Chapitre II Régression linéaire multiple

Licence 3 MIASHS - Université de Bordeaux

Marie Chavent

◆□▶ ◆□▶ ◆■▶ ◆■▶ ● かへで

Chapitre 2

Régression linéaire multiple

1/40

Un exemple

On cherche à modéliser la relation entre poids des bébés à naissance et l'âge, le poids et le statut tabagique de la mère durant la grossesse. On pose :

- y = poids de naissance en grammes (bwt),
- x_1 = âge de la mère (age),
- x_2 = poids de la mère en kilos (weight),
- x_3 = statut tabagique de la mère pendant la grossesse (smoke) codée 1=oui et 0=non.

On suppose que cette relation est linéaire de la forme :

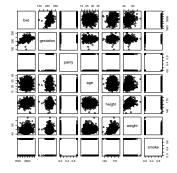
$$y = \beta_0 + \beta_1 x_1 + \beta_2 x_2 + \beta_3 x_3$$

- On veut estimer cette relation avec un modèle de régression multiple.
- On utilise un échantillon de n = 1174 naissances pour lesquelles le poids du bébé, l'âge, le poids et le statut tabagique de la mère, ont été mesurés.

```
load("poids.RData")
print(data[1:5,c("bwt","age","weight","smoke")],digits=4)

## bwt age weight smoke
## 1 3402 27 45.36 0
## 2 3203 33 61.23 0
## 3 3629 28 52.16 1
## 4 3062 23 56.70 1
## 5 3856 25 42.18 0
```

```
pairs(data) #diagrammes de dispersion
```



```
modele <- lm(bwt~ age+weight+smoke,data=data)
modele$coefficients

## (Intercept) age weight smoke
## 3050.56238 -0.91802 7.90266 -254.25425</pre>
```

◆□▶ ◆□▶ ◆■▶ ◆■▶ ● かへで

Chapitre 2

Régression linéaire multiple

3/40

1. Le modèle

On cherche à modéliser la relation entre plus de 2 variables quantitatives.

Un modèle de régression linéaire multiple est de la forme suivante :

$$y = \beta_0 + \sum_{j=1}^{p} \beta_j x_j + \varepsilon$$
 (1)

où:

- y est la variable à expliquer (à valeurs dans \mathbb{R});
- x_1, \ldots, x_p sont les variables explicatives (à valeurs dans \mathbb{R});
- ε est le terme d'erreur aléatoire du modèle;
- $\beta_0, \beta_1, \dots, \beta_p$ sont les paramètres à estimer.

Commentaires:

- La désignation "multiple" fait référence au fait qu'il y a plusieurs variables explicatives x_j pour expliquer y.
- La désignation "linéaire" correspond au fait que le modèle (1) est linéaire.

Pour *n* observations, on peut écrire le modèle de régression linéaire multiple sous la forme :

$$y_i = \beta_0 + \sum_{j=1}^p \beta_j x_{ij} + \varepsilon_i$$
 pour $i = 1, \dots, n$. (2)

Dans ce chapitre, on suppose que :

- ε_i est une variable *aléatoire*, non observée,
- x_{ij} est observé et non aléatoire,
- y_i est observé et *aléatoire*.

On fait les trois hypothèses additionnelles suivantes :

(A1)
$$\mathbb{E}[\varepsilon_i] = 0$$
, $\forall i = 1, ..., n$,
ou de manière équivalente :
 $\mathbb{E}[y_i] = \beta_0 + \sum_{j=1}^p \beta_j x_{ij}$, $\forall i = 1, ..., n$.

Commentaire sur l'hypothèse (A1) : elle indique que les erreurs sont centrées



Chapitre 2

Régression linéaire multiple

5/40

(A2)
$$\mathbb{V}(\varepsilon_i) = \sigma^2$$
, $\forall i = 1, ..., n$, ou de manière équivalente : $\mathbb{V}(y_i) = \sigma^2$, $\forall i = 1, ..., n$.

Commentaires sur l'hypothèse (A2) :

- On parle d'hypothèse d'homoscédasticité (\simeq homogénéité des variances).
- Cette variance σ^2 est un paramètre du modèle qu'il faudra estimer.
- (A3) $Cov(\varepsilon_i, \varepsilon_{i'}) = 0, \forall i \neq i'$ ou de manière équivalente : $Cov(y_i, y_{i'}) = 0, \forall i \neq i'$.

Commentaire sur l'hypothèse (A3) :

- Sous cette hypothèse, les termes d'erreur ε_i sont non corrélés.

On peut écrire matriciellement le modèle (2) de la manière suivante :

$$Y = X\beta + \epsilon \tag{3}$$

οù

$$Y = \begin{pmatrix} y_1 \\ y_2 \\ \vdots \\ y_n \end{pmatrix}, \quad X = \begin{pmatrix} 1 & x_{11} & \dots & x_{1p} \\ 1 & x_{21} & \dots & x_{2p} \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ 1 & x_{n,1} & \dots & x_{np} \end{pmatrix}, \quad \beta = \begin{pmatrix} \beta_0 \\ \beta_1 \\ \vdots \\ \beta_p \end{pmatrix}, \quad \text{et} \quad \epsilon = \begin{pmatrix} \varepsilon_1 \\ \varepsilon_2 \\ \vdots \\ \varepsilon_n \end{pmatrix}.$$

- Y désigne le vecteur à expliquer de taille n,
- X la matrice explicative de taille $n \times (p+1)$,
- ϵ le vecteur d'erreurs de taille n.

Exercice : Touver X et Y pour les données sur les appartements.



Chapitre 2

Régression linéaire multiple

7/40

Les hypothèses peuvent alors s'écrire sous forme matricielle :

(A1')
$$\mathbb{E}(\epsilon) = 0_n$$
 ou de manière équivalente : $\mathbb{E}(Y) = X\beta \in \mathbb{R}^n$.

(A2')
$$\mathbb{V}(\epsilon) = \sigma^2 I_n$$

ou de manière équivalente : $\mathbb{V}(Y) = \sigma^2 I_n$.

Dans la suite de ce chapitre, on suppose que

$$n > (p+1)$$
 et rang $(X) = p+1$

On a donc plus d'observations que de variables et il n'existe pas de liaison linéaire entre les variables explicatives x_i c'est à dire pas de multicolinéarité.

Remarque.

Il est important de bien faire la différence entre

- l'expression $\mathbb{E}(y_i) = \beta_0 + \sum_{j=1}^p \beta_j x_{ij}$ (qui désigne l'espérance d'une variable aléatoire scalaire), et l'expression $\mathbb{E}(Y) = X\beta$ (qui désigne l'espérance d'une variable aléatoire vectorielle) : on obtient dans un cas un scalaire, dans l'autre cas un vecteur de \mathbb{R}^n .
- l'expression $\mathbb{V}(y_i) = \sigma^2$ (qui désigne la variance d'une variable aléatoire scalaire), et l'expression $\mathbb{V}(Y) = \sigma^2 I_n$ (qui désigne la covariance d'une variable aléatoire vectorielle) : on obtient dans un cas un scalaire (σ^2) , dans l'autre cas une matrice carrée $(\sigma^2 I_n)$ de dimension $n \times n$.



Chapitre 2

Régression linéaire multiple

9/40

2. Estimation des paramètres $\beta_0, \beta_1, \dots, \beta_p$, et σ^2

A partir de l'echantillon (aléatoire) de n observations

$$\{(x_{i1},\ldots,x_{ip},y_i),\ i=1,\ldots,n\},\$$

on veut estimer les paramètres

$$\beta_0, \beta_1, \ldots, \beta_p$$
 et σ^2 .

- Pour estimer $\beta = (\beta_0, \beta_1, \dots, \beta_p)$, on peut utiliser la méthode des moindres carrés qui ne nécessite pas d'hypothèse supplémentaire sur la distribution de ε_i , contrairement à la méthode du maximum de vraisemblance qui est fondée sur la normalité de ε_i .
- La méthode des moindres carrés ne fournit pas un estimateur de σ^2 .

Estimation de β par les moindres carrés

On cherche $\widehat{\beta} \in \mathbb{R}^{p+1}$ qui minimise la somme des erreurs quadratiques

$$\varepsilon_i^2 = (y_i - \beta_0 - \beta_1 x_{i1} - \ldots - \beta_p x_{ip})^2$$

On doit donc résoudre le problème d'optimisation suivant :

$$\widehat{\beta} = \arg\min_{\beta \in \mathbb{R}^{p+1}} \sum_{i=1}^{n} [y_i - (\beta_0 + \sum_{j=1}^{p} \beta_j x_{ij})]^2.$$
 (4)

Vocabulaire:

- $\hat{y}_i = \widehat{\beta}_0 + \sum_{j=1}^p \widehat{\beta}_j x_{ij}$ est appelé la valeur prédite.
- $\hat{\varepsilon}_i = y_i \hat{y}_i$ est appelé le résidu.

En notant $x_i^T = (1, x_{i1}, \dots, x_{ip})$, la valeur prédite \hat{y}_i s'écrit

$$\hat{y}_i = x_i^T \widehat{\beta}.$$

Chapitre 2

Régression linéaire multiple

11/40

Résolution du problème d'optimisation

Le problème d'optimisation est :

$$\min_{\beta \in \mathbb{R}^{p+1}} F(\beta),$$

avec

$$F(\beta) = \sum_{i=1}^{n} [y_i - (\beta_0 + \sum_{j=1}^{p} \beta_j x_{ij})]^2$$
$$= (Y - X\beta)^T (Y - X\beta)$$
$$= Y^T Y - 2Y^T X\beta + \beta^T X^T X\beta$$

Le minimum est atteint pour

$$\frac{\partial F(\beta)}{\partial \beta} = 0.$$

Rappels. Soient a et x deux vecteurs de dimension K, et soit A une matrice de dimension $K \times K$. On a :

$$\frac{\partial a^T x}{\partial x} = \frac{\partial x^T a}{\partial x} = a \quad \text{et} \quad \frac{\partial x^T A x}{\partial x} = 2Ax \text{ si} \quad A \text{ est symétrique,}.$$

Solution du problème d'optimisation

On en déduit après quelques manipulations :

$$\widehat{\beta} = (X^T X)^{-1} X^T Y, \tag{5}$$

sous réserve que X^TX soit inversible.

Commentaires

- Le minimum de F est égal à $\sum_{i=1}^{n} \hat{\varepsilon}_{i}^{2}$. Ce minimum est appelé la somme des carrés des résidus (SCR).
- La valeur prédite \widehat{y}_i estime $\mathbb{E}[y_i] = \beta_0 + \sum_{j=1}^p \beta_j x_{ij}$ et non pas y_i . Une meilleure notation serait $\widehat{\mathbb{E}[y_i]}$.
- Aucune des hypothèses n'a été utilisée ici pour obtenir $\widehat{\beta}$.



Chapitre 2

Régression linéaire multiple

13/40

Propriétés de $\widehat{\beta}$

Sous les hypothèses (A1') et (A2'), on peut montrer que

- $\mathbb{E}[\widehat{\beta}] = \beta$,
- $\mathbb{V}(\widehat{\beta}) = \sigma^2(X^T X)^{-1}$

Commentaires

- L'estimateur $\widehat{\beta}$ est sans biais.
- Il est aussi de variance minimale parmi tous les estimateurs linéaires par rapport à Y) sans biais (propriété dite de Gauss-Markov).

Estimation de σ^2

Le paramètre σ^2 est défini par

$$\sigma^2 = \mathbb{V}(\varepsilon_i) = \mathbb{V}(y_i) = \mathbb{E}[(y_i - \mathbb{E}[y_i])^2].$$

En prenant $\hat{y}_i = x_i^T \widehat{\beta}$ comme estimateur de $\mathbb{E}[y_i]$, il apparaît naturel d'estimer σ^2 par

$$s^{2} = \frac{1}{n - (p+1)} \sum_{i=1}^{n} (y_{i} - \hat{y}_{i})^{2} = \frac{\sum_{i=1}^{n} (\widehat{\varepsilon}_{i})^{2}}{n - p - 1} = \frac{SCR}{n - p - 1}.$$

Commentaires

- s^2 est un estimateur sans biais de σ^2
- La perte de p+1 degrés de liberté dans l'expression de s^2 est le "coût" de l'estimation de $\beta_0, \beta_1, \ldots, \beta_p$ nécessaire pour obtenir les $\hat{y_i}$.



Chapitre 2

Régression linéaire multiple

15/40

Sorties R des données poids de naissance

3. Tests d'hypothèses et intervalles pour les paramètres β_i

On veux maintenant tester la nullité des coefficients β_j du modèle de régression.

Pour faire ces tests, il est nécessaire de faire une hypothèse supplémentaire :

(A3)'
$$\epsilon \sim \mathcal{N}(0_n, \sigma^2 I_n)$$

ou de manière équivalente $Y \sim \mathcal{N}(X\beta, \sigma^2 I_n)$.

Commentaire. L'unique "nouveauté" ici est la normalité.



Chapitre 2

Régression linéaire multiple

17/40

Test de signification du modèle

Typiquement, on commence par tester :

$$\mathcal{H}_0$$
: " $\beta_1=\ldots=\beta_p=0$ " contre \mathcal{H}_1 : " $\exists\,j\in\{1,\ldots,p\},\,\beta_j
eq0$ ".

On utilise la statistique suivante :

$$F_{n} = \frac{\sum_{i=1}^{n} (\hat{y}_{i} - \bar{y}_{n})^{2}/p}{\sum_{i=1}^{n} (y_{i} - \hat{y}_{i})^{2}/(n - p - 1)} = \frac{SCE/p}{SCR/(n - p - 1)}$$

qui est distribuée sous \mathcal{H}_0 selon une loi de Fisher à p et n-p-1 degrés de libertés. On rejette \mathcal{H}_0 avec un risque $0 \le \alpha \le 1$ si

$$F_n \geq f_{1-\alpha}(p, n-p-1)$$

où $f_{1-\alpha}(p, n-p-1)$ est le fractile d'ordre $1-\alpha$ de la loi F(p, n-p-1).

Table d'analyse de la variance (ANOVA) :

Source de variation	Somme des carrés	ddl	carré moyen	F
régression (expliquée)	$SCE = \sum_{i=1}^{n} (\widehat{y}_i - \overline{y}_n)^2$	р	$\frac{1}{p}\sum_{i=1}^n(\widehat{y}_i-\bar{y}_n)^2$	$\frac{SCE/p}{SCR/(n-p-1)}$
Résiduelle	$SCR = \sum_{i=1}^{n} (y_i - \widehat{y}_i)^2$	n-(p+1)	$\frac{1}{n-p-1} \sum_{i=1}^{n} (y_i - \widehat{y}_i)^2$	
Totale	$SCT = \sum_{i=1}^{n} (y_i - \bar{y}_n)^2$	n-1	$\frac{1}{n-1}\sum_{i=1}^{n}(y_i-\bar{y}_n)^2$	

Remarques:

- On retrouve la statistique dite de Fisher F_n qui permet de tester l'ajustement du modèle.
- On retrouve la propriété fondamentale SCT = SCE + SCT qui permet de mesurer l'ajustement du modèle par le coefficient de détermination

$$R^2 = \frac{SCE}{SCT} = 1 - \frac{SCR}{SCT}.$$

 Le coefficient R² donne la proportion de variabilité de y qui est expliquée par le modèle. Plus le R² est proche de 1, meilleure est l'adéquation du modèle aux données.



Chapitre 2

Régression linéaire multiple

19/40

Test de significativité d'un paramètre β_i

On désire maintenant tester :

$$\mathcal{H}_0$$
 : " $eta_j = 0$ " contre \mathcal{H}_1 : " $eta_j
eq 0$ "

Nouvelles propriétés pour les estimateurs $\widehat{\beta}_j$ et s^2

Sous les hypothèses (A1')-(A3'), on a :

(a)
$$\widehat{\beta}_j \sim \mathcal{N}\left(\beta_j, \sigma^2 c_{jj}\right)$$

où c_{jj} est le terme $(j+1, j+1)$ de la matrice $(X^T X)^{-1}$

(b)
$$\frac{(n-p-1)s^2}{\sigma^2} \sim \chi^2(n-p-1)$$

(c) $\widehat{\beta}_i$ et s^2 sont indépendants

Un rappel de probabilité

Si
$$U \sim \mathcal{N}(0,1)$$
, $V \sim \chi^2(\nu)$ et U est indépendant de V , alors $\frac{U}{\sqrt{\frac{V}{\nu}}} \sim T(\nu)$.

On déduit alors des propriétés (a)-(c) que

$$\frac{\frac{\widehat{\beta}_j - \beta_j}{\sqrt{\sigma^2 c_{jj}}}}{\sqrt{\frac{(n-p-1)s^2}{\sigma^2}}} = \frac{\widehat{\beta}_j - \beta_j}{s\sqrt{c_{jj}}} \sim T(n-p-1).$$

On utilisera donc la statistique suivante :

$$T_n = \frac{\widehat{eta}_j - eta_j}{s\sqrt{c_{jj}}},$$

qui est distribuée selon une loi de Student à n-p-1 degrés de libertés.

◆□▶ ◆□▶ ◆■▶ ◆■▶ ■ からの

Chapitre 2

Régression linéaire multiple

21/40

Test de \mathcal{H}_0 contre \mathcal{H}_1

Sous l'hypothèse \mathcal{H}_0 : " $eta_j=0$ ", on a

$$T_n = \frac{\widehat{\beta}_j}{s\sqrt{c_{jj}}} \sim T(n-p-1). \tag{6}$$

Pour une hypothèse alternative \mathcal{H}_1 : " $\beta_j \neq 0$ " bilatérale, on rejette \mathcal{H}_0 avec un risque $0 \leq \alpha \leq 1$ si

$$|t| \geq t_{1-\alpha/2}(n-p-1)$$

où t est la réalisation de T_n et $t_{1-\alpha/2}(n-p-1)$ est le fractile d'ordre $1-\alpha/2$ de la loi T(n-p-1).

Remarques.

Pour réaliser ce test, on peut également :

- regarder la p-valeur aussi appelée niveau de signification du test : si p-valeur $\leq \alpha$, on rejette \mathcal{H}_0 . Dans le cas d'un test bilatéral $(\mathcal{H}_1 : "\beta_1 \neq 0")$, on a :

$$p\text{-valeur} = \mathbb{P}(|T_n| > |t| / \mathcal{H}_0). \tag{7}$$

On rejette \mathcal{H}_0 si p-valeur $\leq \alpha$.

- construire l'intervalle de confiance de β_i :

$$[\widehat{eta}_j \pm t_{1-lpha/2}(n-p-1)s\sqrt{c_{jj}}].$$

On rejette \mathcal{H}_0 si 0 n'appartient pas à cet intervalle.



Chapitre 2

Régression linéaire multiple

23/40

Rejeter \mathcal{H}_0 signifie:

- que le coefficient β_j est significativement non nul,
- que β_j s'interprète comme le taux d'accroissement moyen de y en fonction d'une variation de x_j lorsque tous les autres régresseurs $x_1, \ldots, x_{j-1}, x_{j+1}, \ldots, x_p$ restent fixés.

Contribution jointe d'un ensemble de régresseurs

On peut maintenant tester la nullité de $q \leq p$ paramètres :

$$\mathcal{H}_0$$
: " $eta_1=\ldots=eta_q=0$ " contre \mathcal{H}_1 : " $\exists\, j\in\{1,\ldots,q\},\,eta_j
eq 0$ ".

Cela revient à comparer deux modèles :

- le modèle complet à p regresseurs (modèle 1) pour lequel on évalue la somme des carrés des résidus SCR_1 ,
- le modèle réduit à p-q regresseurs (modèle 0) pour lequel on évalue la somme des carrés des résidus SCR_0 .

On peut montrer que sous \mathcal{H}_0 :

$$\frac{(\mathsf{SCR}_0 - \mathsf{SCR}_1)/q}{\mathsf{SCR}_1/(n-p-1)} \sim \textit{F}(q, n-p-1).$$



Chapitre 2

Régression linéaire multiple

25/40

La zone de rejet associée à cette statistique de test est donc :

$$\mathcal{R} =]f_{1-\alpha}(q, n-p-1), +\infty[.$$

Rejeter \mathcal{H}_0 signifie qu'au moins un des q coefficients est non nul.

```
modele0 <- lm(bwt~ smoke,data=data)
modele1 <- lm(bwt~ age+weight+smoke,data=data)
anova(modele0,modele1)

## Analysis of Variance Table
##
## Model 1: bwt~ smoke
## Model 2: bwt~ age + weight + smoke
## Res.Df RSS Df Sum of Sq F Pr(>F)
## 1 1172 297411671
## 2 1170 291055628 2 6356043 12.8 3.2e-06 ***
## ---
## Signif. codes: 0 '***' 0.001 '**' 0.05 '.' 0.1 ' ' 1
```

On désire prévoir à l'aide du modèle la valeur de la variable y pour des observations futures $(x_{1,0}, \ldots, x_{p,0})$ des p variables explicatives.

Posons

$$x_0 = (1, x_{1,0}, \dots, x_{p,0})^T \in \mathbb{R}^{p+1}$$

D'après le modèle on a :

$$y_0 = x_0^T \beta + \varepsilon_0,$$

et la prédiction est :

$$\widehat{y}_0 = \widehat{\mathbb{E}[y_0]} = x_0^T \widehat{\beta}.$$

L'erreur de prédiction est définie par $\hat{y_0} - y_0$ et on peut montrer que sous les hypothèses du modèle (incluant l'hypothèse de normalité), on a :

$$\widehat{y}_0 - y_0 \sim \mathcal{N}\left(0, \sigma^2\left(1 + x_0^T (X^T X)^{-1} x_0\right)\right).$$
 (8)

Chapitre 2

Régression linéaire multiple

27/40

On en déduit que :

$$rac{y_0 - \hat{y}_0}{\sigma \sqrt{1 + x_0^T (X^T X)^{-1} x_0}} \sim \mathcal{N}(0, 1).$$

On peut montrer que :

$$\frac{y_0 - \hat{y}_0}{s\sqrt{1 + x_0^T(X^TX)^{-1}x_0}} \sim T(n - p - 1).$$

On utilise ce résultat pour construire un intervalle de prédiction pour y_0 , c'est à dire l'intervalle [A, B] tel que

$$\mathbb{P}(A \leq y_0 \leq B) = 1 - \alpha.$$

Ici, y_0 est une variable aléatoire et non pas un paramètre. L'intervalle de prédiction est donc un intervalle dans lequel une future observation y_0 va tomber avec une certaine probabilité (différent d'un intervalle de confiance).

On en déduit l'intervalle de prédiction pour y_0 au niveau de confiance $1-\alpha$ suivant :

$$\left[\hat{y}_0 \pm t_{1-\alpha/2} (n-p-1) s \sqrt{1 + x_0^T (X^T X)^{-1} x_0}\right]$$

On peut aussi construire un intervalle de confiance de la valeur moyenne

$$\mathbb{E}[y_0] = x_0^T \beta,$$

qui est cette fois un paramètre. On va donc chercher l'intervalle aléatoire [A,B] tel que

$$\mathbb{P}(A \leq \mathbb{E}[y_0] \leq B) = 1 - \alpha.$$

◆□▶ ◆□▶ ◆■▶ ◆■▶ ■ かへで

Chapitre 2

Régression linéaire multiple

29/40

Pour construire cet intervalle, on montre que :

$$\hat{y}_0 \sim \mathcal{N}\left(x_0'\beta, \sigma^2 x_0^T (X^T X)^{-1} x_0\right),$$

$$\frac{\hat{y}_0 - x_0^T \beta}{s \sqrt{x_0^T (X^T X)^{-1} x_0}} \sim T(n-p-1).$$

On en déduit l'intervalle de confiance de $\mathbb{E}[y_0] = x_0^T \beta$ suivant :

$$\left[\widehat{y}_0 \mp t_{1-\alpha/2}(n-p-1) \ s \ \sqrt{x_0^T(X^TX)^{-1}x_0}\right].$$

```
#prevision de l'age du bebe d'une femme de 30 ans, 50 kg et fumeuse
predict(modele,data.frame(age=30,weight=50,smoke=1),interval="prediction")

### fit lwr upr
## 1 3163.9 2183.8 4144

predict(modele,data.frame(age=30,weight=50,smoke=1),interval="confidence")

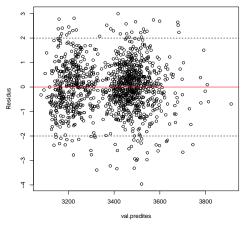
## fit lwr upr
## 1 3163.9 3109.1 3218.7
```

Exemple des données poids de naissance.

```
#On calcule les residus studentises
residus=rstudent(modele)

#On calcule les valeurs predites
val.predites <- predict(modele)

#Graphique predictions-residus
plot(val.predites ,residus, xlab="val.predites", ylab="Residus")
abline(h=c(-2,0,2), lty=c(2,1,2),col=c(1,2,1))</pre>
```



Chapitre 2

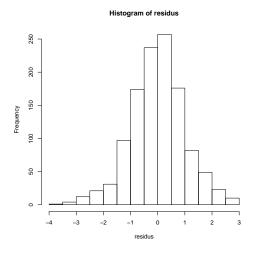
Régression linéaire multiple

31/40

```
#normalite des residus
shapiro.test(residus)

##
## Shapiro-Wilk normality test
##
## data: residus
## W = 0.993, p-value = 0.000022

hist(residus)
```



Il s'agit maintenant de sélectionner parmi les p variables explicatives, les $q \le p$ variables qui donnent le "meilleur" modèle pour prédire y.

Il faut donc:

- un critère de qualité d'un modèle afin de comparer deux modèles n'ayant pas nécessairement le même nombre de variables explicatives.
- une procédure qui permet de choisir parmi tous les modèles, le meilleur au sens de ce critère. On parle de procédure de choix de modèle.

Un problème de complexité :

- Le nombre de modèles à considérer est $\sum_{q=1}^{p} C_p^q = 2^p 1$. Ce nombre croît exponentiellement avec p. Par exemple, si p=30, on devrait considérer $2^{30}=10^9$ modèles...
- En pratique, on utilise donc des heuristiques dont les plus simples sont les procédures pas à pas ascendante ou descendante.



Chapitre 2

Régression linéaire multiple

33/40

Les critères R^2 et R^2 ajusté

- Le coefficient $R^2 = 1 \frac{SCR}{SCT}$
 - mesure l'ajustement du modèle aux données,
 - augmente lorsque le nombre de variables incluses dans le modèle augmente,
 - permet de comparer des modèles ayant le même nombre de variables.
- Le coefficient $R_{\text{ajuste}}^2 = 1 \frac{SCR/(n-p-1)}{SCT/(n-1)}$
 - estime le $R^2_{
 m population} = 1 rac{\mathbb{V}(arepsilon)}{\mathbb{V}(Y)} = 1 rac{\sigma^2}{\sigma_Y^2}$,
 - n'augmente pas forcément lorsque le nombre de variables introduites dans le modèle augmente,
 - permet de comparer des modèles ayant un nombre de variables différent.

Les critères AIC et BIC.

Ce sont deux critères de vraisemblance pénalisées définis par :

- AIC = -2In(L) + 2k: Akaike Information Criterion
- BIC = -2ln(L) + kln(n): Bayesian Information Criterion

où L est la vraisemblance maximisée et k est le nombre de paramètres libres du modèle.

En régression multiple :

- il y a q+2 paramètres $\beta_0, \beta_1, \ldots, \beta_q, \sigma$ et une equation donc k=q+1 paramètres libres.
- la vraisemblance est définie comme la densité conjointe des y_i et son expression est

$$L(\beta, \sigma^2) = \frac{1}{(2\pi\sigma^2)^{n/2}} \exp\left(-\frac{1}{2\sigma^2}(Y - X\beta)^T(Y - X\beta)\right)$$

Les estimateurs du maximum de vraisemblance sont $\tilde{\beta}=(X^TX)^{-1}X^TY$ et $\tilde{\sigma}^2=\frac{SCR}{n}$. La vraisemblance maximisée est $L=L(\tilde{\beta},\tilde{\sigma}^2)$ et on obtient :

$$-2ln(L) = n(ln(2\pi\tilde{\sigma}^2) + 1)$$

(□▶ ◀♬▶ ◀臺▶ ◀臺▶ · 喜 · 쒸٩♡

Chapitre 2

Régression linéaire multiple

35/40

Ecriture simplifiée en régression multiple.

$$AIC = n \ln(SCR) + 2k + cste$$

 $BIC = n \ln(SCR) + k \ln(n) + cste$

Ces critères doivent être minimisés dans une procédure de choix de modèle.

Procédure pas à pas ascendante (forward stepwise).

- On part du modèle nul sans variable.
- On effectue *p* régressions linéaires simples et on sélectionne le modèle qui minimise le critère *AIC*.
- On effectue p-1 régressions linéaires avec 2 variables explicatives et on sélectionne le modèle qui minimise le critère AIC.
- On recommence jusqu'à ce que le critère AIC ne diminue plus.

Procédure pas à pas descendante (backward stepwise).

On part cette fois du modèle complet à p variables explicatives et on supprime pas à pas les variables. Le test d'arrêt et le critère sont les mêmes que pour la procédure ascendante.



Chapitre 2

Régression linéaire multiple

37/40

```
full <- lm(bwt ~ gestation + age + weight + smoke, data=data) null <- lm(bwt ~ 1, data=data)
back <- step(full, direction="backward")</pre>
## Start: AIC=14379
## bwt ~ gestation + age + weight + smoke
##
## - weight 1 5352463 248055745 14402
## - smoke 1 14379595 257082877 14444
## - gestation 1 48352346 291055628 14590
##
## Step: AIC=14377
## bwt ~ gestation + weight + smoke
##
## Df Sum of Sq
## <none>
                                   RSS AIC
## <none> 242763748 14377
## - weight 1 5637978 248401726 14402
## - smoke 1 14556053 257319800 14443
## - gestation 1 48324498 291088245 14588
formula(back)
## bwt ~ gestation + weight + smoke
```

```
forw <- step(null, scope=list(lower=null,upper=full), direction="forward", trace = 1)</pre>
## Start: AIC=14683
## bwt ~ 1
##
             Df Sum of Sq
                               RSS AIC
## + gestation 1 52601391 264100599 14472
## + smoke 1 19290318 297411671 14611
             1 7699680 309002310 14656
## + weight
## <none> 310701000 ___
## + age 1 230584 316471406 14684
## Step: AIC=14472
## bwt ~ gestation
##
         Df Sum of Sq
                           RSS AIC
##
## + smoke 1 15698873 248401726 14402
## + weight 1 6780798 257319800 14443
## + age 1 754996 263345603 14471
## <none>
                    264100599 14472
##
## Step: AIC=14402
## bwt ~ gestation + smoke
##
##
         Df Sum of Sq
                           RSS AIC
## + weight 1 5637978 242763748 14377
## <none>
                248401726 14402
## + age 1 345981 248055745 14402
##
## Step: AIC=14377
## bwt \tilde{\ } gestation + smoke + weight
        Df Sum of Sq
##
                        RSS
                               AIC
## <none>
                     242763748 14377
## + age 1
               60465 242703282 14379
```

√) Q (~)

39/40

Chapitre 2

Régression linéaire multiple

```
formula(forw)
## bwt ~ gestation + smoke + weight
summary(lm(forw,data=data)) # idem forw
##
## Call:
## lm(formula = forw, data = data)
##
## Residuals:
## Min 1Q Median 3Q Max
## -1471.9 -305.0 -7.9 276.2 1455.9
##
## Coefficients:
    Estimate Std. Error t value Pr(>|t|)
## (Intercept) -499.702 246.393 -2.03 0.043 *
## gestation 12.703 0.832 15.26 < 2e-16 ***
## amala 229.004 27.341 -8.38 < 2e-16 ***
          -229.004
7.386
                                        -8.38 < 2e-16 ***
## smoke
                              27.341
                              1.417 5.21 2.2e-07 ***
## weight
## ---
## Signif. codes: 0 '***' 0.001 '**' 0.05 '.' 0.1 ' ' 1
##
## Residual standard error: 456 on 1170 degrees of freedom
## Multiple R-squared: 0.233, Adjusted R-squared: 0.231
## F-statistic: 119 on 3 and 1170 DF, p-value: <2e-16
```