Méthode de sélection de variables dans le modèle linéaire multivarié avec prise en compte de la dépendance

Marie Perrot-Dockès
Céline Lévy-Leduc, Julien Chiquet, Laure Sansonnet

AgroParisTech/UMR INRA MIA-Paris (Équipe Stat & Génome)

Introduction

- **Description des données :**
  - $\boldsymbol{X}$ matrice de design de taille $n \times p$
  - $\boldsymbol{Y}$ matrice réponse de taille $n \times q$ $\quad (n \approx 30,\ q \approx 1000)$
- **Question :** Quelles sont les variables qui influencent les réponses ?
- **Approche :**
  - Sélection de variables dans le modèle

$$\boldsymbol{Y} = \boldsymbol{X}\boldsymbol{B} + \boldsymbol{E},$$

où

- $\boldsymbol{B}$ matrice **parcimonieuse** des coefficients de taille $p \times q$
- $\boldsymbol{E}$ matrice des erreurs de taille $n \times q$ avec

$$\forall i \in \{1, \ldots, n\},\ (E_{i,1}, \ldots, E_{i,q}) \overset{iid}{\sim} \mathcal{N}(0, \boldsymbol{\Sigma}_q)$$

  - Prise en compte de la dépendance en estimant $\boldsymbol{\Sigma}_q$

Méthode en 3 étapes

1. **Estimation des erreurs E**

   Résidus des modèles indépendants sur chaque colonne de Y $\Rightarrow \widehat{E}$.

2. **Estimation de la covariance des erreurs Σ_q**
   - Différentes modélisations de la dépendance $\Rightarrow$ différentes estimations de Σ_q (AR(1), ARMA, Toeplitz, ...).
   - Choix de la meilleure modélisation de la dépendance à l'aide d'un test de bruit blanc (test de Portmanteau).

3. **"Blanchiment" et sélection de variables :**
   - "Blanchiment" : $\boldsymbol{Y}\,\widehat{\Sigma}_q^{-1/2} = \boldsymbol{X}\boldsymbol{B}\,\widehat{\Sigma}_q^{-1/2} + \boldsymbol{E}\,\widehat{\Sigma}_q^{-1/2}$
   - Sélection de variables par procédure Lasso
   - *Stability selection*

Estimation de $\boldsymbol{\Sigma}_q^{-1/2}$ dans le cas d'un AR(1)

$$\forall i \in \{1, \ldots, n\},\ \forall t \in \mathbb{Z},\ E_{i,t} - \phi_1 E_{i,t-1} = W_{i,t},$$
$$\text{avec } (W_{i,t})_t \sim BB(0, \sigma^2),\ |\phi_1| < 1.$$

Dans ce cas :

$$\boldsymbol{\Sigma}_q^{-1/2} = \begin{pmatrix} \sqrt{1-\phi_1^2} & -\phi_1 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & 1 & -\phi_1 & \cdots & 0 \\ 0 & 0 & \ddots & \ddots & \vdots \\ \vdots & \vdots & \ddots & \ddots & -\phi_1 \\ 0 & 0 & \cdots & 0 & 1 \end{pmatrix}.$$

Estimateur de ϕ_1 : $\widehat{\phi_1} = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^{n} \widehat{\phi_1^{(i)}}$

où $\widehat{\phi_1^{(i)}}$: estimateur de Yule-Walker de ϕ_1 obtenu à partir de la $i$ème ligne de $\widehat{\boldsymbol{E}}$.

Estimation de $\boldsymbol{\Sigma}_q^{-1/2}$ dans le cas "Toeplitz"

$\forall i \in \{1, \ldots, n\}$, on modélise $(E_{i,1}, \ldots, E_{i,q})$ comme un processus stationnaire.
Dans ce cas :

$$\boldsymbol{\Sigma_q} = \begin{pmatrix} \gamma(0) & \gamma(1) & \cdots & \gamma(q-1) \\ \gamma(1) & \gamma(0) & \cdots & \gamma(q-2) \\ \vdots & & & \\ \gamma(q-1) & \gamma(q-2) & \cdots & \gamma(0) \end{pmatrix},$$

$$\text{Estimateur de } \gamma(h) \ : \quad \widehat{\gamma}(h) = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^{n} \widehat{\gamma}_i(h),$$

où $\widehat{\gamma}_i(h)$ est un estimateur de la fonction d'auto-covariance du processus stationnaire $(E_{i,t})_t$ en h.

Estimation de B et sélection de variables

Approche de type LASSO

- Dans le cas d'un modèle univarié : $\mathcal{Y} = \mathcal{X}\mathcal{B} + \mathcal{E}$ le critère LASSO pour estimer $\mathcal{B}$ est

$$\widehat{\mathcal{B}}(\lambda) = \text{Argmin}_{\mathcal{B}} \left\{ \|\mathcal{Y} - \mathcal{X}\mathcal{B}\|_2^2 + \lambda \|\mathcal{B}\|_1 \right\}.$$

- On vectorise le modèle blanchi : $\boldsymbol{Y}\widehat{\boldsymbol{\Sigma}}_q^{-1/2} = \boldsymbol{X}\boldsymbol{B}\widehat{\boldsymbol{\Sigma}}_q^{-1/2} + \boldsymbol{E}\,\widehat{\boldsymbol{\Sigma}}_q^{-1/2}$

$$\begin{aligned}
\mathcal{Y} &= vec(\boldsymbol{Y}\widehat{\boldsymbol{\Sigma}}_q^{-1/2}) = vec(\boldsymbol{X}\boldsymbol{B}\widehat{\boldsymbol{\Sigma}}_q^{-1/2}) + vec(\boldsymbol{E}\widehat{\boldsymbol{\Sigma}}_q^{-1/2}) \\
&= ((\widehat{\boldsymbol{\Sigma}}_q^{-1/2})' \otimes \boldsymbol{X})vec(\boldsymbol{B}) + vec(\boldsymbol{E}\widehat{\boldsymbol{\Sigma}}_q^{-1/2}) \\
&= \mathcal{X}\mathcal{B} + \mathcal{E}.
\end{aligned}$$

Résultat Théorique

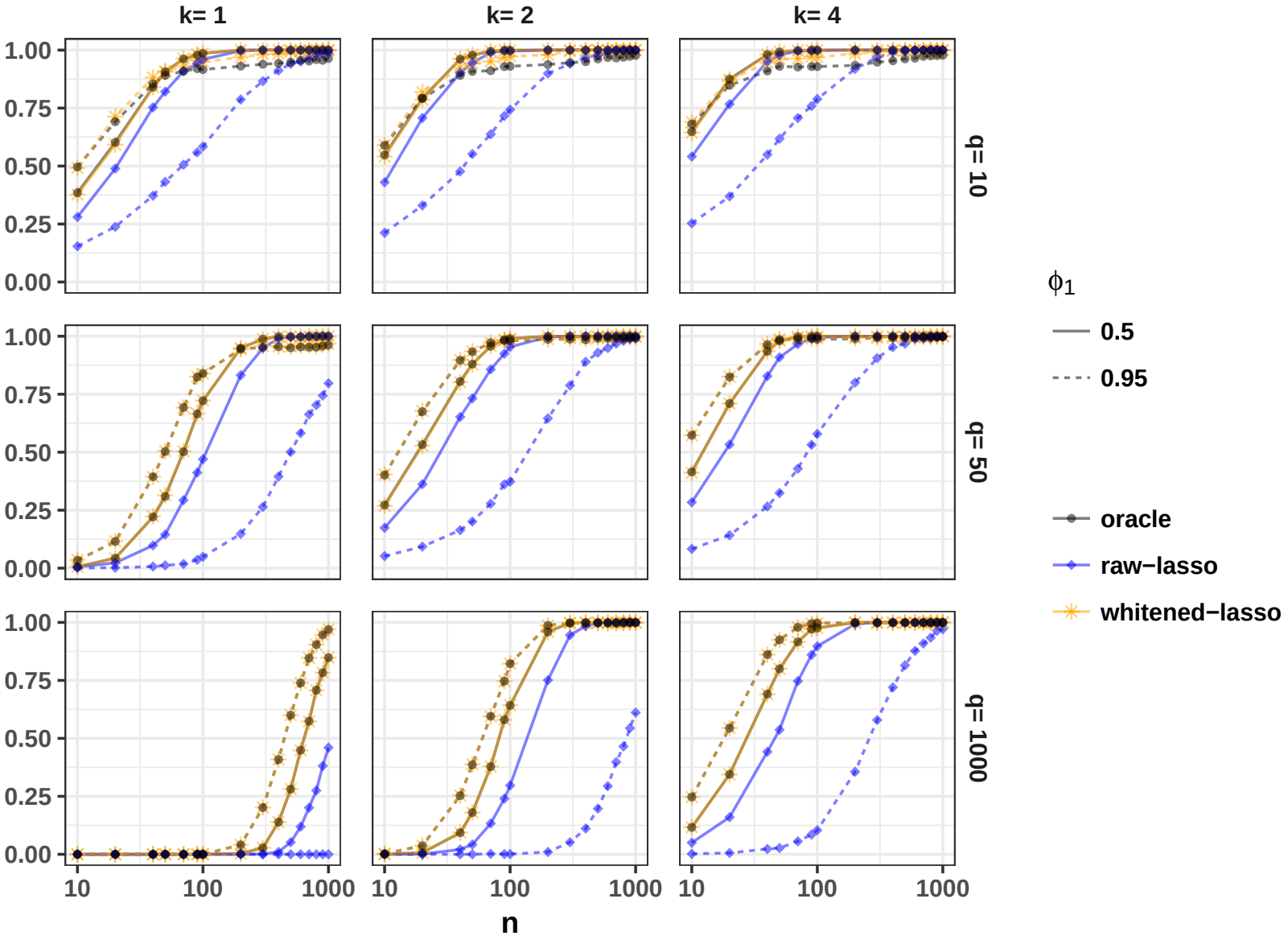
Théorème : Si les conditions suivantes sont respectées

1. $|J| = O(q^{c_1})$
2. $q^{c_2} \min_{j \in J} |\mathcal{B}_j| \geq M_3$.
3. $\|\Sigma^{-1} - \widehat{\Sigma}^{-1}\|_\infty = O_P((nq)^{-1/2})$
4. $\rho(\Sigma - \widehat{\Sigma}) = O_P((nq)^{-1/2})$
5. $q = q_n = o\left(n^{\frac{1}{2(c_1+c_2)}}\right) = o(n^k)$ où $c_1 + c_2 = \frac{1}{2k}$, $\frac{\lambda}{\sqrt{n}} \to \infty$ and $\frac{\lambda}{n} = o\left(q^{-(c_1+c_2)}\right)$, as $n \to \infty$,

alors,

$$\mathbb{P}\left(\text{sign}(\widehat{\mathcal{B}}(\lambda)) = \text{sign}(\mathcal{B})\right) \to 1, \text{ as } n \to \infty.$$

Vrai support : Simulation numérique

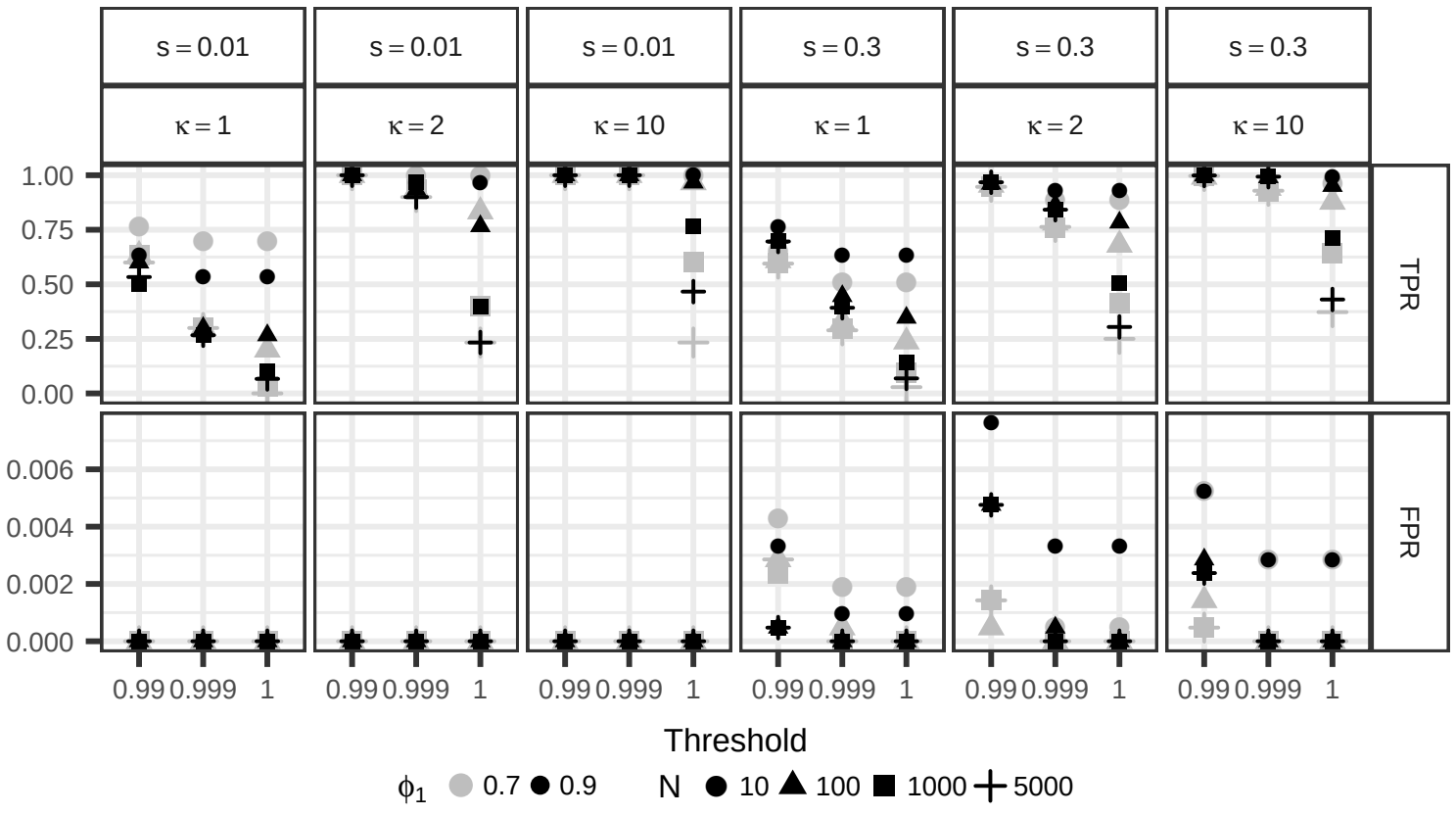


Choix de λ en pratique

- On divise le jeu de donnée en 10 groupes
- Appelons k l'échantillon à qui on retire le k^{iem} groupe. Pour chaque échantillon :
  - Calcul λ_{CV}
  - Stability selection $\rightarrow (N_i^k)_{1 \leq i \leq n}$: le nombre de fois ou chaque variable a été sélectionnée dans cet échantillon k
- $N_i = \sum_{i=1}^{10} N_i^k / 10$
- On garde les variables i tel que $N_i >$ seuil

Implémenté dans un package R **MultiVarSel**

Choix du seuil en pratique



Conclusion et Perspectives

- Bonnes performances d'un point de vue pratique et théorique de notre méthode
- Performances similaires voire meilleures que les méthodes existantes

Conclusion et Perspectives

- Bonnes performances d'un point de vue pratique et théorique de notre méthode
- Performances similaires voire meilleures que les méthodes existantes
- Travaux en cours
  - Utilisation d'autres types de structures de dépendance pour Σ_q
  - En pratique : Généralisation à d'autres matrices de design

Références

- M. Perrot-Dockès et al. “A multivariate variable selection approach for analyzing LC-MS metabolomics data”, arXiv :1704.00076.
- M. Perrot-Dockès et al. “Variable selection in multivariate linear models with high-dimensional covariance matrix estimation”, arXiv :1707.04145
- Package R **MultiVarSel** sur le CRAN

Merci pour votre attention !