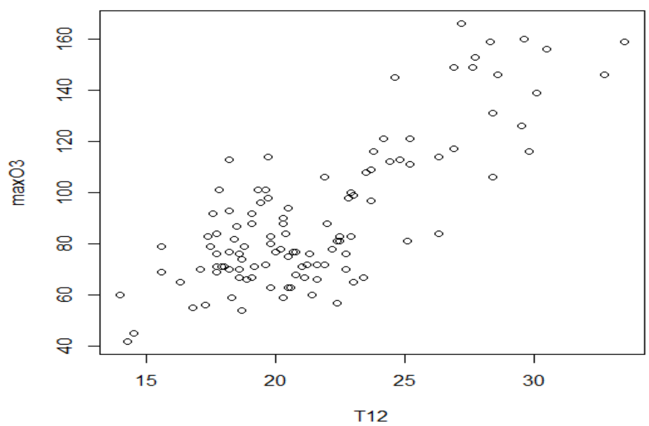
Exemple de régression linéaire simple et multiple, régression logarithmique et exponentielle, régression polynomiale

Régression linéaire simple

Dans cette partie nous allons utiliser la base de données ozone que vous pouvez importer à partir du lien suivant : https://r-stat-sc-donnees.github.io/ozone.txt

On peut représenter graphiquement le nuage de points maxO3 en fonction de T12 :

```
> plot(maxO3~T12, data=ozone)
```



Ce nuage de points nous fait penser à un alignement selon une forme qui n'est pas très loin d'une droite.

```
> reg_simp <- lm(maxO3~T12, data=ozone)
> reg_simp

Call:
lm(formula = maxO3 ~ T12, data = ozone)

Coefficients:
(Intercept)          T12
    -27.420        5.469

>
```

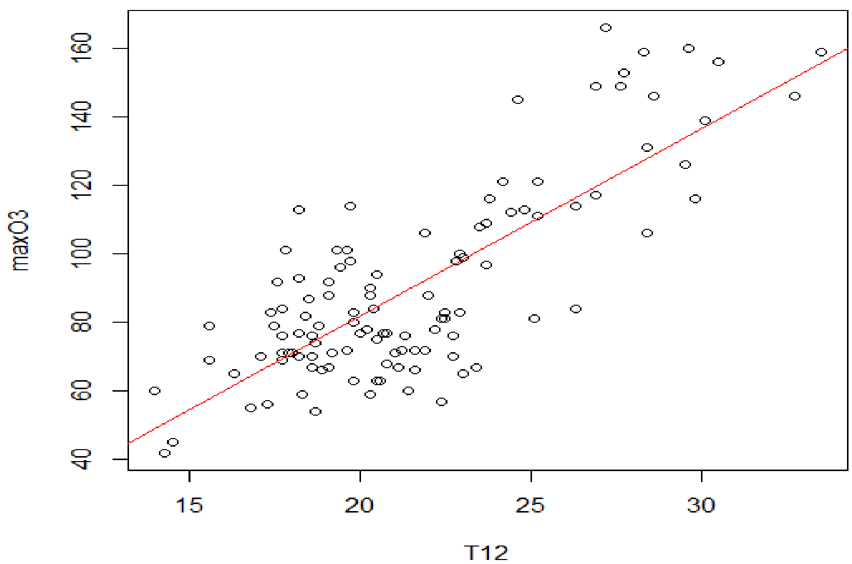
Pour plus de détail :

```
> summary(reg_simp)

Call:
lm(formula = maxO3 ~ T12, data = ozone)

Residuals:
    Min      1Q  Median      3Q     Max
-38.079 -12.735   0.257  11.003  44.671

Coefficients:
            Estimate Std. Error t value Pr(>|t|)
```

```
(Intercept) -27.4196     9.0335  -3.035    0.003 **
T12           5.4687     0.4125  13.258   <2e-16 ***
---
Signif. codes:  0 '***' 0.001 '**' 0.01 '*' 0.05 '.' 0.1 ' ' 1

Residual standard error: 17.57 on 110 degrees of freedom
Multiple R-squared:  0.6151,    Adjusted R-squared:  0.6116
F-statistic: 175.8 on 1 and 110 DF,  p-value: < 2.2e-16

>
```

Pour tracer la droite de régression linéaire :

```
> abline(reg_simp , col ="red")
```



Selon ce modèle de régression linéaire, prévoyons la concentration en ozone d'une journée. Sachant que la température prévue de cette journée est de T12 = 19 °C :

```
> a_prevoir <- data.frame(T12=19)
> maxO3_prev <- predict(reg_simp,a_prevoir)
> round(maxO3_prev, digits=2)
    1
76.49
>
```

Régression linéaire multiple

Nous allons utiliser la même base de données ozone. Dans cette partie nous allons chercher à expliquer maxO3 en fonction des autres variables quantitatives. En utilisant la fonction lm(), nous allons chercher le modèle de régression multiple de maxO3 en fonction des autres variable qualitatives.

```
> reg_multi <- lm(maxO3~T9+T12+T15+Ne9+Ne12+Ne15+maxO3v, data=ozone)
> summary(reg_multi)
```

```
Call:
lm(formula = maxO3 ~ T9 + T12 + T15 + Ne9 + Ne12 + Ne15 + maxO3v,
    data = ozone)

Residuals:
    Min      1Q  Median      3Q     Max
-57.768  -7.845  -1.359   8.134  38.984

Coefficients:
            Estimate Std. Error t value Pr(>|t|)
(Intercept) 12.70548   13.10860   0.969  0.33467
T9          -0.63596    1.03462  -0.615  0.54011
T12          2.50600    1.39946   1.791  0.07625 .
T15          0.71381    1.13674   0.628  0.53142
Ne9         -2.76057    0.89157  -3.096  0.00252 **
Ne12        -0.37193    1.34590  -0.276  0.78283
Ne15         0.09028    0.99934   0.090  0.92819
maxO3v       0.37774    0.06121   6.171 1.32e-08 ***
---
Signif. codes:  0 '***' 0.001 '**' 0.01 '*' 0.05 '.' 0.1 ' ' 1

Residual standard error: 14.43 on 104 degrees of freedom
Multiple R-squared:  0.7546,    Adjusted R-squared:  0.738
F-statistic: 45.68 on 7 and 104 DF,  p-value: < 2.2e-16

>
```

On constate ici que certains paramètres ne sont pas significativement différents de 0, car leur p-valeur (la valeur indiquée par : Pr(>|t|)) n'est pas inférieure à 5 %, le niveau de test que nous souhaitons.

Le R^2 (`Multiple R-squared`) vaut environ 0.75, et le R^2 ajusté est d'environ 0.74.

Cette valeur est plus élevée qu'en régression linéaire simple, et c'est logique, car lorsque l'on rajoute des variables explicatives potentielles, on accroît naturellement la valeur de ces R^2.

Retirez les variables non significatives

On va maintenant retirer les variables non significatives. On commence par la moins significative, c’est-à-dire la variable qui a la p-valeur la plus grande. Dans notre exemple c’est la variable Ne15, car elle a une p-valeur de presque 0.93.

```
> reg_multi = lm(maxO3~T9+T12+T15+Ne9+Ne12+maxO3v,data=ozone)#Ne15 est retirée du model
> summary(reg_multi)

Call:
lm(formula = maxO3 ~ T9 + T12 + T15 + Ne9 + Ne12 + maxO3v, data = ozone)

Residuals:
    Min      1Q  Median      3Q     Max
-57.689  -7.796  -1.447   8.147  38.929

Coefficients:
            Estimate Std. Error t value Pr(>|t|)
(Intercept) 12.84916   12.95015   0.992  0.32338
T9          -0.62976    1.02745  -0.613  0.54124
T12          2.56018    1.25841   2.034  0.04443 *
T15          0.65787    0.94878   0.693  0.48960
Ne9         -2.76526    0.88585  -3.122  0.00232 **
```

```
Ne12         -0.30796    1.13912  -0.270  0.78742
maxO3v        0.37752    0.06087   6.202 1.12e-08 ***
---
Signif. codes:  0 '***' 0.001 '**' 0.01 '*' 0.05 '.' 0.1 ' ' 1

Residual standard error: 14.36 on 105 degrees of freedom
Multiple R-squared:  0.7545,    Adjusted R-squared:  0.7405
F-statistic:  53.8 on 6 and 105 DF,  p-value: < 2.2e-16

>
```

On voit maintenant que Ne12 est la moins significative (avec une p-valeur de 0.79). On l'enlève donc.

```
> reg_multi <- lm(maxO3~T9+T12+T15+Ne9+maxO3v,data=ozone)
> summary(reg_multi)

Call:
lm(formula = maxO3 ~ T9 + T12 + T15 + Ne9 + maxO3v, data = ozone)

Residuals:
    Min      1Q  Median      3Q     Max
-57.246  -7.607  -1.295   8.285  38.477

Coefficients:
            Estimate Std. Error t value Pr(>|t|)
(Intercept) 11.28440   11.53397   0.978   0.3301
T9          -0.73127    0.95218  -0.768   0.4442
T12          2.66487    1.19211   2.235   0.0275 *
T15          0.66817    0.94386   0.708   0.4806
Ne9         -2.92578    0.65451  -4.470 1.97e-05 ***
maxO3v       0.37960    0.06012   6.314 6.48e-09 ***
---
Signif. codes:  0 '***' 0.001 '**' 0.01 '*' 0.05 '.' 0.1 ' ' 1

Residual standard error: 14.3 on 106 degrees of freedom
Multiple R-squared:  0.7544,    Adjusted R-squared:  0.7428
F-statistic: 65.11 on 5 and 106 DF,  p-value: < 2.2e-16

>
```

On constate maintenant qu'il faut retirer la variable T9.

```
> reg_multi <- lm(maxO3~T12+T15+Ne9+maxO3v,data=ozone)
> summary(reg_multi)

Call:
lm(formula = maxO3 ~ T12 + T15 + Ne9 + maxO3v, data = ozone)

Residuals:
    Min      1Q  Median      3Q     Max
-56.068  -7.767  -1.605   8.446  40.187

Coefficients:
            Estimate Std. Error t value Pr(>|t|)
(Intercept)  9.13680   11.16838   0.818   0.4151
T12          2.23175    1.04826   2.129   0.0355 *
T15          0.62772    0.94058   0.667   0.5060
Ne9         -2.96393    0.65137  -4.550 1.42e-05 ***
```

```
maxO3v       0.37019    0.05875   6.301 6.71e-09 ***
---
Signif. codes:  0 '***' 0.001 '**' 0.01 '*' 0.05 '.' 0.1 ' ' 1

Residual standard error: 14.27 on 107 degrees of freedom
Multiple R-squared:  0.753,     Adjusted R-squared:  0.7438
F-statistic: 81.55 on 4 and 107 DF,  p-value: < 2.2e-16
```

On retire ensuite T15

```
> reg_multi <- lm(maxO3~T12+Ne9+maxO3v,data=ozone)
> summary(reg_multi)

Call:
lm(formula = maxO3 ~ T12 + Ne9 + maxO3v, data = ozone)

Residuals:
    Min      1Q  Median      3Q     Max
-56.385  -7.872  -1.941   7.899  41.513

Coefficients:
            Estimate Std. Error t value Pr(>|t|)
(Intercept)  9.76225   11.10038   0.879    0.381
T12          2.85308    0.48052   5.937 3.57e-08 ***
Ne9         -3.02423    0.64342  -4.700 7.71e-06 ***
maxO3v       0.37571    0.05801   6.477 2.85e-09 ***
---
Signif. codes:  0 '***' 0.001 '**' 0.01 '*' 0.05 '.' 0.1 ' ' 1

Residual standard error: 14.23 on 108 degrees of freedom
Multiple R-squared:  0.752,     Adjusted R-squared:  0.7451
F-statistic: 109.1 on 3 and 108 DF,  p-value: < 2.2e-16

>
```

On remarque qu'à présent, tous les paramètres sont significatifs. Quant au R^2, il vaut environ 0.75, tout comme le R^2 ajusté. On peut donc utiliser ce modèle à des fins de prévision.

Si l'on souhaite prévoir la concentration journalière en ozone, sachant que la température prévue à 12 h sera de 15 °C, que la valeur de Ne9 sera de 2, et que la concentration maxO3v de la veille vaut 100, alors on saisit les lignes suivantes :

```
> a_prevoir <- data.frame(T12=15,Ne9=2,maxO3v=100)
> a_prevoir
  T12 Ne9 maxO3v
1  15   2    100
> maxO3_prev <- predict(reg_multi,a_prevoir)
> maxO3_prev
       1
84.08126
> round(maxO3_prev, digits=2)
    1
84.08
>
```

On obtient une concentration maxO3 de 84.

Régression exponentiel

L'objectif d'un "procédé en batch" de génie fermentaire est de déterminer les caractéristiques cinétiques d'un microorganisme en particulier son taux de croissance µ. Pour cela, on va ensemencer un bioréacteur avec (entre autre) une certaine concentration de microorganismes et de substrat dont on va mesurer l'évolution au cours du temps. Des mesures de densité optique seront régulièrement effectuées à l'aide d'un spectrophotomètre. Les échantillons prélevés seront dilués afin de rester dans la zone de linéarité du spectrophotomètre, zone pour laquelle la densité optique est proportionnelle à la concentration. Après différentes calibrations, on a obtenu les concentrations suivantes :

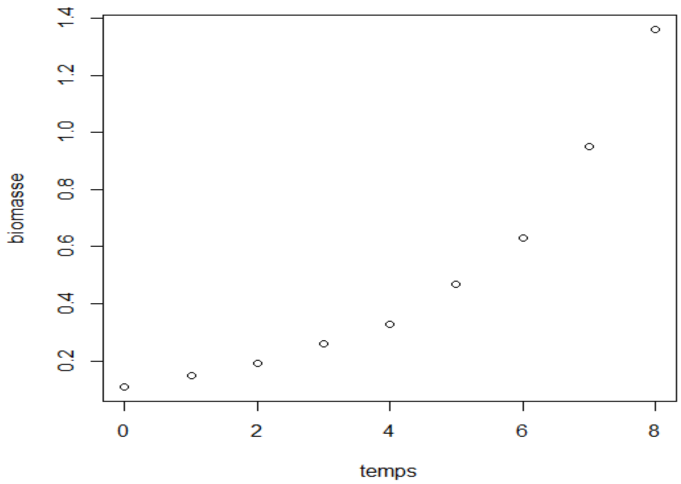
Temps t_i (h)	*Biomasse x_i (g/L)*
0	*0,11*
1	*0,15*
2	*0,19*
3	*0,26*
4	*0,33*
5	*0,47*
6	*0,63*
7	*0,95*
8	*1,36*

Nous allons d'abord créer une base de données data comportant les données à traiter :

```
> temps =  0:8
> biomasse = c(0.11 , 0.15 , 0.19 , 0.26 , 0.33 , 0.47 , 0.63 , 0.95 , 1.36)
> data = data.frame(temps, biomasse)
> data
  temps biomasse
1     0     0.11
2     1     0.15
3     2     0.19
4     3     0.26
5     4     0.33
6     5     0.47
7     6     0.63
8     7     0.95
9     8     1.36
>
```

Ensuite nous allons afficher le nuage de points de biomasse de fonction du temps

```
> plot(biomasse ~ temps, data=data)
```



Il est clair qu'il s'agit d'une régression exponentielle. Pour trouver le model de cette régression nous allons appliquer la fonction lm() à log(biomasse) et temps :

```
> reg_exp = lm (log(biomasse) ~ temps, data = data)
> reg_exp

Call:
lm(formula = log(biomasse) ~ temps, data = data)

Coefficients:
(Intercept)        temps
    -2.2593       0.3098
```

Pour plus de détail :

```
> summary(reg_exp)

Call:
lm(formula = log(biomasse) ~ temps, data = data)

Residuals:
     Min       1Q    Median       3Q      Max
-0.08847 -0.04460 -0.01712  0.05198  0.08861

Coefficients:
             Estimate Std. Error t value Pr(>|t|)
(Intercept) -2.259256   0.039685  -56.93 1.35e-10 ***
temps        0.309766   0.008336   37.16 2.66e-09 ***
---
Signif. codes:  0 '***' 0.001 '**' 0.01 '*' 0.05 '.' 0.1 ' ' 1

Residual standard error: 0.06457 on 7 degrees of freedom
Multiple R-squared:  0.995,     Adjusted R-squared:  0.9942
F-statistic:  1381 on 1 and 7 DF,  p-value: 2.656e-09
```

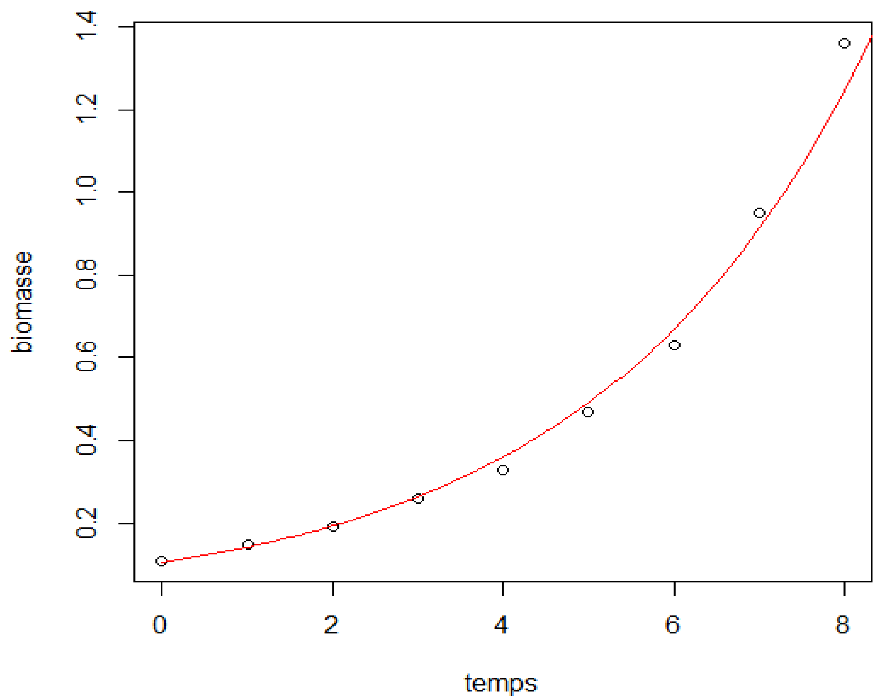
Selon ce model :

$$Biomasse = \alpha * e^{\beta * temps}$$

Avec : $\alpha = e^{-2.259256}$ et $\beta = 0.309766$

Pour tracer la courbe de régression :

```
> alfa = exp(coef(reg_exp)[1])
> beta = coef(reg_exp)[2]
> curve(alfa*exp(beta*x) , from=0 , to=10, col = "red", add = TRUE)
```



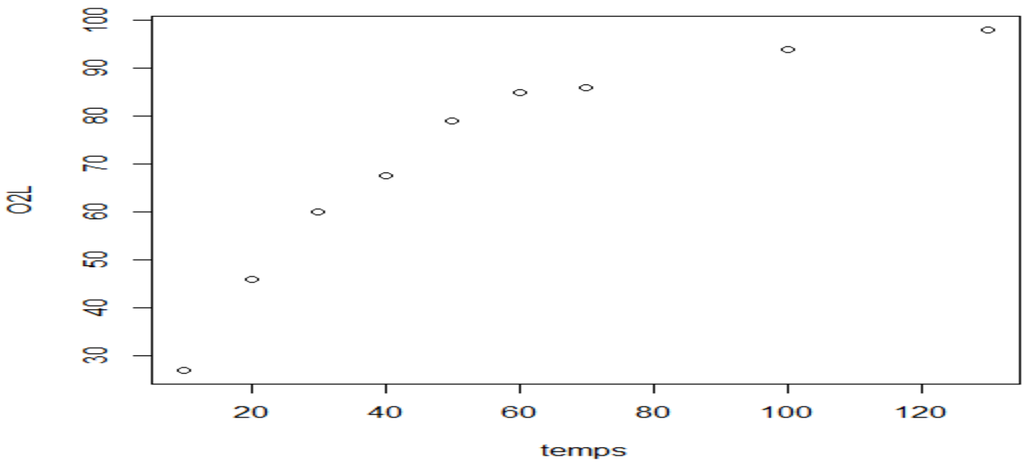
Régression logarithmique

La capacité d'oxygénation d'un fermenteur (O2L) est déterminée en suivant la cinétique de transfert d'oxygène en absence de microorganismes selon le tableau suivant :

t_i *temps (s)*	*10*	*20*	*30*	*40*	*50*	*60*	*70*	*100*	*130*
O_{2L_i} (mgl^{-1})	*27*	*46*	*60*	*67,5*	*79*	*85*	*86*	*94*	*98*

Tracer le nuage de point de $O2L_i$ en fonction du temps

```
> temps = c(10, 20, 30, 40, 50, 60, 70, 100, 130)
> O2L = c(27, 46, 60, 67.5, 79, 85, 86, 94, 98)
> plot(temps, O2L)
>
```



Il est clair qu'il s'agit d'une régression logarithmique. Pour trouver le model de cette régression nous allons appliquer la fonction lm() à exp(O2L) et temps :

```
> reg_log = lm(O2L ~ log(temps))
> reg_log

Call:
lm(formula = O2L ~ log(temps))

Coefficients:
(Intercept)   log(temps)
     -38.98        29.12

> summary(reg_log)

Call:
lm(formula = O2L ~ log(temps))

Residuals:
    Min      1Q  Median      3Q     Max
-4.7431 -1.1041 -0.9254  1.2809  4.7691

Coefficients:
            Estimate Std. Error t value Pr(>|t|)
(Intercept)  -38.980      5.454  -7.147 0.000186 ***
log(temps)    29.116      1.411  20.634 1.58e-07 ***
---
Signif. codes:  0 '***' 0.001 '**' 0.01 '*' 0.05 '.' 0.1 ' ' 1

Residual standard error: 3.202 on 7 degrees of freedom
Multiple R-squared:  0.9838,    Adjusted R-squared:  0.9815
F-statistic: 425.8 on 1 and 7 DF,  p-value: 1.576e-07

>
```

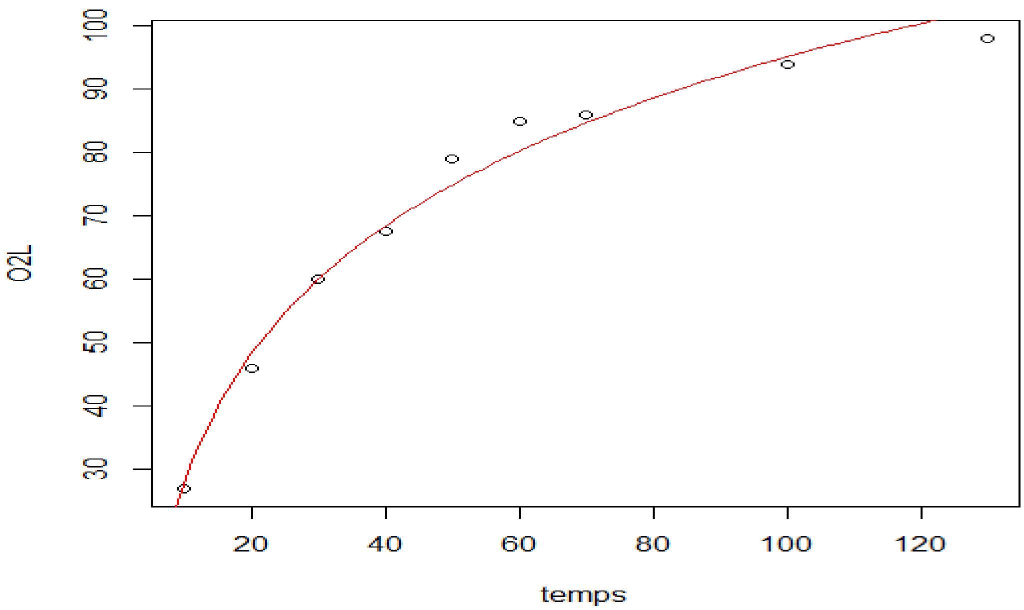
Selon ce model :

$$O2L = a + b * \log(\text{temps})$$

Avec : $a = -38.980$ et $b = 29.116$

Pour tracer la courbe de régression :

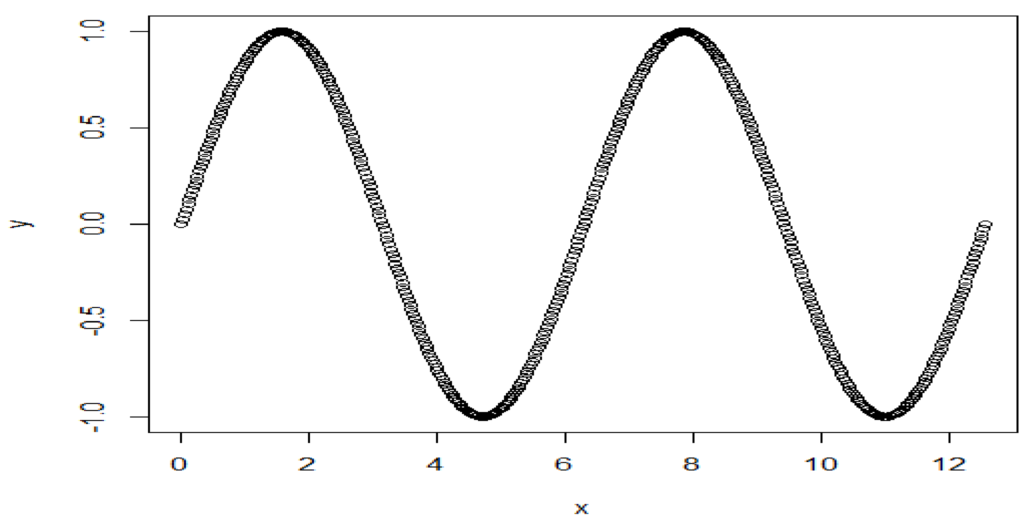
```
> a=reg_log$coef[1]
> b=reg_log$coef[2]
> curve(a+ b*log(x) , from=0 , to=140, col = "red", add = TRUE)
```



Régression polynomiale

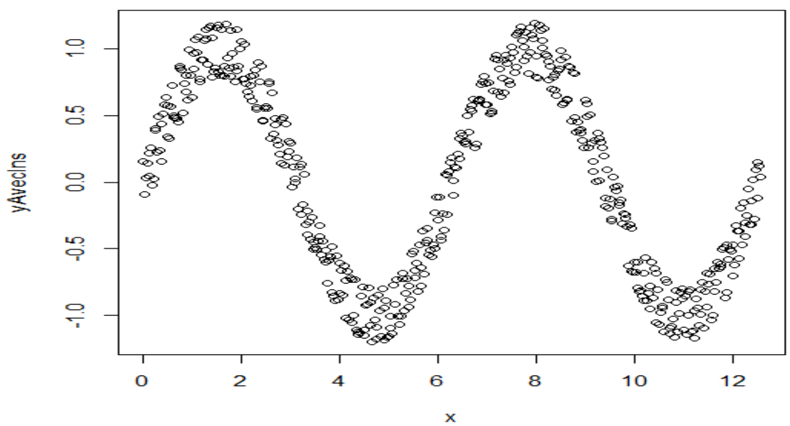
Dans cette partie nous allons présenter un modèle de régression polynomiale. Pour cela nous allons créer le nuage de points suivant :

```
> x= seq(0, 4*pi, length=500)
> y=sin(x)
>
> plot(x,y)
```



Pour avoir un nuage de point qui ressemble à des données expérimentales nous allons ajouter un brui (une incertitude)

```
> yIns= sample(y/5, 500)
> yAvecIns = y + yIns
> plot(x,yAvecIns)
```



Il est clair qu'il s'agit d'une régression polynomiale

Nous allons chercher un polynôme de régression de degré 5 parce que le nuage de points à 2 max locaux et 2 min locaux

```
> reg_poly = lm(yAvecIns ~ x + I(x^2) + I(x^3) + I(x^4) + I(x^5))
> reg_poly

Call:
lm(formula = yAvecIns ~ x + I(x^2) + I(x^3) + I(x^4) + I(x^5))

Coefficients:
(Intercept)            x       I(x^2)       I(x^3)       I(x^4)       I(x^5)
  -0.614740     3.578164    -2.292867     0.510208    -0.046465     0.001483

> summary(reg_poly)

Call:
lm(formula = yAvecIns ~ x + I(x^2) + I(x^3) + I(x^4) + I(x^5))

Residuals:
    Min      1Q  Median      3Q     Max
-0.6832 -0.1991  0.0109  0.1986  0.7707

Coefficients:
              Estimate Std. Error t value Pr(>|t|)
(Intercept) -0.6147404  0.0694442  -8.852   <2e-16 ***
x            3.5781644  0.1120601  31.931   <2e-16 ***
I(x^2)      -2.2928670  0.0553980 -41.389   <2e-16 ***
I(x^3)       0.5102078  0.0111900  45.595   <2e-16 ***
I(x^4)      -0.0464647  0.0009820 -47.314   <2e-16 ***
I(x^5)       0.0014828  0.0000311  47.677   <2e-16 ***
---
Signif. codes:  0 '***' 0.001 '**' 0.01 '*' 0.05 '.' 0.1 ' ' 1

Residual standard error: 0.2633 on 494 degrees of freedom
```

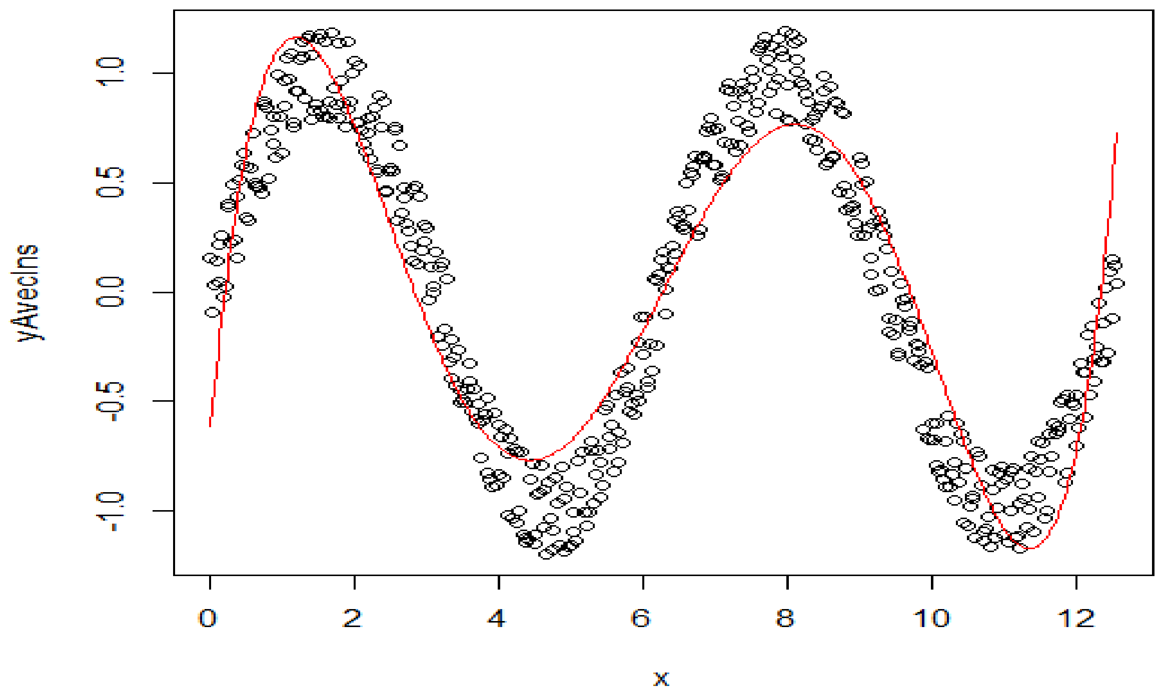
```
Multiple R-squared:  0.8687,    Adjusted R-squared:  0.8674
F-statistic: 653.7 on 5 and 494 DF,  p-value: < 2.2e-16

>
```

Selon ce model

$$y = -0.6147404 + 3.5781644x - 2.2928670x^2 + 0.5102078x^3 - 0.0464647x^4 + 0.0014828x^5$$

Pour tracer la courbe de régression :

```
> lines (x, fitted(reg_poly) , col = "red" )
```



Un Autre exemple de régression polynomial

Création des données (vecteurs X et Y)

```
> x=seq(0,100)
> X=sample(x,100, rep = T)
> X=sample(X,100, rep = T)
> X=sample(X,100, rep = T)

> y=sin(X*pi/50)
> Y=5*y+rnorm(100)
> plot(X,Y)
```

Création du model polynomial

```
> model = lm(Y ~ X + I(X^2)+ I(X^3)+ I(X^4)+ I(X^5))

> beta = coef(model)

> curve(beta[1] + beta[2]*x + beta[3]*x^2 + beta[4]*x^3 + beta[5]*x^4 +
beta[6]*x^5 , col = "red", add = T)
```