

# Introduction Stats Econométrie

## Régression multivariée

[marco.cuturi@ensae.fr](mailto:marco.cuturi@ensae.fr)

---

# Régression: fondamentaux

- Même sujet peut être étudié différemment: statistiques, algèbre linéaire, AI...  
*etc..*
- La régression linéaire est directement relié au récentes idées sur la **parsimonie**
  - Lasso (1996→)
  - SVM régression (1996→)
  - Compressed Sensing (2002→)

# Une des tâches les plus fondamentales: la régression

Données: plusieurs observations du même type

- Base de données  $\{\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_N\}$ .
- Chaque observation  $\mathbf{x}_j$  est un vecteur de mesures  $\mathbf{x}_j = \begin{bmatrix} x_{1,j} \\ x_{2,j} \\ \vdots \\ x_{d,j} \end{bmatrix}$
- Chaque mesure  $x_{i,j}$  ( $1 \leq i \leq d$ ) d'une observation  $\mathbf{x}_j$  est un nombre.

# Une des tâches les plus fondamentales: la régression

Cette base de données peut s'interpréter comme une **matrice**  $\mathbb{R}^{d \times N}$

$$\{\mathbf{x}^1, \dots, \mathbf{x}^N\} \iff \begin{bmatrix} \mathbf{x}_{1,1} & \mathbf{x}_{1,2} & \cdots & \mathbf{x}_{1,N} \\ \mathbf{x}_{2,1} & \mathbf{x}_{2,2} & \cdots & \mathbf{x}_{2,N} \\ \mathbf{x}_{3,1} & \mathbf{x}_{3,2} & \cdots & \mathbf{x}_{3,N} \\ \vdots & \vdots & \cdots & \vdots \\ \mathbf{x}_{d,1} & \mathbf{x}_{d,2} & \cdots & \mathbf{x}_{d,N} \end{bmatrix}$$

# Examples



$$\text{Credit card holder } \mathbf{x}_j = \begin{bmatrix} \text{Income} \\ \text{Age} \\ \vdots \\ \text{Work history (months)} \\ \text{Family} \\ \# \text{ Credit Incidents} \end{bmatrix}$$



$$\text{Patient } \mathbf{x}_j = \begin{bmatrix} \text{height} \\ \text{weight} \\ \vdots \\ \# \text{ minutes exercise/week} \\ \text{LDL cholesterol} \\ \text{HDL cholesterol} \end{bmatrix}$$



$$\text{Blog } \mathbf{x}_j = \begin{bmatrix} \text{avg. pages view/month} \\ \# \text{ posts} \\ \vdots \\ \text{avg. } \# \text{ comments/month} \\ \text{revenue from ads/month} \end{bmatrix}$$

## Au sein de ces variables...

- Certaines peuvent être **faciles à mesurer**, d'autres **plus difficiles**.
- Certaines variables peuvent avoir un effet **causal** sur les autres.
  
- En régression , les  $d$  caractéristiques (ou variables) sont séparées entre:
  - $k$  **régresseurs** (ou **variables prédictives, indépendantes**)
  - $d - k$  **variables dépendantes** (ou **prédites**).

# Régression

- En régression , les  $d$  caractéristiques (ou variables) sont séparées entre:
  - $k$  **régresseurs** (ou **variables prédictives, indépendantes**)
  - $d - k$  **variables dépendantes** (ou **prédites**).

*deviner* les **variables dépendantes**(chères à mesurer) grâce aux **régresseurs**.

# Le problème de la Régression

- Etant donnés,

- Une BDD  $\{\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_N\} \iff X = \begin{bmatrix} x_{1,1} & x_{1,2} & \cdots & x_{1,N} \\ x_{2,1} & x_{2,2} & \cdots & x_{2,N} \\ x_{3,1} & x_{3,2} & \cdots & x_{3,N} \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ x_{d,1} & x_{d,2} & \cdots & x_{d,N} \end{bmatrix}$



# Le problème de la Régression

- Etant donné,

- Une BDD  $\{\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_N\} \iff X = \begin{bmatrix} \mathbf{x}_{1,1} & \mathbf{x}_{1,2} & \cdots & \mathbf{x}_{1,N} \\ \mathbf{x}_{2,1} & \mathbf{x}_{2,2} & \cdots & \mathbf{x}_{2,N} \\ \mathbf{x}_{3,1} & \mathbf{x}_{3,2} & \cdots & \mathbf{x}_{3,N} \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ \mathbf{x}_{d-1,1} & \mathbf{x}_{d-1,2} & \cdots & \mathbf{x}_{d-1,N} \\ \mathbf{x}_{d,1} & \mathbf{x}_{d,2} & \cdots & \mathbf{x}_{d,N} \end{bmatrix}$

- Un ensemble de  $k$  régresseurs  $\text{Reg} \subset \{1, \dots, d\}$
- Un ensemble de  $d - k$  variables dépendantes  $\text{Res} \subset \{1, \dots, d\}$

# Le problème de la Régression

- Régression = **construire une fonction**  $f : \mathbb{R}^k \rightarrow \mathbb{R}^{d-k}$  telle que,

$$\forall \mathbf{x}, f((\mathbf{x}_i)_{i \in \text{Reg}}) \approx (\mathbf{x}_k)_{k \in \text{Res}}.$$

- *e.g.* if  $d = 6$ ,  $k = 4$ , **Reg** =  $\{1, 2, 3, 4\}$ , **Res** =  $\{5, 6\}$  nous rechercherons une fonction  $f : \mathbb{R}^4 \rightarrow \mathbb{R}^2$ ,

$$f(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \mathbf{x}_3, \mathbf{x}_4) \approx (\mathbf{x}_5, \mathbf{x}_6)$$

# Plus d'Exemples



$$\text{Credit card holder } \mathbf{x}_j = \begin{bmatrix} \text{Income} \\ \text{Age} \\ \vdots \\ \text{Work history (months)} \\ \text{Family} \\ \# \text{ Credit Incidents} \end{bmatrix}$$



$$\text{Patient } \mathbf{x}_j = \begin{bmatrix} \text{height} \\ \text{weight} \\ \vdots \\ \# \text{ minutes exercise/week} \\ \text{LDL cholesterol} \\ \text{HDL cholesterol} \end{bmatrix}$$



$$\text{Blog } \mathbf{x}_j = \begin{bmatrix} \text{avg. pages view/month} \\ \# \text{ posts} \\ \vdots \\ \text{avg. } \# \text{ comments/month} \\ \text{revenue from ads/month} \end{bmatrix}$$

# Plus d'Exemples



$$\text{Credit card holder } \mathbf{x}_j = \begin{bmatrix} \text{Income} \\ \text{Age} \\ \vdots \\ \text{Work history (months)} \\ \text{Family} \\ \# \text{ Credit Incidents} \end{bmatrix}$$



$$\text{Patient } \mathbf{x}_j = \begin{bmatrix} \text{height} \\ \text{weight} \\ \vdots \\ \# \text{ minutes exercise/week} \\ \text{LDL cholesterol} \\ \text{HDL cholesterol} \end{bmatrix}$$



$$\text{Blog } \mathbf{x}_j = \begin{bmatrix} \text{avg. pages view/month} \\ \# \text{ posts} \\ \vdots \\ \text{avg. } \# \text{ comments/month} \\ \text{revenue from ads/month} \end{bmatrix}$$

## Dans les slides suivants...

Nous ne considérons que des tâches avec **une** variable **dépendante**

- Toutes les autres seront des **régresseurs**.
- Nous renommons la variable **dépendante** **y** et réassignons les noms  $x_1, \dots, x_d$  pour les **régresseurs**
- prédire plus qu'une variable? extension assez directe.

## Dans les slides suivants...

Nous assumerons que **y** prend des valeurs **continues**.

- Quand **y** prend des valeurs discrètes, notamment binaires  $\{0, 1\}$ , d'autres approches sont envisagées.
- Pourtant... **binary**  $\subset$  **real** : la régression "marche" sur des valeurs discrètes,
- Mais **real**  $\not\subset$  **binary**... on parle alors de classification (HS).

# Exemple: Apartments

現在の条件に合う物件数 **1,226** 件中 **161~180** 件を表示しています。 [前へ](#) [5](#) [6](#) [7](#) [8](#) [9](#) [10](#) [11](#) [12](#) [13](#) [14](#) [次へ](#)

[絞り込み条件をリセット](#) [一覧表示](#) [間取り表示](#)  すべてにチェック [チェックした物件をまとめて](#) [詳細表示](#) [お問い合わせ](#)

画像	路線名/駅名 住所	バス 徒歩	賃料 管理費等	敷金または保証金 礼金(数引)	間取り 専有面積	築年月 (築年数)	選択
	<a href="#">京阪鴨東線/出町柳</a> 京都市左京区田中大塚町 <a href="#">間取り図</a> <a href="#">写真</a>	- 5分	4.20万円 3,000円	5万円 5万円(-)	1R 16.00m <sup>2</sup>	'89/09 (築22年)	<input type="checkbox"/>
	<a href="#">叡山本線/修学院</a> 京都市左京区山端滝ヶ鼻町 <a href="#">間取り図</a> <a href="#">写真</a>	- 7分	4.30万円 2,000円	5万円 なし(なし)	1K 20.44m <sup>2</sup>	'95/03 (築17年)	<input type="checkbox"/>
	<a href="#">叡山本線/修学院</a> 京都市左京区山端滝ヶ鼻町 <a href="#">間取り図</a> <a href="#">写真</a>	- 7分	4.30万円 2,000円	5万円 なし(なし)	1K 20.44m <sup>2</sup>	'95/03 (築17年)	<input type="checkbox"/>
	<a href="#">叡山本線/一乗寺</a> 京都市左京区一乗寺梅ノ木町 <a href="#">間取り図</a> <a href="#">写真</a>	- 6分	4.30万円 2,000円	5万円 なし(-)	1K 20.00m <sup>2</sup>	'88/03 (築24年)	<input type="checkbox"/>
	<a href="#">京阪鴨東線/出町柳</a> 京都市左京区吉田上阿達町 <a href="#">間取り図</a> <a href="#">写真</a>	- 7分	4.30万円 2,000円	5万円 5万円(なし)	1K 19.02m <sup>2</sup>	'85/02 (築27年)	<input type="checkbox"/>
	<a href="#">烏丸線/今出川</a> 京都市上京区柳園子町 <a href="#">間取り図</a> <a href="#">写真</a>	- 3分	4.30万円 2,000円	なし 10万円(-)	1R 17.70m <sup>2</sup>	'84/10 (築27年)	<input type="checkbox"/>
	<a href="#">烏丸線/今出川</a> 京都市上京区北小路室町 <a href="#">間取り図</a> <a href="#">写真</a>	- 2分	4.50万円 なし	5万円 5万円(-)	1K 16.00m <sup>2</sup>	'94/03 (築18年)	<input type="checkbox"/>
	<a href="#">京阪鴨東線/出町柳</a> 京都市左京区田中下柳町 <a href="#">間取り図</a> <a href="#">写真</a>	- 3分	4.30万円 2,500円	5万円 8万円(-)	1K 20.00m <sup>2</sup>	'85/03 (築27年)	<input type="checkbox"/>
	<a href="#">叡山本線/修学院</a> 京都市左京区高野泉町 <a href="#">間取り図</a> <a href="#">写真</a>	- 5分	4.05万円 5,500円	6万円 5万円(なし)	1K 14.58m <sup>2</sup>	'79/01 (築33年)	<input type="checkbox"/>

**選択路線**

叡山本線

出町柳(824)

元田中(380)  茶山(388)

一乗寺(279)

修学院(187)

[路線を選びなおす](#) [駅を選びなおす](#)

**基本条件**

賃料 [選び方を変える](#)

安  高

下限なし~上限なし

管理費・共益費込み(1,226)

礼金なし(266)

敷金・保証金なし(224)

**間取り**

1R(102)  1K/1DK(778)

1LDK(66)  2K/2DK(73)

2LDK(99)  3K/3DK(22)

3LDK(78)  4K/4DK(0)

4LDK以上(8)

**最寄り駅からの時間(徒歩)**

1分以内(63)  5分以内(466)

7分以内(706)  10分以内(902)

15分以内(1,076)

指定なし(1,226)

Information sur 285 appartements au Japon, à Kyoto.

Source: <http://realestate.yahoo.co.jp/>

# Exemple: Appartements

現在の条件に合う物件数 **1,226** 件中 **161~180** 件を表示しています。 前へ ◀ 5 6 7 8 **9** 10 11 12 13 14 ▶ 次へ

絞り込み条件をリセット

一覧表示 間取り表示  すべてにチェック  チェックした物件をまとめて

画像	路線名/駅名 住所	バス 徒歩	賃料 管理費等	敷金または保証金 礼金(数引)	間取り 専有面積	築年月 (築年数)	選択
	京阪鴨東線/出町柳 京都市左京区田中大塚町 <a href="#">間取り図</a> <a href="#">写真</a>	- 5分	4.20万円 3,000円	5万円 5万円(-)	1R 16.00m <sup>2</sup>	'89/09 (築22年)	<input type="checkbox"/>
	叡山本線/修学院 京都市左京区山端滝ヶ鼻町 <a href="#">間取り図</a> <a href="#">写真</a>	- 7分	4.30万円 2,000円	5万円 なし(なし)	1K 20.44m <sup>2</sup>	'95/03 (築17年)	<input type="checkbox"/>
	叡山本線/修学院 京都市左京区山端滝ヶ鼻町 <a href="#">間取り図</a> <a href="#">写真</a>	- 7分	4.30万円 2,000円	5万円 なし(なし)	1K 20.44m <sup>2</sup>	'95/03 (築17年)	<input type="checkbox"/>
	叡山本線/一乗寺 京都市左京区一乗寺梅ノ木町 <a href="#">間取り図</a> <a href="#">写真</a>	- 6分	4.30万円 2,000円	5万円 なし(-)	1K 20.00m <sup>2</sup>	'88/03 (築24年)	<input type="checkbox"/>
	京阪鴨東線/出町柳 京都市左京区吉田上阿達町 <a href="#">間取り図</a> <a href="#">写真</a>	- 7分	4.30万円 2,000円	5万円 5万円(なし)	1K 19.02m <sup>2</sup>	'85/02 (築27年)	<input type="checkbox"/>
	烏丸線/今出川 京都市上京区柳園子町 <a href="#">間取り図</a> <a href="#">写真</a>	- 3分	4.30万円 2,000円	なし 10万円(-)	1R 17.70m <sup>2</sup>	'84/10 (築27年)	<input type="checkbox"/>
	烏丸線/今出川 京都市上京区北小路室町 <a href="#">間取り図</a> <a href="#">写真</a>	- 2分	4.50万円 なし	5万円 5万円(-)	1K 16.00m <sup>2</sup>	'94/03 (築18年)	<input type="checkbox"/>
	京阪鴨東線/出町柳 京都市左京区田中下柳町 <a href="#">間取り図</a> <a href="#">写真</a>	- 3分	4.30万円 2,500円	5万円 8万円(-)	1K 20.00m <sup>2</sup>	'85/03 (築27年)	<input type="checkbox"/>
	叡山本線/修学院 京都市左京区高野泉町 <a href="#">間取り図</a> <a href="#">写真</a>	- 5分	4.05万円 5,500円	6万円 5万円(なし)	1K 14.58m <sup>2</sup>	'79/01 (築33年)	<input type="checkbox"/>

**選択路線**

叡山本線

出町柳(824)  元田中(380)  茶山(388)

一乗寺(279)  修学院(187)

▶ 路線を選びなおす ▶ 駅を選びなおす

**基本条件**

賃料

安  高

下限なし~上限なし

管理費・共益費込み(1,226)

礼金なし(266)

敷金・保証金なし(224)

**間取り**

1R(102)  1K/1DK(778)

1LDK(66)  2K/2DK(73)

2LDK(99)  3K/3DK(22)

3LDK(78)  4K/4DK(0)

4LDK以上(8)

**最寄り駅からの時間(徒歩)**

1分以内(63)  5分以内(466)

7分以内(706)  10分以内(902)

15分以内(1,076)

指定なし(1,226)

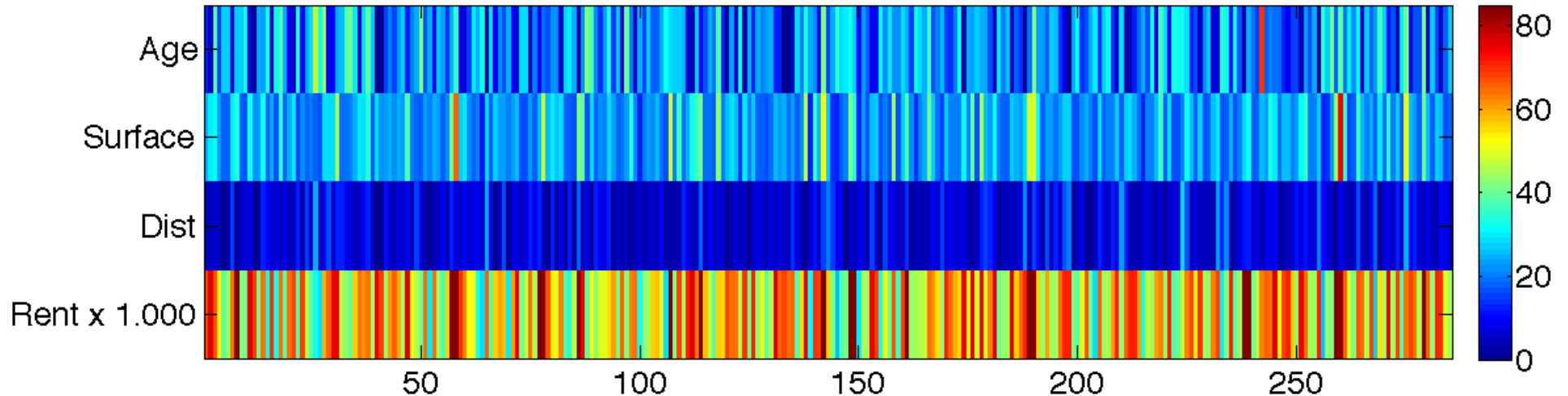
Information sur 285 appartements au Japon, à Kyoto.

Retenu 4 variables: **Surface**, **Loyer**, **Age du bâtiment**, **distance / station**.



# What does the matrix look like?

```
imagecs(H); colorbar;
```



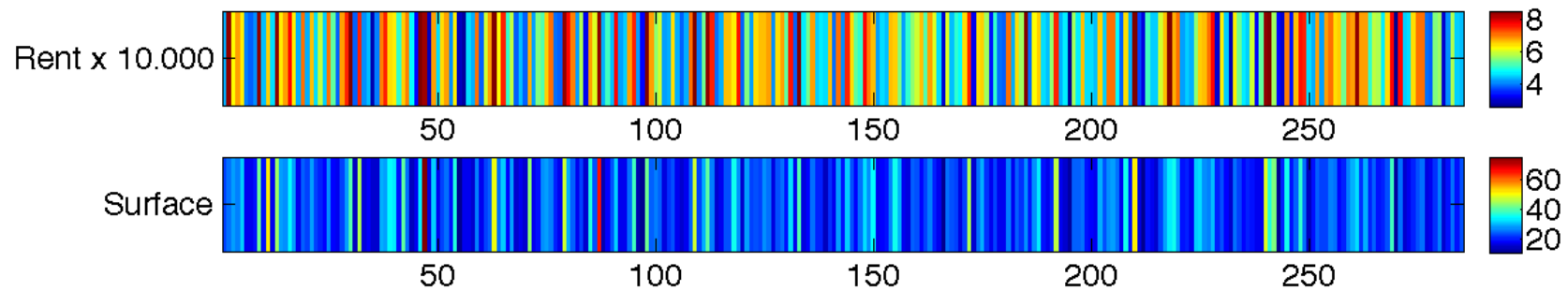
285 columns, 4 lines.

Chaque colonne représente un appartement.

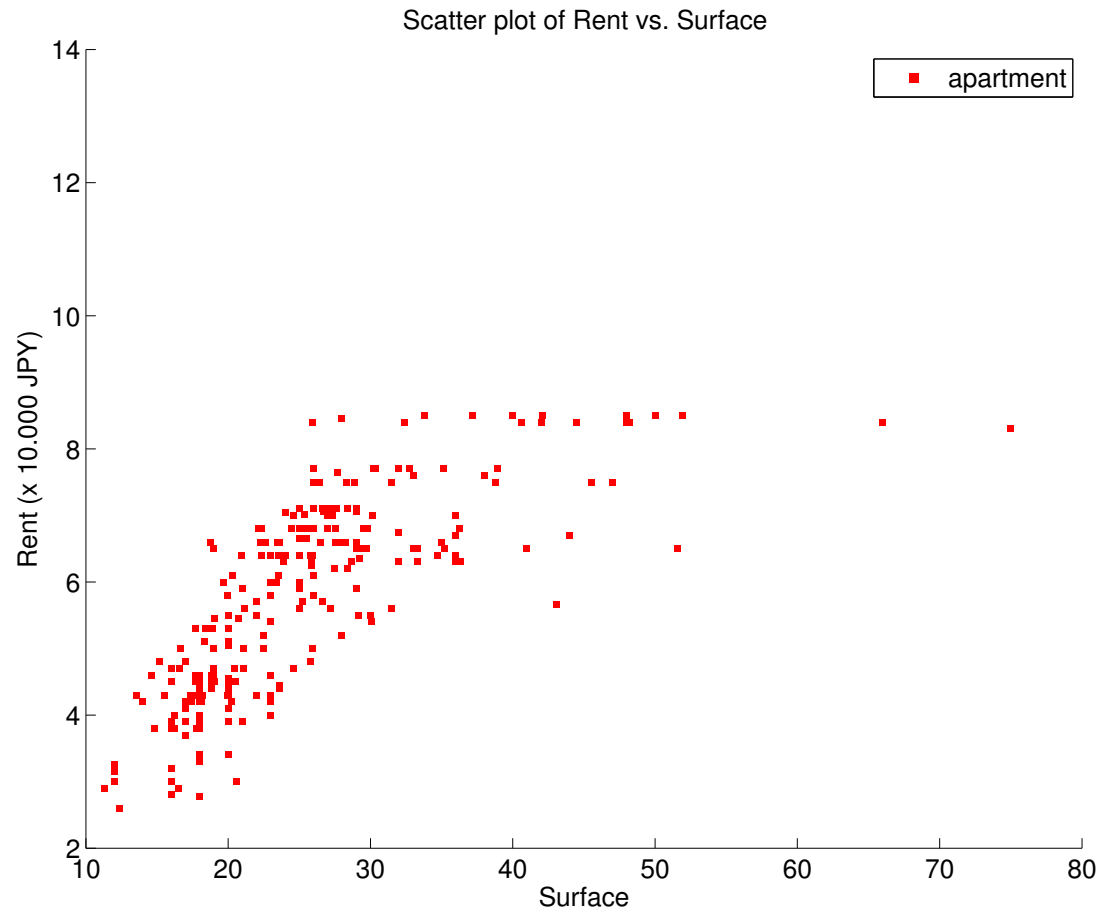
Nous ferons la **régression** du loyer à partir de l'âge, surface and distance

---

# Régression: une variable vs. une autre

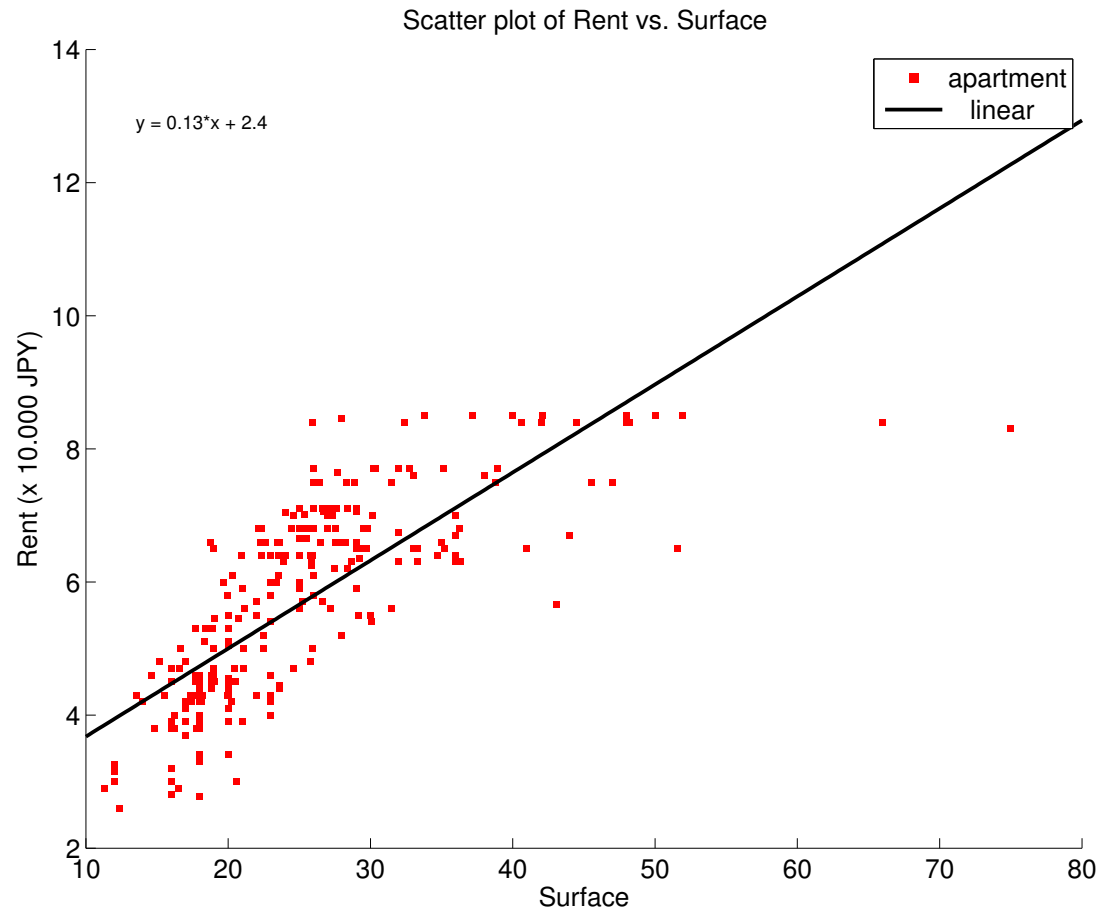


# Loyer vs. Surface



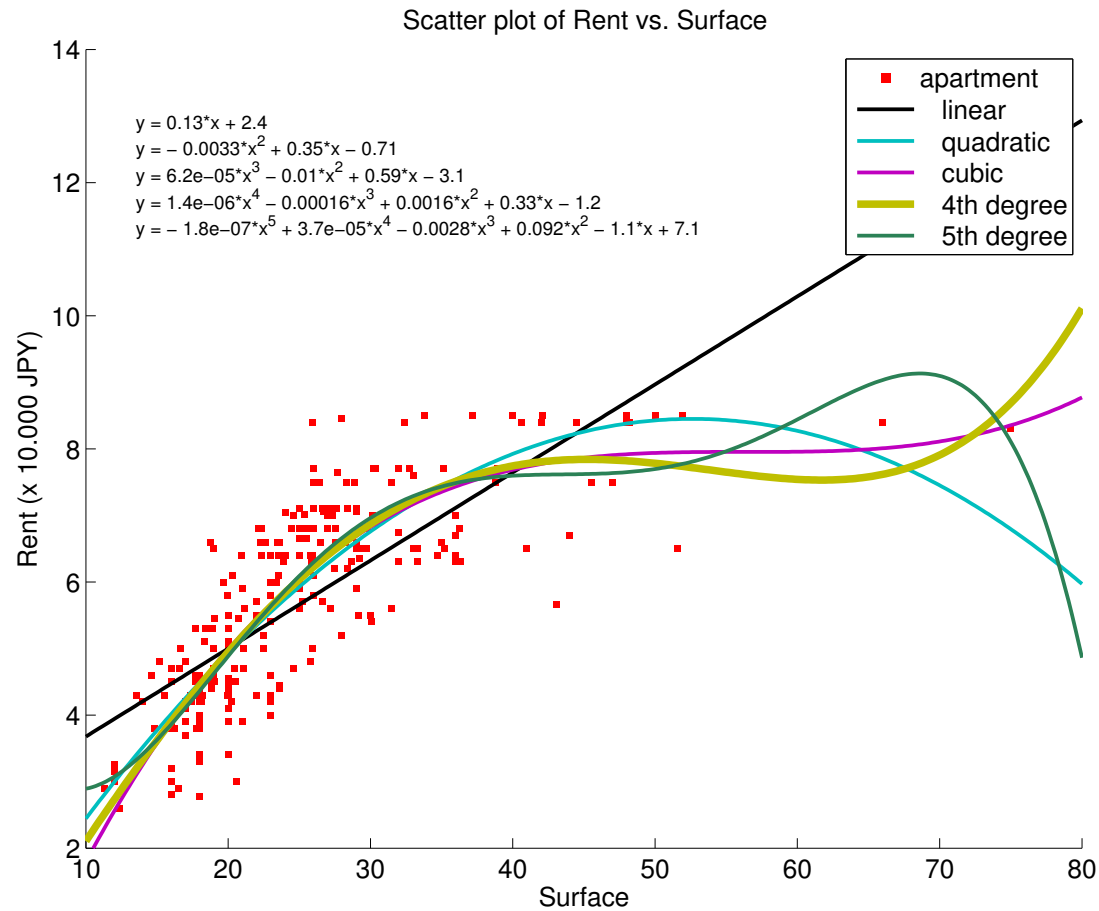
Remarquez que le jeu de données est censuré au dessus de 85.000 JPY

# Loyer vs. Surface



Si nous utilisons un outil logiciel, nous obtenons l'approximation  $y = 0.13x + 2.4$

# Loyer vs. Surface



Nous pouvons utiliser des polynômes de degré supérieur....

# Outil logiciel de “curve fitting”

- Tous ces logiciels utilisent le critère des **moindres carrés** e.g

$$\min_{f \in \mathcal{F}} \sum_{j=1}^N (y_j - f(x_j))^2$$

où  $\mathcal{F}$  est une **classe de functions**

- Les logiciels courants considèrent plusieurs classes for  $\mathcal{F}$ .

# Behind the curve fitting tool

- Tous ces logiciels utilisent le critère des **moindres carrés** e.g

$$\min_{f \in \mathcal{F}} \sum_{j=1}^N (y_j - f(x_j))^2$$

où  $\mathcal{F}$  est une **classe de functions**

- Les logiciels courants considèrent plusieurs classes for  $\mathcal{F}$ .

- **Linéaire**  $\min_{b, a_1 \in \mathbb{R}} \sum_{j=1}^N (y_j - (b + a_1 x_j))^2$

# Behind the curve fitting tool

- Tous ces logiciels utilisent le critère des **moindres carrés** e.g

$$\min_{f \in \mathcal{F}} \sum_{j=1}^N (y_j - f(x_j))^2$$

où  $\mathcal{F}$  est une **classe de fonctions**

- Les logiciels courants considèrent plusieurs classes for  $\mathcal{F}$ .

- **Linéaire**  $\min_{b, a_1 \in \mathbb{R}} \sum_{j=1}^N (y_j - (b + a_1 x_j))^2$

- **Quadratique**  $\min_{b, a_1, a_2 \in \mathbb{R}} \sum_{j=1}^N (y_j - (b + a_1 x_j + a_2 x_j^2))^2$



# Behind the curve fitting tool

- Tous ces logiciels utilisent le critère des **moindres carrés** e.g

$$\min_{f \in \mathcal{F}} \sum_{j=1}^N (y_j - f(x_j))^2$$

où  $\mathcal{F}$  est une **classe de functions**

- Les logiciels courants considèrent plusieurs classes for  $\mathcal{F}$ .

- **Linéaire**  $\min_{b, a_1 \in \mathbb{R}} \sum_{j=1}^N (y_j - (b + a_1 x_j))^2$

- **Quadratique**  $\min_{b, a_1, a_2 \in \mathbb{R}} \sum_{j=1}^N \left( y_j - (b + a_1 x_j + a_2 x_j^2) \right)^2$

- **Cubique**  $\min_{b, a_1, a_2, a_3 \in \mathbb{R}} \sum_{j=1}^N \left( y_j - (b + a_1 x_j + a_2 x_j^2 + a_3 x_j^3) \right)^2$

- *etc.*

# Comment résoudre ce problème? le cas linéaire

- Jetons un oeil à la fonction

$$(a, b) \mapsto \sum_{j=1}^N (\mathbf{y}_j - (\mathbf{b} + \mathbf{a}x_j))^2.$$

- Using the notations

Loyer  $Y = [y_1 \quad y_2 \quad \cdots \quad y_N]$

Surface  $X = [x_1 \quad x_2 \quad \cdots \quad x_N]$

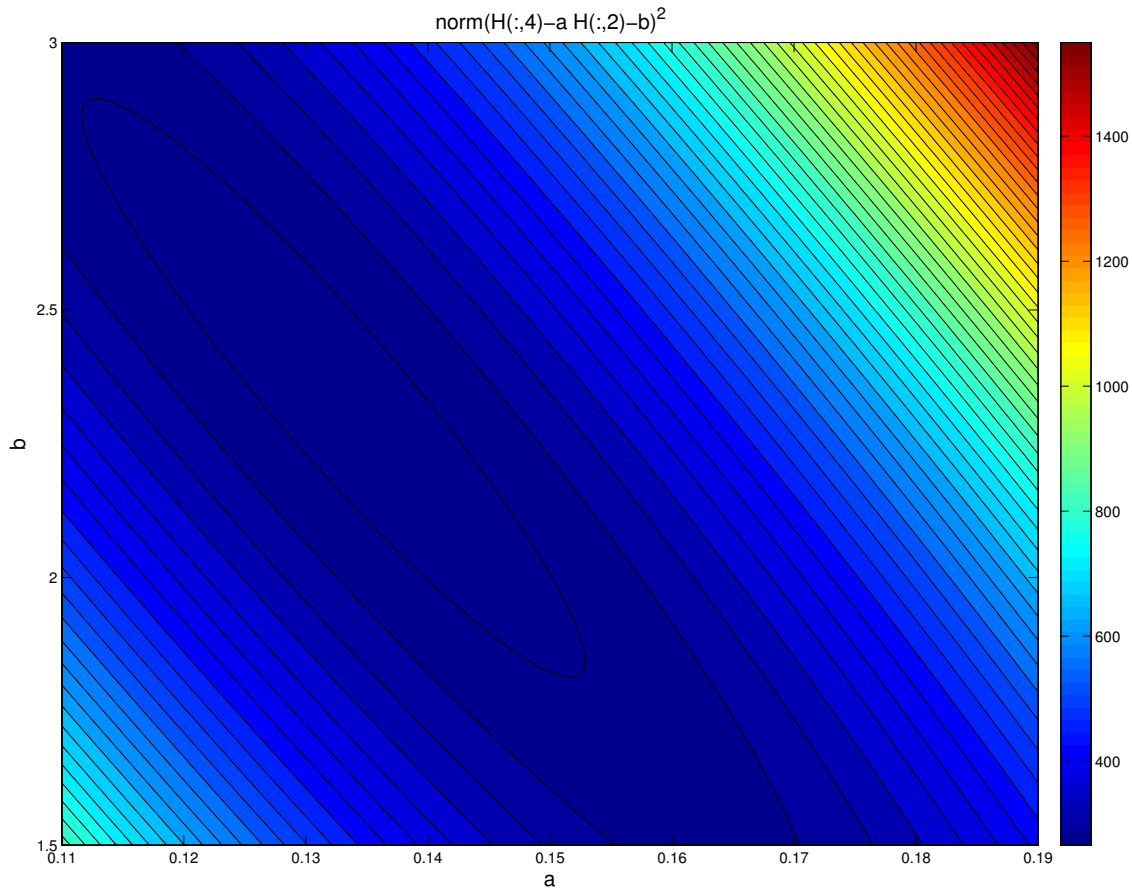
Constante  $\mathbf{1}_N = [1 \quad 1 \quad \cdots \quad 1]$

Nous avons

$$\sum_{j=1}^N (\mathbf{y}_j - (\mathbf{a}x_j + \mathbf{b}))^2 = \|\mathbf{Y} - \mathbf{a}\mathbf{X} - \mathbf{b}\mathbf{1}_N\|^2$$

# Contour plot de $(a, b) \rightarrow \|Y - aX - b\mathbf{1}_N\|^2$

- Comme nous n'avons que 2 paramètres, nous pouvons produire un contour plot



- Ceci valide la réponse  $\mathbf{y} = 0.13x + 2.4$ . Comment l'obtenir?

# Un peu d'algèbre linéaire

- We define the function  $L$  as

$$L : (a, b) \mapsto \sum_{j=1}^N (\mathbf{y}_j - (\mathbf{b} + \mathbf{a}x_j))^2$$

- Les dérivées partielles de  $L$  peuvent se calculer.

$$\frac{\partial L}{\partial a} = -2 \sum_{j=1}^N (\mathbf{y}_j - (\mathbf{b} + \mathbf{a}x_j)) \mathbf{x}_j$$

$$\frac{\partial L}{\partial b} = -2 \sum_{j=1}^N \mathbf{y}_j - (\mathbf{b} + \mathbf{a}x_j)$$

- Tout minimum  $(a^*, b^*)$  de  $L$  est un point selle.

# Un peu d'algèbre linéaire

- The dérivées partielles de  $L$  doivent s'annuler en  $(a^*, b^*)$

$$\frac{\partial L}{\partial a} = 2 \left( a \sum x_j^2 + b \sum x_j - \sum y_j x_j \right)$$

$$\frac{\partial L}{\partial b} = 2 \left( Nb - \sum y_j + a \sum x_j \right)$$

- Ainsi,  $(a^*, b^*)$  **doit satisfaire** le système linéaire

$$0 = a^* \sum x_j^2 + b^* \sum x_j - \sum y_j x_j$$

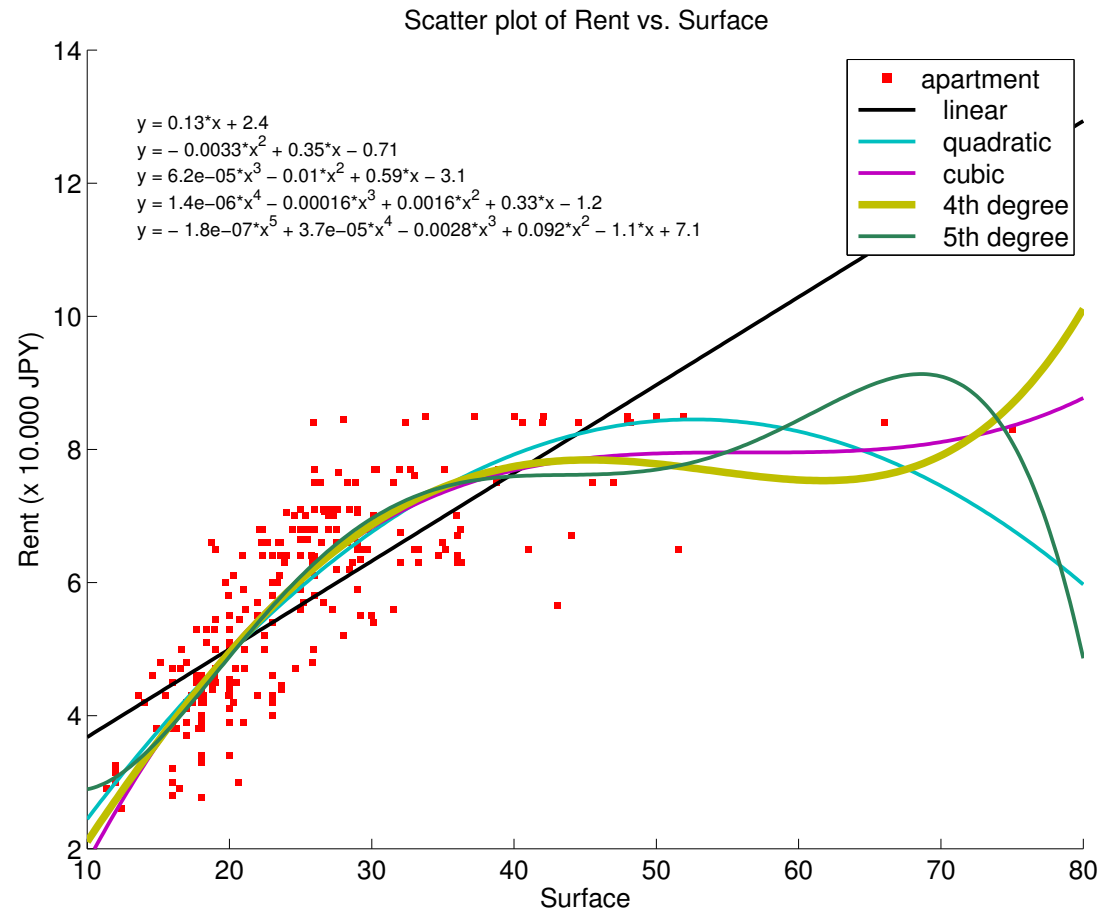
$$0 = Nb^* - \sum y_j + a^* \sum x_j$$

- Soit:

$$\begin{bmatrix} a^* \\ b^* \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \sum x_j^2 & \sum x_j \\ \sum x_j & N \end{bmatrix}^{-1} \begin{bmatrix} \sum y_j x_j \\ \sum y_j \end{bmatrix}$$

- ans = 0.132248772789152 2.354203561671262

# Loyer vs. Surface



Nous avons compris le cas linéaire. Quid du cas quadratique?

# Cas quadratique

$$\text{Quadratique} \quad \min_{b, a_1, a_2 \in \mathbb{R}} \sum_{j=1}^N \left( y_j - (b + a_1 x_j + a_2 x_j^2) \right)^2$$

- même idée... on défini

$$L : (a_1, a_2, b) \mapsto \sum_{j=1}^N \left( y_j - (b + a_1 x_j + a_2 x_j^2) \right)^2$$

- regardons maintenant les dérivées de cet objectif...

$$\frac{\partial L}{\partial a_2} = -2 \sum_{j=1}^N \left( y_j - (b + a_1 x_j + a_2 x_j^2) \right) x_j^2$$

$$\frac{\partial L}{\partial a_1} = -2 \sum_{j=1}^N \left( y_j - (b + a_1 x_j + a_2 x_j^2) \right) x_j$$

$$\frac{\partial L}{\partial b} = -2 \sum_{j=1}^N \left( y_j - (b + a_1 x_j + a_2 x_j^2) \right)$$

# Cas quadratique

- Equations pour un point selle:

$$0 = \sum_{j=1}^N \left( y_j - \left( b^* + a_1^* x_j + a_2^* x_j^2 \right) \right) x_j^2$$

$$0 = \sum_{j=1}^N \left( y_j - \left( b^* + a_1^* x_j + a_2^* x_j^2 \right) \right) x_j$$

$$0 = \sum_{j=1}^N \left( y_j - \left( b^* + a_1^* x_j + a_2^* x_j^2 \right) \right)$$

$$\begin{bmatrix} a_2^* \\ a_1^* \\ b^* \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \sum x_j^4 & \sum x_j^3 & \sum x_j^2 \\ \sum x_j^3 & \sum x_j^2 & \sum x_j \\ \sum x_j^2 & \sum x_j & N \end{bmatrix}^{-1} \begin{bmatrix} \sum y_j x_j^2 \\ \sum y_j x_j \\ \sum y_j \end{bmatrix}$$

- ans = -0.003306463076068 0.347969105896777 -0.705157514974559



# Polynômes d'ordre supérieur

- Intuitivement, pour les polynômes d'ordre  $p$  nous aurons à
  - Construire une matrice (de Toeplitz)
  - Combiner les valeurs de  $y$  and  $x$  pour plusieurs exposants
  - Résoudre le système linéaire
- D'une manière peut-être surprenante:

Trouver le **meilleur polynôme d'ordre  $p$**  avec les **moindres carrés**



Résoudre un système linéaire de  $p$  **variables**

- Pas si surprenant en fait:
  - Moindre carrés: objectif de degré 2 en les coefficients.
  - Minimum  $\Leftrightarrow$  point selle  $\Leftrightarrow$  système de degré 1..
  - Les moindre carrés sont choisis **parce qu'** ils sont résolus via système linéaire...

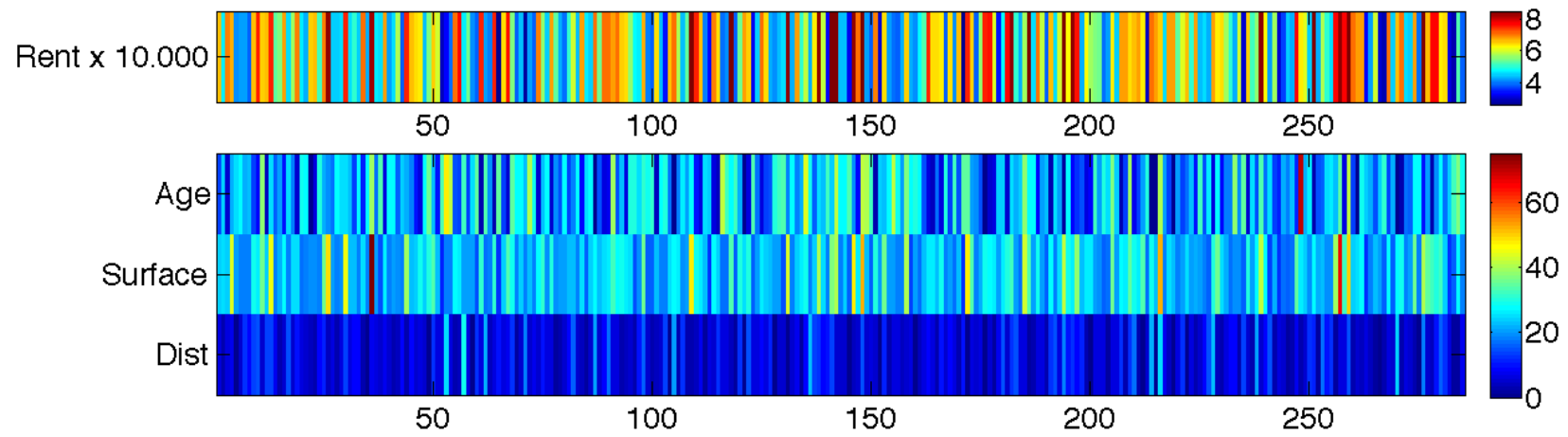
---

# Le cas général : une vs. plusieurs variables

- Comment pouvons nous introduire plusieurs variables?

Loyer  $Y = [y_1 \quad y_2 \quad \cdots \quad y_N]$

All other variables  $X = \begin{bmatrix} \vdots & \vdots & \cdots & \vdots \\ \mathbf{x}_1 & \mathbf{x}_2 & \cdots & \mathbf{x}_N \\ \vdots & \vdots & \cdots & \vdots \end{bmatrix}$



# Le cas général

- Nous avons donc  $d$  **régresseurs** ,  $1$  **variable dépendante**.
- Considérons à nouveau l'approche **linéaire**. Nous voulons une fonction  $f$  de la forme

$$f(\mathbf{x}) = \alpha_0 + \alpha_1 x_1 + \alpha_2 x_2 + \cdots + \alpha_d x_d.$$

- Nous devons déterminer  $d + 1$  valeurs
  - une constante  $\alpha_0$
  - des poids  $1 \leq i \leq d, \alpha_i$  pour chaque variable.
- **Moindres Carrés:**

$$L(\alpha_0, \alpha_1, \alpha_2, \cdots, \alpha_d) = \sum_{j=1}^N \left( y_j - (\alpha_0 + \alpha_1 x_{1,j} + \alpha_2 x_{2,j} + \cdots + \alpha_d x_{d,j}) \right)^2$$

# Le cas général

- Remarquons que

$$L(\alpha_0, \alpha_1, \alpha_2, \dots, \alpha_d) \rightarrow \sum_{i=1}^N \left( y_i - \left( \alpha_0 + \begin{bmatrix} \alpha_1 \\ \vdots \\ \alpha_d \end{bmatrix}^T \mathbf{x}_i \right) \right)^2 = \left\| \begin{bmatrix} \alpha_0 \\ \vdots \\ \alpha_d \end{bmatrix}^T X - Y \right\|^2,$$

where

$$X = \begin{bmatrix} 1 & 1 & \cdots & 1 \\ \vdots & \vdots & \cdots & \vdots \\ \mathbf{x}_1 & \mathbf{x}_2 & \cdots & \mathbf{x}_N \\ \vdots & \vdots & \cdots & \vdots \end{bmatrix} \in \mathbb{R}^{d+1 \times N}$$

and

$$Y = [y_1 \quad \cdots \quad y_N] \in \mathbb{R}^N.$$

- Nous écrivons  $\alpha$  pour le vecteur de taille  $d + 1$   $\begin{bmatrix} \alpha_0 \\ \vdots \\ \alpha_d \end{bmatrix}$ .

# Moindres Carrés - Linéaire

- En développant cette expression

$$L(\alpha) = (\alpha^T X X^T \alpha - 2Y X^T \alpha + \|Y\|^2)$$

- Considérons le **gradient** de cette fonction:

$$\nabla L = 2X X^T \alpha - 2X Y^T$$

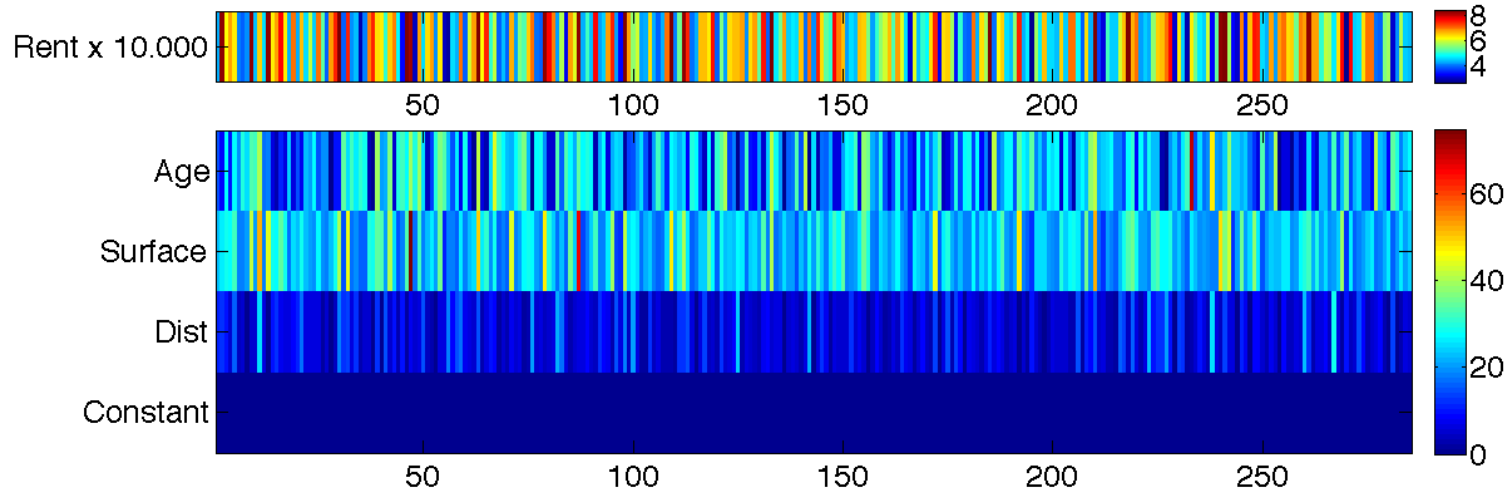
- Le gradient s'annule donc si

$$\alpha^* = (X X^T)^{-1} X Y^T$$

- $X X^T \in \mathbf{S}_+^n$ :  $X X^T$  est une matrice semidéfinie positive.
- Cette expression marche si  $X X^T \in \mathbb{R}^{d+1}$  est **inversible**, à savoir  $X X^T \in \mathbf{S}_{++}^n$ .

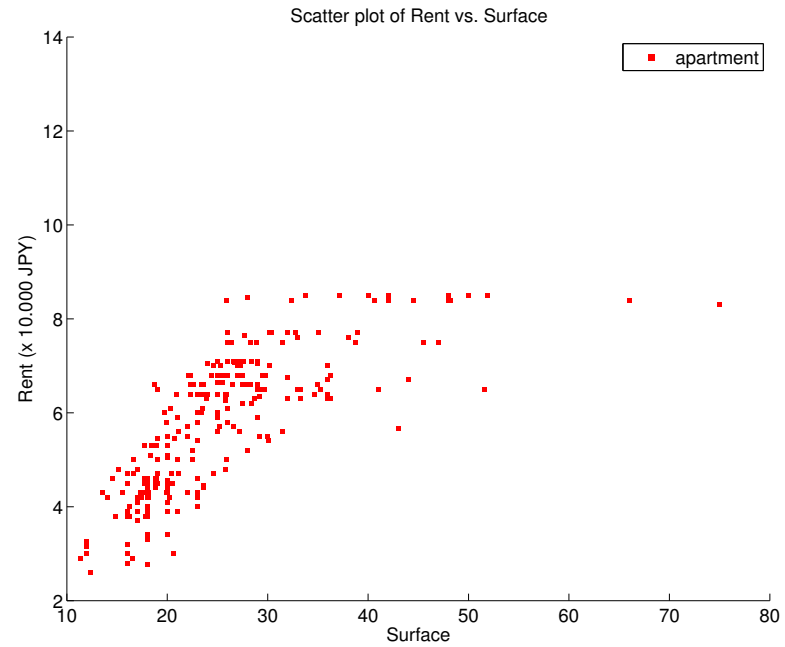
# Loyer vs. le reste

- Prenons nos données. Ajoutons une ligne de 1s



```
>>> (X*X') \ (X*Y')
ans =
    0.000141678721821
    0.004226687659299
   -0.012599982792209
    5.611128285287092
```

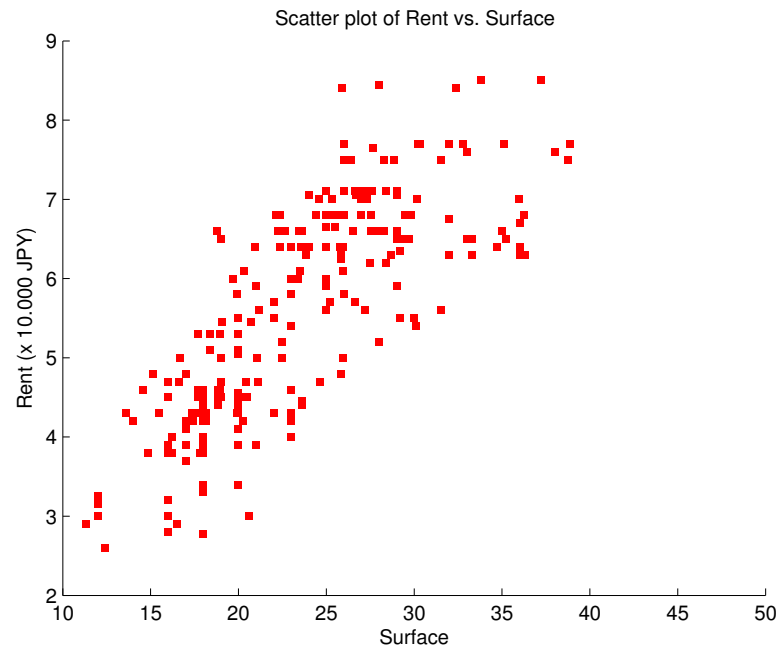
# Quel est le problème?



$$\text{loyer} = 1.4 \hat{\text{age}} + 42.2 \text{ surf} - 125 \text{ dist} + 56.110 \text{ JPY}$$



# En enlevant les points aberrants? (surf > 40)



```
>>> (X*X') \ (X*Y')
```

```
ans =
```

```
-0.049332605603095    x age  
 0.163122792160298    x surface  
-0.004411580036614    x distance  
 2.731204399433800    + 27.300 JPY
```

Morale: facile de tirer des conclusions fausses

# Que peut il arriver de problématique?

- Que se passe-t-il quand  $d \gg n$ ?  $(XX^T)$  n'est **plus inversible**...
  - données en génomique,
  - données en analyse d'images (beaucoup de caractéristiques)
- Que se passe-t-il quand  $(XX^T)$  est **mal conditionnée**?  $(\frac{\lambda_{\min}(XX^T)}{\lambda_{\max}(XX^T)} \approx 0)$ ?
  - Si  $\lambda_{\min}(XX^T) = 1e - 10$ ,  $\lambda_{\max}((XX^T)^{-1}) = 1e10!!$
  - Très mauvaise stabilité numérique de la solution.
- Quand  $d \gg n$ , nous sommes tentés de faire de la **sélection de variable**,
  - *i.e.* choisir un sous-ensemble  $d'$  des  $d$  variables qui suffit pour prédire  $\mathbf{y}$ .
  - *i.e.* favoriser des vecteurs  $\alpha$  tels que  $\|\alpha\|_0 = \text{card}\{\alpha_i \neq 0\}$  est petit.

# En résumé

**Régression:** trouver une relation fonctionnelle entre une **variable dépendante** and des **prédicteurs**

# En résumé

**Régression:** trouver une relation fonctionnelle entre une **variable dépendante** and des **prédicteurs**

Trouver une fonction  $f$  telle que

$$\forall(\mathbf{x}, y) \text{ observables, } f(\mathbf{x}) \approx y$$

# En résumé

**Régression:** trouver une relation fonctionnelle entre une **variable dépendante** and des **prédicteurs**

Trouver une fonction  $f$  telle que

$$\forall(\mathbf{x}, \mathbf{y}) \text{ observables, } f(\mathbf{x}) \approx \mathbf{y}$$

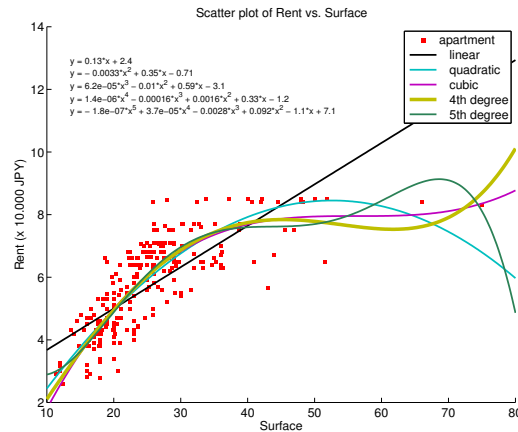
Utiliser une BDD & le critère des moindres carrés:

$$\min_{f \in \mathcal{F}} \frac{1}{N} \sum_{j=1}^N (\mathbf{y}_j - f(\mathbf{x}_j))^2$$

# En résumé

**Régression:** trouver une relation fonctionnelle entre une **variable dépendante** and des **prédicteurs**

- pour la régression d'une variable **réelle** vs. une autre :



- Moindres-Carrés  $L(b, a_1, \dots, a_p)$  pour estimer **lignes**, polynômes.
- Aboutit à un système linéaire.

$$\frac{\partial \mathbf{2^{nd} order}(b, a_1, \dots, a_p)}{\partial a_p} = \mathbf{linear} \text{ in } (b, a_1, \dots, a_p)$$

- En posant  $\partial L / \partial a_p = 0$  nous obtenons  $p + 1$  equations **linéaires** pour  $p + 1$  variables.

# En résumé

**Régression:** trouver une relation fonctionnelle entre une **variable dépendante** and des **prédicteurs**

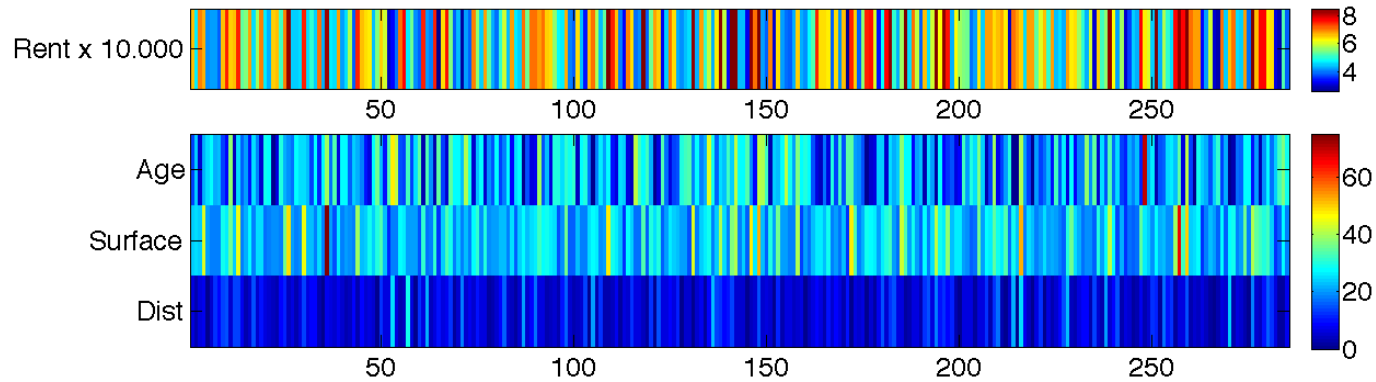
- pour la régression d'une variable **réelle** vs plusieurs autres :
  - Trouver vecteur de poids  $\alpha \in \mathbb{R}^d$  tel que  $(\alpha^T \mathbf{x} + \alpha_0) \approx y$ .
  - On ajoute à la matrice  $d \times N$  des données, une ligne de 1 pour définir **X**.
  - La ligne **Y** de valeurs **prédire**.
  - Critère des Moindres-Carrés:

$$L(\alpha) = \|\mathbf{Y} - \alpha^T \mathbf{X}\|^2 = \left( \alpha^T \mathbf{X} \mathbf{X}^T \alpha - 2 \mathbf{Y} \mathbf{X}^T \alpha + \|\mathbf{Y}\|^2 \right).$$

$$\nabla_{\alpha} L = 0 \quad \Rightarrow \quad \alpha^* = (\mathbf{X} \mathbf{X}^T)^{-1} \mathbf{X} \mathbf{Y}^T$$

- Ceci marche si  $\mathbf{X} \mathbf{X}^T \in \mathbb{R}^{d+1}$  est **inversible**.

# Exemple



```
>> (X*X') \ (X*Y')
```

```
ans =
```

```
-0.049332605603095    x age  
 0.163122792160298    x surface  
-0.004411580036614    x distance  
 2.731204399433800    + 27.300 JPY
```



# Autres interprétations

- Une perspective **statistique** sur la régression MC.
- Quelques mots sur l'utilisation de **polynômes** en plus haute dimension.
- Une perspective **géométrique**
- **co-linéarité des variables et surapprentissage**
- Quelques solutions: **techniques de régression avancées**
  - Sélection de variables
  - Régression "Ridge"
  - Lasso