^{-1} X \mathbf{y}$
3. Calculer les valeurs prédites : $\mathbf{z} = X\alpha^\star$
4. Calculer les résidus : $\boldsymbol{\varepsilon} = \mathbf{y} - \mathbf{z}$
   $\hookrightarrow$ Si les résidus présentent une structure:
   $\hookrightarrow$ Transformer les données et reprendre à 1.
5. Calculer le R^2
   $\hookrightarrow$ Si R^2 est trop petit la régression n'a pas de sens
6. Calculer la variance estimée : $s^2 = \frac{\boldsymbol{\varepsilon}^\top \boldsymbol{\varepsilon}}{n-1-p}$
7. Calculer les contributions : $\mathbf{c} = \frac{\mathbf{h}}{(p+1)(1-\mathbf{h})^2} \; \frac{\boldsymbol{\varepsilon}^2}{s^2}$, $\mathbf{h} = \mathrm{diag}(H)$
   $\hookrightarrow$ Si la contribution d'un point est supérieure à $\frac{4}{n}$:
   $\hookrightarrow$ Examiner le point correspondant

Résumons nous : le (pseudo) code qui va bien

1. $X = [\mathbf{e}\ \ \mathbf{x}]$
2. $\alpha^\star = (X^\top X)^{-1} X\mathbf{y}$
3. $\mathbf{z} = X\alpha^\star$
4. $\varepsilon = \mathbf{y} - \mathbf{z}$

```
a = np.linalg.solve((X.T@X), (X.T@y))
z = X@a
e = y-z
```

5. $R^2 = \frac{(z-\overline{y})^\top (z-\overline{y})}{(y-\overline{y})^\top (y-\overline{y})}$
6. $H = X(X^\top X)^{-1} X^\top$
7. $\mathbf{h} = diag(H)$

```
R2 = 1 - e.T@e/np.sum((y-np.mean(y))**2)
H = X@(np.linalg.solve((X.T@X),(X.T)))
h = np.diag(H)
```

8. $s^2 = \frac{\boldsymbol{\varepsilon}^\top \boldsymbol{\varepsilon}}{n-p}$
9. $\mathbf{c} = \frac{\mathbf{h}}{p(1-\mathbf{h})^2} \frac{\boldsymbol{\varepsilon}^2}{s^2}$

```
s2 = e.T@e/(n-p-1)
c = (h/(1-h)**2)*(e**2)  /  ((p+1)*s2)
```

Diagnostic de la régression

Diagnostic Général

- R^2 : qualité de la régression
- Analyse des résidus
  - Structure
  - Gaussien
  - Indépendance des $\mathbf{y}$ et $\mathbf{x}$

Analyse des individus

- Calcul de l'influence des $\mathbf{x}_i$: $H_{i,i}$
- Résidus normalisés : $\varepsilon_i^{\{-i\}} = \frac{\varepsilon_i}{1-H_{ii}}$
- Contribution : $c_i = \frac{H_{ii}}{(p+1)(1-H_{ii})^2} \frac{\varepsilon_i^2}{s^2}$

Diagnostic de la régression

Diagnostic Général

- R^2 : qualité de la régression
- Analyse des résidus
  - Structure
  - Gaussien
  - Indépendance des $\mathbf{y}$ et $\mathbf{x}$

Analyse des individus

- Calcul de l'influence des $\mathbf{x}_i$: $H_{i,i}$
- Résidus normalisés : $\varepsilon_i^{\{-i\}} = \frac{\varepsilon_i}{1-H_{ii}}$
- Contribution : $c_i = \frac{H_{ii}}{(p+1)(1-H_{ii})^2} \frac{\varepsilon_i^2}{s^2}$

Reste à faire : les **variables**

Plan

La pertinence des variables

$$y = a_0 + \sum_{j=1}^{p} a_j \mathbf{x}(j) + \varepsilon$$

La problématique

- $\mathbf{x}(j)$: $a_j = 0$?
- $\Rightarrow$: $\mathbf{x}(j)$ n'intervient pas dans la régression
- Que faire si X contient de "mauvais" prédicteurs ?

La sélection de variables

- Trouver le "meilleur" sous-ensemble de variables p_0
- p_0 petit:
  - Meilleur conditionnement de $X^\top X$
  - Calcul plus rapides
  - Modèle plus simple (rasoir d'Ockham)

Stratégies de sélection

Stratégie globale

- Tester différents sous ensembles de variables
- Garder le “meilleur” sous-ensemble donné un critère
  - Lequel ?

Stratégies de parcours des sous ensembles de variables:

- Approche globale
- Forward/Backward
- Stepwise
- ...

Etude de cas : les données sur le ciment

- x_1 : Amount of tricalcium aluminate
- x_2 : Amount of tricalcium silicate
- x_3 : Amount of tetracalcium alumino ferrite
- x_4 : Amount of dicalcium silicate
- y : Heat evolved per gram of cement (in calories)

```
a  =   62.4054    1.5511    0.5102    0.1019   -0.1441
R2 =    0.9824
```

x1	x2	x3	x4	y	e	h	r	c
7.00	26.00	6.00	60.00	78.50	0.00	0.55	0.00	0.00
1.00	29.00	15.00	52.00	74.30	1.51	0.33	0.71	0.05
11.00	56.00	8.00	20.00	104.30	-1.67	0.58	-0.98	0.26
11.00	31.00	8.00	47.00	87.60	-1.73	0.30	-0.79	0.05
7.00	52.00	6.00	33.00	95.90	0.25	0.36	0.12	0.00
11.00	55.00	9.00	22.00	109.20	3.93	0.12	1.60	0.07
3.00	71.00	17.00	6.00	102.70	-1.45	0.37	-0.70	0.06
1.00	31.00	22.00	44.00	72.50	-3.17	0.41	-1.58	0.34
2.00	54.00	18.00	22.00	93.10	1.38	0.29	0.63	0.03
21.00	47.00	4.00	26.00	115.90	0.28	0.70	0.20	0.02
1.00	40.00	23.00	34.00	83.80	1.99	0.43	1.00	0.15
11.00	66.00	9.00	12.00	113.30	0.97	0.26	0.43	0.01
10.00	68.00	8.00	12.00	109.40	-2.29	0.30	-1.05	0.10

Sélection systématique des variables

1	x1	x2	x3	x4	R^2	
1	x1				0.534	$y = a_0 + a_1 x_1$
1		x2			0.666	
1			x3		0.286	$\dots$
1				x4	0.675	$y = a_0 + a_4 x_4$
1	x1	x2			0.979	$y = a_0 + a_1 x_1 + a_2 x_2$
1	x1		x3		0.548	
1	x1			x4	0.972	$\dots$
1		x2	x3		0.847	$y = a_0 + a_3 x_3 + a_4 x_4$
1		x2		x4	0.680	
1			x3	x4	0.935	$\dots$
1	x1	x2	x3		0.982	$y = a_0 + a_1 x_1 + a_2 x_2 + a_3 x_3$
1	x1	x2		x4	0.982	
1	x1		x3	x4	0.982	$\dots$
1		x2	x3	x4	0.973	$y =$
1	x1	x2	x3	x4	0.982	$a_0 + a_1 x_1 + a_2 x_2 + a_3 x_3 + a_4 x_4$

Quelles variables choisir ?

$\{x_1, x_2\} : R^2 = 0.979$ $\{x_1, x_2, x_3, x_4\} : R^2 = 0.982$

Le R^2 n'est pas suffisant pour choisir...

Mesure de la qualité d'un modèle : le Cp de Mallows

Définition : Cp de Mallows

Soit $X^{(0)} \in \mathbb{R}^{n \times p_0}$ une sous matrice de $X \in \mathbb{R}^{n \times p}$, avec $p_0 < p$ et $z_i^{(0)}$ le vecteur des prédictions associées.
Le Cp de Mallows de la matrice $X^{(0)}$ est défini par:

$$Cp = \frac{1}{s^2} \sum_{i=1}^{n} (y_i - z_i^{(0)})^2 - n + 2p_0$$

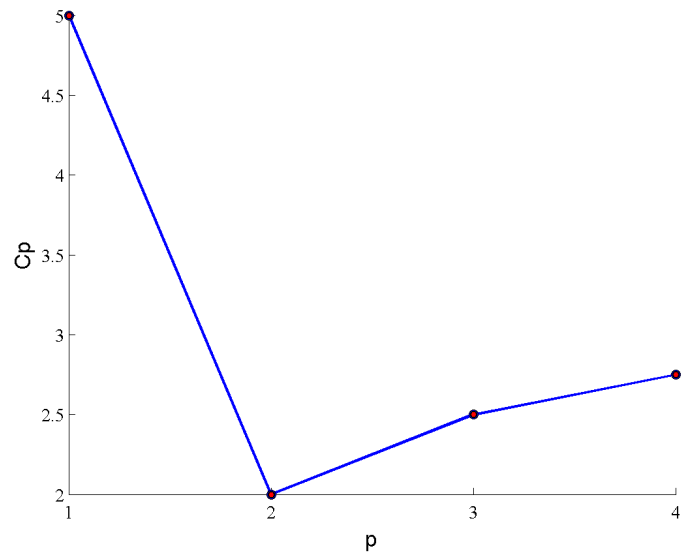
avec $s^2 = \frac{1}{n-p} \sum_{i=1}^{n} (y_i - z_i)^2$ la variance estimée sur le modèle complet .

NB : Ici, p désigne le nombre total de colonnes de X utilisé pour la régression, incluant donc la colonne de 1.

Analyse du Cp de Mallows

$$Cp = \frac{1}{s^2} \sum_{i=1}^{n} (y_i - z_i^{(0)})^2 - n + 2p_0$$

- le Cp estime l'erreur quadratique
- plus le Cp d'un modèle est petit, meilleur est ce modèle
  - plus il y a de variables, plus $\sum_{i=1}^{n} (y_i - z_i^{(0)})^2$ est petit
  - mais p_0 augmente



Mallows, C.L., (1973) Some comments on Cp, Technometrics, 15, 661-675.

Sélection systématique des variables

1	x1	x2	x3	x4	R^2	erreurs	Cp
1	x1				0.534	1699.61	202.55
1		x2			0.666	1202.09	142.49
1			x3		0.286	2616.36	315.15
1				x4	0.675	1194.22	138.73
1	x1	x2			0.979	93.88	2.68
1	x1		x3		0.548	2218.12	198.09
1	x1			x4	0.972	121.22	5.50
1		x2	x3		0.847	701.74	62.44
1		x2		x4	0.680	1461.81	138.23
1			x3	x4	0.935	294.01	22.37
1	x1	x2	x3		0.982	90.00	3.04
1	x1	x2		x4	0.982	85.35	3.02
1		x2	x3	x4	0.973	146.85	7.34
1	x1	x2	x3	x4	0.982	110.35	5.00

Quelles variables choisir ? $\min_{Cp}$

$$\{x_1, x_2\} : Cp = 2.68$$

Sélection de variables : autres approches

Forward Selection

- Approche additive

1. Ensemble de départ vide
2. À chaque itération, on ajoute la variable donnant une matrice $X^{(0)}$ avec un C_p minimum
3. Quand toutes les variables ont été ajoutées, on prend le min des C_p sur l'ensemble.

Backward Selection

- Approche soustractive

1. Ensemble de départ avec **toutes les variables**
2. À chaque itération, on **supprime** la variable donnant une matrice $X^{(0)}$ avec un C_p minimum
3. Quand toutes les variables ont été **supprimées**, on prend le min des C_p sur l'ensemble.

Conclusion

Diagnostic

- Modéle :
  - R^2
  - Examen global des résidus
- Observations
  - Examen des résidus un à un
  - Examen des contributions (distance de Cook)
- Variables
  - calcul du Cp de Mallows

Pour aller plus loin

- Critères BIC, AIC, PRESS, ...
- Utiliser des tests statistiques
- Changer de fonction objectif

$\sum(y_i - z_i)(z_i - \bar{y}) = 0$?

$$\begin{aligned}\sum(y_i - z_i)(z_i - \bar{y}) &= \sum \varepsilon_i(z_i - \bar{y}) \\ &= \sum \varepsilon_i \bar{y} - \varepsilon_i z_i \\ &= \bar{y} n \underbrace{\bar{\boldsymbol{\varepsilon}}}_{=0} - \underbrace{\boldsymbol{\varepsilon}^\top \mathbf{z}}_{=0}\end{aligned}$$