

MS IA : MDI721  
Modèle linéaire en dimension 1

Pavlo Mozharovskyi      François Portier  
Télécom Paris

Septembre 2019

## 1. Introduction : visualisation / Python

## 2. Moindres carrés uni-dimensionnels

Modélisation

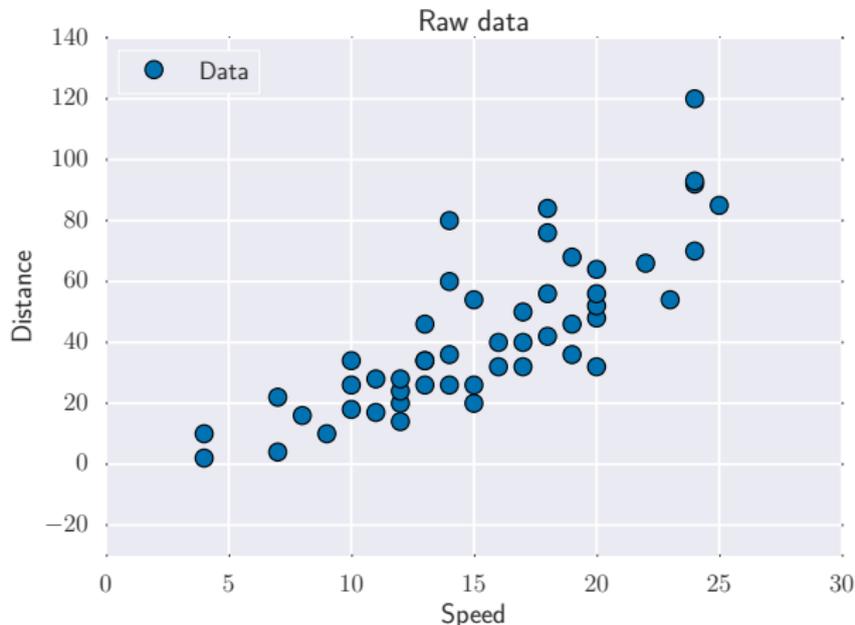
Formulation mathématique

Centrer - Réduire

Vraisemblance

## Point de départ en dimension deux

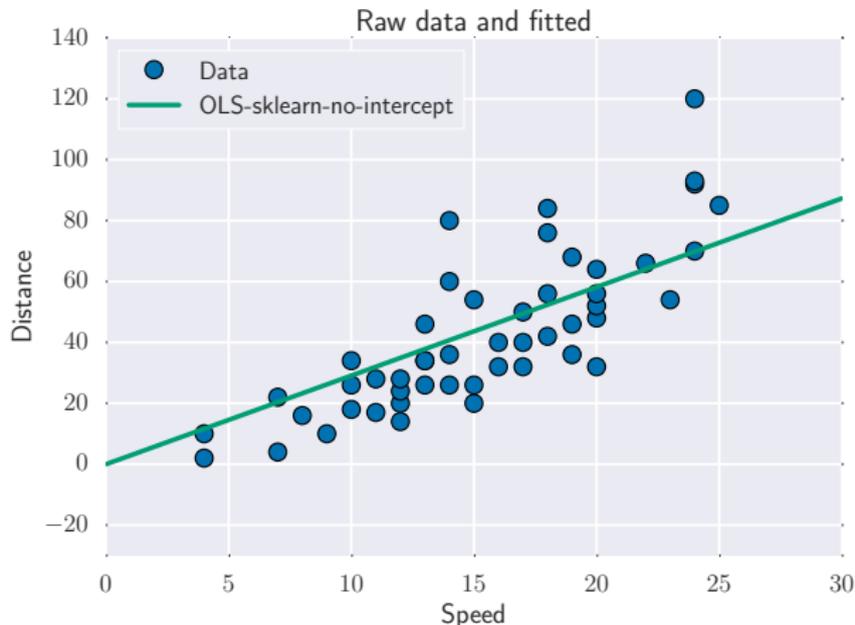
Exemple : distance de freinage d'une voiture en fonction de la vitesse  
( $n = 50$  mesures)



Dataset *cars* : <https://stat.ethz.ch/R-manual/R-devel/library/datasets/html/cars.html>

## Point de départ en dimension deux

Exemple : distance de freinage d'une voiture en fonction de la vitesse  
( $n = 50$  mesures)



Dataset *cars* : <https://stat.ethz.ch/R-manual/R-devel/library/datasets/html/cars.html>

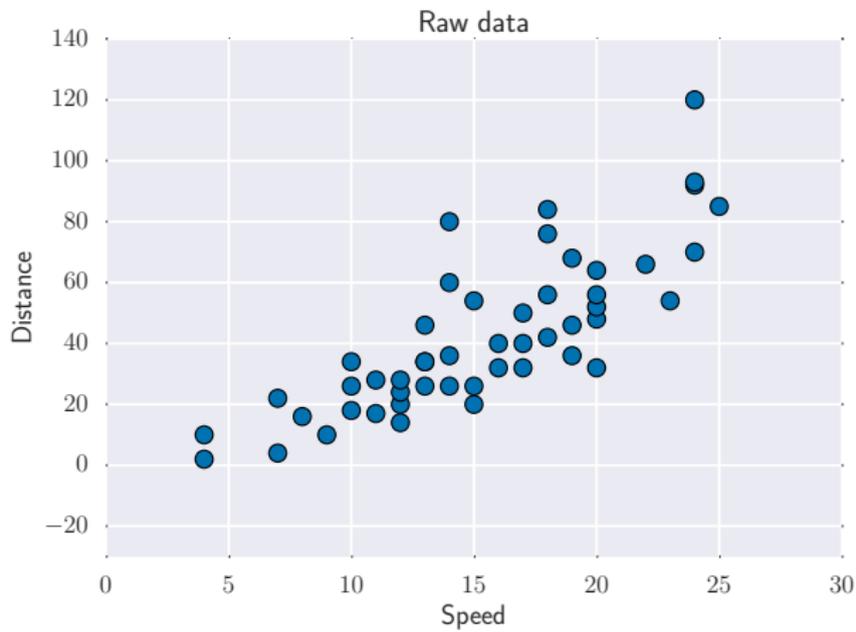
## Commandes sous Python

```
import pandas as pd
import matplotlib.pyplot as plt
import sklearn.linear_model as lm
# Load data
url = 'https://forge.scilab.org/index.php/p/rdataset/
      source/file/master/csv/datasets/cars.csv'
dat = pd.read_csv(url)
y = dat['dist']
X = dat[['speed']] # sklearn needs X to have 2 dim.

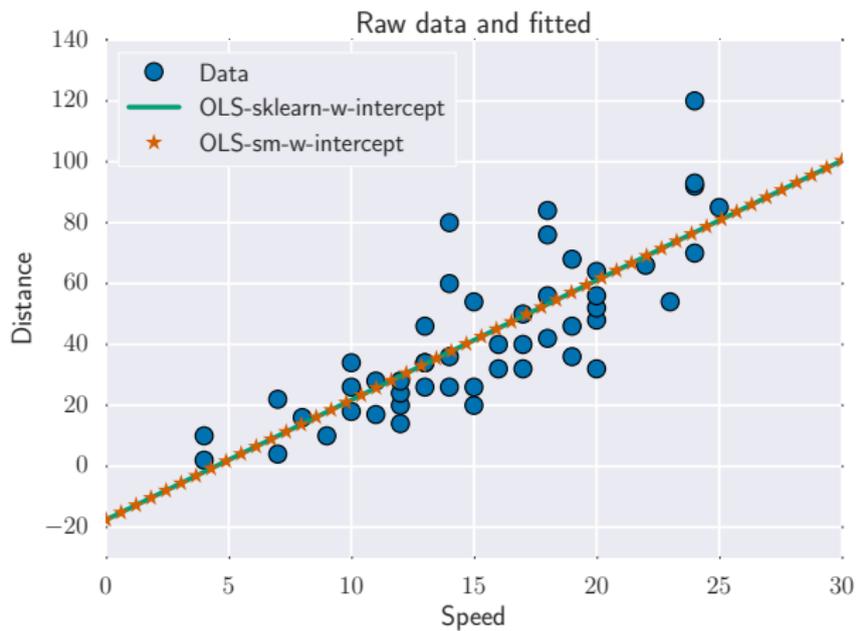
skl_linmod = lm.LinearRegression(fit_intercept=False)
skl_linmod.fit(X, y) # Fit regression model

fig = plt.figure(figsize=(8, 6))
plt.plot(X, y, 'o', label="Data")
plt.plot(X, skl_linmod.predict(X),
         label="OLS-sklearn-no-intercept")
plt.legend(loc='upper left')
plt.show()
```

## Avec constante à l'origine



## Avec constante à l'origine



## Commandes sous Python : avec constantes

```
import statsmodels.api as sm

# data, fitted, etc
y = dat['dist']
X = dat[['speed']]
X = sm.add_constant(X)
results = sm.OLS(y,X).fit()

# plot
fig, ax = plt.subplots(figsize=(8,6))
ax.plot(X['speed'], y, 'o', label="data")
ax.plot(X['speed'], results.fittedvalues,
        linewidth=3, label="OLS-sm-w-intercept")
ax.legend(loc='best')
```

1. Introduction : visualisation / Python

2. Moindres carrés uni-dimensionnels

Modélisation

Formulation mathématique

Centrer - Réduire

Vraisemblance

1. Introduction : visualisation / Python

2. Moindres carrés uni-dimensionnels

Modélisation

Formulation mathématique

Centrer - Réduire

Vraisemblance

# Modélisation I

Observations :  $(y_i, x_i)$ , pour  $i = 1, \dots, n$

Hypothèse de modèle linéaire ou de régression linéaire :

$$y_i \approx \theta_0^* + \theta_1^* x_i$$

- $\theta_0^*$  : ordonnée à l'origine (inconnue)
- $\theta_1^*$  : coefficient directeur (inconnu)

Rem : les deux paramètres sont inconnus du statisticien

## Définition

- $y$  est une **observation** ou une variable à expliquer
- $x$  est une **variable explicative** ou covariable ( : *feature*)

# Interprétation des notations

## Exemple : dataset *cars*

- $n = 50$
- $y_i$  : temps de freinage de la voiture  $i$
- $x_i$  : vitesse de la voiture  $i$
- $y$  : l'observation est le temps de freinage
- $x$  : la variable explicative est la vitesse

L'hypothèse de régression linéaire/modèle linéaire revient à postuler que le temps de freinage d'une voiture est proportionnel à sa vitesse

Utiliser `describe()` de Pandas pour obtenir quelques informations basiques.

## Modélisation II

On donne un sens au symbole  $\approx$  de la manière suivante :

### Modèle probabiliste

$$Y_i = \theta_0^* + \theta_1^* x_i + \varepsilon_i,$$
$$\varepsilon_i \stackrel{i.i.d}{\sim} \varepsilon, \text{ pour } i = 1, \dots, n$$
$$\mathbb{E}(\varepsilon) = 0$$

où i.i.d. signifie « indépendants et identiquement distribués »

### Interprétation

$\varepsilon_i = Y_i - \theta_0^* - \theta_1^* x_i$  : erreurs entre le modèle théorique et les observations, représentées par des variables aléatoires  $\varepsilon_i$  centrées (on parle aussi de **bruit blanc**).

Rem : l'aspect aléatoire peut avoir diverses causes : bruit de mesure, bruit de transmission, variabilité dans une population, etc.

# Modélisation III

## Définition

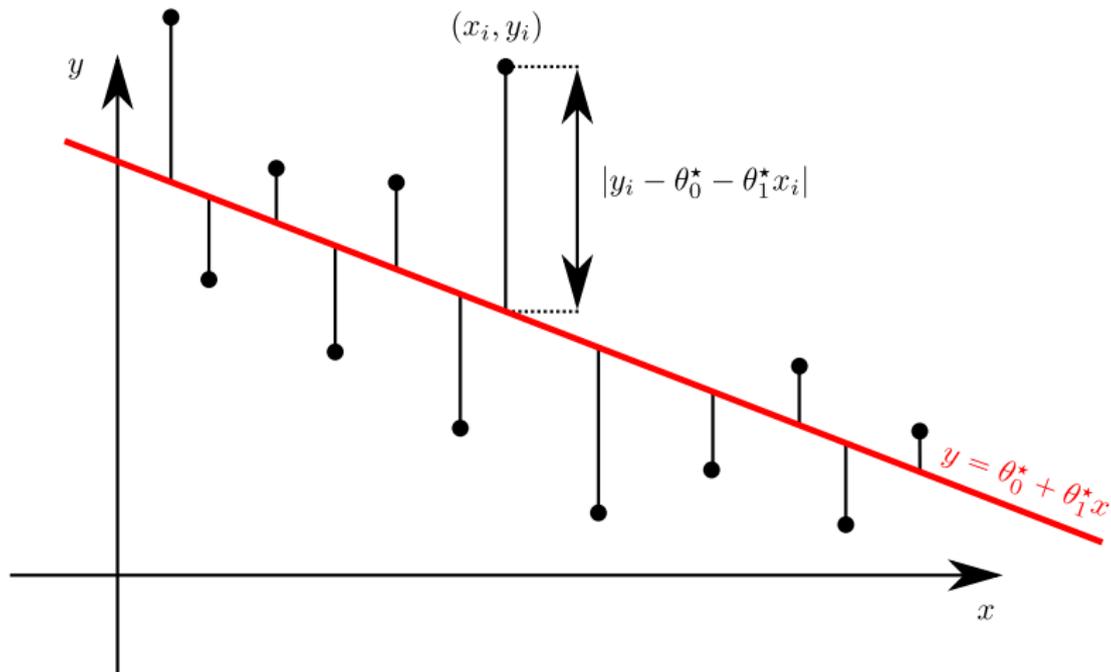
On appelle

- **ordonnée à l'origine** la quantité  $\theta_0^*$  ( : *intercept*)
- **pente** la quantité  $\theta_1^*$  ( : *slope*)

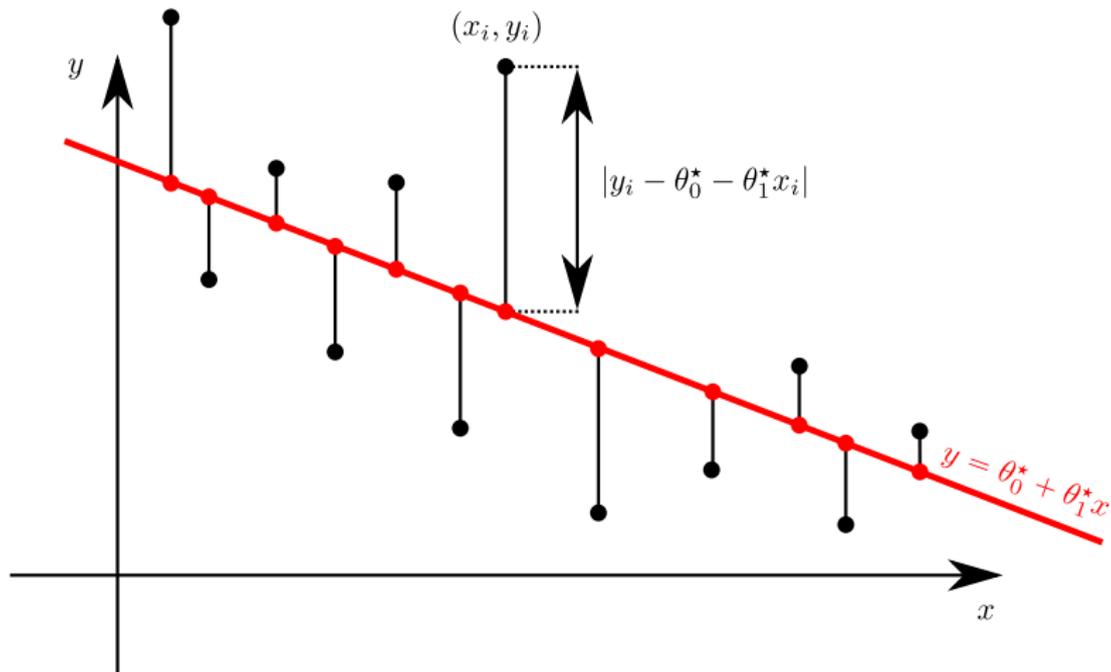
## Objectif

Estimer  $\theta_0^*$  et  $\theta_1^*$  (inconnus) par des quantités  $\hat{\theta}_0$  et  $\hat{\theta}_1$  dépendant des observations  $(y_i, x_i)$  pour  $i = 1, \dots, n$

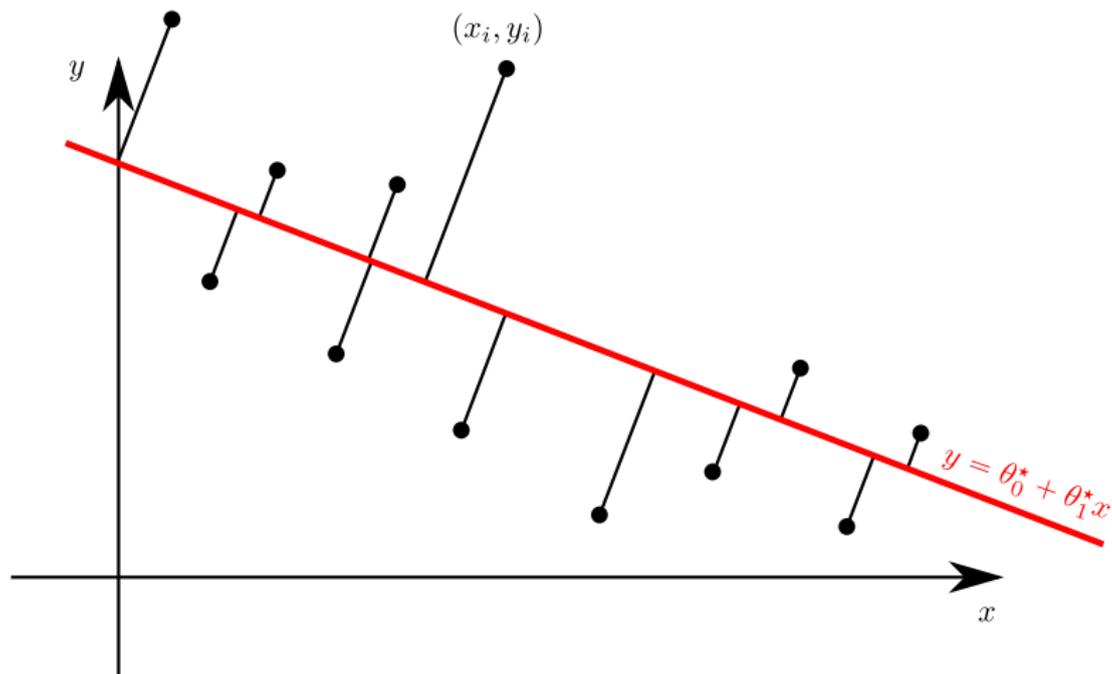
# Moindres carrés : visualisation



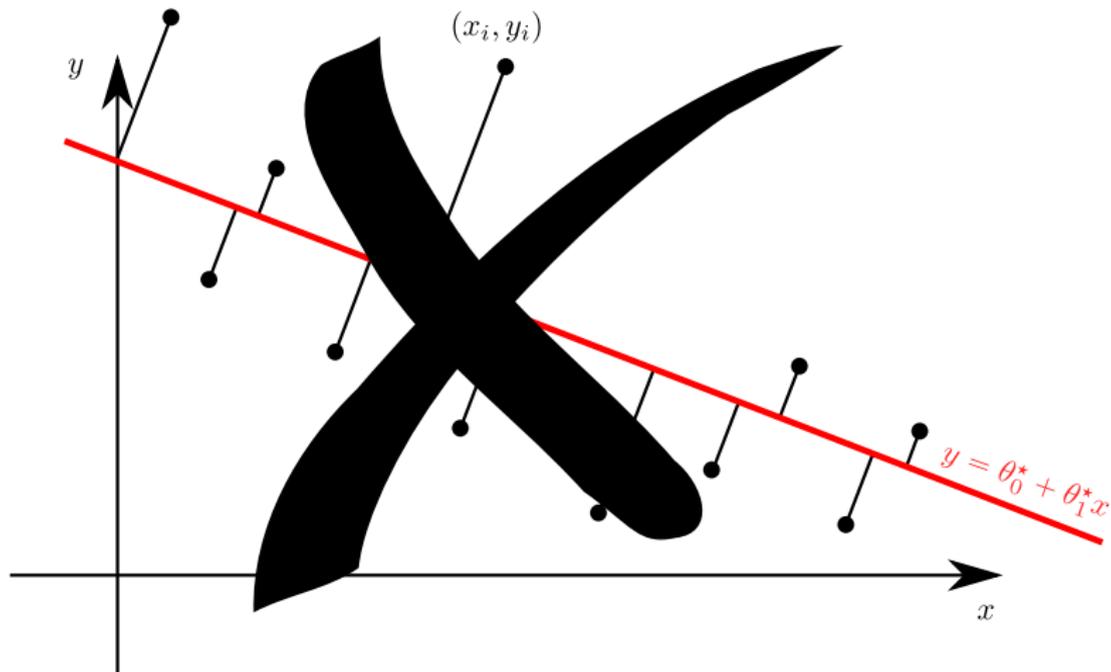
# Moindres carrés : visualisation



## Moindres carrés (totaux) : visualisation



# Moindres carrés (totaux) : visualisation



## Estimateur des moindres carrés : formulation

Pour des raisons mathématiques on peut choisir de minimiser la somme des carrés des “erreurs”

### Définition

L'estimateur des **moindres carrés** est défini comme suit :

$$(\hat{\theta}_0, \hat{\theta}_1) \in \operatorname{argmin}_{(\theta_0, \theta_1) \in \mathbb{R}^2} \sum_{i=1}^n (y_i - \theta_0 - \theta_1 x_i)^2$$

- on l'appelle aussi l'estimateur des **moindres carrés ordinaires**, MCO ( : *ordinary least-squares, OLS*)
- l'intérêt original vient de ce que les conditions du premier ordre sont équivalentes à résoudre un système linéaire

Rem : la notation «  $\in \operatorname{argmin}$  » ne présage en rien de l'unicité...

# Paternité des moindres carrés



**Adrien-Marie Legendre**

“Nouvelles méthodes pour la détermination des orbites des comètes”, 1805

“Theoria motus corporum coelestium in sectionibus conicis solem ambientium” 1809



**Carl Friedrich Gauss**

## Définition

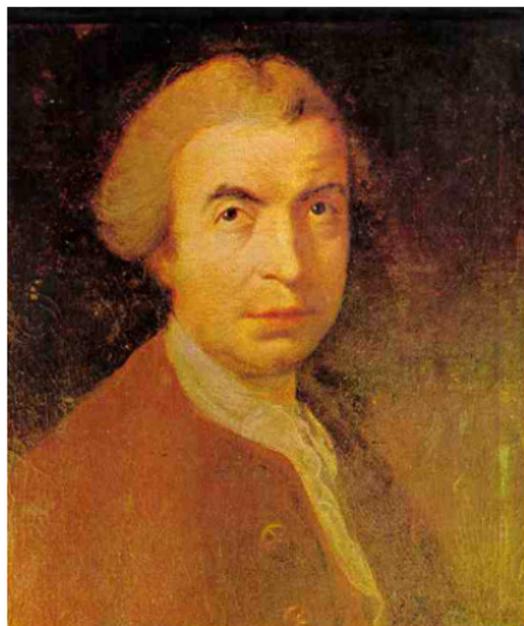
On définit l'estimateur des **moindres déviations absolues** ( : *Least Absolute Deviation (LAD)*) comme suit :

$$(\hat{\theta}_0, \hat{\theta}_1) \in \operatorname{argmin}_{(\theta_0, \theta_1) \in \mathbb{R}^2} \sum_{i=1}^n |y_i - \theta_0 - \theta_1 x_i|$$

Rem : difficile à calculer sans ordinateur ; nécessite un algorithme itératif d'optimisation non-lisse (fonctions non différentiables)

Rem : on verra plus tard qu'il est en revanche plus robuste aux points aberrants ( : *outliers*) que l'estimateur MCO

## Paternité des moindres déviations absolues



**Ruđer Josip Bošković**  
“???”, 1757



**Pierre-Simon de Laplace**  
“Traité de mécanique céleste”, 1799

1. Introduction : visualisation / Python

2. Moindres carrés uni-dimensionnels

Modélisation

Formulation mathématique

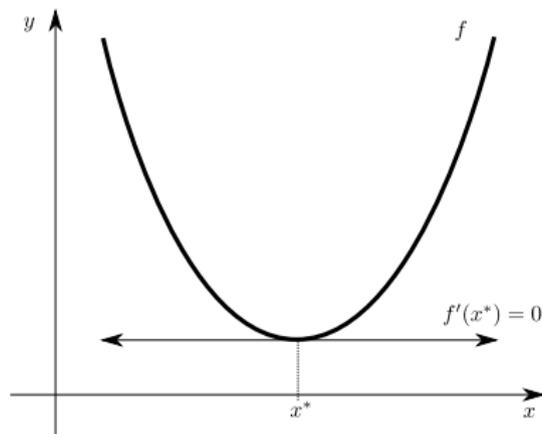
Centrer - Réduire

Vraisemblance

## Condition du premier ordre pour un minimum local (CNO)

### Théorème : règle de Fermat

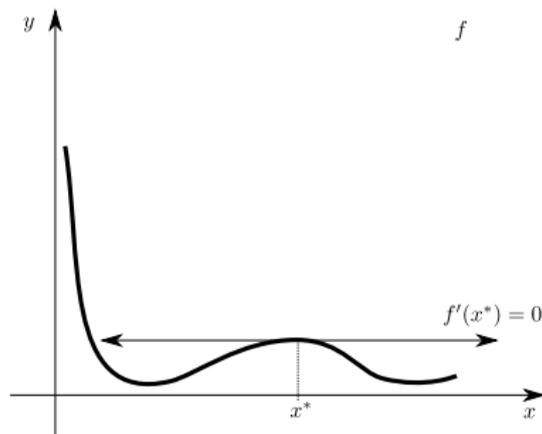
Si  $f$  est différentiable en un minimum local  $x^*$  alors le gradient de  $f$  est nul en  $x^*$ , *i.e.*  $\nabla f(x^*) = 0$ .



## Condition du premier ordre pour un minimum local (CNO)

### Théorème : règle de Fermat

Si  $f$  est différentiable en un minimum local  $x^*$  alors le gradient de  $f$  est nul en  $x^*$ , *i.e.*  $\nabla f(x^*) = 0$ .

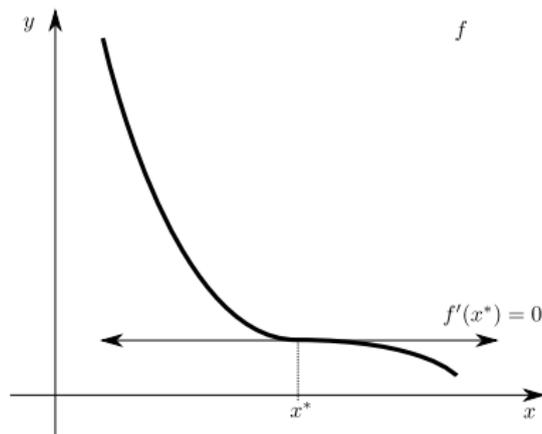


Rem : Ce n'est une condition suffisante que si  $f$  est convexe !

## Condition du premier ordre pour un minimum local (CNO)

### Théorème : règle de Fermat

Si  $f$  est différentiable en un minimum local  $x^*$  alors le gradient de  $f$  est nul en  $x^*$ , *i.e.*  $\nabla f(x^*) = 0$ .



Rem : Ce n'est une condition suffisante que si  $f$  est convexe !

## Retour aux moindres carrés

$$\hat{\boldsymbol{\theta}} = (\hat{\theta}_0, \hat{\theta}_1) \in \operatorname{argmin}_{(\theta_0, \theta_1) \in \mathbb{R}^2} \frac{1}{2} \sum_{i=1}^n (y_i - \theta_0 - \theta_1 x_i)^2$$

On cherche donc à minimiser une fonction de deux variables :

$$f(\theta_0, \theta_1) = f(\boldsymbol{\theta}) = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^n (y_i - \theta_0 - \theta_1 x_i)^2$$

Conditions nécessaires du premier ordre (CNO) :

$$\begin{cases} \frac{\partial f}{\partial \theta_0}(\hat{\boldsymbol{\theta}}) = \sum_{i=1}^n (y_i - \hat{\theta}_0 - \hat{\theta}_1 x_i) = 0 \\ \frac{\partial f}{\partial \theta_1}(\hat{\boldsymbol{\theta}}) = \sum_{i=1}^n (y_i - \hat{\theta}_0 - \hat{\theta}_1 x_i) x_i = 0 \end{cases}$$

---

**Exo** :  $f$  est elle convexe ? Aide : la somme de fonction convexe est convexe

## Suite du calcul

Notation usuelle de la moyenne :  $\bar{x}_n = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n x_i$  et  $\bar{y}_n = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n y_i$

Avec ces notations, les CNO s'écrivent (en divisant par  $n$ ) :

$$\begin{cases} \frac{\partial f}{\partial \theta_0}(\hat{\theta}) = \sum_{i=1}^n (y_i - \hat{\theta}_0 - \hat{\theta}_1 x_i) = 0 \\ \frac{\partial f}{\partial \theta_1}(\hat{\theta}) = \sum_{i=1}^n (y_i - \hat{\theta}_0 - \hat{\theta}_1 x_i) x_i = 0 \end{cases}$$

$\Leftrightarrow$

$$\begin{cases} \hat{\theta}_0 = \bar{y}_n - \hat{\theta}_1 \bar{x}_n & \text{(CNO1)} \\ \hat{\theta}_1 = \frac{\sum_{i=1}^n (x_i - \bar{x}_n)(y_i - \bar{y}_n)}{\sum_{i=1}^n (x_i - \bar{x}_n)^2} & \text{(CNO2)} \end{cases}$$

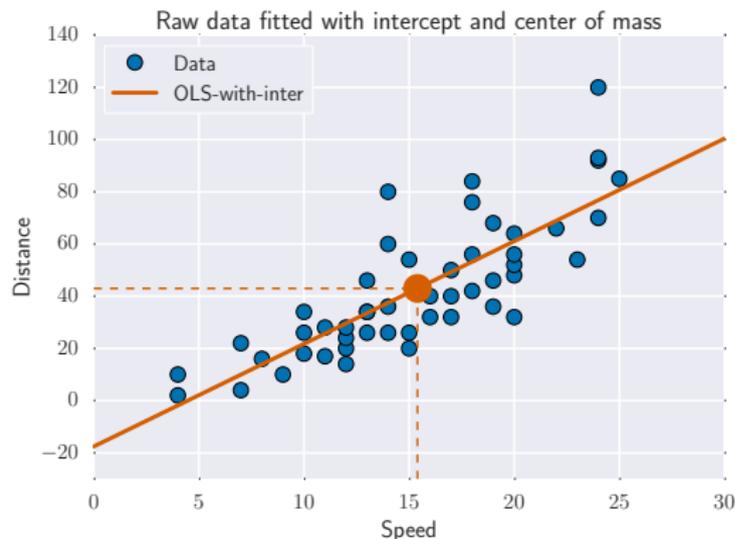
---

**Exo** : Prouver que (CNO2) est vraie si et seulement si  $\mathbf{x} = (x_1, \dots, x_n)^\top$  est non constant, *i.e.*  $\mathbf{x}$  non proportionnel à  $\mathbb{1}_n = (1, \dots, 1)^\top \in \mathbb{R}^n$

---

## Centre de gravité et interprétation

$$(\text{CNO1}) \Leftrightarrow (\bar{x}_n, \bar{y}_n) \in \{(x, y) \in \mathbb{R}^2 : y = \hat{\theta}_0 + \hat{\theta}_1 x\}$$



- $\overline{speed} = 15.4$
- $\overline{dist} = 42.98$
- $\hat{\theta}_0 = -17.579095$  l'ordonnée l'origine (négatif!!!)
- $\hat{\theta}_1 = 3.932409$  pente de la dr

Interprétation physique : le centre de gravité du nuage de points est sur la droite de régression (estimée)

## Reformulation vectorielle

Notation :  $\mathbf{x} = (x_1, \dots, x_n)^\top$  et  $\mathbf{y} = (y_1, \dots, y_n)^\top$

$$\text{(CNO2)} \Leftrightarrow \hat{\theta}_1 = \frac{\sum_{i=1}^n (x_i - \bar{x}_n)(y_i - \bar{y}_n)}{\sum_{i=1}^n (x_i - \bar{x}_n)^2}$$

$$\text{(CNO2)} \Leftrightarrow \hat{\theta}_1 = \text{corr}_n(\mathbf{x}, \mathbf{y}) \cdot \frac{\sqrt{\text{var}_n(\mathbf{y})}}{\sqrt{\text{var}_n(\mathbf{x})}}$$

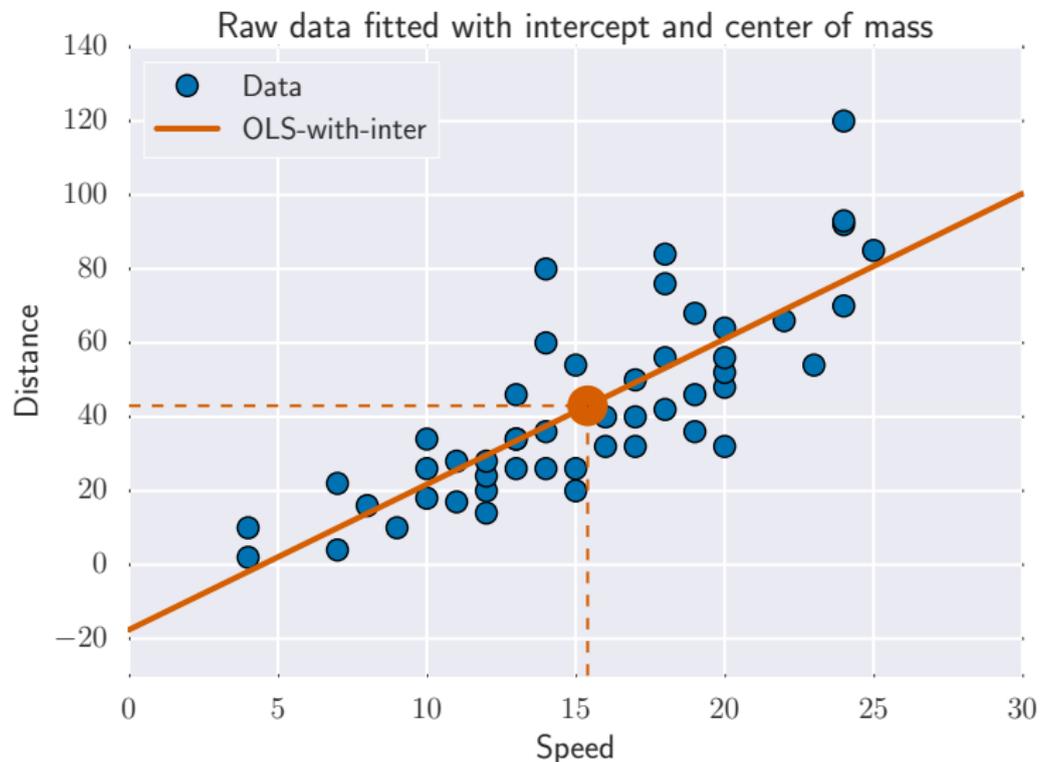
où 
$$\text{corr}_n(\mathbf{x}, \mathbf{y}) = \frac{\frac{1}{n} \sum_{i=1}^n (x_i - \bar{x}_n)(y_i - \bar{y}_n)}{\sqrt{\text{var}_n(\mathbf{x})} \sqrt{\text{var}_n(\mathbf{y})}}$$

et 
$$\text{var}_n(\mathbf{z}) = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n (z_i - \bar{z}_n)^2 \quad (\text{pour tout } \mathbf{z} = (z_1, \dots, z_n)^\top)$$

respectivement **corrélations empiriques** et **variances empiriques**

## Retour sur l'exemple du dataset *cars*

Pente de la droite tracée :  $\text{corr}_n(\mathbf{x}, \mathbf{y}) \cdot \frac{\sqrt{\text{var}_n(\mathbf{y})}}{\sqrt{\text{var}_n(\mathbf{x})}} = 3.932409$ .



1. Introduction : visualisation / Python

2. Moindres carrés uni-dimensionnels

Modélisation

Formulation mathématique

Centrer - Réduire

Vraisemblance

## Recentrage

Nouveau modèle d'observation, dit **(re)centré** :

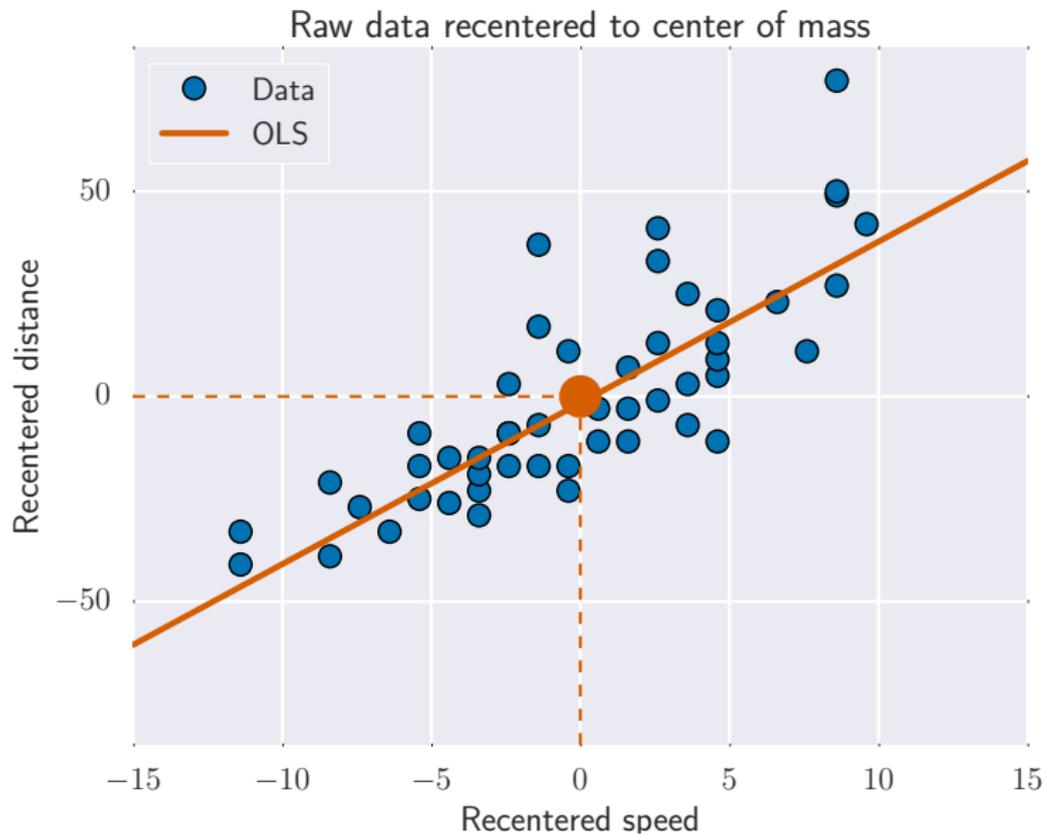
$$\text{Si pour tout } i = 1, \dots, n : \begin{cases} x'_i = x_i - \bar{x}_n \\ y'_i = y_i - \bar{y}_n \end{cases} \Leftrightarrow \begin{cases} \mathbf{x}' = \mathbf{x} - \bar{x}_n \mathbb{1}_n \\ \mathbf{y}' = \mathbf{y} - \bar{y}_n \mathbb{1}_n \end{cases}$$

si l'on note  $\mathbb{1}_n = (1, \dots, 1)^\top \in \mathbb{R}^n$  et que l'on résout le programme des moindres carrés pour les  $(\mathbf{x}', \mathbf{y}')$  alors

$$\begin{cases} \hat{\theta}'_0 = 0 \\ \hat{\theta}'_1 = \frac{\frac{1}{n} \sum_{i=1}^n x'_i y'_i}{\frac{1}{n} \sum_{i=1}^n x_i'^2} \end{cases}$$

Rem : équivalent à choisir pour origine le centre de gravité du nuage de points, *i.e.*  $(\bar{x}'_n, \bar{y}'_n) = (0, 0)$

## Recentrage (II)



## Recentrage et réinterprétation

Considérons le coefficient  $\hat{\theta}'_1$  ( $\hat{\theta}'_0 = 0$ ) des données centrées  $\mathbf{y}'$ ,  $\mathbf{x}'$  :

$$\hat{\theta}'_1 \in \operatorname{argmin}_{\theta_1} \sum_{i=1}^n (y'_i - \theta_1 x'_i)^2 = \operatorname{argmin}_{\theta_1} \sum_{i=1}^n x_i'^2 \left( \frac{y'_i}{x'_i} - \theta_1 \right)^2$$

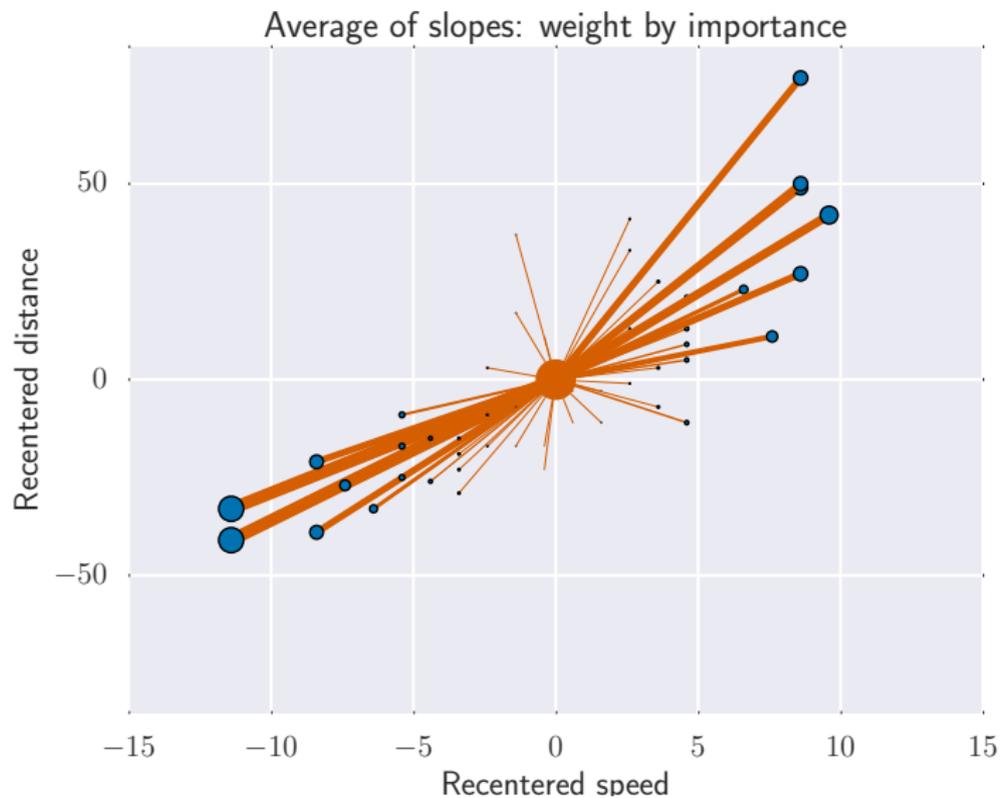
Interprétation :  $\hat{\theta}'_1$  est une moyenne pondérée des “pentes”  $\frac{y'_i}{x'_i}$

$$\hat{\theta}'_1 = \frac{\sum_{i=1}^n x_i'^2 \frac{y'_i}{x'_i}}{\sum_{j=1}^n x_j'^2}$$

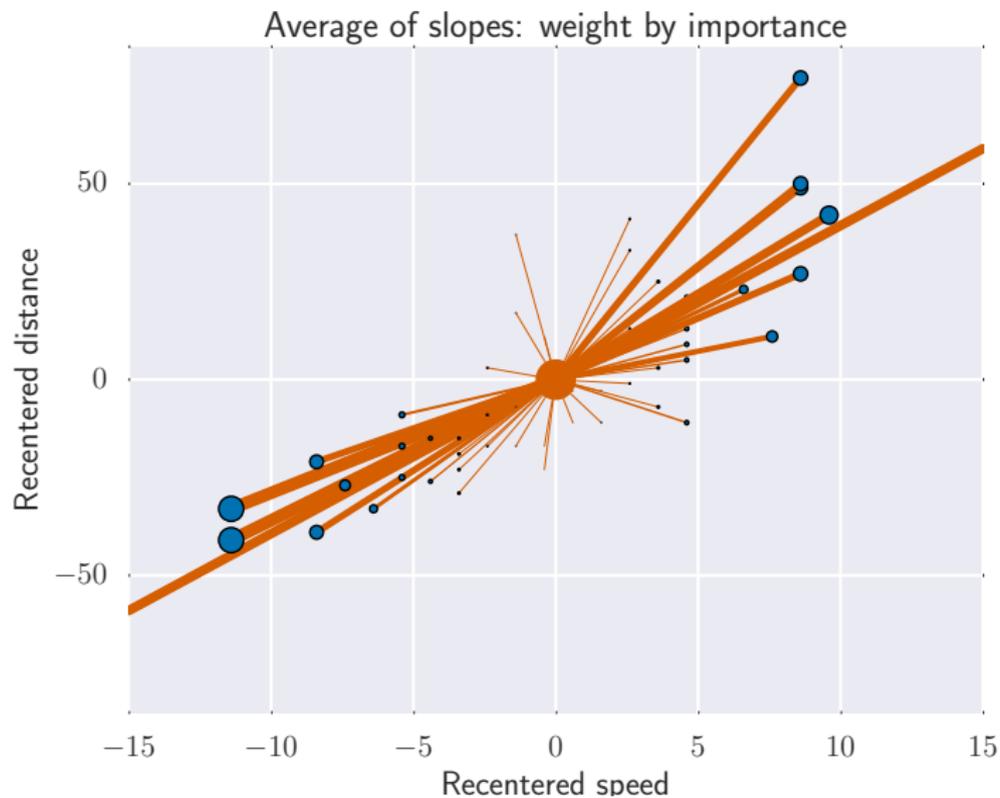
Influence des points extrêmes : poids proportionnels aux  $x_i'^2$

Rem : voir aussi la notion de point “levier” ( : *leverage*)

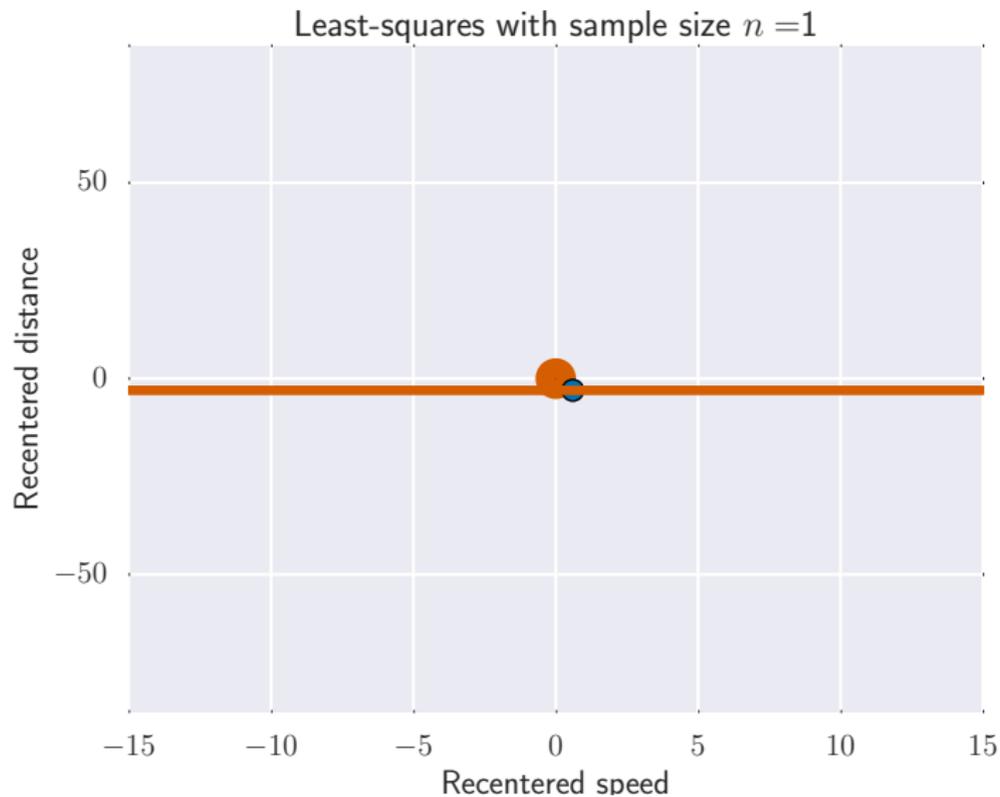
# Illustration de l'influence des points extrêmes



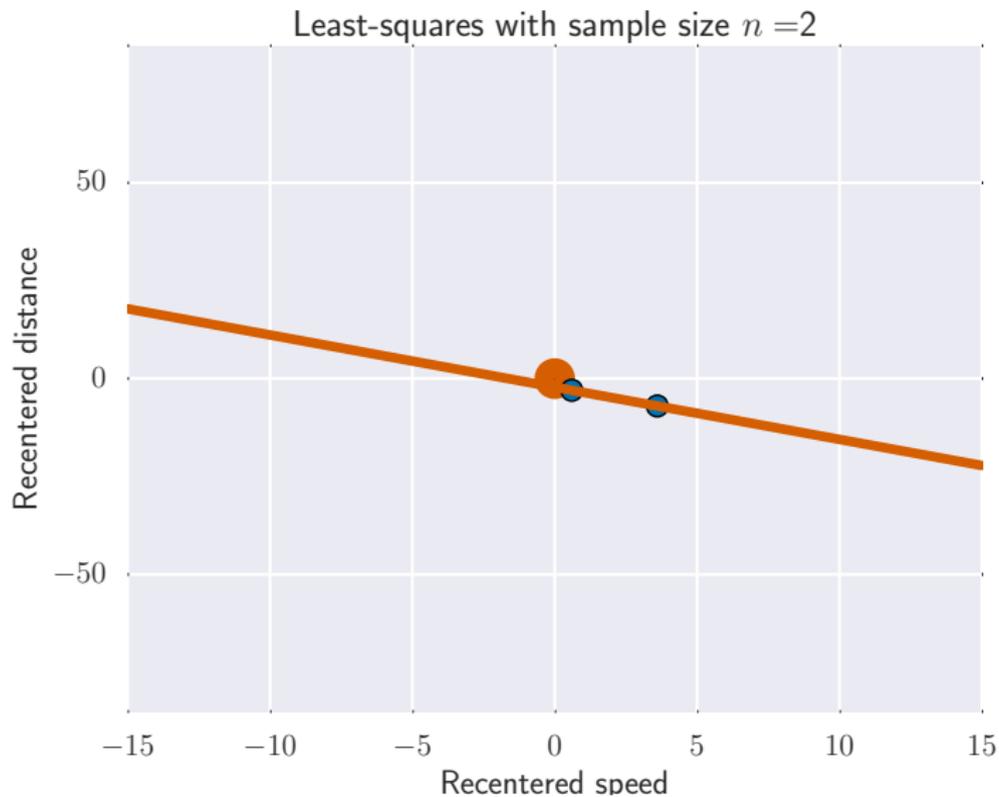
# Illustration de l'influence des points extrêmes



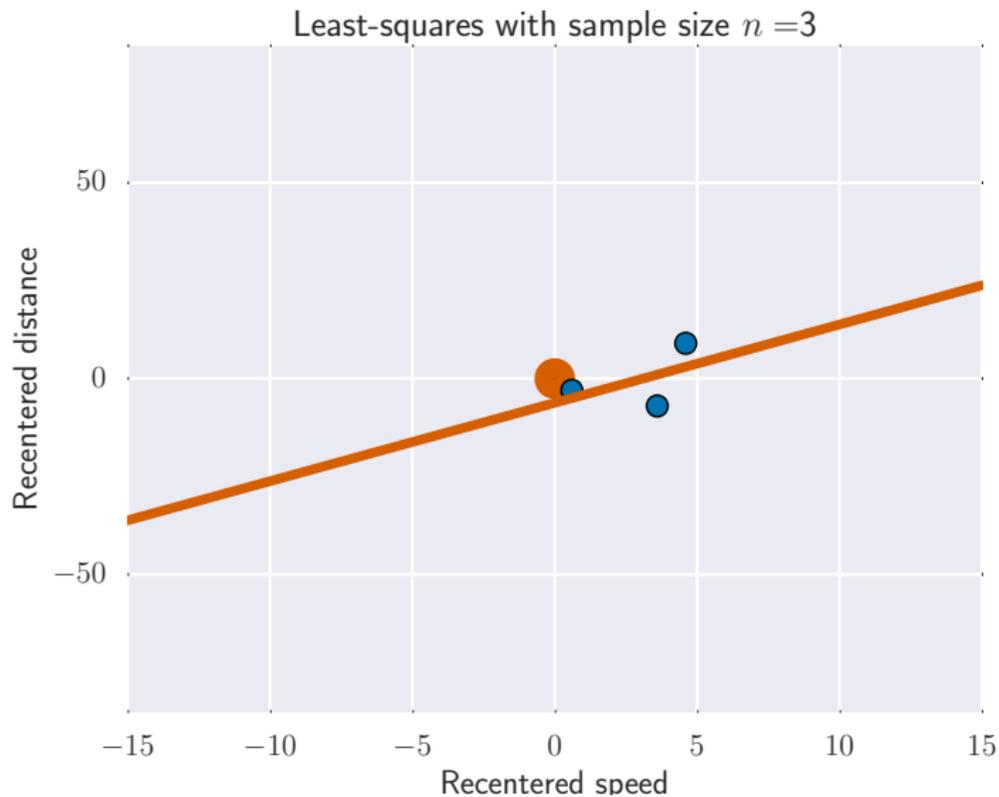
# Illustration de l'influence des points extrêmes



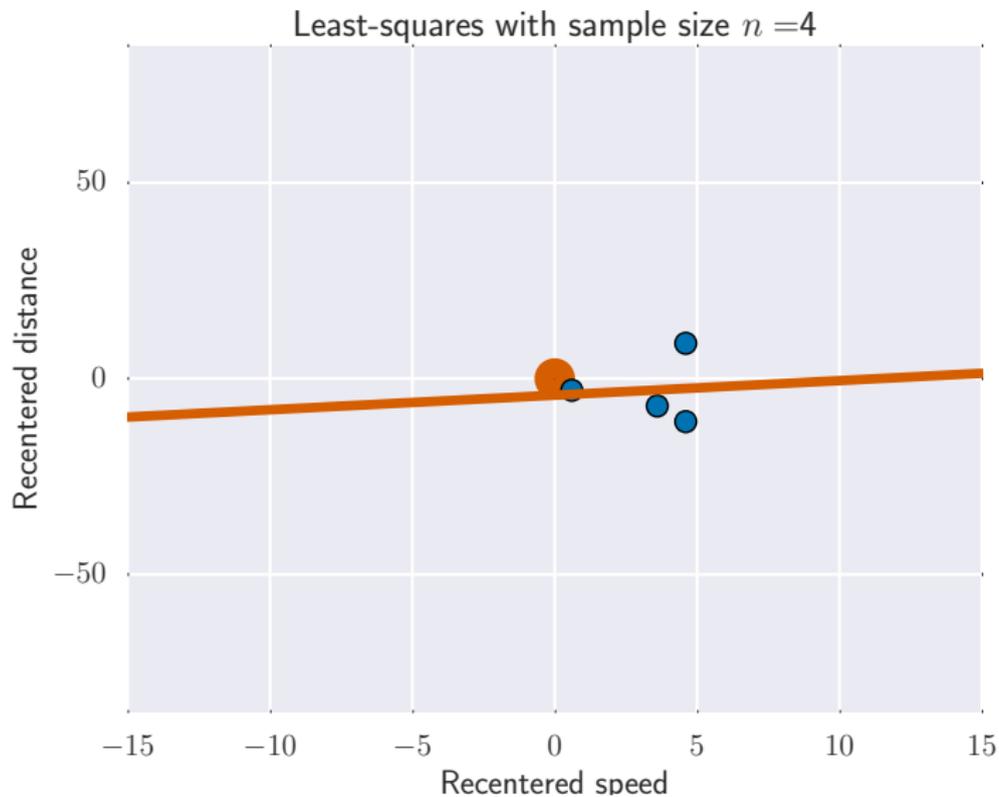
# Illustration de l'influence des points extrêmes



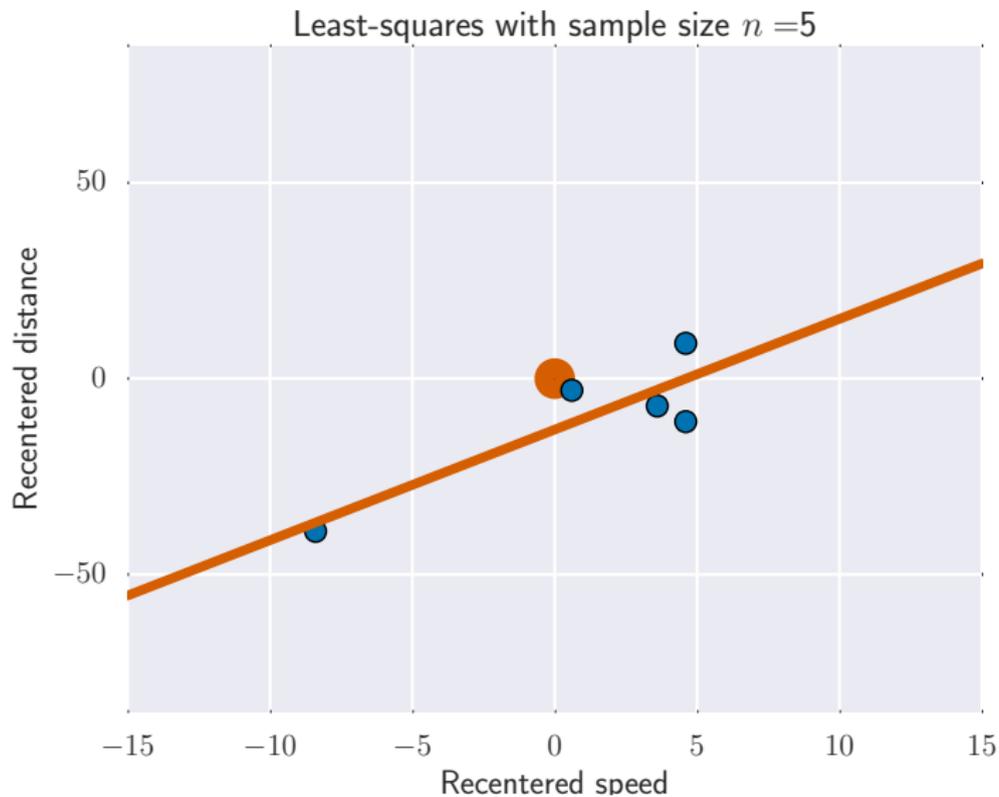
# Illustration de l'influence des points extrêmes



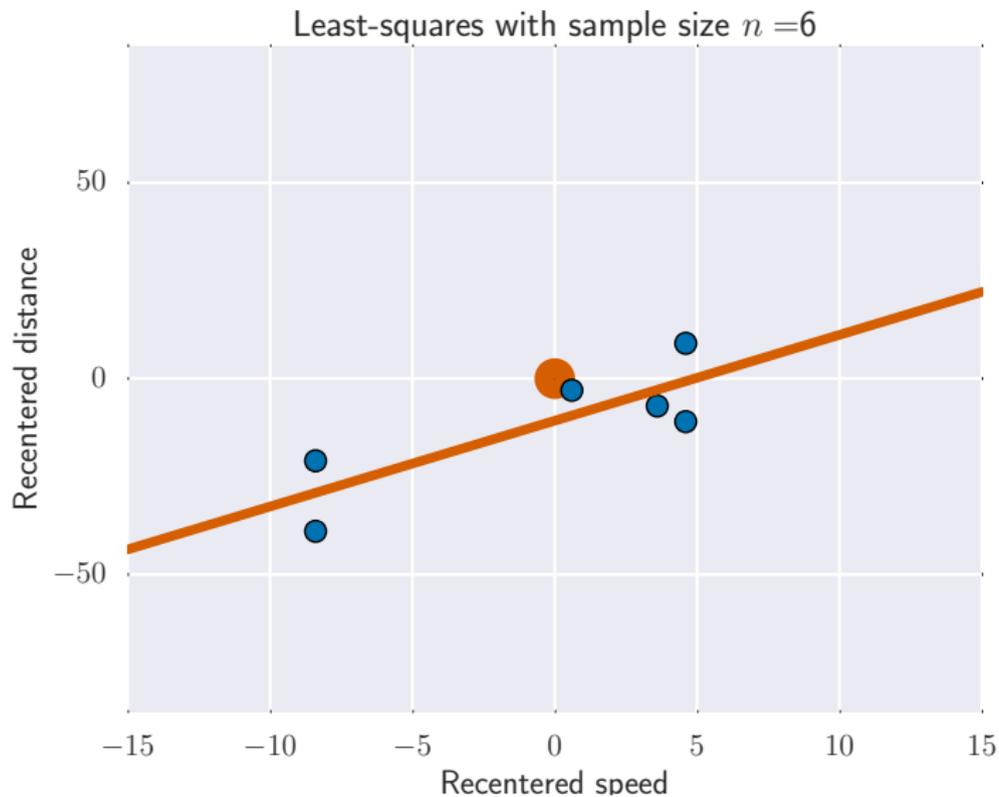
# Illustration de l'influence des points extrêmes



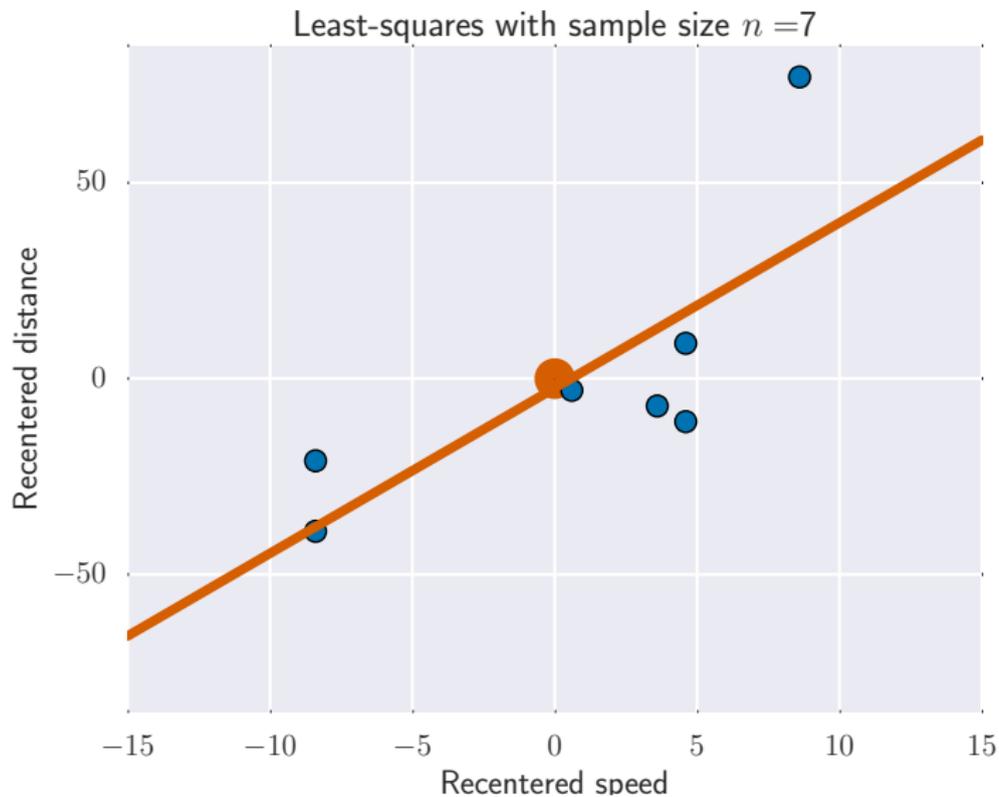
# Illustration de l'influence des points extrêmes



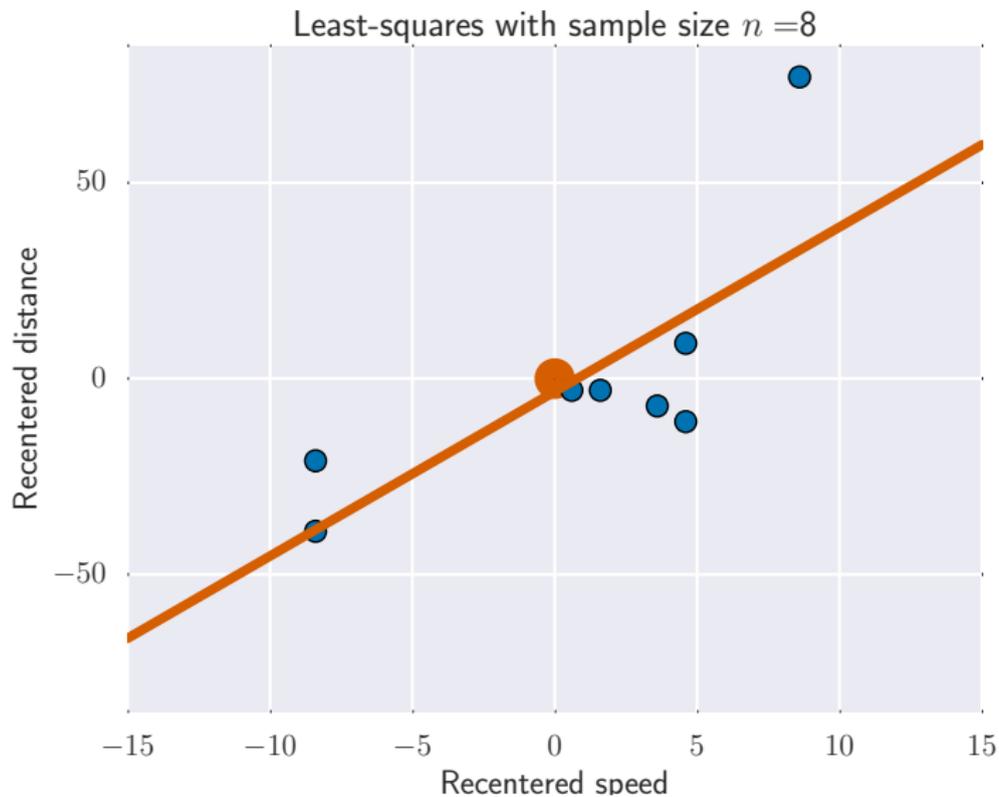
# Illustration de l'influence des points extrêmes



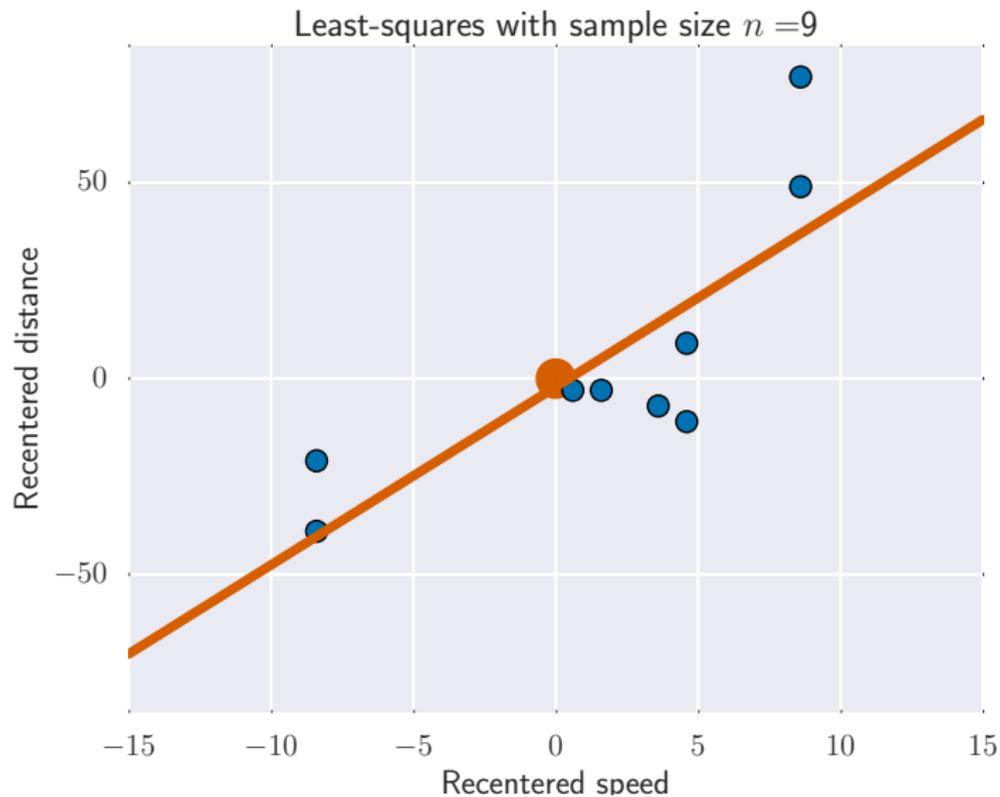
# Illustration de l'influence des points extrêmes



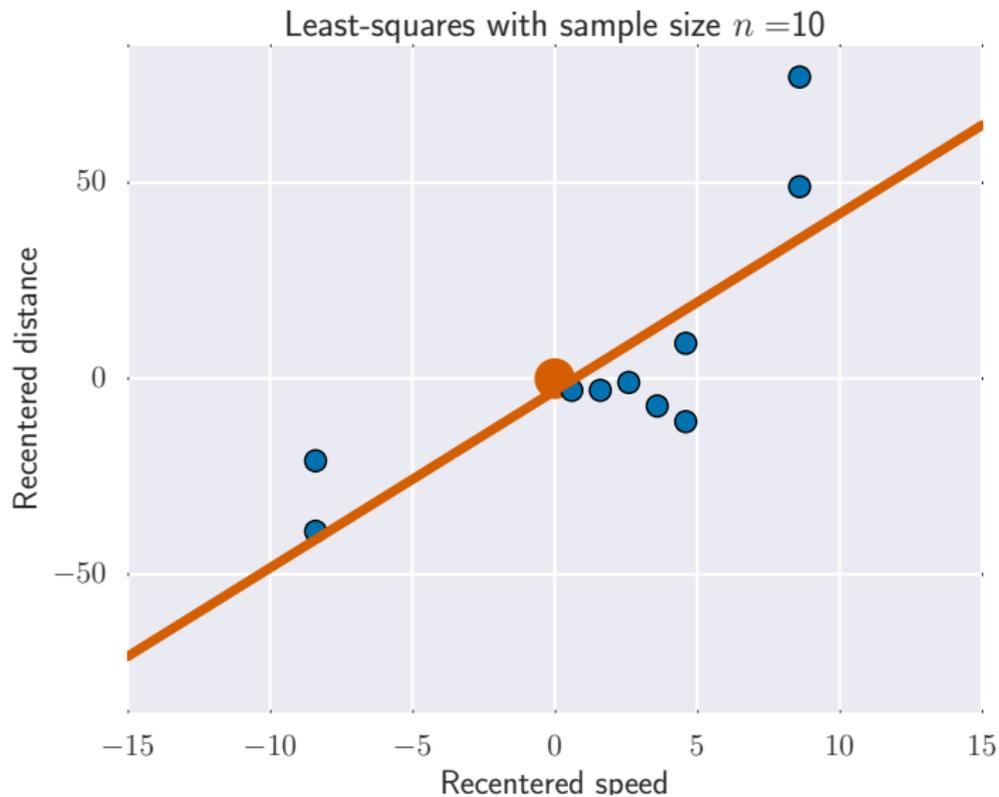
# Illustration de l'influence des points extrêmes



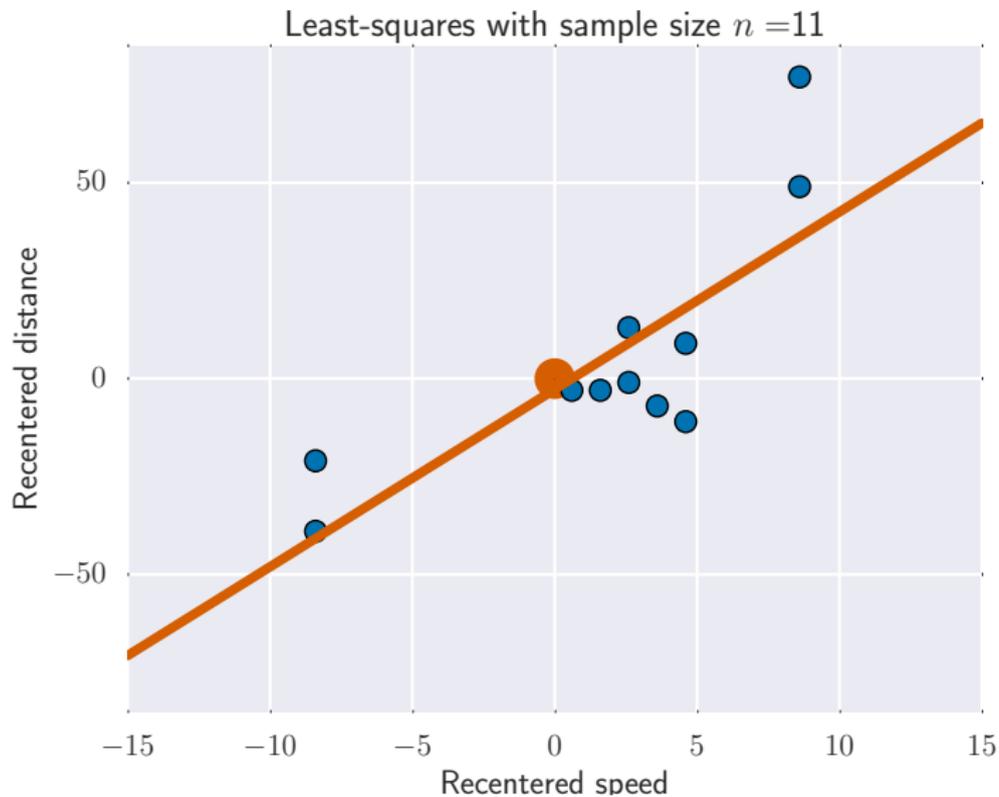
# Illustration de l'influence des points extrêmes



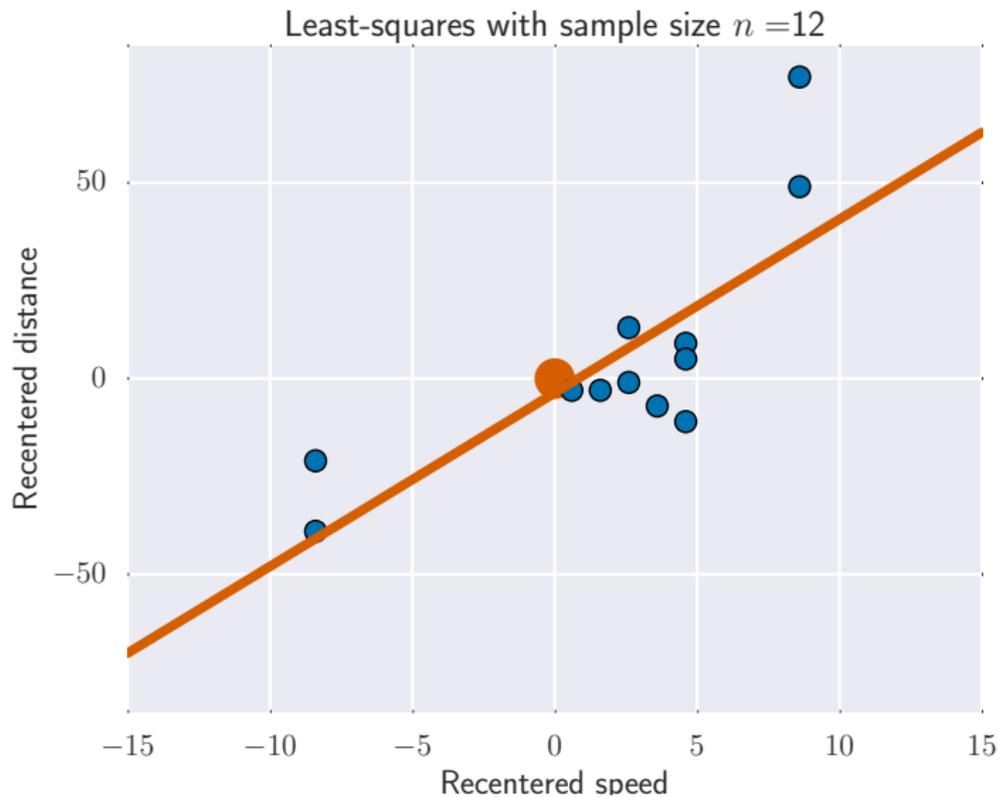
# Illustration de l'influence des points extrêmes



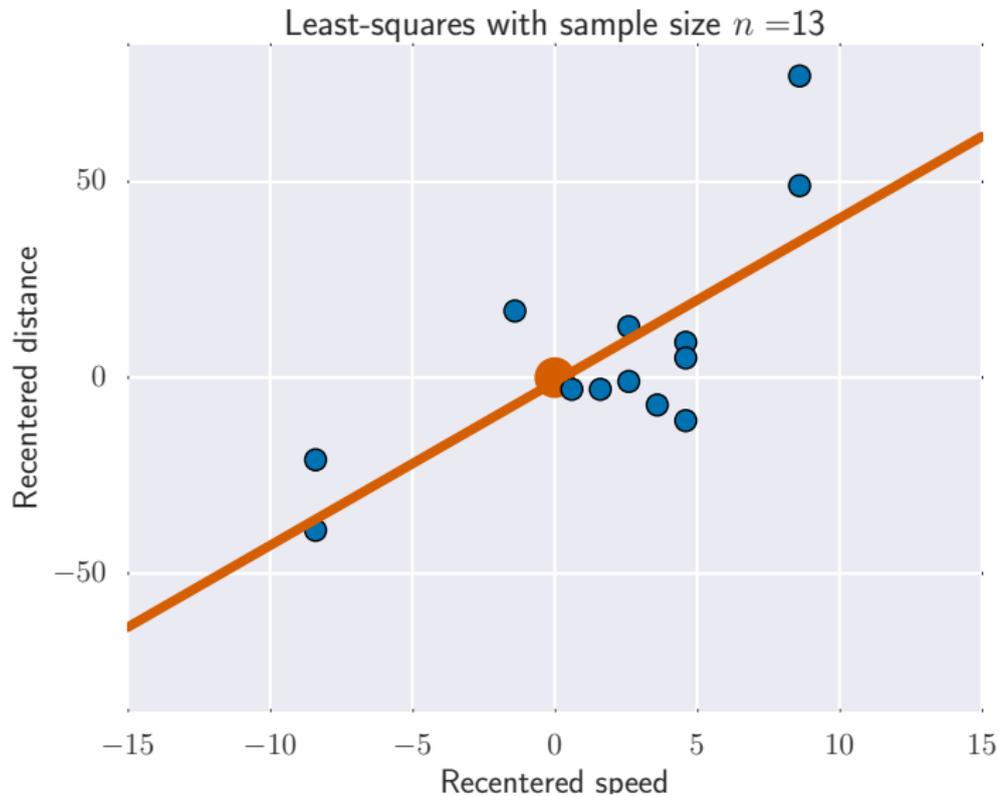
# Illustration de l'influence des points extrêmes



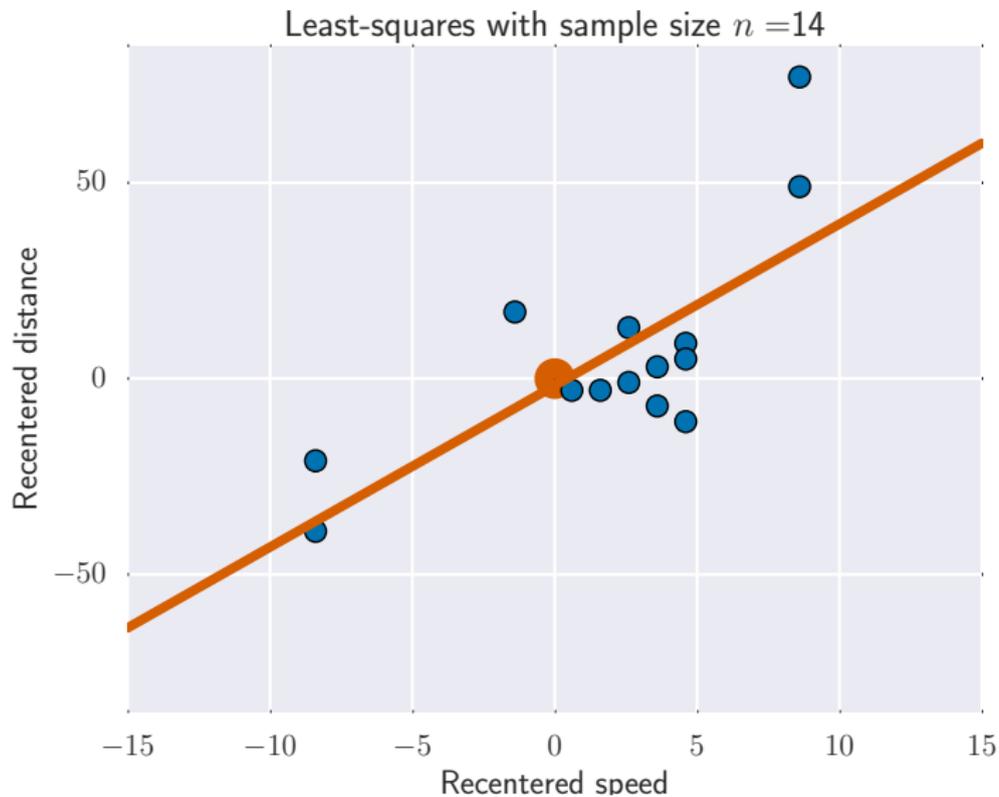
# Illustration de l'influence des points extrêmes



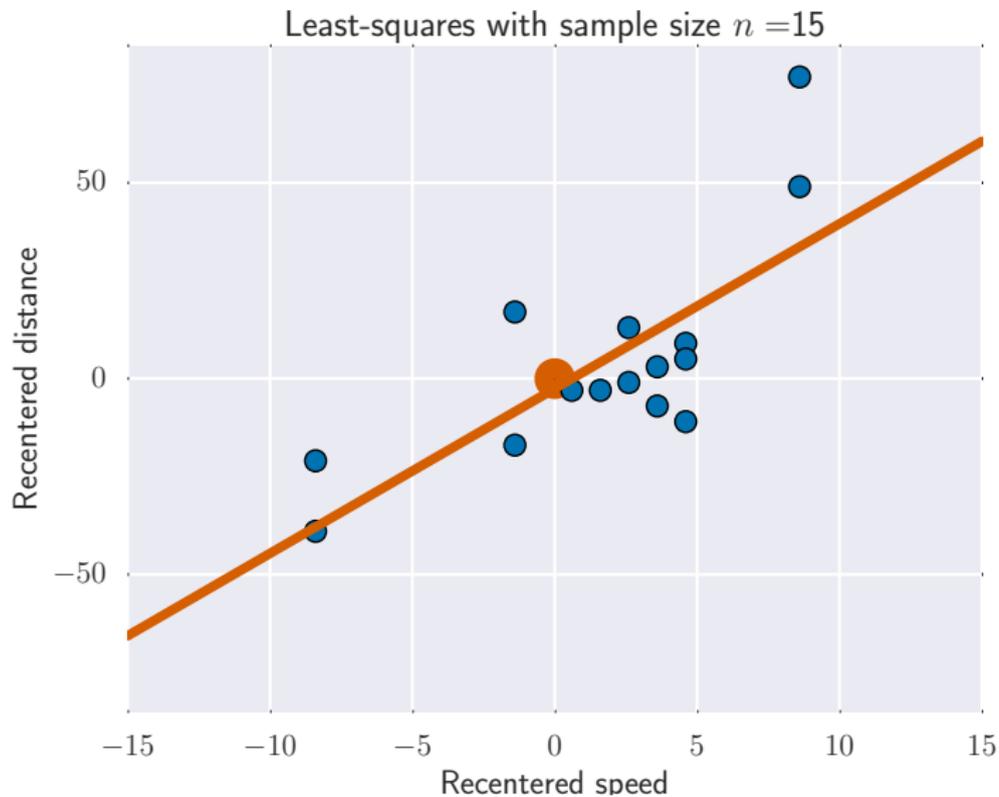
# Illustration de l'influence des points extrêmes



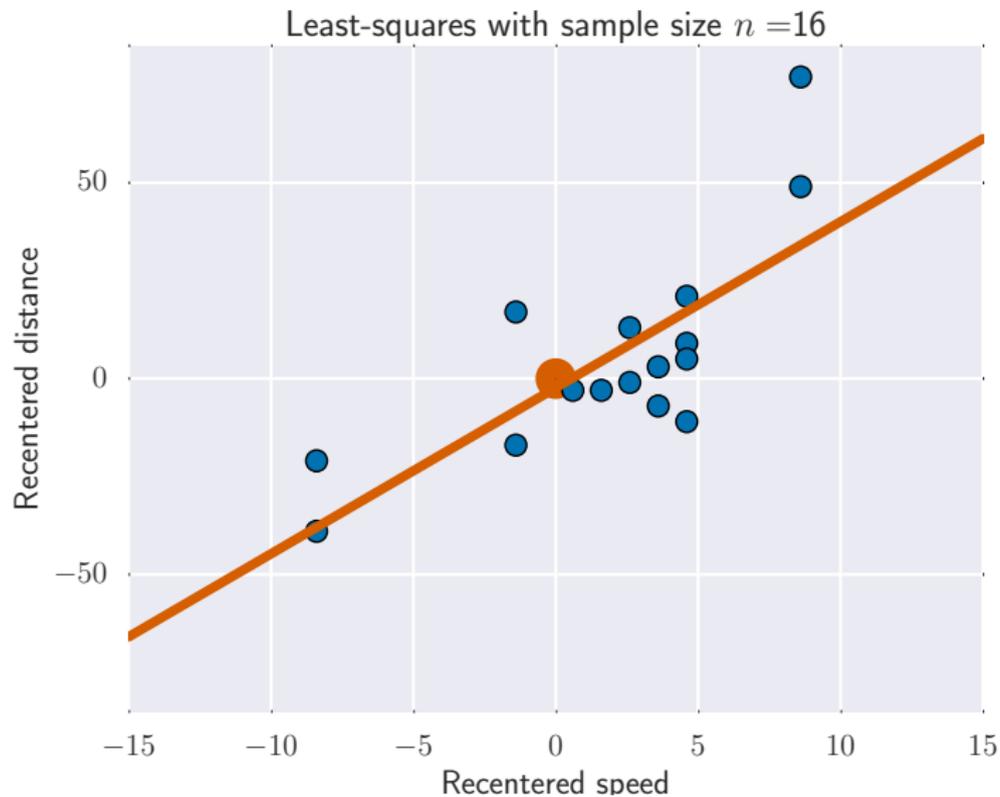
# Illustration de l'influence des points extrêmes



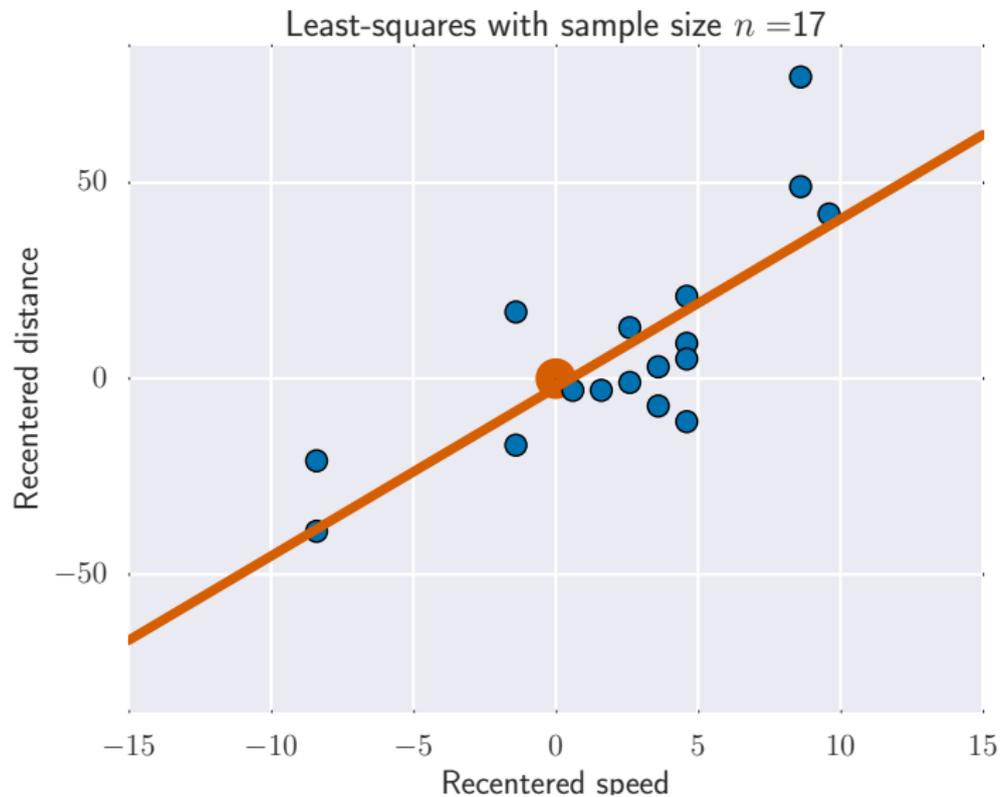
# Illustration de l'influence des points extrêmes



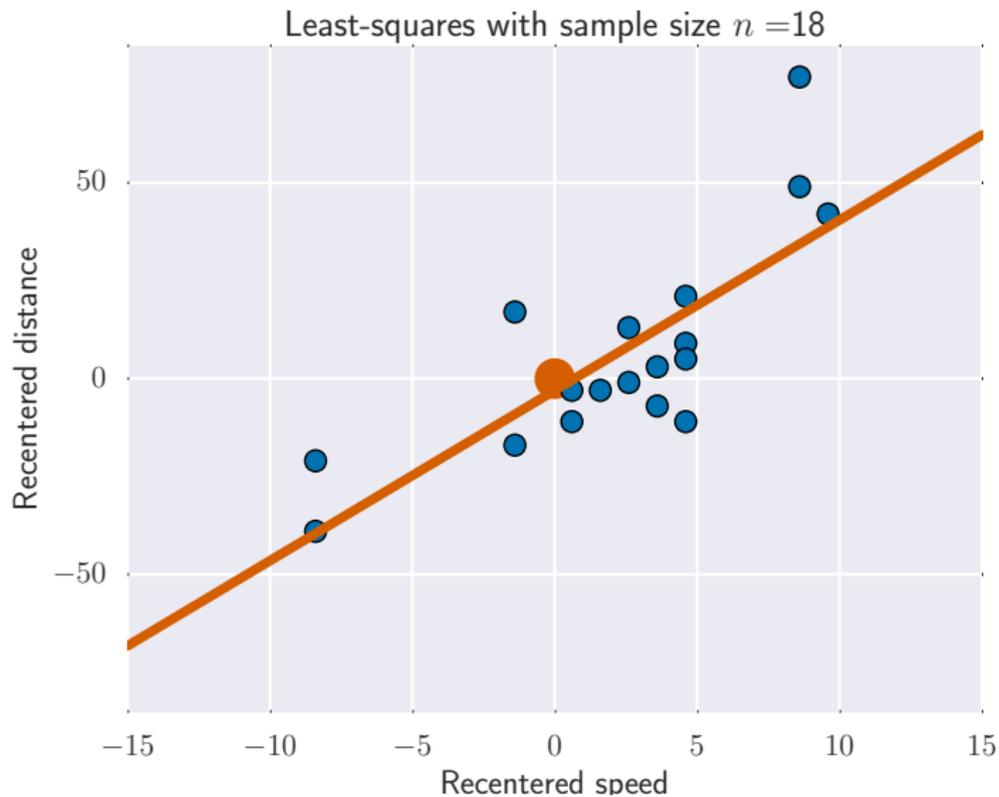
# Illustration de l'influence des points extrêmes



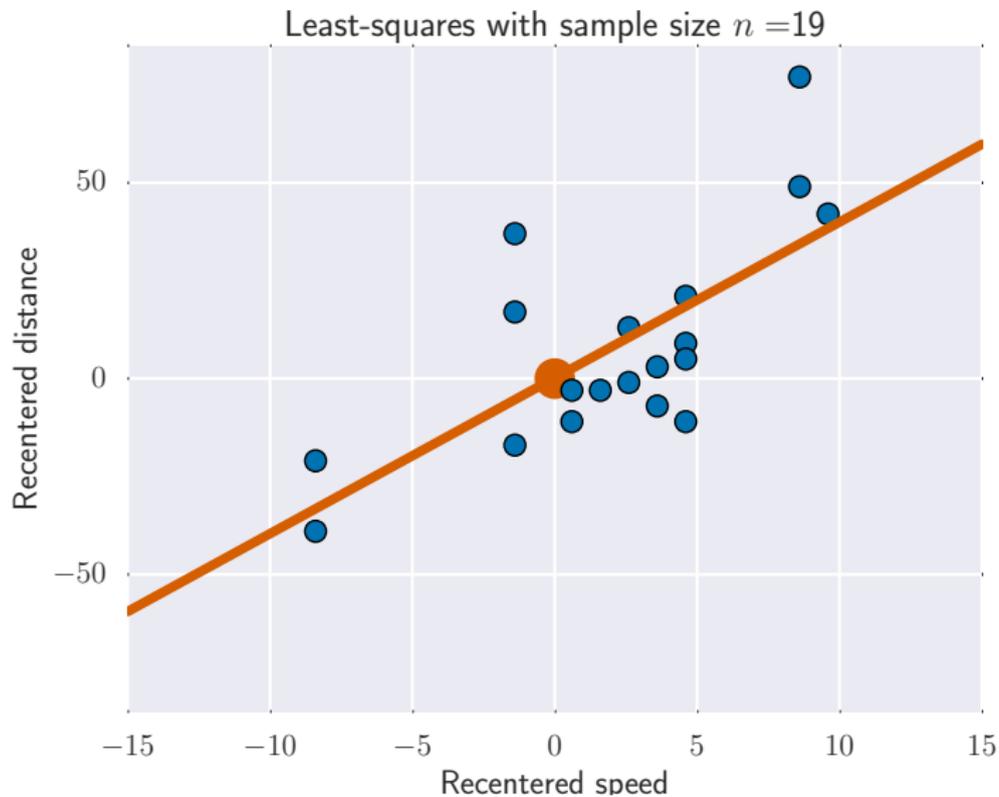
# Illustration de l'influence des points extrêmes



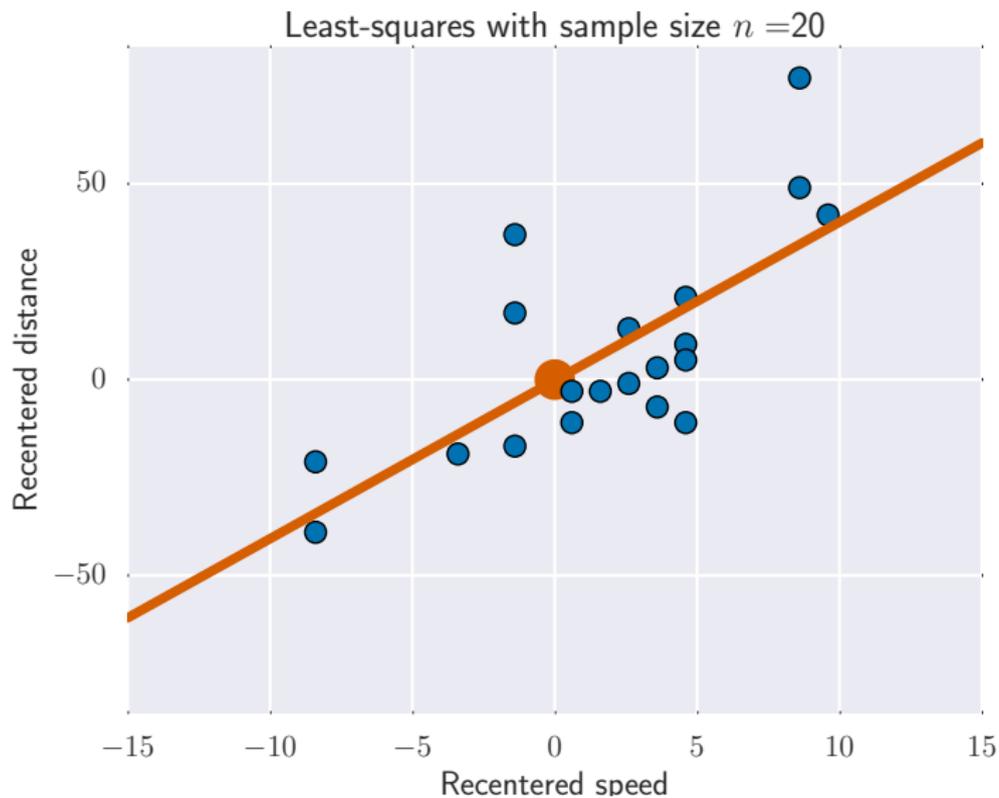
# Illustration de l'influence des points extrêmes



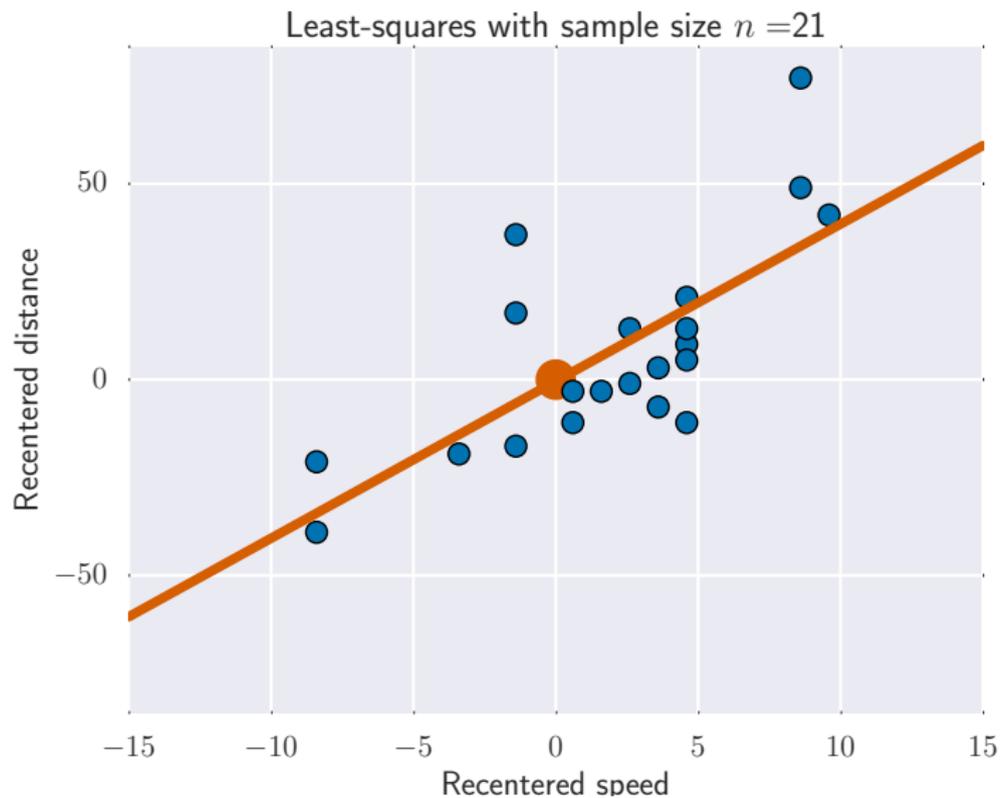
# Illustration de l'influence des points extrêmes



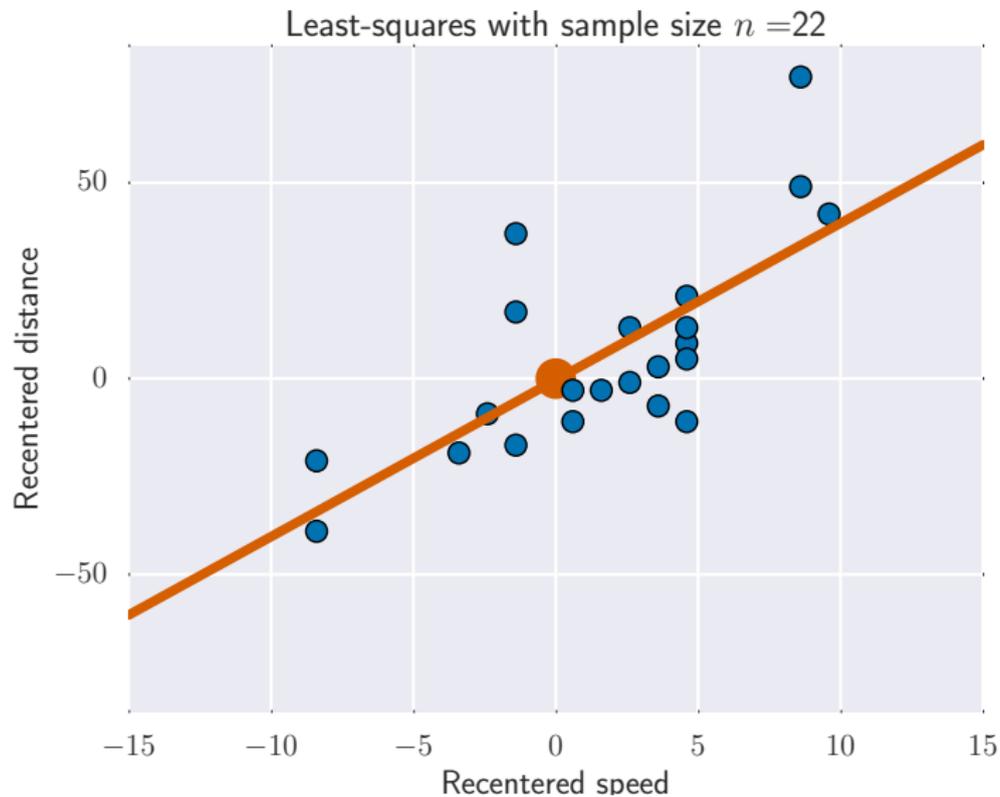
# Illustration de l'influence des points extrêmes



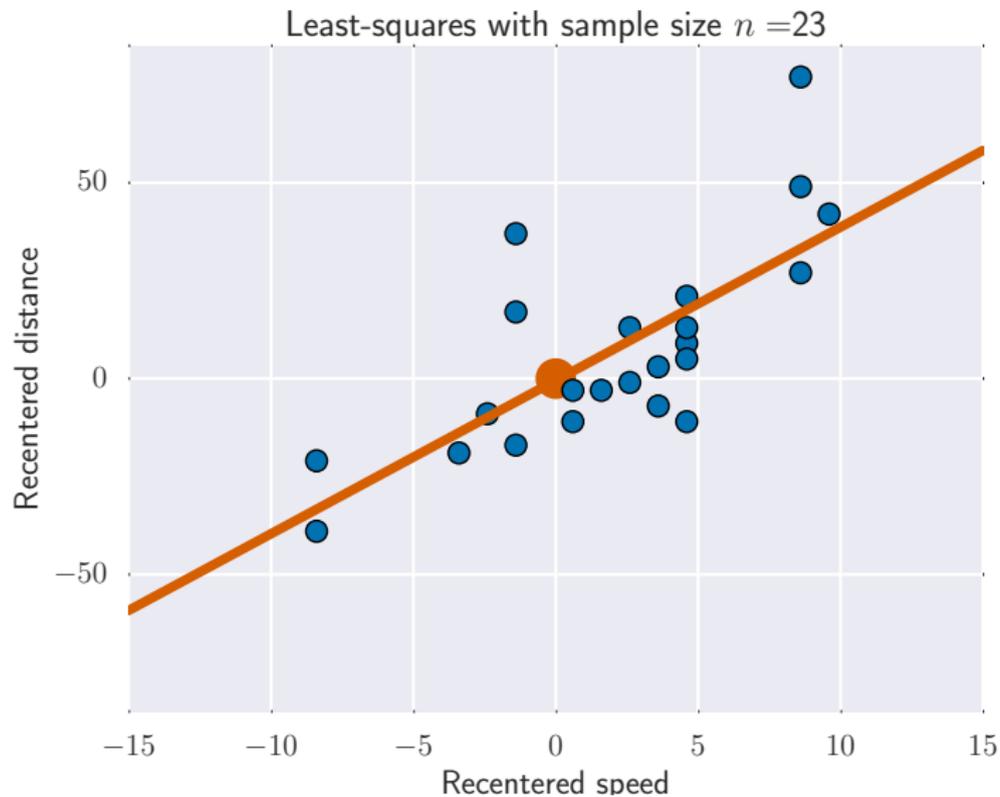
# Illustration de l'influence des points extrêmes



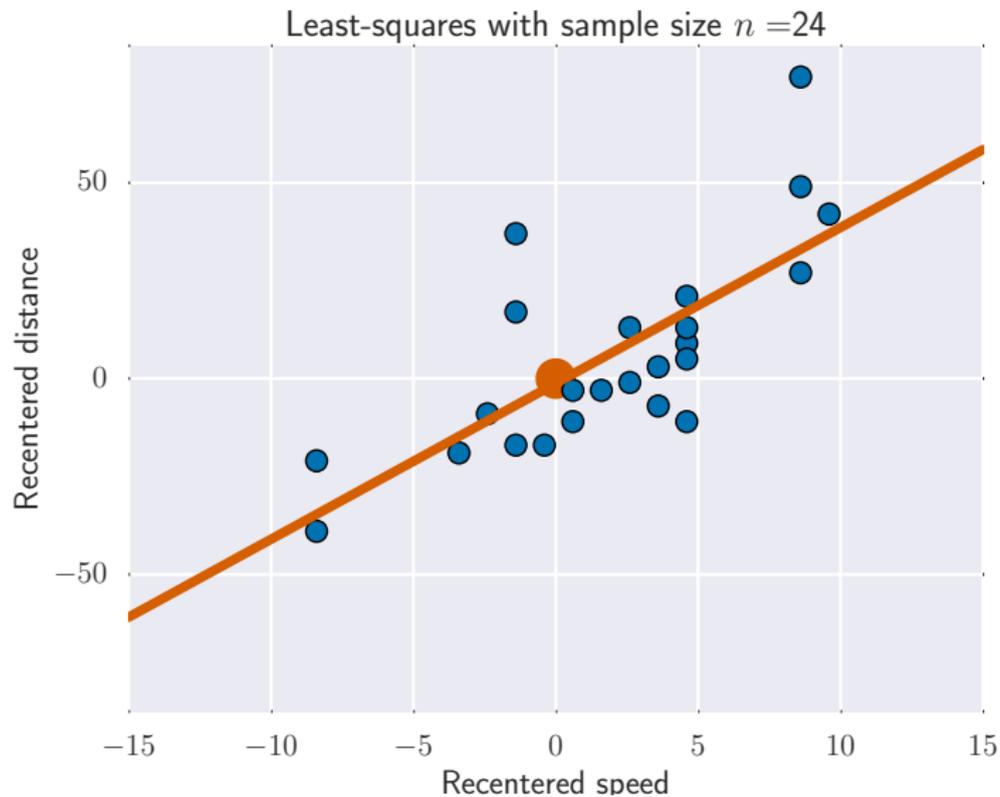
# Illustration de l'influence des points extrêmes



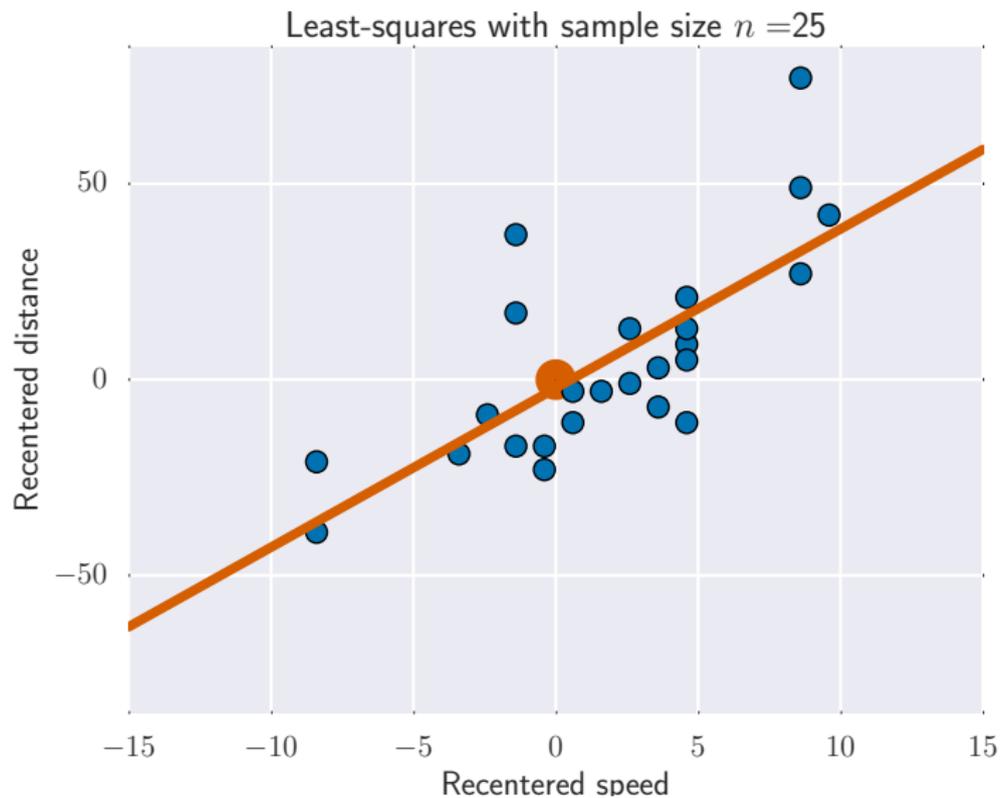
# Illustration de l'influence des points extrêmes



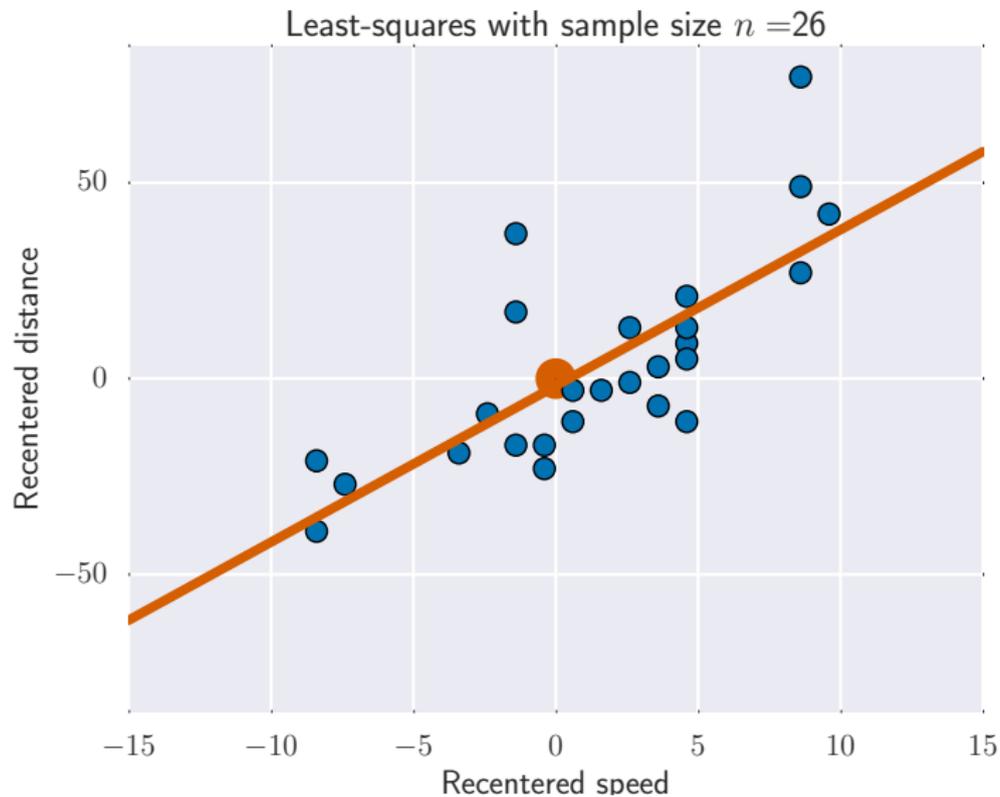
# Illustration de l'influence des points extrêmes



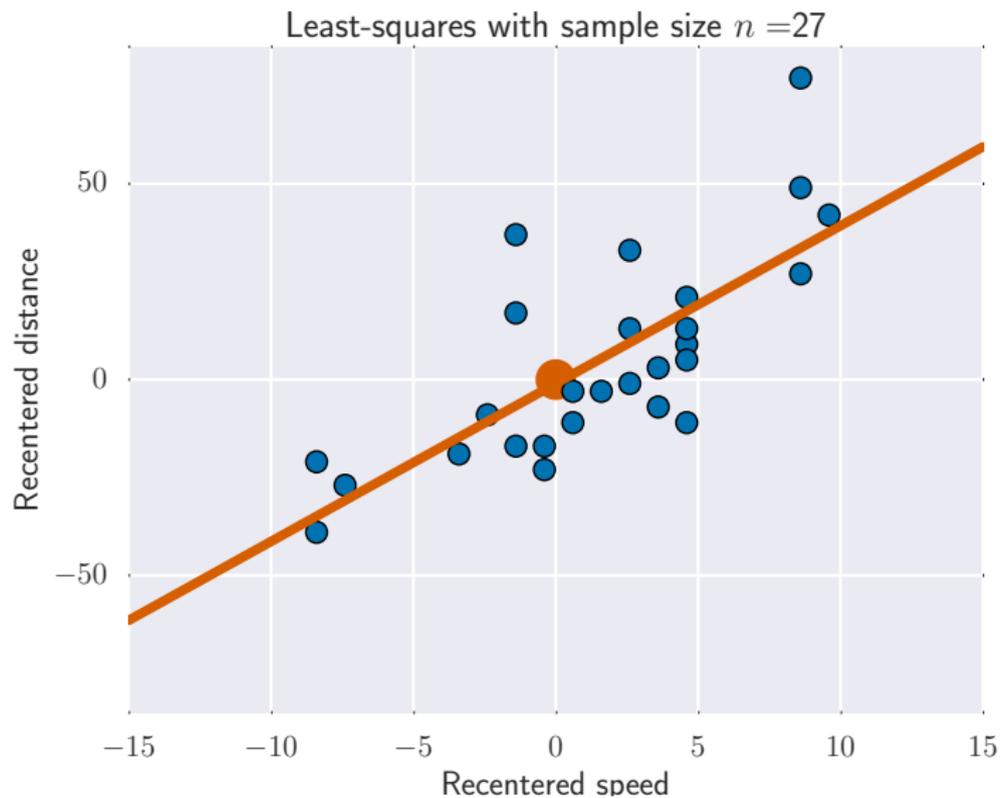
# Illustration de l'influence des points extrêmes



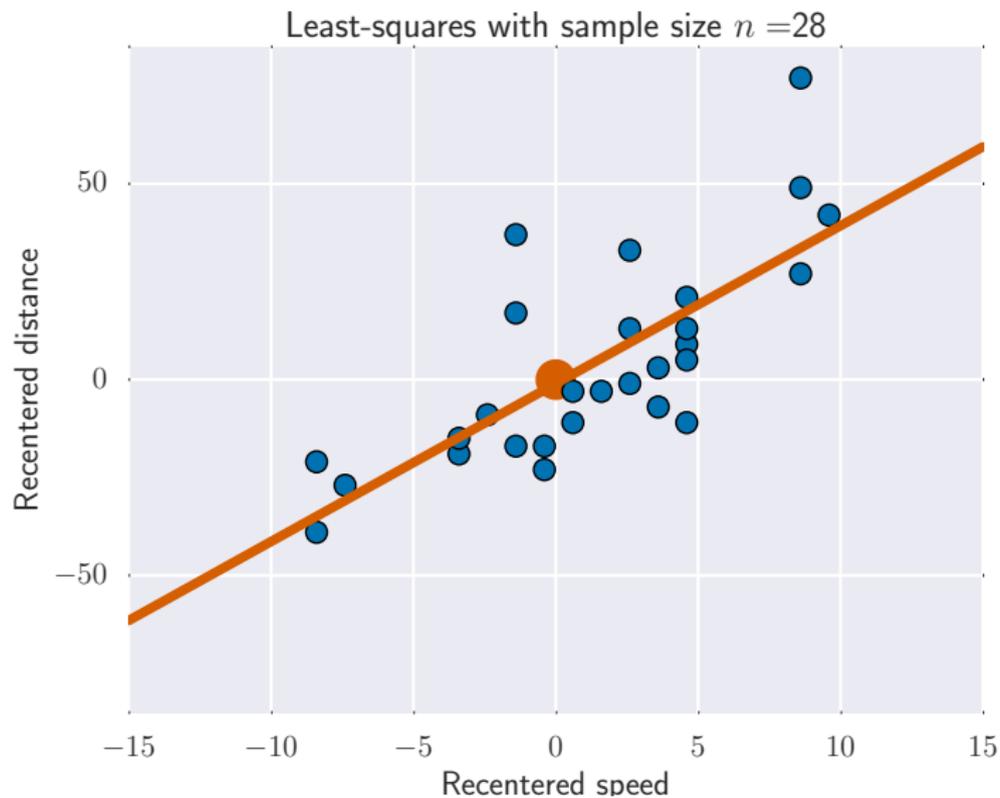
# Illustration de l'influence des points extrêmes



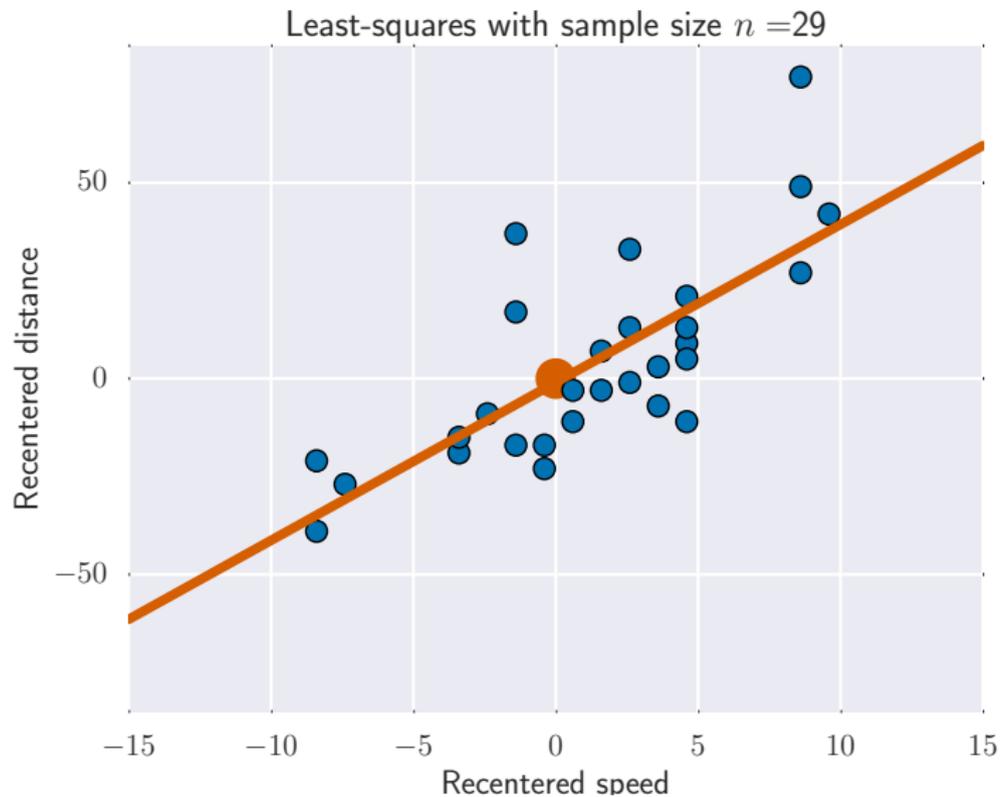
# Illustration de l'influence des points extrêmes



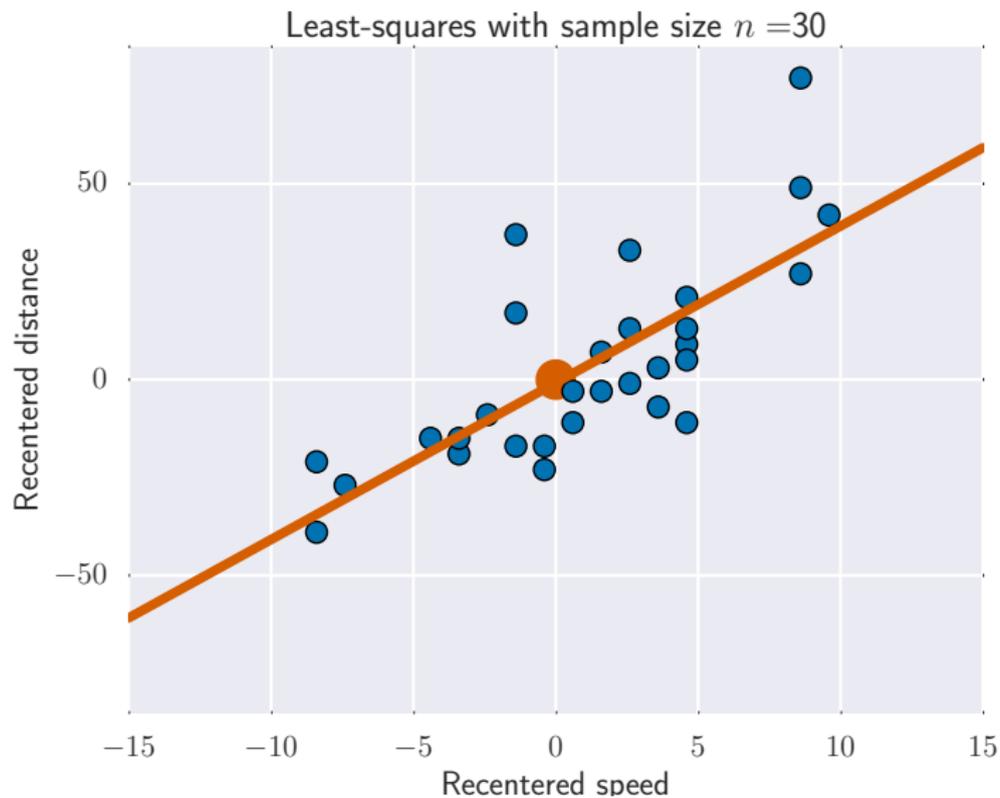
# Illustration de l'influence des points extrêmes



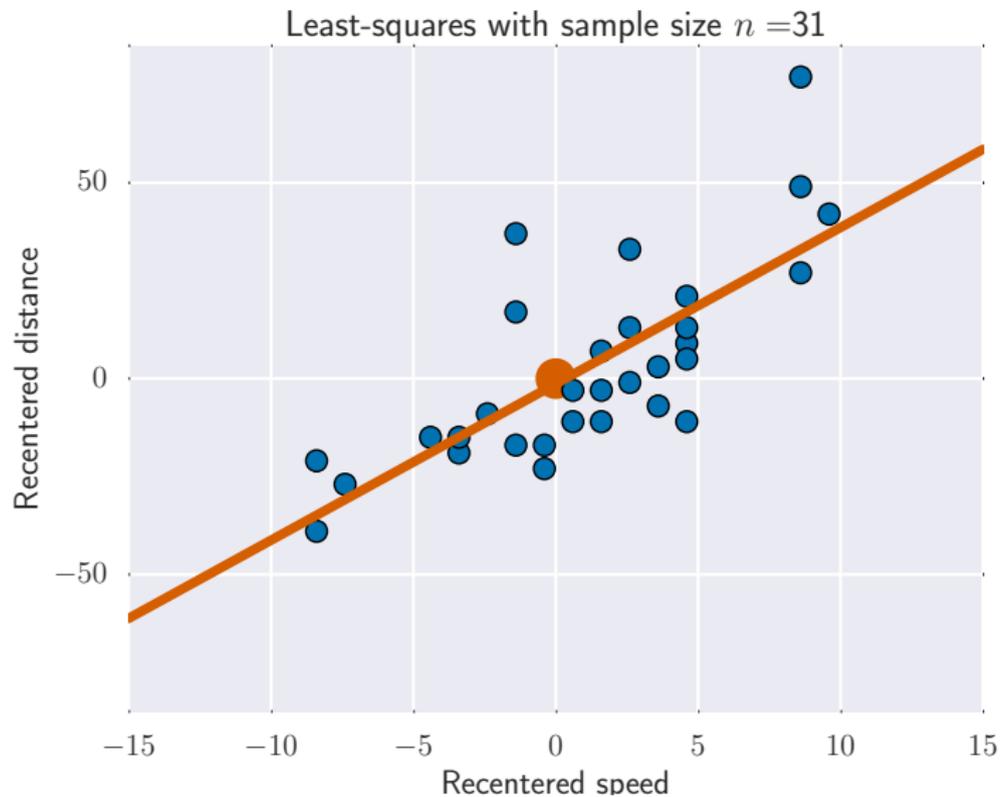
# Illustration de l'influence des points extrêmes



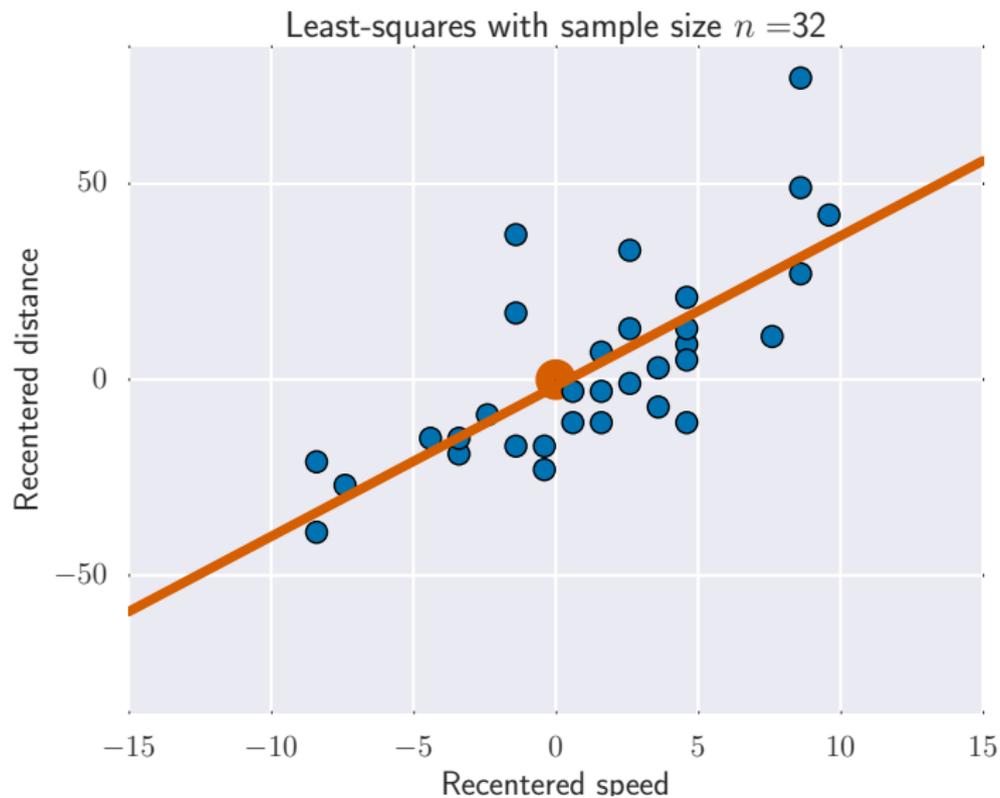
# Illustration de l'influence des points extrêmes



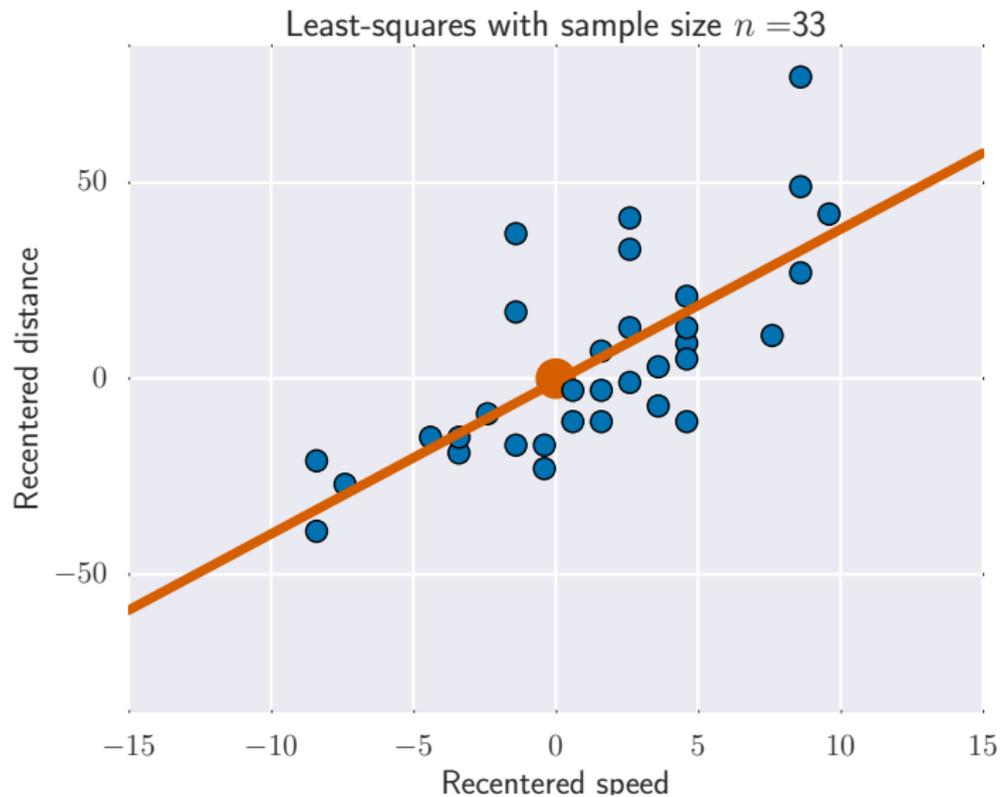
# Illustration de l'influence des points extrêmes



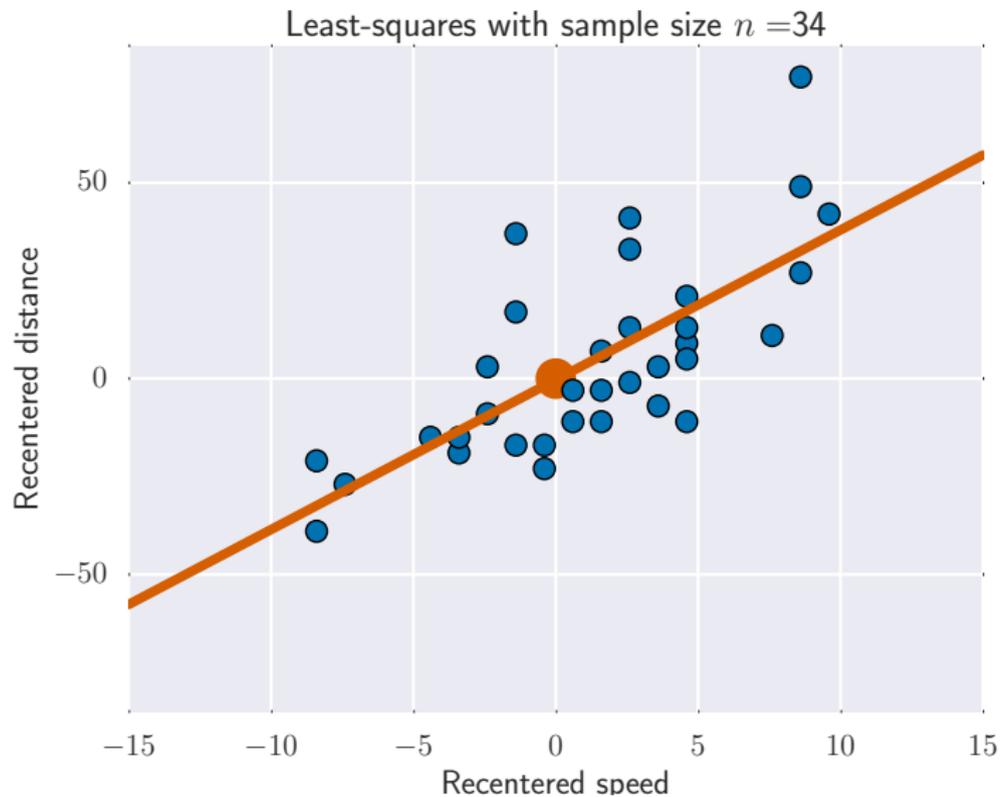
# Illustration de l'influence des points extrêmes



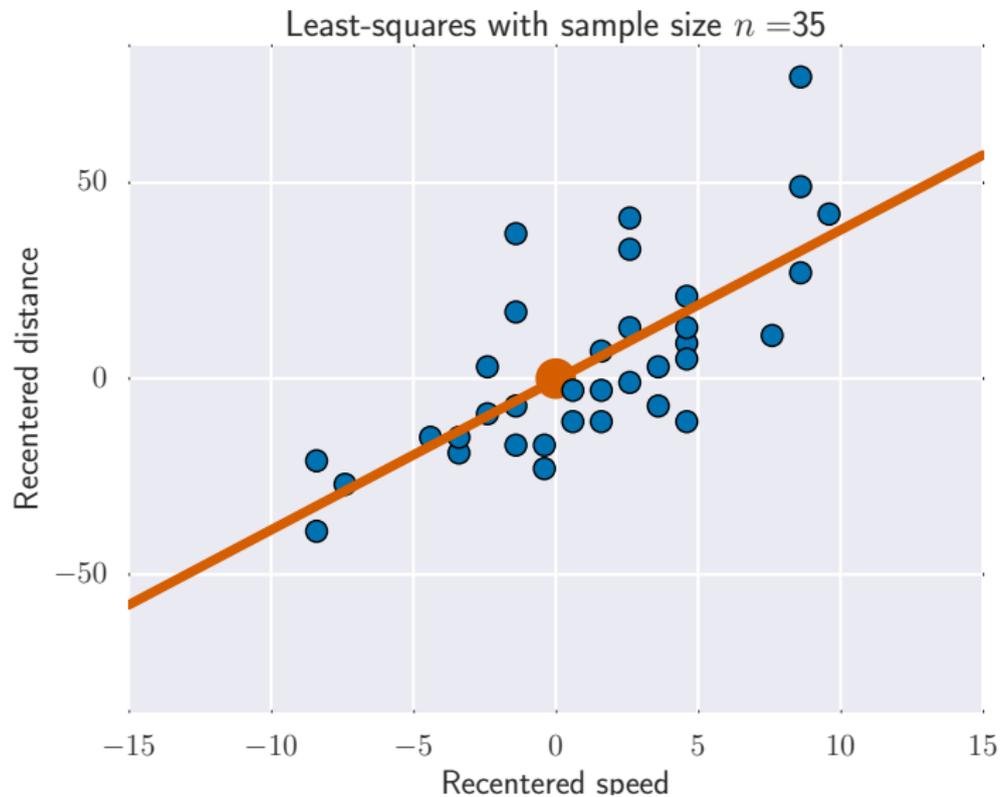
# Illustration de l'influence des points extrêmes



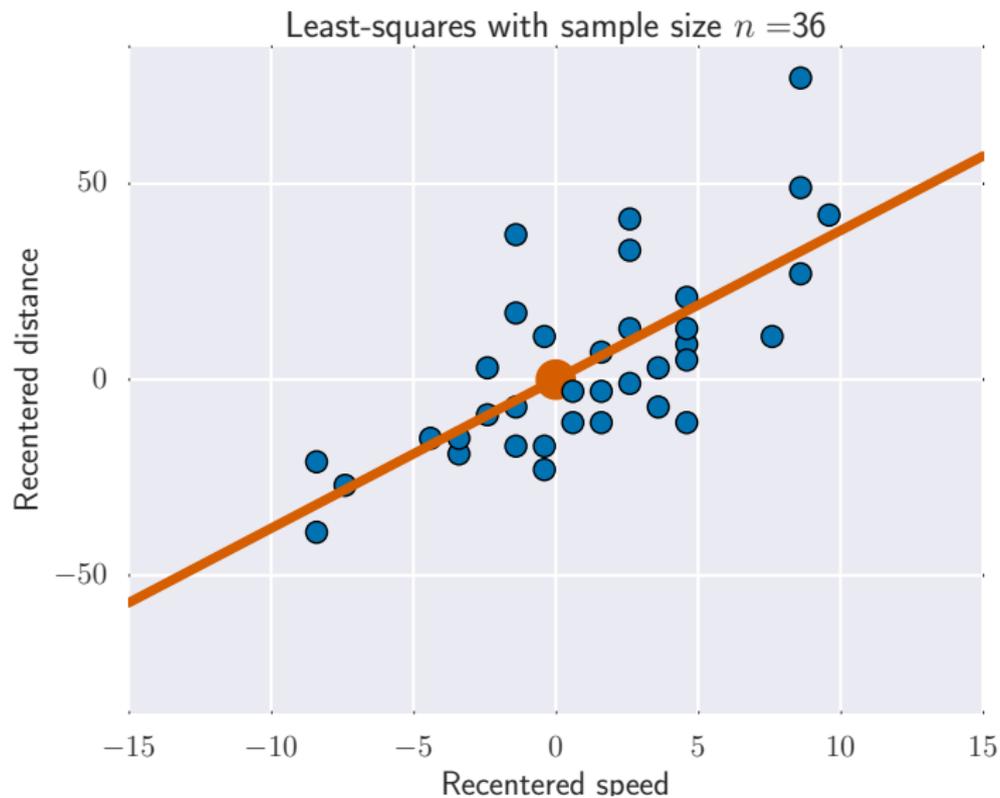
# Illustration de l'influence des points extrêmes



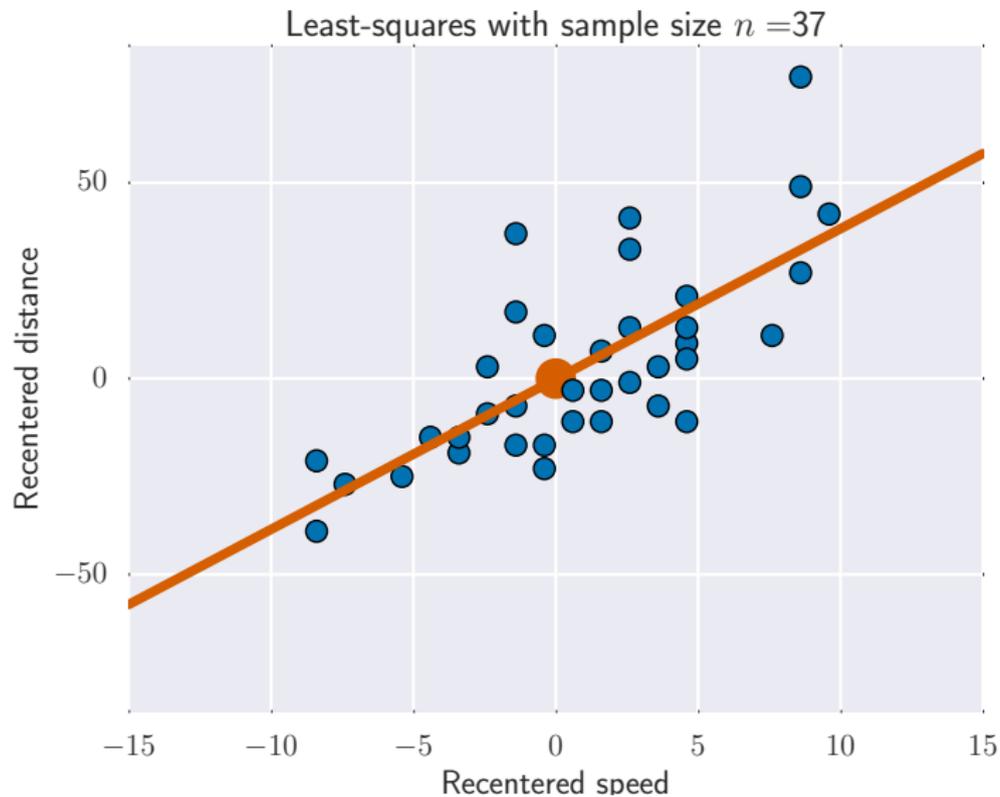
# Illustration de l'influence des points extrêmes



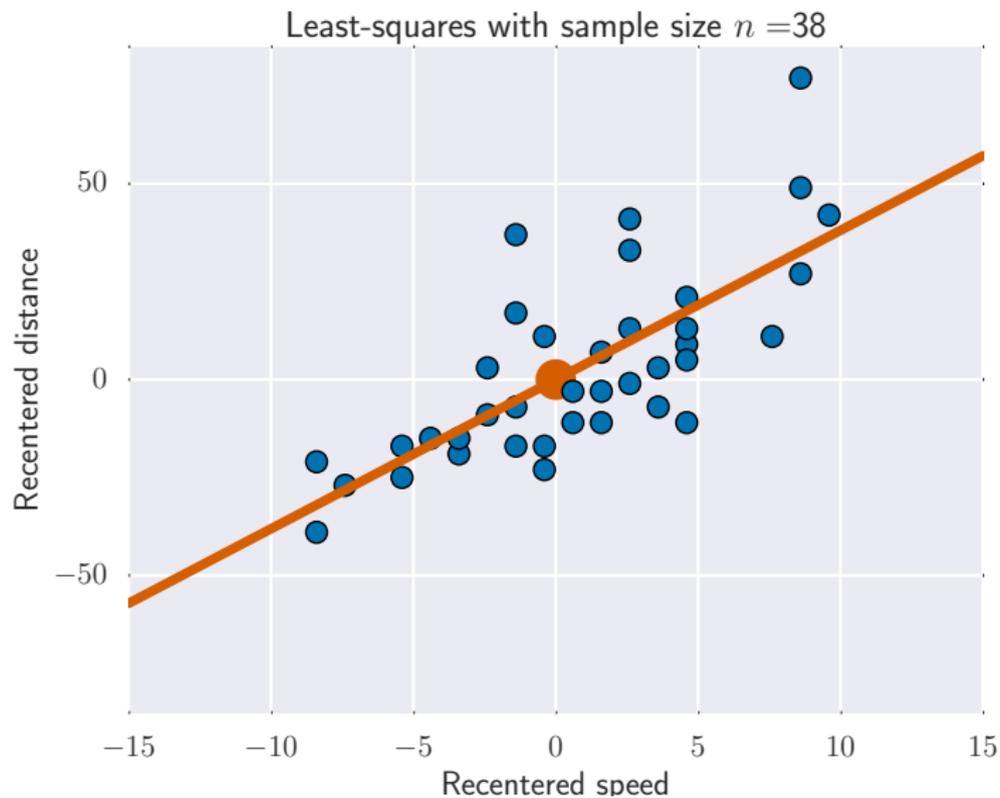
# Illustration de l'influence des points extrêmes



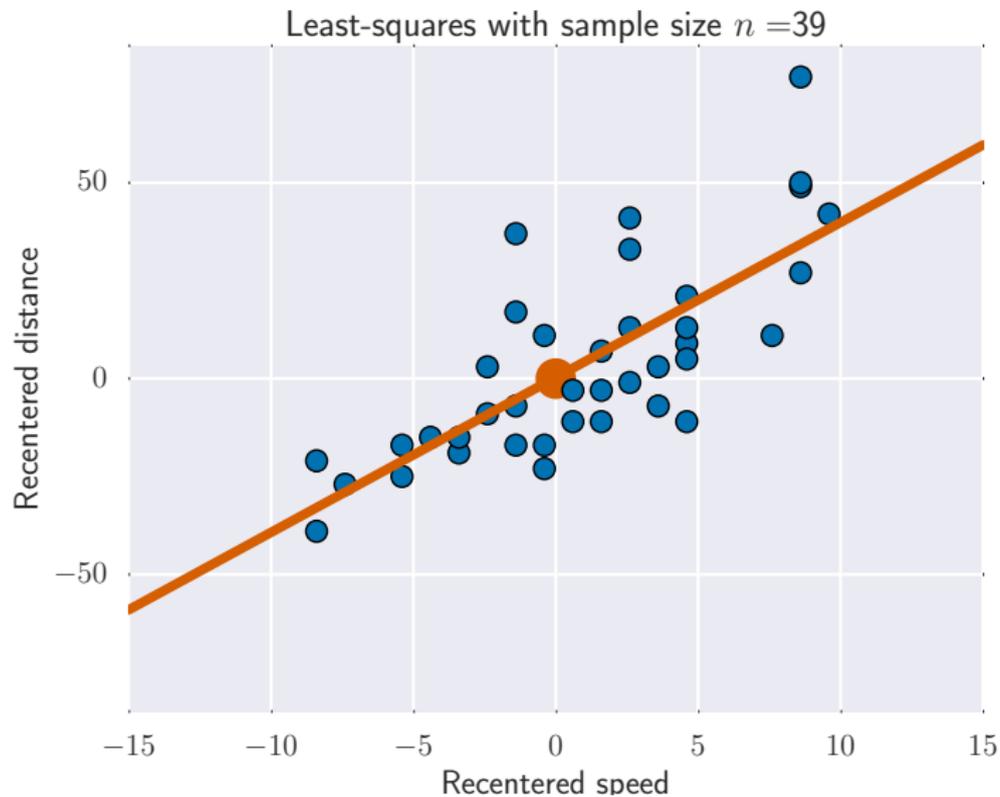
# Illustration de l'influence des points extrêmes



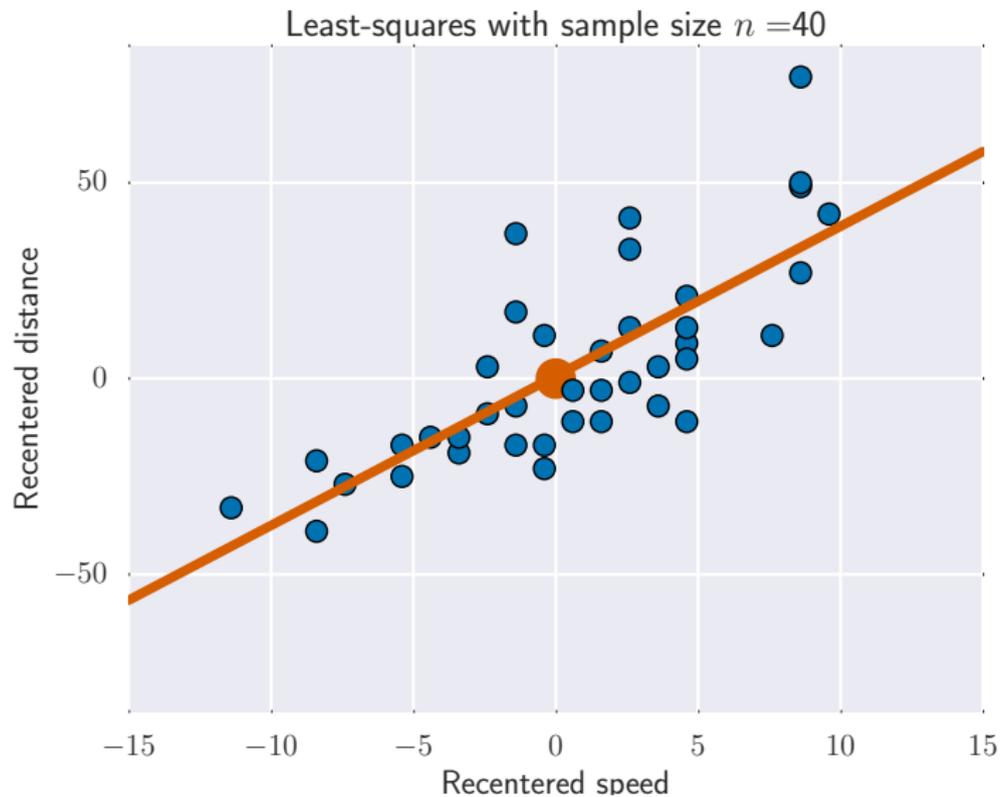
# Illustration de l'influence des points extrêmes



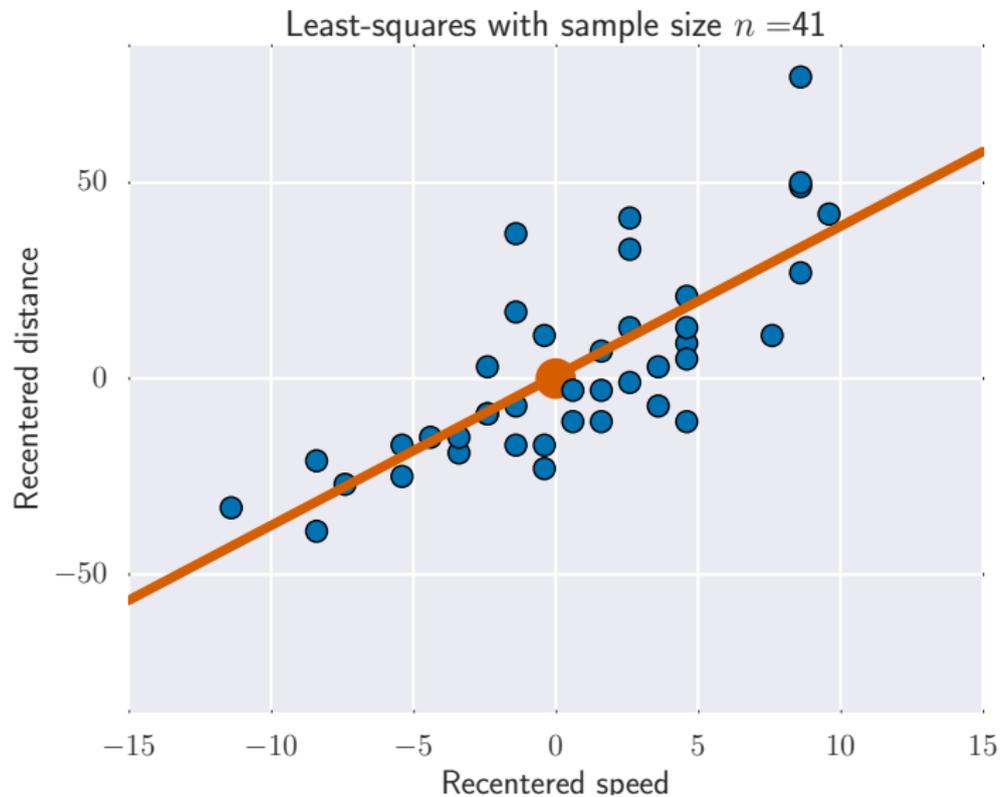
# Illustration de l'influence des points extrêmes



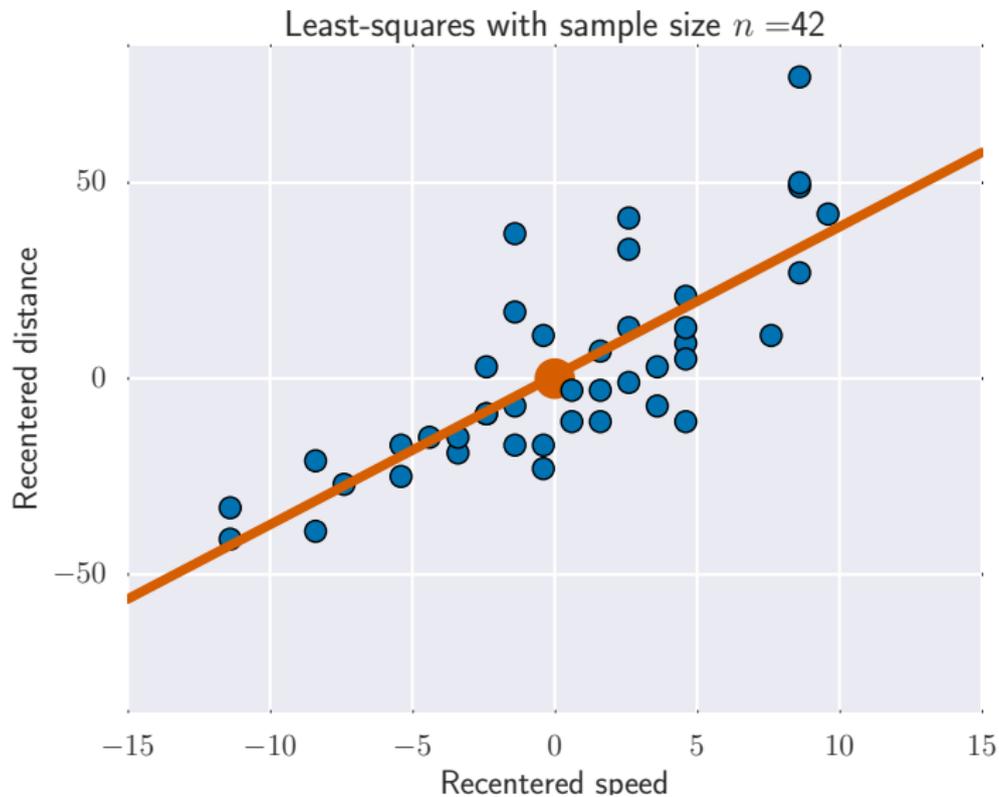
# Illustration de l'influence des points extrêmes



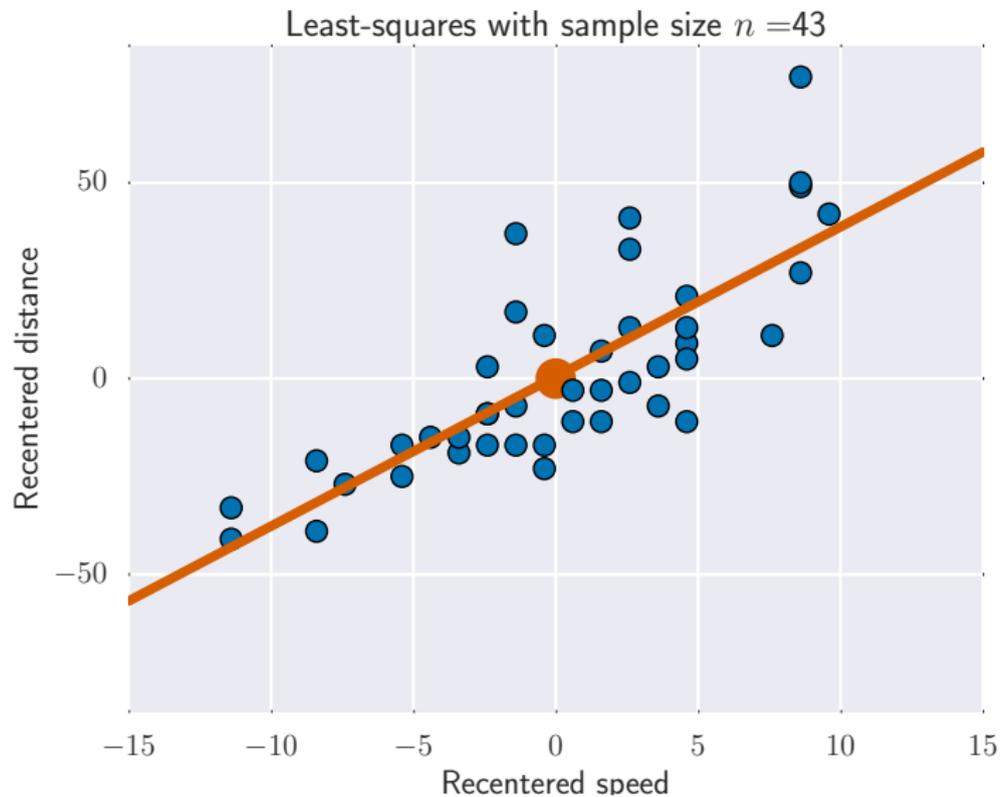
# Illustration de l'influence des points extrêmes



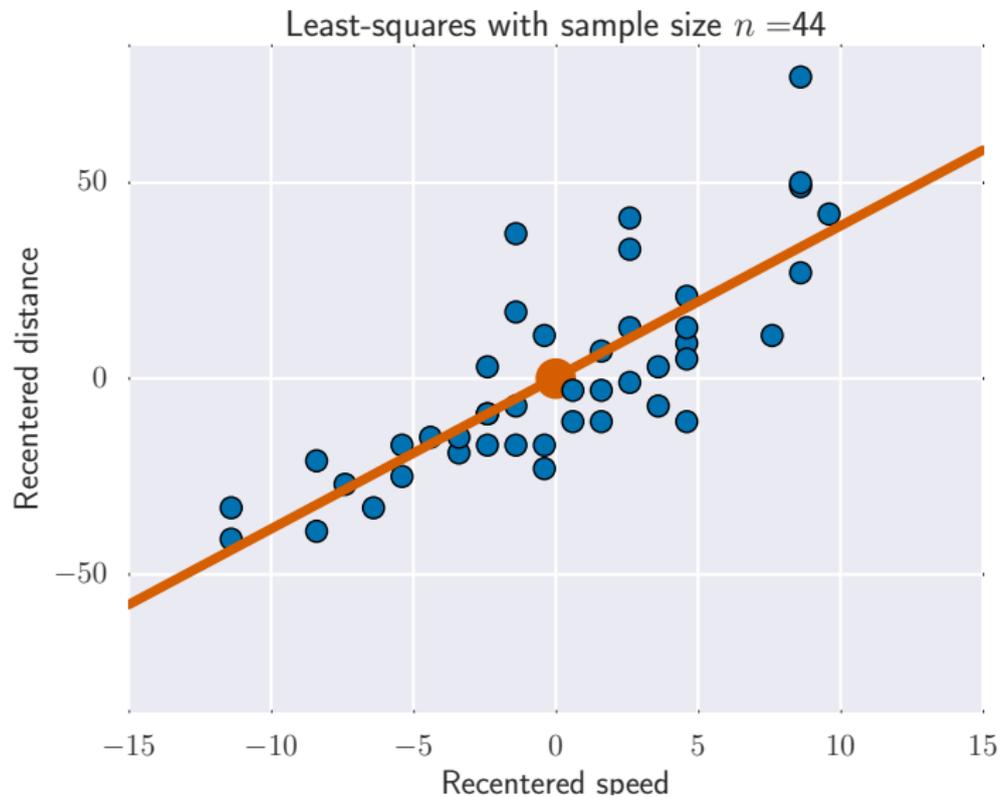
# Illustration de l'influence des points extrêmes



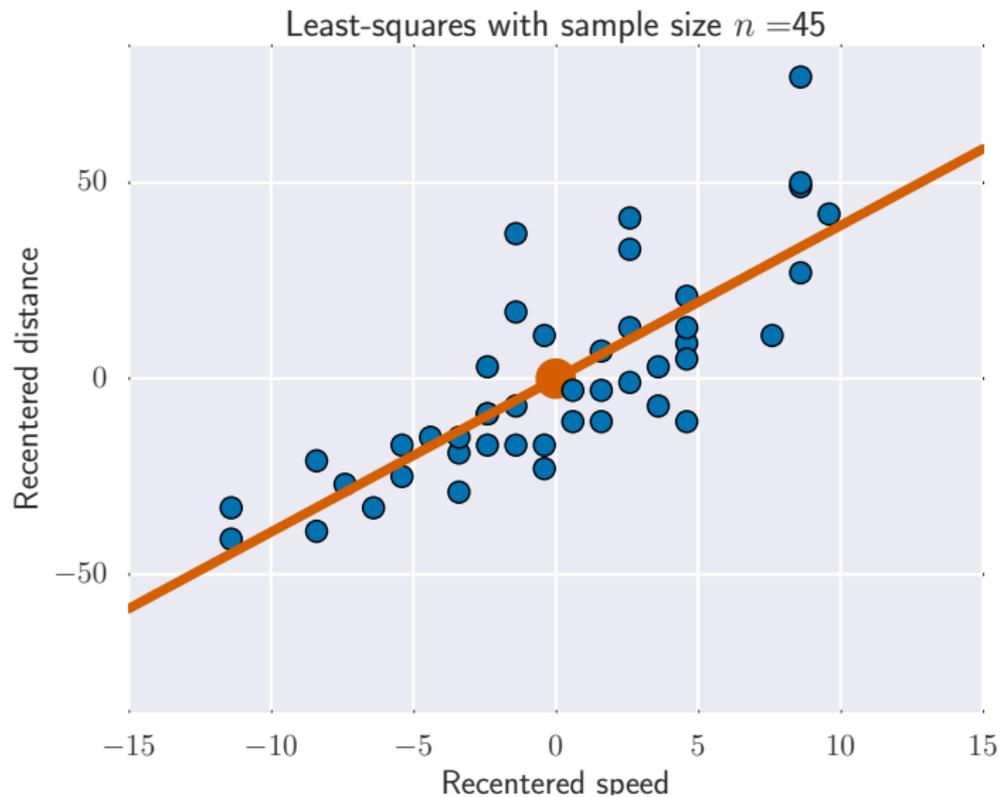
# Illustration de l'influence des points extrêmes



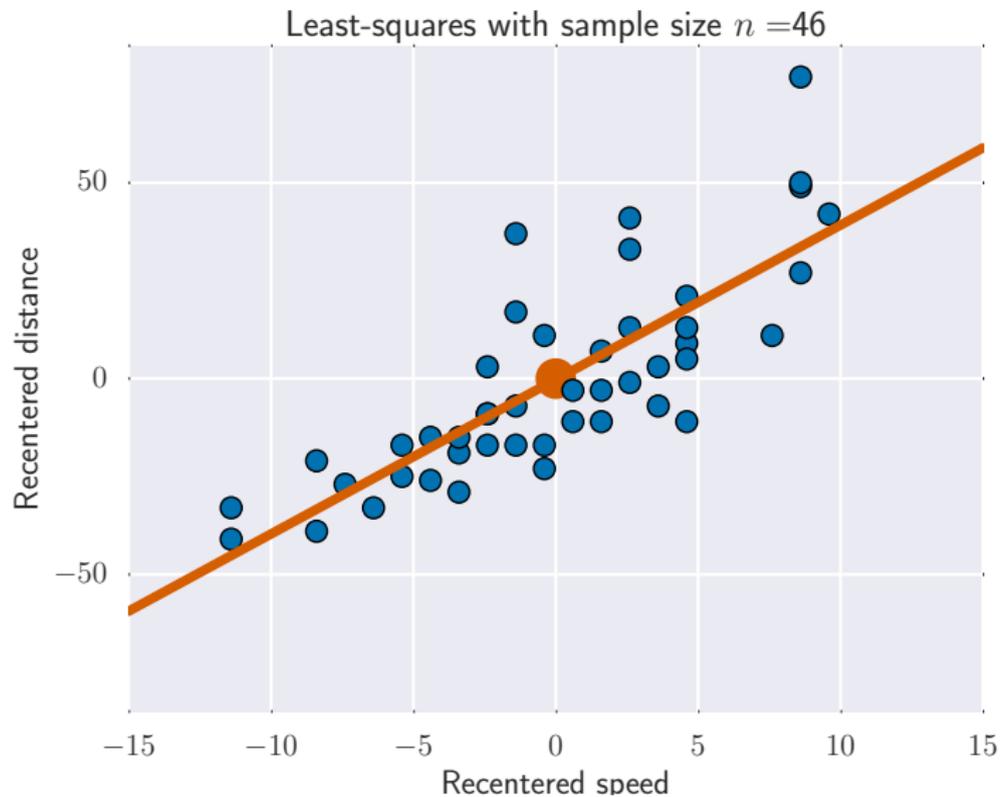
# Illustration de l'influence des points extrêmes



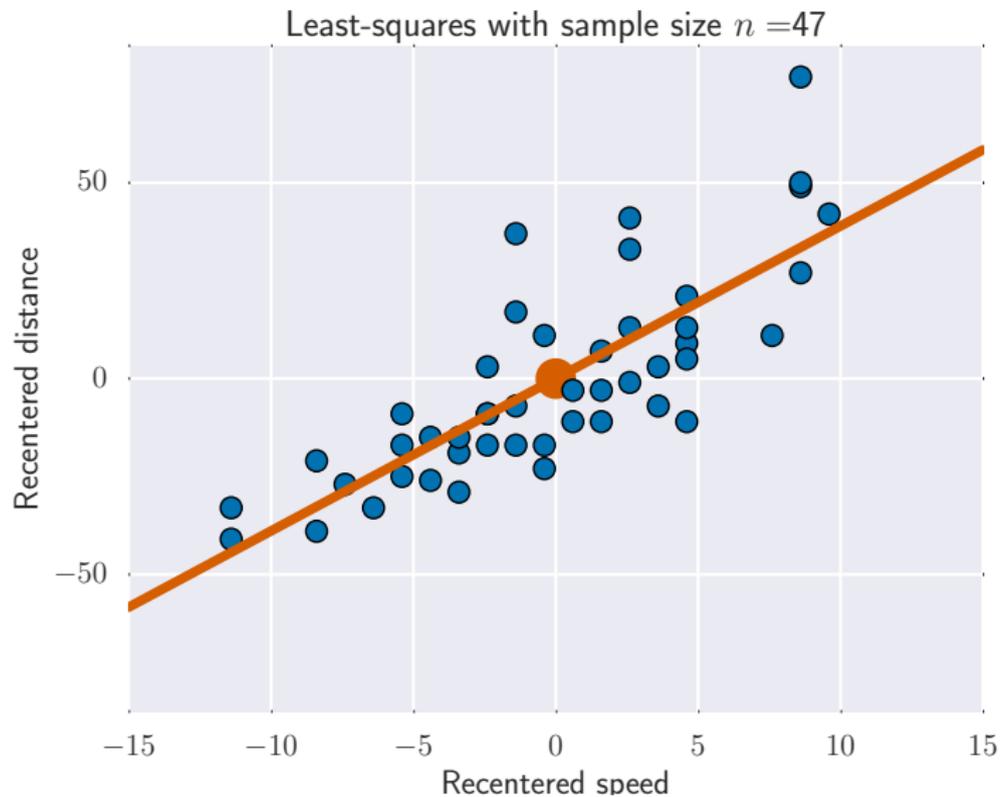
# Illustration de l'influence des points extrêmes



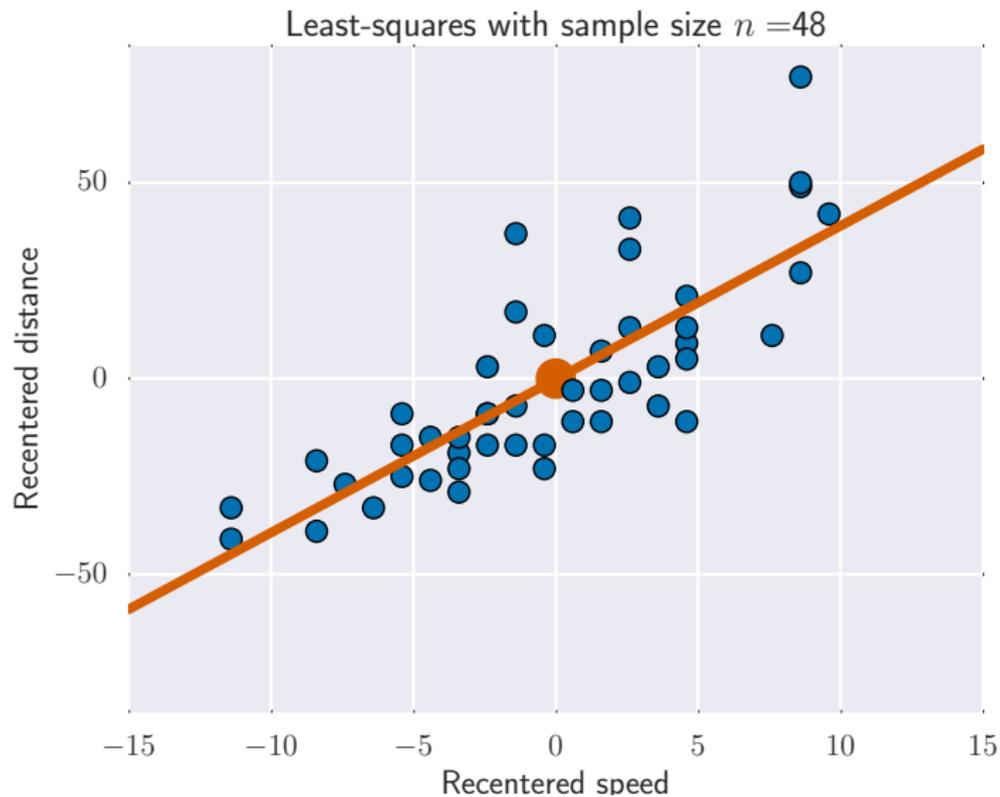
# Illustration de l'influence des points extrêmes



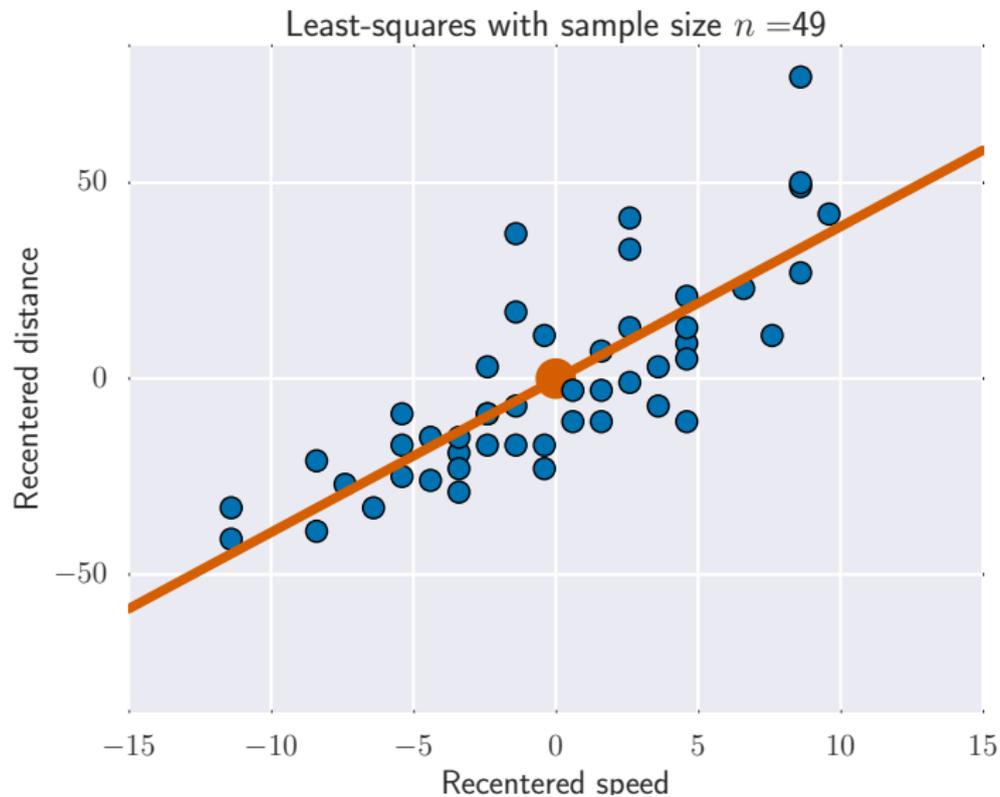
# Illustration de l'influence des points extrêmes



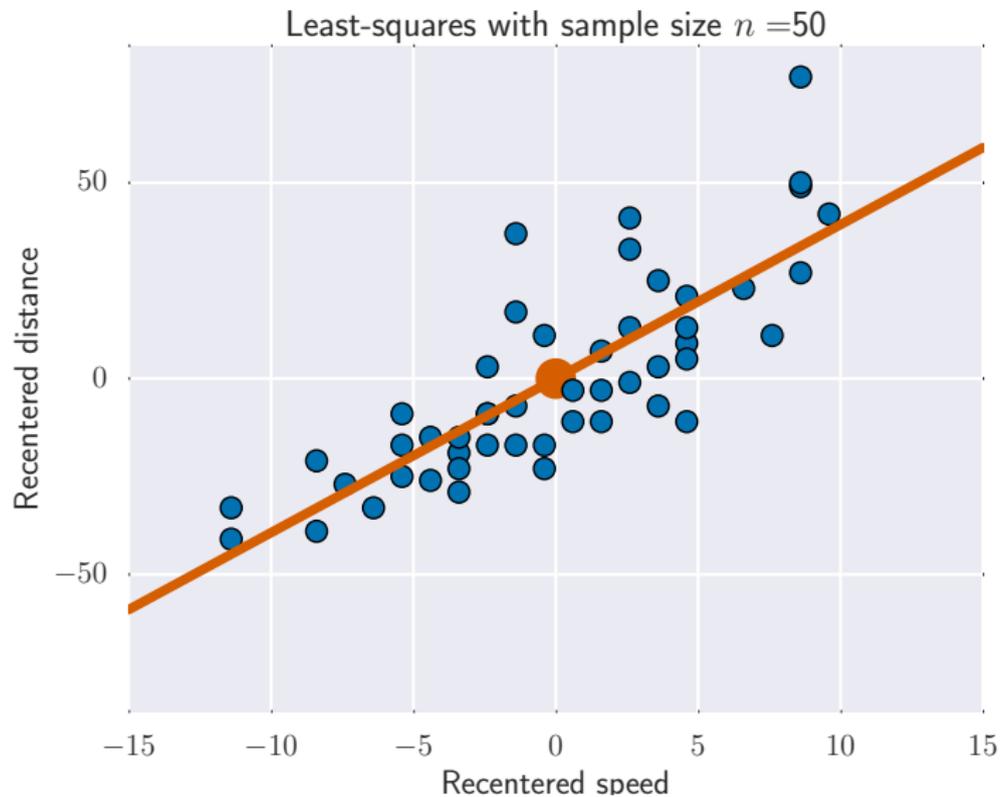
# Illustration de l'influence des points extrêmes



# Illustration de l'influence des points extrêmes



# Illustration de l'influence des points extrêmes



## Recentrage + mise à l'échelle

Nouveau modèle d'observation, dit aussi **centré-réduit** :

$$\forall i = 1, \dots, n : \begin{cases} x_i'' = (x_i - \bar{x}_n) / \sqrt{\text{var}_n(\mathbf{x})} \\ y_i'' = (y_i - \bar{y}_n) / \sqrt{\text{var}_n(\mathbf{y})} \end{cases} \Leftrightarrow \begin{cases} \mathbf{x}'' = \frac{\mathbf{x} - \bar{x}_n \mathbb{1}_n}{\sqrt{\text{var}_n(\mathbf{x})}} \\ \mathbf{y}'' = \frac{\mathbf{y} - \bar{y}_n \mathbb{1}_n}{\sqrt{\text{var}_n(\mathbf{y})}} \end{cases}$$

En résolvant le programme des moindres carrés pour  $(\mathbf{x}'', \mathbf{y}'')$  alors

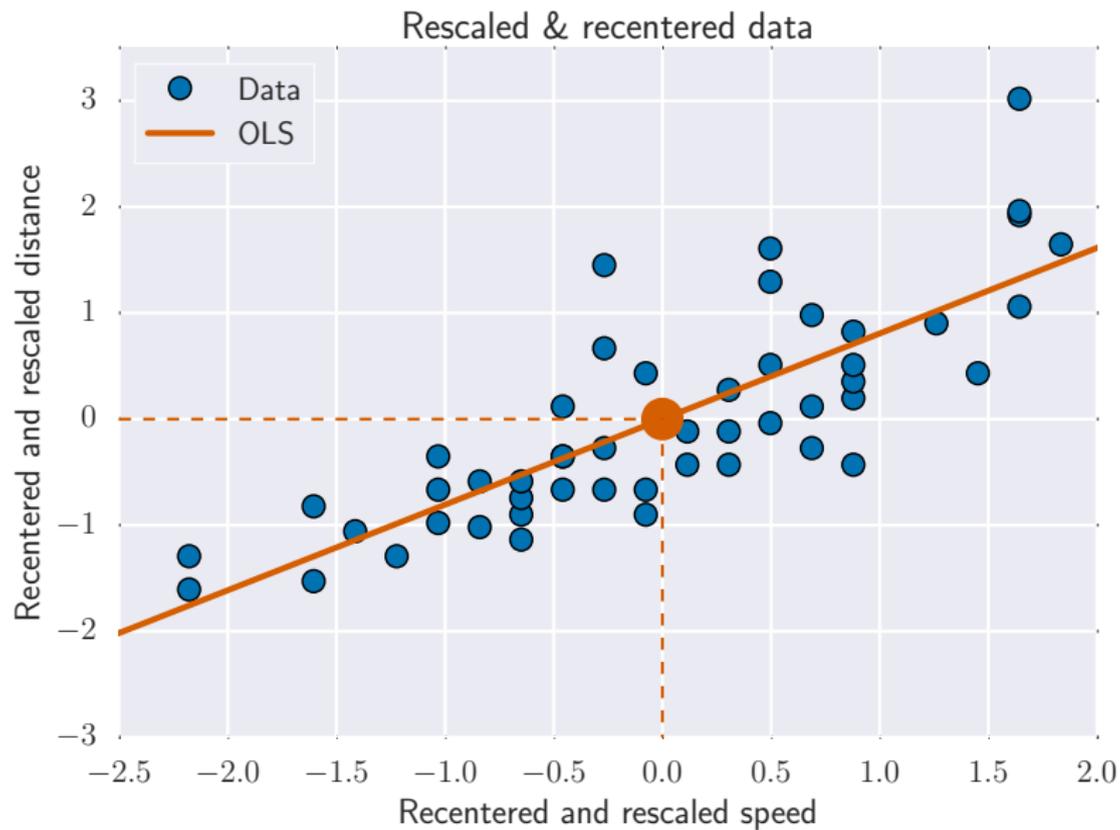
$$\begin{cases} \hat{\theta}_0'' = 0 \\ \hat{\theta}_1'' = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n x_i'' y_i'' \end{cases}$$

C'est équivalent à choisir le centre de gravité du “nuage de points” pour origine et normaliser  $\mathbf{x}$  et  $\mathbf{y}$  pour la **norme empirique**  $\|\cdot\|_n$  :

$$\|\mathbf{x}''\|_n^2 = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n (x_i'')^2 = 1$$

$$\|\mathbf{y}''\|_n^2 = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n (y_i'')^2 = 1$$

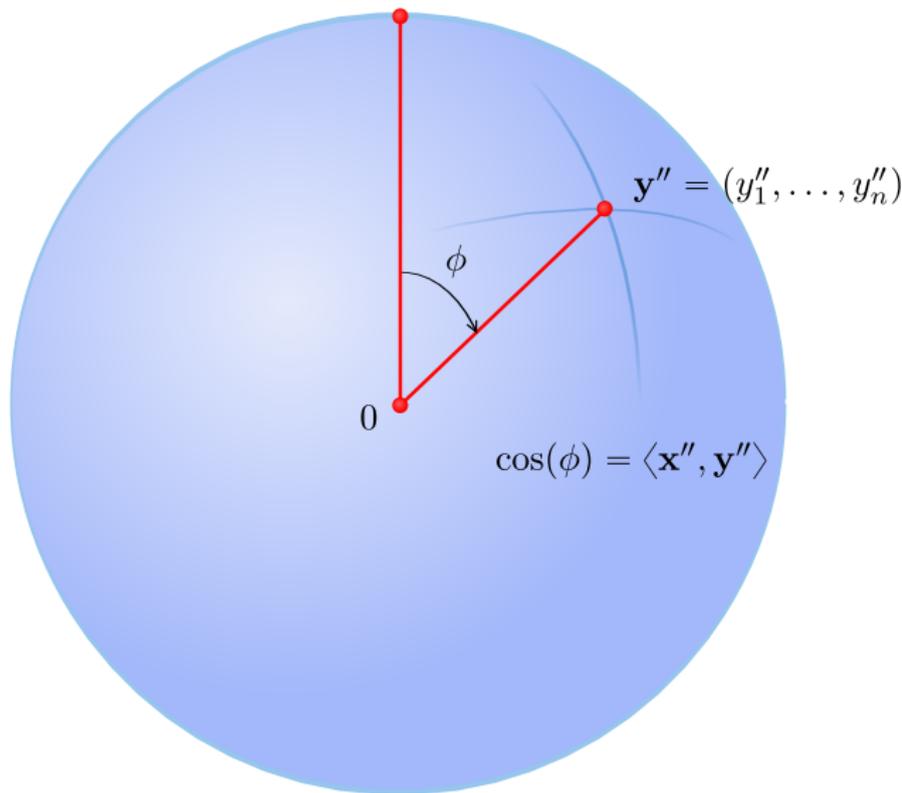
## Recentrage + mise à l'échelle (II)



## Interprétation corrélation (cas centré-réduit)

Exemple : cas  $n = 3$  et  $\|\mathbf{x}''\|_n^2 = \|\mathbf{y}''\|_n^2 = 1$

$$\mathbf{x}'' = (x''_1, \dots, x''_n)$$



## Quand/Pourquoi pré-traiter ?

On peut recentrer  $\mathbf{y}$  ou bien ajouter une variable constante au modèle, mais recentrer est souvent plus simple

Rem : dans les cas creux ( : *sparse*) cela peut être plus difficile à gérer, cf. régression logistique avec données textuelles

Pour la/les variable(s) explicative(s) la mise à l'échelle est importante :

- si l'on veut interpréter l'ordonnée à l'origine, ou bien interpréter l'amplitude des coefficients de régression (notion de coefficients “petits”)
- si l'on veut pénaliser les coefficients (cf. Lasso, Ridge, etc.)
- pour des raisons numériques (e.g. accélérer les calculs, améliorer le conditionnement, etc.)

Rem : en anticipant sur la suite, centrer/réduire est plus utile en **estimation** qu'en **prédiction**

## Recentrage en python

Utiliser le recentrage de sklearn

<http://scikit-learn.org/stable/modules/preprocessing.html>

```
from sklearn import preprocessing

scaler = preprocessing.StandardScaler().fit(X)

print(np.isclose(scaler.mean_, np.mean(X)))

print(np.array_equal(scaler.std_, np.std(X)))

print(np.array_equal(scaler.transform(X),
                    (X - np.mean(X)) / np.std(X)))

print(np.array_equal(scaler.transform([26]),
                    (26 - np.mean(X)) / np.std(X)))
```

Plus d'informations, variations, etc. :

<http://scikit-learn.org/stable/modules/pipeline.html>

## Définitions

### Prédicteur

On appelle **prédicteur** une fonction qui à une nouvelle observation  $x_{n+1}$  associe une estimation de la variable à expliquer.

Pour les moindres carrés la prédiction est obtenue par :

$$\text{pred}(x_{n+1}) = \hat{\theta}_0 + \hat{\theta}_1 x_{n+1}$$

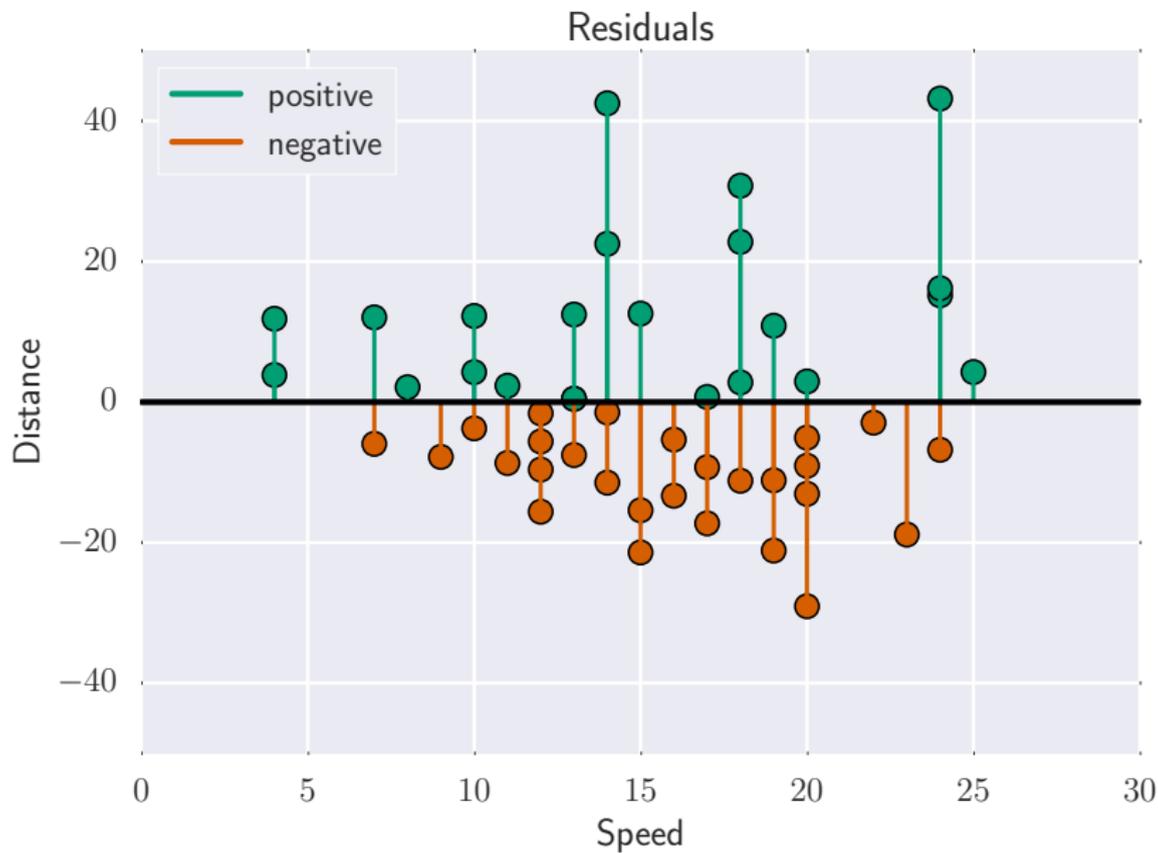
Rem : souvent on note  $\hat{y}_{n+1} = \text{pred}(x_{n+1})$  s'il n'y pas d'ambiguïté

### Résidus

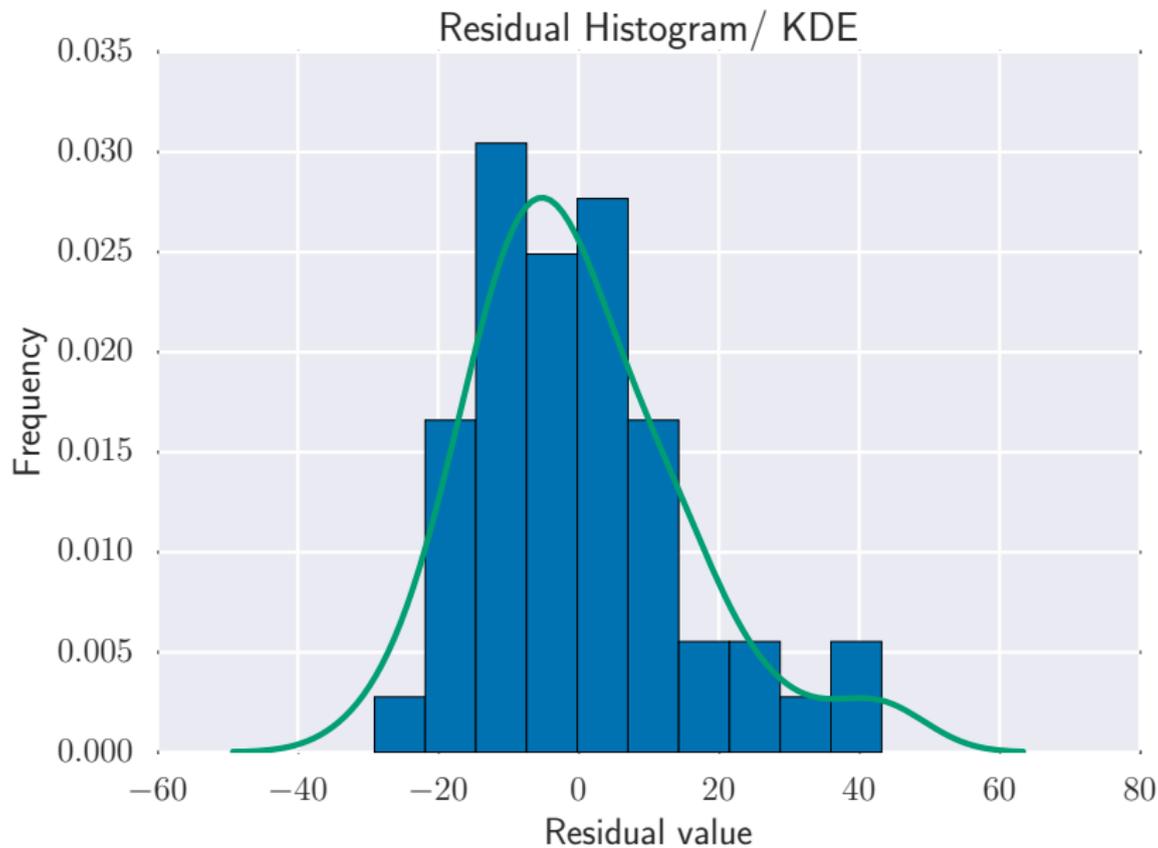
On appelle **résidu** d'un prédicteur la différence entre la valeur observée et la valeur prédite :

$$r_i = y_i - \text{pred}(x_i) = y_i - \hat{y}_i = y_i - (\hat{\theta}_0 + \hat{\theta}_1 x_i)$$

# Résidus



# Histogramme des résidus



## Résidus (suite)

Rappel :  $r_i = y_i - \text{pred}(x_i) = y_i - \hat{y}_i = y_i - (\hat{\theta}_0 + \hat{\theta}_1 x_i)$

### Propriété

Les résidus sont **centrés** :  $\frac{1}{n} \sum_{i=1}^n r_i = 0$

Démonstration :

## Résidus (suite)

Rappel :  $r_i = y_i - \text{pred}(x_i) = y_i - \hat{y}_i = y_i - (\hat{\theta}_0 + \hat{\theta}_1 x_i)$

### Propriété

Les résidus sont **centrés** :  $\frac{1}{n} \sum_{i=1}^n r_i = 0$

Démonstration :

$$\frac{1}{n} \sum_{i=1}^n r_i = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n (y_i - \text{pred}(x_i))$$

## Résidus (suite)

Rappel :  $r_i = y_i - \text{pred}(x_i) = y_i - \hat{y}_i = y_i - (\hat{\theta}_0 + \hat{\theta}_1 x_i)$

### Propriété

Les résidus sont **centrés** :  $\frac{1}{n} \sum_{i=1}^n r_i = 0$

Démonstration :

$$\begin{aligned} \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n r_i &= \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n (y_i - \text{pred}(x_i)) \\ &= \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n (y_i - \hat{y}_i) \end{aligned}$$

## Résidus (suite)

Rappel :  $r_i = y_i - \text{pred}(x_i) = y_i - \hat{y}_i = y_i - (\hat{\theta}_0 + \hat{\theta}_1 x_i)$

### Propriété

Les résidus sont **centrés** :  $\frac{1}{n} \sum_{i=1}^n r_i = 0$

Démonstration :

$$\begin{aligned} \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n r_i &= \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n (y_i - \text{pred}(x_i)) \\ &= \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n (y_i - \hat{y}_i) \\ &= \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n (y_i - (\hat{\theta}_0 + \hat{\theta}_1 x_i)) \end{aligned}$$

## Résidus (suite)

Rappel :  $r_i = y_i - \text{pred}(x_i) = y_i - \hat{y}_i = y_i - (\hat{\theta}_0 + \hat{\theta}_1 x_i)$

### Propriété

Les résidus sont **centrés** :  $\frac{1}{n} \sum_{i=1}^n r_i = 0$

Démonstration :

$$\begin{aligned} \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n r_i &= \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n (y_i - \text{pred}(x_i)) \\ &= \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n (y_i - \hat{y}_i) \\ &= \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n (y_i - (\hat{\theta}_0 + \hat{\theta}_1 x_i)) \\ &= \bar{y}_n - (\hat{\theta}_0 + \hat{\theta}_1 \bar{x}_n) = 0 \end{aligned}$$

1. Introduction : visualisation / Python

2. Moindres carrés uni-dimensionnels

Modélisation

Formulation mathématique

Centrer - Réduire

Vraisemblance

## Raison du choix des moindres carrés

- Intérêt calculatoire : historiquement il fallait éviter des méthodes trop gourmandes en calcul (*e.g.* itératives)
- Intérêt théorique : il est possible d'analyser en détails l'estimateur sous des hypothèses simples

Exemple : sous l'hypothèse que le bruit suit une loi gaussienne *i.e.*,  $\varepsilon \sim \mathcal{N}(0, \sigma^2)$  le maximum de vraisemblance amène à considérer les moindres carrés comme estimateur naturel de  $(\theta_0^*, \theta_1^*)$

Rem : pour un autre modèle de bruit ou pour limiter l'effet de points aberrants ( : *outliers*) on peut alternativement résoudre (*e.g.* QuantReg dans Statsmodels)

$$\hat{\theta} = (\hat{\theta}_0, \hat{\theta}_1) \in \operatorname{argmin}_{(\theta_0, \theta_1) \in \mathbb{R}^2} \sum_{i=1}^n |y_i - \theta_0 - \theta_1 x_i|$$

## Vraisemblance gaussienne

### Rappel : la densité d'une gaussienne uni-dimensionnelle

On note  $Y \sim \mathcal{N}(\mu, \sigma^2)$ , une variable dont la densité est

$$\varphi_{\mu, \sigma}(y) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma^2}} \exp\left(-\frac{(y - \mu)^2}{2\sigma^2}\right)$$

Supposons :  $Y_i \sim \mathcal{N}(\theta_0^* + \theta_1^* x_i, \sigma^2)$ , i.e.  $\varepsilon_i \sim \mathcal{N}(0, \sigma^2)$ , alors le couple  $(\theta_0, \theta_1)$  le plus **vraisemblable** au vu des données est celui qui maximise la densité du vecteur  $(y_1, \dots, y_n)$ .

Sous une hypothèse d'indépendance, c'est la solution de :

$$(\hat{\theta}_0, \hat{\theta}_1) \in \operatorname{argmax}_{(\theta_0, \theta_1) \in \mathbb{R}^2} \prod_{i=1}^n \left( \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma^2}} \exp\left(-\frac{(y_i - \theta_0 - \theta_1 x_i)^2}{2\sigma^2}\right) \right)$$

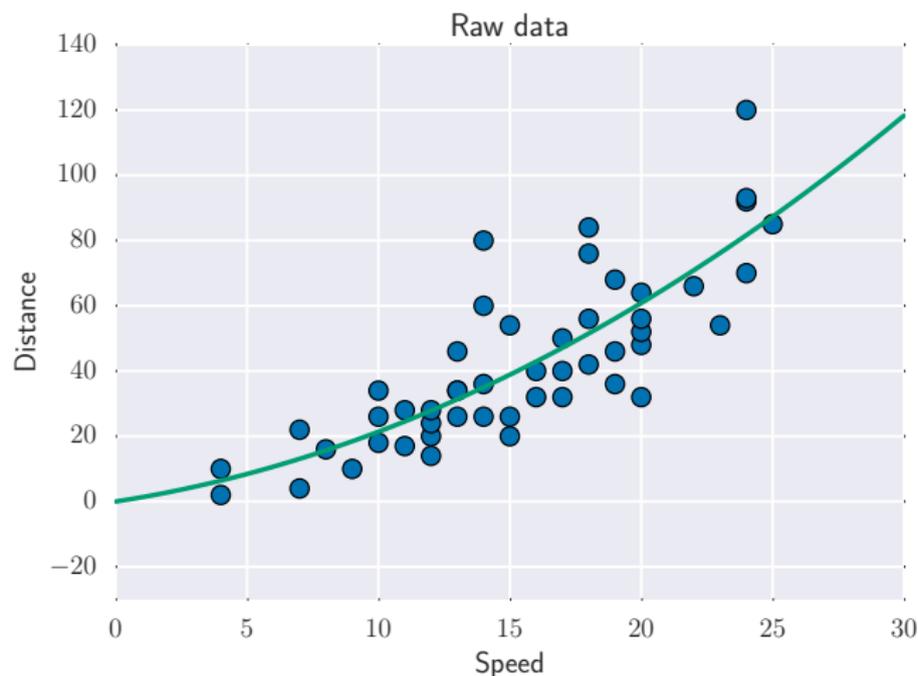
---

**Exo** : retrouver les moindres carrés depuis cette formulation

---

## Discussion : vers le multidimensionnel

Les lois physiques (ou vos souvenirs d'auto-école) conduisent plutôt à choisir une parabole au lieu d'une droite : la même procédure MCO permet d'obtenir l'ajustement suivant en choisissant comme variable explicative  $x_i^2$  au lieu de  $x_i$  :



## Sites web et livres pour aller plus loin

- Quelques notebooks de moindres carrés avec `statsmodels`
- [McKinney \(2012\)](#) concernant `python` pour les statistiques
- [Lejeune \(2010\)](#) concernant le modèle linéaire (notamment)
- pour aller plus loin (plus technique), lire le cours de régression de [B. Delyon](#), par exemple sur les points leviers.

## Références I

- [Del15] B. Delyon. Régression, 2015. <https://perso.univ-rennes1.fr/bernard.delyon/regression.pdf>.
- [Lej10] M. Lejeune. *Statistiques, la théorie et ses applications*. Springer, 2010.
- [McK12] W. McKinney. *Python for Data Analysis : Data Wrangling with Pandas, NumPy, and IPython*. O'Reilly Media, 2012.