LA RÉGRESSION LOGISTIQUE

1 La régression logistique-Modèle

- La variable à expliquer est qualitative,
- n observations réparties en k classes, décrites par p variables explicatives.

Exemples:

- Y= Crédit accordé, $X_1=$ Age , $X_2=$ Type emploi, $X_3=$ Niveau revenus
- Y= Maladie cardiovasculaire, $X_1=$ Age , $X_2=$ Sexe, $X_3=$ Tabac, $X_4=$ Alcool.

Rappel du modèle pour la régression linéaire (ANOVA, Plans d'expériences) :

$$\mathbf{y_i} \leadsto \mathcal{N}(x_i\beta, \sigma^2)$$
 où $\mathbf{y_1}, ..., \mathbf{y_n}$ sont indépendantes.

Ici le modèle gaussien ne convient plus, la variable y_i est discrête.

Quelle loi peut-on proposer (cas à 2 classes $\{0,1\}$)? La loi binomiale $B(p_i)$, où $p_i = P(\mathbf{y}_i = 1 | X = x_i)$

La régression logistique binaire, k=2, propose le modèle suivant. On supposera que l'on cherche à prédire \mathbf{y} qui prend deux valeurs 0 ou 1. En fait on cherche à quantifier $P(\mathbf{y}=1|X=x)$.

La règle de décision sera alors la suivante : si P(y = 1|X = x) > 0.5 alors Y = 1 sinon Y = 0.

Une première possibilité de modélisation pourrait consister à écrire :

$$P(\mathbf{y} = 1|X = x) = \pi(x) = \beta_0 + \beta' \mathbf{x}$$

Dans ce cas, $\pi(x)$ appartient à \mathbb{R} , ce qui n'est pas le cas.

Définition 1. La régression logistique consiste à écrire :

$$\log \left(\frac{P(\mathbf{y} = 1|X = x)}{P(\mathbf{y} = 0|X = x)} \right) = \log \left(\frac{\pi(x)}{1 - \pi(x)} \right) = \beta_0 + \beta' \mathbf{x}$$
$$\Leftrightarrow \pi(x) = \frac{e^{\beta_0 + \beta' \mathbf{x}}}{1 + e^{\beta_0 + \beta' \mathbf{x}}}$$

La fonction LOGIT est $p \to \log\left(\frac{p}{1-p}\right)$.

Une modélisation alternative (Régression PROBIT) également utilisée en pratique consiste à écrire

$$\pi(x) = \Phi(\beta_0 + \beta' \mathbf{x})$$

où Φ est la fonction de répartition de la loi normale.

$$\Leftrightarrow \Phi^{-1}(\pi(x)) = \beta_0 + \beta' \mathbf{x}$$

2 Interprétation

La probabilité d'être malade si l'on fume est

$$P(\mathbf{y} = 1|X = 1) = \frac{e^{\beta_0 + \beta_1}}{1 + e^{\beta_0 + \beta_1}}$$

que l'on compare à la probabilité de ne pas être malade si l'on fume $P(\mathbf{y}=0/X=1)=1-P(\mathbf{y}=1/X=1)$. L'odds est le rapport de ces deux probabilités. On fait de même pour les non-fumeurs et on définit l'odds-ratio comme le rapport des deux odds

$$O.R = \frac{P(\mathbf{y} = 1|X = 1)/(\mathbf{y} = 0|X = 1)}{P(\mathbf{y} = 1|X = 0)/(\mathbf{y} = 0|X = 0)} = e^{\beta_1}$$

C'est le facteur par lequel la cote (ou odds) est multiplié si l'on passe de X=0 à X=1. Dans notre exemple, un $O.R=e^{\beta_1}>1$ indique que le fait de fumer est un facteur aggravant. En effet le risque d'être malade est e^{β_1} fois supérieur pour les fumeurs que pour les non-fumeurs. Par la suite, on regarde le signe de β_1 . L'effet de X est aggravant si $\beta_1>0$

Remarques : si X n'a pas d'effet sur y, O.R. = 1 et $\beta_1 = 0$

On peut sans difficulté utiliser des prédicteurs qualitatifs à m modalités. Chaque variable est remplacée par (m-1) indicatrices après élimination d'une des modalités dite de référence, qui aura un coefficient nul. Les comparaisons de coefficients se font alors par rapport à cette modalité : une valeur proche de 1 signifie que la modalité est proche de la modalité de référence.

Sous R la modalité de référence est la première modalité rencontrée.

3 Estimation

Elle s'effectue par la méthode du maximum de vraisemblance à partir d'un échantillon i.i.d de n observations (y_i) . On fait le calcul dans le cas logit.

$$L(\beta_{0}, \beta) = P(\mathbf{y}_{1} = y_{1}, \dots, \mathbf{y}_{n} = y_{n} | X_{1} = x_{1}, \dots, X_{n} = x_{n})$$

$$= \prod_{i=1}^{n} P(\mathbf{y}_{i} = y_{i} | X_{i} = x_{i})$$

$$= \prod_{i=1}^{n} \left(\frac{e^{\beta_{0} + \beta' \mathbf{x}_{i}}}{1 + e^{\beta_{0} + \beta' \mathbf{x}_{i}}} \right)^{y_{i}} * \left(1 - \frac{e^{\beta_{0} + \beta' \mathbf{x}_{i}}}{1 + e^{\beta_{0} + \beta' \mathbf{x}_{i}}} \right)^{(1 - y_{i})}$$

$$= \prod_{i=1}^{n} \pi(x_{i})^{y_{i}} (1 - \pi(x_{i}))^{(1 - y_{i})}$$

En annulant les dérivées de la log-vraisemblance, on obtient le système

$$\begin{cases} \frac{\partial l(\beta)}{\partial \beta_0} &= \sum (y_i - \pi(x_i)) = 0\\ \frac{\partial l(\beta)}{\partial \beta_j} &= \sum x_i^j (y_i - \pi(x_i)) = 0 \text{ j=1,..,p} \end{cases}$$

qui n'a pas de solution analytique et se résout par des algorithmes numériques. Remarque : dans le cas Probit, il suffit de remplacer l'expression de $\pi(x_i)$.

La théorie de l'estimation par maximum de vraisemblance donne le théorème suivant :

$$(J(\hat{\beta}))^{1/2}(\hat{\beta}-\beta) \leadsto \mathcal{N}(0_n, Id_n)$$

où J la matrice d'information de fisher définie par $J(\hat{\beta}) = \left[-\frac{\partial^2 l(\beta)}{\partial \beta^2}\right]_{\beta = \hat{\beta}}$.

On obtient la matrice de variance-covariance asymptotique des estimateurs comme inverse de la matrice J

$$\hat{V}(\hat{\beta}) = J(\hat{\beta})^{-1} = (\mathbf{X}'\hat{\Sigma}\mathbf{X})^{-1}$$
où
$$\hat{\Sigma} = \begin{bmatrix} \hat{\pi}_1(1 - \hat{\pi}_1) & 0\\ & \dots\\ 0 & \hat{\pi}_n(1 - \hat{\pi}_n) \end{bmatrix}$$

4 Interprétation

Remarques:

- Dans les deux modèles, Probit et Logit, on ne peut pas estimer séparément $\mathbf b$ et la variance des erreurs.
- Les deux fonction Probit et Logit ne conduisent pas aux mêmes valeurs des paramètres. La seule information réellement utilisable est le signe des paramètres, indiquant si la variable associée influence la probabilité à la hausse ou à la baisse.

5 Test et sélection de variables

5.1 Les hypothèses à tester

Comme en régression linéraire, l'objectif est de sélectioner les variables réellement influentes sur la réponse. On distingue trois types d'hypothèses :

1. Evaluer la contribution individuelle d'une variable

$$H_0: \beta_i = 0$$

2. Evaluer la contribution d'un ensemble de "q" variables

$$H_0: \beta_i = ... = \beta_{i+q} = 0$$

3. Evaluer la qualité du modèle dans son ensemble

$$H_0: \beta_1 = \dots = \beta_p = 0$$

Deux approches pour tester ces hypothèses:

- Tests basés sur le rapport de vraisemblance. C'est un test qui mesure l'accroissement de vraisemblance entre le modèle "réduit" et le modèle "complet". Ce test est puissant et cohérent avec l'estimation des paramètres, mais couteux car il nécessite l'évaluation de la vraisemblance pour chaque sous-modèle.
- Tests de Wald. C'est un test basé sur la normalité asymptotique des estimateurs par maximum de vraisemblance. Plus simple à mettre en oeuvre mais moins puissant.

5.2 Le rapport de vraisemblance

 $H_0: \beta_j = 0$

On note M le modèle complet et M_{-j} le modèle sans la variable X_j . On note

$$LR = -2ln\left(\frac{L(M_{-j})}{L(M)}\right) = D_{-j} - D$$

où L est la vraisemblance et D la déviance.

Sous l'hypothèse $H_0,$ LR suit une loi du χ^2 à 1 degré de liberté.

Remarques:

- $LR \ge 0$ car plus il y a de termes dans le modèle et plus la déviance est faible.
- Pour $H_0: \beta_j = ... = \beta_{j+q} = 0, LR \leadsto \chi^2(q)$

5.3 Tests de Wald

Asymptotiquement $\hat{\beta}$ suit une loi normale multidimensionnelle de matrice de variances-covariances :

$$V(\hat{\beta}) = \left(X'\hat{\Sigma}X\right)^{-1} \text{ avec } \hat{\Sigma} = \begin{bmatrix} \hat{\pi}(x_1)(1 - \hat{\pi}(x_1)) & 0\\ & \dots\\ 0 & \hat{\pi}(x_n)(1 - \hat{\pi}(x_n)) \end{bmatrix}$$

- Sous l'hypothèse $H_0: \beta_j = 0$, la statistique de Wald $\frac{\hat{\beta}_j^2}{s_{\beta_j}^2}$ suit une loi du $\chi^2(1)$.
- Sous l'hypothèse $H_0: \beta_1 = ... = \beta_q = 0$, la statistique de Wald $\hat{\beta}'_{(q)}V(\hat{\beta})^{-1}_{(q)}\hat{\beta}_{(q)}$ suit une loi du $\chi^2(q)$.

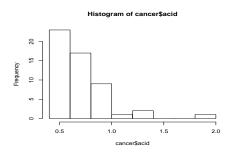
5.4 Exemple

Exemple 2. L'objectif est de prévoir l'implication ou non du système lymphatique dans le cas de cancer observé et donc de construire un meilleur modèle de prédiction. Les variables considérées sont les suivantes :

- age : âge du patient
- acid : niveau de serum acid phosphatase,
- radio : résultat d'une analyse radiographique (0 : négatif, 1 : positif),
- taille : taille de la tumeur (0 : petite, 1 : grande),
- gravite : résultat de la biopsie (0 : moins sérieux, 1 : sérieux).
- lymph: La sixième variable indique l'implication (1) ou non (0) du système lymphatique.

Etude préalable

Une étude au préalable des variables met en évidence des transformations à réaliser.



On introduit dans le modèle plutôt le log de la variable acid

Régression logistique

- Déclarer avec as factor les variables qualitatives ou discrètes (radio, taille, gravité).
- Utiliser la fonction régression généralisée (glm avec l'option family=bibomial)

Résultat de la régression logistique-link=Logit

```
> Anova(mod_logit,test.statistic="LR",type = "III")
Analysis of Deviance Table (Type III tests)
Response: lymph

LR Chisq Df Pr(>Chisq)
age
1.acid
                                           0.196807
0.263960
                          1.2479
radio
taille
gravite
age:1.acid
                          0.0177
                         0.3407
3.8290
1.0119
age:radio
age:taille
                         0.0748
0.5296
age:gravite
l.acid:radio
l.acid:taille
                         1.0212
                                           0.312235
                         0.0017
                                           0.966764
                         1.4986
                                           0.220889
1.acid:gravite
radio:taille
radio:gravite
taille:gravite
                        1.4646
0.0859
0.0461
8.0089
                                          0.226202
0.769505
0.829915
0.004655 **
Signif. codes: 0 "***" 0.001 "**" 0.01 "*" 0.05 "." 0.1 " " 1
```

Résultat de la régression logistique-link=Probit

```
Analysis of Deviance Table (Type III tests)
Response: lymph
                           h LR Chisq Df Pr(>Chisq) 1.7318 1 0.188179 1.3198 1 0.250620 0.0206 1 0.885767 0.3031 1 0.581922
age
l.acid
radio
taille
gravite
age:1.acid
                                 3.7590
1.0871
                                                       0.052525
0.297109
 age:radio
age:taille
                                 0.0828
                                 0.4768
                                                       0.489876
age:taille
age:gravite
l.acid:radio
l.acid:taille
l.acid:gravite
radio:taille
radio:gravite
                                0.4768
1.0727
0.0149
1.4720
1.5986
0.1549
                                                      0.300344
0.902698
0.225029
0.206100
0.693942
taille:gravite
                                8.2624 1
                                                     0.004048 **
Signif. codes: 0 "***" 0.001 "**" 0.01 "*" 0.05 "." 0.1 " " 1
```

> Anova(mod_probit,test.statistic="LR",type = "III")

On peut faire une sélection backward sur le test du χ^2 en enlevant la variable la moins influente.

> Anova(etape9,test.statistic="LR",type = "III")

```
Analysis of Deviance Table (Type III tests)
Response: lymph
              LR Chisq Df Pr(>Chisq)
                1.4349 1 0.2309665
1.acid
                5.6945
                          0.0170182
taille
               10.0862
                       1
                          0.0014938 **
{\tt gravite}
               11.9409
                       1
                          0.0005492 ***
l.acid:gravite
                4.1672
                       1 0.0412149
taille:gravite 6.8699 1 0.0087659 **
Signif. codes: 0 "***" 0.001 "**" 0.01 "*" 0.05 "." 0.1 " " 1
> summary(etape9)
glm(formula = lymph ~ (age + 1.acid + radio + taille + gravite)^2 -
   1.acid:taille - age - 1.acid:radio - radio:taille - radio:gravite -
   radio:age - age:taille - age:l.acid - age:gravite, family = binomial(link = "logit"),
   data = cancer)
Coefficients:
                Estimate Std. Error z value Pr(>|z|)
(Intercept)
                -2.553
                              1.040 -2.455 0.01408 *
1.acid
                  1.709
                             1.420
                                    1.203 0.22902
                   2.340
                             1.084
                                     2.158 0.03092 *
radio1
                   3.138
                             1.171
                                    2.681 0.00735 **
taille1
                                     2.135
gravite1
                   9.961
                              4.666
                                           0.03278 *
                           6.640 1.570 0.11635
l.acid:gravite1
                  10.426
```

```
taille1:gravite1 -5.648 2.434 -2.320 0.02034 *
Signif. codes: 0 "***" 0.001 "**" 0.01 "*" 0.05 "." 0.1 " " 1
(Dispersion parameter for binomial family taken to be 1)
   Null deviance: 70.252 on 52 degrees of freedom
Residual deviance: 36.287 on 46 degrees of freedom
AIC: 50.287
Number of Fisher Scoring iterations: 6
> Anova(etape9,test.statistic="Wald",type = "III")
Analysis of Deviance Table (Type III tests)
Response: lymph
               Df Chisq Pr(>Chisq)
(Intercept)
                1 6.0286
                          0.014076 *
1.acid
                1 1.4469
                          0.229025
radio
                1 4.6576
                          0.030916 *
taille
                1 7.1855
                          0.007349 **
gravite
                1 4.5573
                          0.032779 *
1.acid:gravite 1 2.4658
                          0.116347
taille:gravite 1 5.3823 0.020342 *
Residuals
              46
Signif. codes: 0 "***" 0.001 "**" 0.05 "." 0.1 " " 1
> exp(etape9$coef)
                                                            taille1
     (Intercept)
                          1.acid
                                            radio1
                     5.520827e+00
                                      1.038589e+01
                                                       2.305661e+01
       gravite1 l.acid:gravite1 taille1:gravite1
   2.118736e+04
                     3.372472e+04
                                     3.525473e-03
> etape9$fitted.values
0.021737930\ 0.028103690\ 0.023271633\ 0.024844422\ 0.023271633\ 0.022499839
                                  9
                                             10
0.176682822 0.263277665 0.592094827 0.225537028 0.033264001 0.041572044
        13
                     14
                                 15
                                             16
                                                         17
0.035960303 0.992529501 0.147620836 0.022499839 0.268439092 0.048465885
                     20
0.053602775 0.069964865 0.024844422 0.045467449 0.999315743 0.184932630
        25
                     26
                                 27
                                             28
                                                         29
0.577637283 0.052561844 0.001985131 0.354567705 0.028963024 0.272838623
        31
                     32
                                 33
                                             34
                                                         35
                                                                     36
0.086605715 0.181843489 0.841799859 0.282599930 0.346708766 0.017850718
                                 39
                                             40
                                                         41
        37
                     38
0.836516162\ 0.650007793\ 0.529056521\ 0.621896125\ 0.464206740\ 0.994079603
                     44
                                 45
                                             46
                                                         47
0.990825496\ 0.980332990\ 0.638897574\ 0.985573396\ 0.493963073\ 0.475273469
        49
                    50
                                51
                                            52
0.561236344 0.509763501 0.914074363 0.938577357 0.999956536
> predict(etape9,newdata =cancer[,-6] )
-3.80671894 -3.54334823 -3.73697343 -3.66996376 -3.73697343 -3.77149031
                                  9
                                             10
                                                         11
-1.53898536 -1.02900183
                         0.37263208 -1.23368550
                                                -3.36944969
                                                            -3.13786646
-3.28871683
             4.88929493 -1.75338439
                                    -3.77149031 -1.00255644 -2.97721540
        19
                     20
                                 21
                                             22
                                                         23
-2.87106154 -2.58722918 -3.66996376 -3.04422508
                                                7.28649176 -1.48327917
        25
                     26
                                 27
                                             28
                                                         29
 0.31308167
           -2.89177122
                        -6.22008309
                                    -0.59902100
                                                -3.51234455
                                                            -0.98026793
        31
-2.35580184
            -1.50390728
                         1.67168134
                                    -0.93160144
                                                -0.63353789
                                                             4.00769961
        37
                     38
                                 39
                                             40
                                                         41
                                                                     42
 1.63253171
            0.61907346
                        0.11635719
                                     0.49760412 -0.14341836
                                                             5.12341383
                                                         47
        43
                     44
                                45
                                             46
 4.68211015 3.90894971
                        0.57058250
                                     4.22414961 -0.02414888 -0.09898687
```

50

51 $0.24618121 \quad 0.03905897 \quad 2.36442969 \quad 2.72658673 \quad 10.04353585$

```
> exp(predict(etape9,newdata =cancer[,-6]))/(1+exp(predict(etape9,newdata =cancer[,-6])))
0.021737930 0.028103690 0.023271633 0.024844422 0.023271633 0.022499839
                            8
                                           9
                                                        10
                                                                        11
                                                                                       12
0.176682822 0.263277665 0.592094827 0.225537028 0.033264001 0.041572044
                          14
                                                         16
0.035960303\ 0.992529501\ 0.147620836\ 0.022499839\ 0.268439092\ 0.048465885
           19
                          20
                                         21
                                                         22
                                                                        23
0.053602775 0.069964865 0.024844422 0.045467449 0.999315743 0.184932630
                          26
                                         27
           25
                                                         28
                                                                        29
                                                                                       30
0.577637283 0.052561844 0.001985131 0.354567705 0.028963024 0.272838623
           31
                          32
                                         33
                                                         34
                                                                        35
0.086605715\ 0.181843489\ 0.841799859\ 0.282599930\ 0.346708766\ 0.017850718
           37
                          38
                                         39
                                                         40
                                                                        41
0.836516162 0.650007793 0.529056521 0.621896125 0.464206740 0.994079603
           43
                          44
                                         45
                                                        46
                                                                        47
0.990825496 0.980332990 0.638897574 0.985573396 0.493963073 0.475273469
           49
                          50
                                         51
0.561236344\ 0.509763501\ 0.914074363\ 0.938577357\ 0.999956536
Sélection automatique avec le critère AIC
     Méthode Backward
> backward <- step(mod_logit,method = "backward",k= 2)</pre>
> backward$anova
> Anova(backward,test.statistic="LR",type = "III")
     Méthode forward
> constant = glm(lymph~1,family=binomial,data=cancer)
> forward <- step(constant, direction="forward", scope=list(lower=~1,
+ upper=~(age+l.acid+radio+taille+gravite)*(age+l.acid+radio+taille+gravite)),</pre>
+ trace = TRUE)
> forward$anova
> Anova(forward,test.statistic="LR",type = 'III')
Résultat méthode backward
            Step Df Deviance Resid. Df Resid. Dev
                                         Resid. Dev AIC
30.17407 62.17407
30.17580 60.17580
30.23430 58.23430
30.27670 56.27670
30.35987 54.35987
  NA NA
- l.acid:radio 1 0.001736144
- radio:gravite 1 0.058491134
- radio:taille 1 0.042399111
                                     37
38
39
40
41
     - age:radio
- age:taille
                  1 0.083178600
                                         31.15938 53.15938
                  1 0.799502943
                                     42
    - age:l.acid
- age:gravite
                  1 1.176430869
1 0.710915607
                                     43
44
                                         32.33581 52.33581
33.04672 51.04672
                  1 1.320311701
9 - age 1 1.320311701
10 - 1.acid:taille 1 1.920111975
Analysis of Deviance Table (Type III tests)
Response: lymph
             h
LR Chisq Df Pr(>Chisq)
1.4349 1 0.2309665
5.6945 1 0.0170182 *
10.0862 1 0.0014938 **
11.9409 1 0.0005492 ***
1.acid
radio
taille
gravite
1.acid:gravite 4.1672 1 0.0412149 * taille:gravite 6.8699 1 0.0087659 **
Signif. codes: 0 "***" 0.001 "**" 0.01 "*" 0.05 "." 0.1 " " 1
Résultat méthode forward
       Step Df Deviance Resid. Df Resid. Dev
             NA
                         NA
                                       52
                                             70.25215 72.25215
2 + radio -1 11.251350
                                             59.00080 63.00080
                                       51
3 + taille -1 5.647384
                                             53.35342 59.35342
                                       50
4 + 1.acid -1 4.367406
                                       49
                                             48.98601 56.98601
Analysis of Deviance Table (Type III tests)
Response: lymph
        LR Chisq Df Pr(>Chisq)
         7.4983 1
radio
                          0.006176 **
taille
           6.2856 1
                          0.012172 *
1.acid 4.3674 1
                         0.036633 *
Signif. codes: 0 "***" 0.001 "**" 0.01 "*" 0.05 "." 0.1 " " 1
```

6 Validation

Pour prédire la variable \hat{y} , la règle d'affectation est la suivante : On affecte un nouvel individu \mathbf{x} à la classe telle que la probabilité à postériori est maximale, i.e

$$\hat{y} = argmax_{1 \le i \le k} \hat{\pi}(x)$$

Si la variable Y est binaire, cela revient à prédire $\hat{y} = 1$ si $\hat{\pi}(x) > 0.5$. On appelle probabilité de coupure la valeur 0.5. On peut éventuellement modifier cette probabilité. On dresse ensuite la matrice de confusion (ou cross-over) qui croisent les valeurs de Y et les valeurs prédites \hat{y} .

Exemple 3. Sur la prévision du cancer lymphatique, on dresse les matrices de confusions pour les deux modèles obtenus

Pour le modèle obtenu par sélection pas à pas et sélection backward par le critère d'AIC.

> table(backward\$fitted.values>0.5,cancer\$lymph)

```
0 1
FALSE 29 5
TRUE 4 15
```

Pour le modèle obtenu par sélection forward en utilisant le critère d'AIC, on obtient

> table(forward\$fitted.values>0.5,cancer\$lymph)

```
0 1
FALSE 29 9
TRUE 4 11
```

Le meilleur modèle est le premier modèle.

La comparaison de performance ne va pas toujours de soi, quand les modèles n'ont pas le même nombre de paramètres ou ne sont pas du même type. Le modèle le plus complexe sera plus performant sur les données ayant servi à l'estimation. Pour palier ce biais, deux méthodes sont proposées.

- On partage l'échantillon du départ en deux sous-échantillons : le premier dit d'apprentissage sert à estimer le modèle, le second de validation sert à construire la matrice de confusion. Cette méthode nécessite un grand nombre d'observations.
- On réalise une validation croisée en partageant en 10 échantillons les données : les 9 premiers servant à l'apprentissage et le dixième à la validation, puis on réalise une permutation circulaire sur le rôle des échantillons. Le taux d'erreur est obtenu comme une moyenne sur des 10 taux d'erreurs obtenus.
- Partition si possible du fichier en apprentissage et validation
- Régression complète
- Sélection de variables
 - Soit par une méthode de sélection pas à pas.
 - Soit en réalisant le test du rapport de vraisemblance pour enlever plusieurs variables a la fois.
 - Sélection automatique avec le critère d'Akaike.
- Comparaison des différents modèles avec les matrices de confusions.
- Choix du meilleur modèle s'il existe.