# La régression linéaire

MOD 2.3 Statistiques appliquées aux sciences de l'ingénieur

Celine Helbert

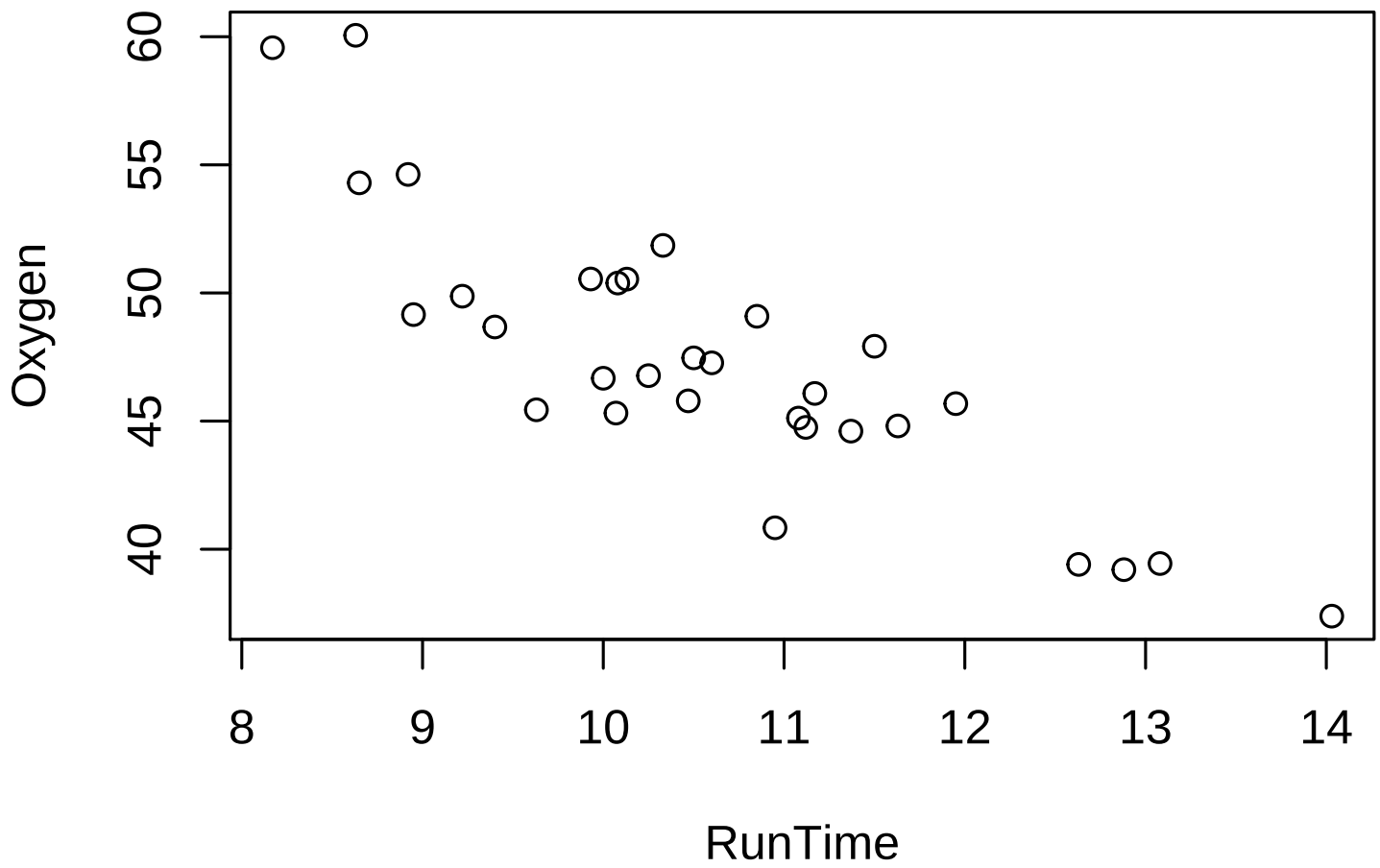
# MOD 2.3 Statistiques appliquées aux sciences de l'ingénieur

Céline Helbert

## La régression linéaire

Exemple : On s'intéresse à la consommation en oxygène lors d'une course. Des données sont récoltées pour plusieurs athlètes indiquant leur temps de course, leur age, leurs poids, etc. et la consommation en oxygène lors de la course. Dans le cadre de la régression linéaire on s'intéresse à **modéliser** la consommation en oxygène pour pouvoir la **prévoir** pour un nouvel individu. La Figure 1 montre les 31 consommations en oxygène (*Oxygen*) récoltées en fonction du temps de course (*RunTime*). La consommation en oxygène est clairement dépendante du temps de course. L'objectif du chapitre est de proposer un modèle le plus pertinent possible entre les variables explicatives et la variable *Oxygen*, d'estimer les paramètres du modèle, de prédire le modèle en tenant compte des incertitudes d'estimation et de prédiction.

| Age | Weight | Oxygen | RunTime | RestPulse | RunPulse | MaxPulse |
|---|---|---|---|---|---|---|
| 44 | 89.47 | 44.609 | 11.37 | 62 | 178 | 182 |
| 40 | 75.07 | 45.313 | 10.07 | 62 | 185 | 185 |
| 44 | 85.84 | 54.297 | 8.65 | 45 | 156 | 168 |
| 42 | 68.15 | 59.571 | 8.17 | 40 | 166 | 172 |
| 38 | 89.02 | 49.874 | 9.22 | 55 | 178 | 180 |
| 47 | 77.45 | 44.811 | 11.63 | 58 | 176 | 176 |
| 40 | 75.98 | 45.681 | 11.95 | 70 | 176 | 180 |
| 43 | 81.19 | 49.091 | 10.85 | 64 | 162 | 170 |
| 44 | 81.42 | 39.442 | 13.08 | 63 | 174 | 176 |
| 38 | 81.87 | 60.055 | 8.63 | 48 | 170 | 186 |
| 44 | 73.03 | 50.541 | 10.13 | 45 | 168 | 168 |
| 45 | 87.66 | 37.388 | 14.03 | 56 | 186 | 192 |
| 45 | 66.45 | 44.754 | 11.12 | 51 | 176 | 176 |
| 47 | 79.15 | 47.273 | 10.6 | 47 | 162 | 164 |
| 54 | 83.12 | 51.855 | 10.33 | 50 | 166 | 170 |
| 49 | 81.42 | 49.156 | 8.95 | 44 | 180 | 185 |
| 51 | 69.63 | 40.836 | 10.95 | 57 | 168 | 172 |
| 51 | 77.91 | 46.672 | 10 | 48 | 162 | 168 |
| 48 | 91.63 | 46.774 | 10.25 | 48 | 162 | 164 |
| 49 | 73.37 | 50.388 | 10.08 | 67 | 168 | 168 |
| 57 | 73.37 | 39.407 | 12.63 | 58 | 174 | 176 |
| 54 | 79.38 | 46.08 | 11.17 | 62 | 156 | 165 |
| 52 | 76.32 | 45.441 | 9.63 | 48 | 164 | 166 |
| 50 | 70.87 | 54.625 | 8.92 | 48 | 146 | 155 |
| 51 | 67.25 | 45.118 | 11.08 | 48 | 172 | 172 |
| 54 | 91.63 | 39.203 | 12.88 | 44 | 168 | 172 |
| 51 | 73.71 | 45.79 | 10.47 | 59 | 186 | 188 |
| 57 | 59.08 | 50.545 | 9.93 | 49 | 148 | 155 |
| 49 | 76.32 | 48.673 | 9.4 | 56 | 186 | 188 |
| 48 | 61.24 | 47.92 | 11.5 | 52 | 170 | 176 |
| 52 | 82.78 | 47.467 | 10.5 | 53 | 170 | 172 |


Oxygen
40
45
50
55
60
8
9
10
11
12
13
14
RunTime

Contexte et notations

- $X_1, ..., X_p$ sont des variables explicatives (descripteurs)
- $Y$ est la variable (quantitative) à expliquer (variable d'intérêt).

Objectif : on cherche à approcher la relation entre $Y$ et $(X_1, ..., X_p)$ à partir d'un échantillon à n observations.

# Plan

Soit $y = \begin{pmatrix} y_1 \\ \vdots \\ y_n \end{pmatrix}$ le vecteur des observations. On note $x_{ij}$ l'observation de la $j$ème variable explicative $X_j$ pour la $i$ème observation.

On suppose que $y$ est la réalisation du modèle suivant

$$\mathbf{y_i} = \beta_0 + \sum_{j=1}^{p} \beta_j x_{ij} + \epsilon_\mathbf{i}, \forall 1 \leq i \leq n$$

où $\beta_0, \ldots, \beta_p$ sont des nombres réels déterministes inconnus, $\epsilon_\mathbf{1}, ..., \epsilon_\mathbf{n}$ sont $n$ variables aléatoires non corrélées, de moyenne nulle $\mathbb{E}[\epsilon_\mathbf{i}] = 0$ et de variance constante $\mathbb{V}(\epsilon_\mathbf{i}) = \sigma^2$.

## Remarque

Les remarques suivantes peuvent être faites :

- Ce modèle est l'extension naturelle du modèle de régression linéaire simple à la prise en compte de plusieurs variables explicatives.
- Il est linéaire par rapport aux paramètres $\beta_0, \beta_1, ..., \beta_p$ inconnus.
- Parmi les variables $X_j$ on peut trouver des transformations comme $\log X_1$, $\sqrt{X_1}$, $X_1^2$ et des termes d'interactions comme $X_1 * X_2$.
- $\beta_0 + \sum_{j=1}^{p} \beta_j x_{ij}$ correspond à la partie déterministe du modèle, c'est l'espérance de la variable aléatoire $\mathbf{y_i}$, elle dépend de $x_{i1}$, ..., $x_{ip}$. $\epsilon_\mathbf{i}$ est un complément aléatoire et correspond à la part de $\mathbf{y_i}$ qui ne dépend pas de $x_{i1}$, ..., $x_{ip}$.

- Le modèle s'écrit aussi matriciellement (en gras les variables aléatoires, en rouge les paramètres inconnus) :

$$\begin{pmatrix} \mathbf{y_1} \\ . \\ . \\ . \\ \mathbf{y_n} \end{pmatrix} = X \begin{pmatrix} \beta_0 \\ . \\ . \\ . \\ \beta_p \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} \epsilon_\mathbf{1} \\ . \\ . \\ . \\ \epsilon_\mathbf{n} \end{pmatrix}$$

où $X = \begin{pmatrix} 1 & x_{11} & .. & x_{1p} \\ ... & .. & .. & .. \\ 1 & x_{n1} & .. & x_{np} \end{pmatrix}$ $\mathbb{E}\begin{pmatrix} \epsilon_\mathbf{1} \\ . \\ \epsilon_\mathbf{n} \end{pmatrix} = 0_n$ et

$$\mathbb{V}\begin{pmatrix} \epsilon_\mathbf{1} \\ . \\ \epsilon_\mathbf{n} \end{pmatrix} = \sigma^2 Id_n$$

Le problème est donc d'estimer $\beta_0, \beta_1, ..., \beta_p, \sigma^2$.

On cherche $b_0, b_1 \ldots b_p$ tels que
$C(b) = \sum_{i=1}^{n} (y_i - (b_0 + b_1 x_{i1} + \ldots + b_p x_{ip}))^2$ soit la plus petite possible.

Matriciellement, on obtient :

$$C(b) = {}^t(y - Xb)(y - Xb)$$

où $b = \begin{pmatrix} b_0 \\ b_1 \\ \vdots \\ b_p \end{pmatrix}$.

$C(b)$ est minimale au point $\hat{b} = ({}^tXX)^{-1}{}^tXy$.

Remarques :

- Chaque paramètre est une combinaison linéaire des observations.
- Le vecteur des prévisions, noté $\hat{y}$, s'exprime par :

$$\hat{y} = \hat{b}_0 1 + \hat{b}_1 x_1 + .. + \hat{b}_p x_p = X\hat{b} = X({}^tXX)^{-1\,t}Xy.$$

Pour la suite on note $H = X({}^tXX)^{-1\,t}X$. Il s'agit de la matrice de projection orthogonale sur $vect(1, x_1, ..., x_p)$.

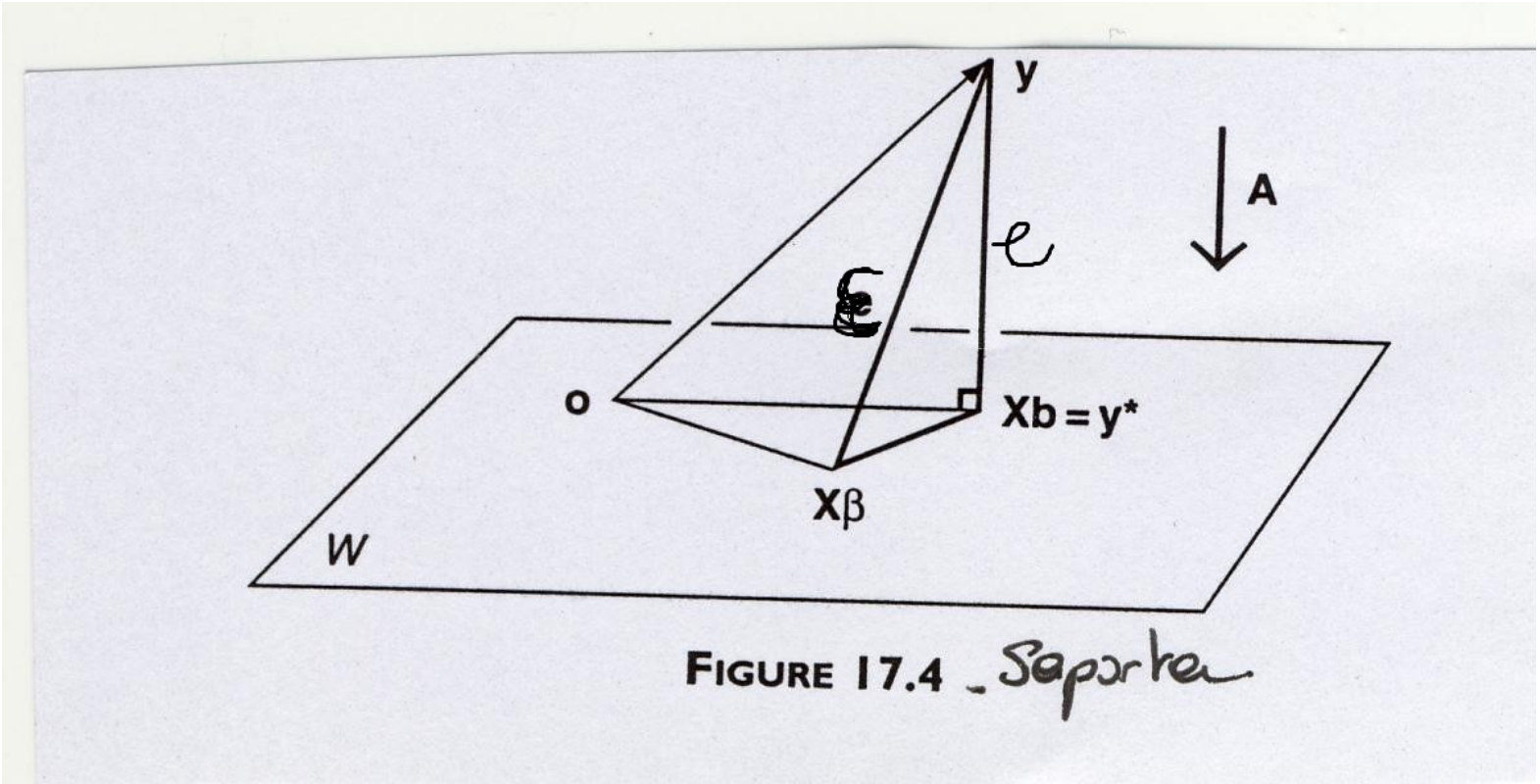



FIGURE 17.4 - Saporta

On note $\mathbf{B}$ l'estimateur des moindres carrés. On a : $\mathbf{B} = ({}^tXX)^{-1}{}^tX\mathbf{y}$.
De plus, on note $\hat{\mathbf{y}}$ le vecteur aléatoire des prévisions, on a $\hat{\mathbf{y}} = X\mathbf{B} = H\mathbf{y}$.

On a les propriétés suivantes :

**Théorème**

1. $\mathbf{B}$ *est un estimateur sans biais de* $\beta$.
2. $\mathbf{B}$ *est de tous les estimateurs sans biais de* $\beta$ *de la forme* $A\mathbf{y}$, *celui de variance minimale. On a* $\mathbb{V}(\mathbf{B}) = \sigma^2({}^tXX)^{-1}$
3. $\hat{\sigma}^2 = \frac{1}{n-p-1} \left\|\mathbf{y} - \hat{\mathbf{y}}\right\|^2$ *est un estimateur sans biais de* $\sigma^2$.

# Plan

Dans la suite pour réaliser des tests statistiques sur le modèle, on a besoin de l'hypothèse sur les lois des v.a..

On suppose alors que :

$$\begin{pmatrix} \mathbf{y_1} \\ . \\ . \\ . \\ \mathbf{y_n} \end{pmatrix} = X\beta + \begin{pmatrix} \epsilon_1 \\ . \\ . \\ . \\ \epsilon_n \end{pmatrix}$$

où $\begin{pmatrix} \epsilon_1 \\ . \\ \epsilon_n \end{pmatrix} \rightsquigarrow \mathcal{N}(0, \sigma^2 I_n)$

Dans la suite pour réaliser des tests statistiques sur le modèle, on a besoin de l'hypothèse sur les lois des v.a..
On suppose alors que :

$$\begin{pmatrix} \mathbf{y_1} \\ . \\ . \\ . \\ \mathbf{y_n} \end{pmatrix} = X\beta + \begin{pmatrix} \epsilon_\mathbf{1} \\ . \\ . \\ . \\ \epsilon_\mathbf{n} \end{pmatrix}$$

où $\begin{pmatrix} \epsilon_\mathbf{1} \\ . \\ \epsilon_\mathbf{n} \end{pmatrix} \rightsquigarrow \mathcal{N}(0, \sigma^2 I_n)$

## Compléments de Statistique

### Définition

Un vecteur aléatoire $Z$ est un vecteur gaussien ssi toute combinaison linéaire de ses composantes est une variable aléatoire gaussienne. Il est caratérisé par son espérance et sa matrice de variance-covariance.

### Théorème

*Théorème de Cochran : Soit $Z$ un vecteur gaussien centré réduit de $\mathbb{R}^n$ et soit $F$ un sous espace de $\mathbb{R}^n$ de dimension $p+1$. Soit $P_F$ le projecteur orthogonal de $\mathbb{R}^n$ sur $F$. Alors*

- $P_F Z \rightsquigarrow \mathcal{N}_n(0, P_F)$, $P_{F^\perp} Z \rightsquigarrow \mathcal{N}_n(0, P_{F^\perp})$ *et ces projections sont des vecteurs aléatoires indépendants*
- $\|P_F Z\|^2 \rightsquigarrow \chi^2_{p+1}$, $\|P_{F^\perp} Z\| \rightsquigarrow \chi^2_{n-(p+1)}$ *et ces variables aléatoires sont indépendantes*

Hypothèse : $\mathbf{y_i} = \beta_0 + \sum_{j=1}^{p} \beta_j x_{ij} + \epsilon_\mathbf{i}$ où $\epsilon_\mathbf{1}$, ..., $\epsilon_\mathbf{n}$ i.i.d. $\mathcal{N}_n(0, \sigma^2)$

## Proposition

*On a les résultats suivants :*

1. $\mathbf{B}$ *est un vecteur gaussien multi-dimensionnel,* $\mathbf{B} \rightsquigarrow \mathcal{N}_{p+1}(\beta, \sigma^2({}^tXX)^{-1})$
2. $\frac{1}{\sigma^2} \left\| \mathbf{y} - \hat{\mathbf{y}} \right\|^2 \rightsquigarrow \chi^2_{n-(p+1)}$

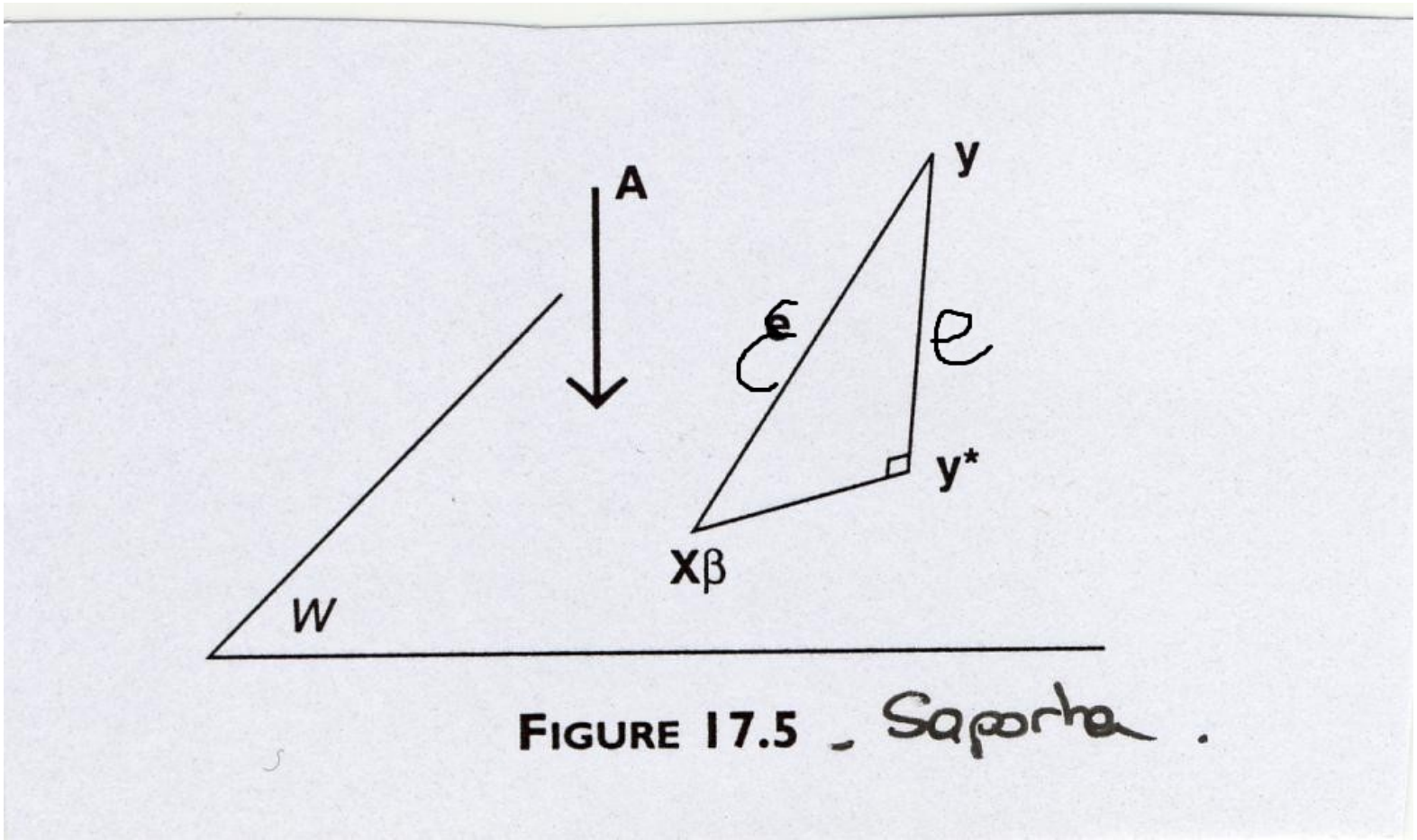



FIGURE 17.5 - Saporta .

## Proposition

*Dans le cadre de la régression linéaire, on a la décomposition suivante :*

$$\|\mathbf{y} - \bar{\mathbf{y}}\|^2 = \|\mathbf{y} - \hat{\mathbf{y}}\|^2 + \|\hat{\mathbf{y}} - \bar{\mathbf{y}}\|^2$$

*où* $\bar{\mathbf{y}} = \left(\frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n} \mathbf{y_i}\right) 1_{\mathbb{R}^n}$

## Définition

On appelle coefficient de détermination le réel $R^2$ défini par

$$R^2 = \frac{\text{Regression sum of square}}{\text{Total sum of squares}} = \frac{\sum (\hat{\mathbf{y}}_i - \bar{\mathbf{y}})^2}{\sum (\mathbf{y_i} - \bar{\mathbf{y}})^2}.$$

Remarque : R se nomme aussi le coefficient de corrélation multiple

## Proposition

*Dans le cadre de la régression linéaire, on a la décomposition suivante :*

$$\|\mathbf{y} - \bar{\mathbf{y}}\|^2 = \|\mathbf{y} - \hat{\mathbf{y}}\|^2 + \|\hat{\mathbf{y}} - \bar{\mathbf{y}}\|^2$$

*où* $\bar{\mathbf{y}} = \left(\frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n} \mathbf{y_i}\right) 1_{\mathbb{R}^n}$

## Définition

On appelle coefficient de détermination le réel $R^2$ défini par

$$R^2 = \frac{\text{Regression sum of square}}{\text{Total sum of squares}} = \frac{\sum (\hat{\mathbf{y}}_i - \bar{\mathbf{y}})^2}{\sum (\mathbf{y_i} - \bar{\mathbf{y}})^2}.$$

Remarque : R se nomme aussi le coefficient de corrélation multiple

En général, on regroupe les calculs dans une table d'analyse de la variance :

| source de variation | Somme des carrés |
|---|---|
| Expliquée par la régression | $SSR = \sum (\hat{\mathbf{y}}_i - \bar{\mathbf{y}})^2$ |
| Erreur Résiduelle | $SSE = \sum (\mathbf{y_i} - \hat{\mathbf{y}}_i)^2$ |
| Totale | $SST = \sum (\mathbf{y_i} - \bar{\mathbf{y}})^2$ |

Dans un deuxième temps, on procède au test de "significativité" du modèle dans son ensemble. Ce test teste l'hypothèse de non régresion i.e H0 : $\beta_1 = \beta_2 = .. = \beta_p = 0$.

Si H0 est vraie,

- $\frac{SSR}{\sigma^2} \rightsquigarrow \chi^2_p$
- $\frac{SSE}{\sigma^2} \rightsquigarrow \chi^2_{n-(p+1)}$

Soit $F$ la v.a. définie par

$$F = \frac{SSR/p}{SSE/(n-(p+1))} = \frac{(n-p-1)R^2}{p(1-R^2)} = \frac{MSR}{MSE}$$

suit sous $\mathbf{H}_0$ une loi de Fisher de degré de liberté (p,n-p-1).

C'est pourquoi, la table d'analyse de la variance présentée ci-dessus est complétée par deux colonnes supplémentaires, pour préparer le calcul de la statistique de Fisher.

| source de variation | Somme des carrés | DF | Carré moyen |
|---|---|---|---|
| Expliquée par la régression | $SSR = \sum (\hat{y}_i - \bar{y})^2$ | p | $MSR = \frac{SSR}{DF}$ |
| Résiduelle | $SSE = \sum (y_i - \hat{y}_i)^2$ | n-p-1 | $MSE = \frac{SSE}{DF}$ |
| Totale | $SST = \sum (y_i - \bar{y})^2$ | n-1 | |

Dans la pratique, on calcule $F_{obs} = \frac{MSR}{MSE}$ et on teste :

- si $F_{obs} < q_{1-\alpha}$ (où $q_{1-\alpha}$ est le quantile d'ordre $1-\alpha$ de la loi de Fisher de degré de liberté (p,n-p-1)), on conserve $H_0$
- sinon on rejette $H_0$.

Les logiciels renvoient $p = P_{H_0}(F > F_{obs})$

- si $p > 0,05$ on conserve $H_0$
- sinon on rejette $H_0$.

Commandes sous R : *summary*(*lm*) ou *anova*.

Dans la pratique, on calcule $F_{obs} = \frac{MSR}{MSE}$ et on teste :

- si $F_{obs} < q_{1-\alpha}$ (où $q_{1-\alpha}$ est le quantile d'ordre $1-\alpha$ de la loi de Fisher de degré de liberté (p,n-p-1)), on conserve $H_0$
- sinon on rejette $H_0$.

Les logiciels renvoient $p = P_{H_0}(F > F_{obs})$

- si $p > 0,05$ on conserve $H_0$
- sinon on rejette $H_0$.

Commandes sous R : *summary*(*lm*) ou *anova*.

Sous l'hypothèse de normalité des résidus, on rappelle que $B$ est un vecteur gaussien multi-dimensionnel, $\mathbf{B} \rightsquigarrow \mathcal{N}_{p+1}(\beta, \sigma^2({}^tXX)^{-1})$

**Théorème**

*La variable* $\dfrac{\mathbf{b_i} - \beta_\mathbf{i}}{\sqrt{\hat{\sigma}^2[({}^tXX)^{-1}]_{ii}}}$ *suit une loi de Student à* $(n-p-1)$ *degré de liberté.*

On peut ensuite construire le test suivant $H_0 : \beta_i = 0$

Sous $H_0$, la v.a. $\mathbf{T} = \frac{\mathbf{b_i}}{\sqrt{\hat{\sigma}^2[({}^tXX)^{-1}]_{ii}}}$ suit une loi de Student à $(n-p-1)$ degré de liberté, on calcule donc $t = T(\omega)$ et on la compare à la valeur de la table ou bien le logiciel calcule $P(|T| \geq |t|)$.

# Importation des données et Régression

```
>Fitness <- read.table('fitness.txt', header = TRUE)
>head(Fitness)
```

| | Age | Weight | Oxygen | RunTime | RestPulse | RunPulse | MaxPulse |
|---|---|---|---|---|---|---|---|
| 1 | 44 | 89.47 | 44.609 | 11.37 | 62 | 178 | 182 |
| 2 | 40 | 75.07 | 45.313 | 10.07 | 62 | 185 | 185 |
| 3 | 44 | 85.84 | 54.297 | 8.65 | 45 | 156 | 168 |
| 4 | 42 | 68.15 | 59.571 | 8.17 | 40 | 166 | 172 |
| 5 | 38 | 89.02 | 49.874 | 9.22 | 55 | 178 | 180 |
| 6 | 47 | 77.45 | 44.811 | 11.63 | 58 | 176 | 176 |

```
> summary(Fitness)
```

| Age | Weight | Oxygen | RunTime |
|---|---|---|---|
| Min. :38.00 | Min. :59.08 | Min. :37.39 | Min. : 8.17 |
| 1st Qu.:44.00 | 1st Qu.:73.20 | 1st Qu.:44.96 | 1st Qu.: 9.78 |
| Median :48.00 | Median :77.45 | Median :46.77 | Median :10.47 |
| Mean :47.68 | Mean :77.44 | Mean :47.38 | Mean :10.59 |
| 3rd Qu.:51.00 | 3rd Qu.:82.33 | 3rd Qu.:50.13 | 3rd Qu.:11.27 |
| Max. :57.00 | Max. :91.63 | Max. :60.05 | Max. :14.03 |

| RestPulse | RunPulse | MaxPulse |
|---|---|---|
| Min. :40.00 | Min. :146.0 | Min. :155.0 |
| 1st Qu.:48.00 | 1st Qu.:163.0 | 1st Qu.:168.0 |
| Median :52.00 | Median :170.0 | Median :172.0 |
| Mean :53.45 | Mean :169.6 | Mean :173.8 |
| 3rd Qu.:58.50 | 3rd Qu.:176.0 | 3rd Qu.:180.0 |
| Max. :70.00 | Max. :186.0 | Max. :192.0 |

# Régression - commande summary

```
>lm1 <- lm(Oxygen~.,data = Fitness)
>summary(lm1)
Call:
lm(formula = Oxygen ~ ., data = Fitness)

Residuals:
    Min      1Q  Median      3Q     Max
-5.4026 -0.8991  0.0706  1.0496  5.3847

Coefficients:
             Estimate Std. Error t value Pr(>|t|)
(Intercept) 102.93448   12.40326   8.299 1.64e-08 ***
Age          -0.22697    0.09984  -2.273  0.03224 *
Weight       -0.07418    0.05459  -1.359  0.18687
RunTime      -2.62865    0.38456  -6.835 4.54e-07 ***
RestPulse    -0.02153    0.06605  -0.326  0.74725
RunPulse     -0.36963    0.11985  -3.084  0.00508 **
MaxPulse      0.30322    0.13650   2.221  0.03601 *
---
Signif. codes:  0 '***' 0.001 '**' 0.01 '*' 0.05 '.' 0.1 ' ' 1

Residual standard error: 2.317 on 24 degrees of freedom
Multiple R-squared:  0.8487,        Adjusted R-squared:  0.8108
F-statistic: 22.43 on 6 and 24 DF,  p-value: 9.715e-09
```

# Plan

Les propriétés des estimateurs de la régression linéaire viennent de :

- $\forall i \in \{1, ..., n\}, E(\epsilon_i) = 0$ et $V(\epsilon_i) = \sigma^2 = cte$
- $\forall i \neq j, cov(\epsilon_i, \epsilon_j) = 0$

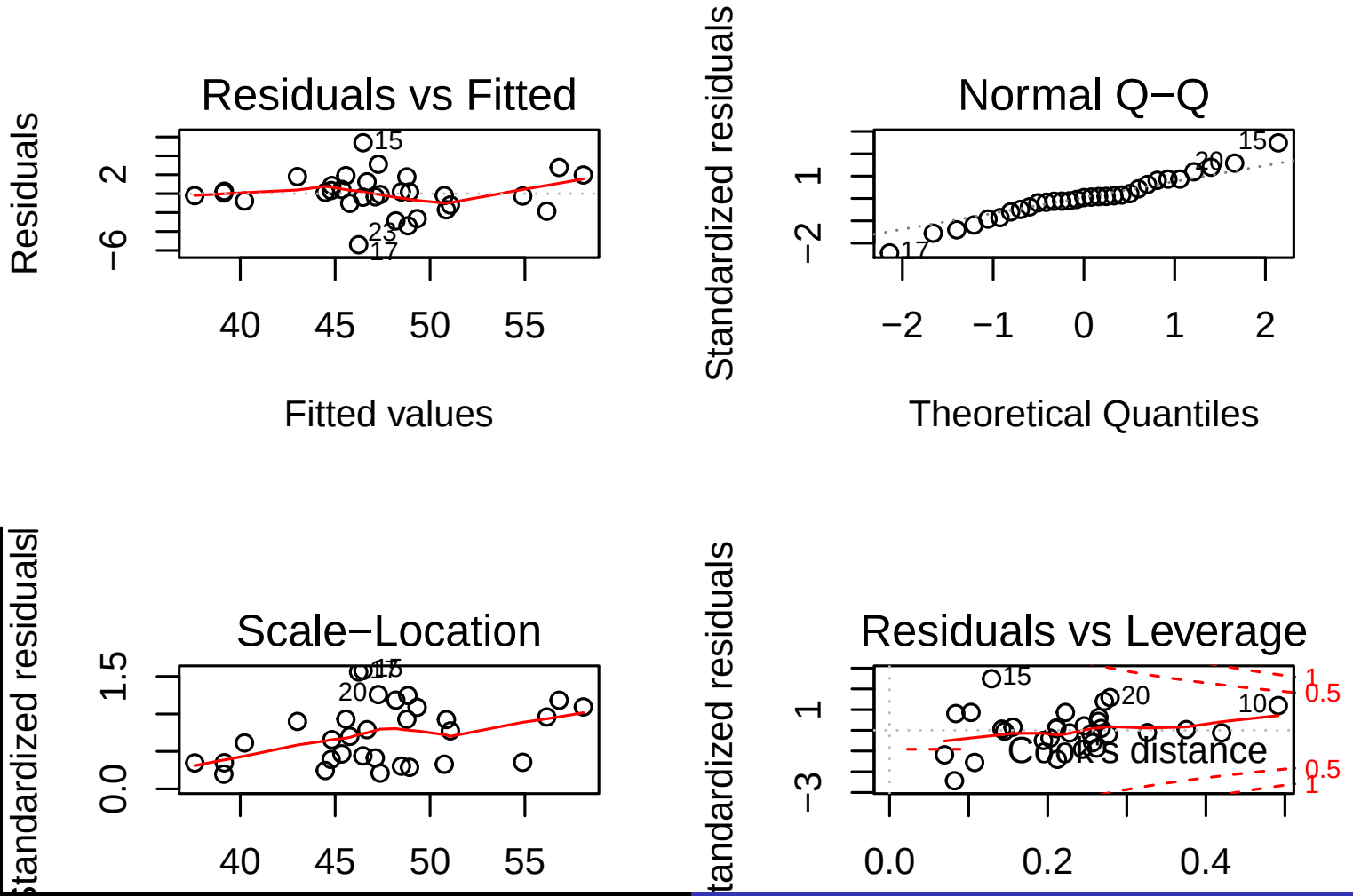
On vérifie ces deux hypothèses de manière empirique en traçant le graphe des résidus. En fonction du résultat, on peut proposer différentes modifications du modèle (quadratique, racine carrée, logarithme ou changement de variable pour rendre la variance constante).

Les propriétés des estimateurs de la régression linéaire viennent de :

- $\forall i \in \{1, ..., n\}, E(\epsilon_i) = 0$ et $V(\epsilon_i) = \sigma^2 = cte$
- $\forall i \neq j, cov(\epsilon_i, \epsilon_j) = 0$

On vérifie ces deux hypothèses de manière empirique en traçant le graphe des résidus. En fonction du résultat, on peut proposer différentes modifications du modèle (quadratique, racine carrée, logarithme ou changement de variable pour rendre la variance constante).

L'autre hypothèse est la distribution de loi normale, on le vérifie avec le graphique des QQ-plot (cf Figure 4)



Attention : certaines observations peuvent être singulières, il s'agit :

- des observations influentes $\rightarrow$ on calcule l'effet de levier,
- des observations aberrantes ou atypiques $\rightarrow$ résidus extrêmes.

## Observations influentes

### Définition

Soit $H = X({}^tXX)^{-1}{}^tX$, la matrice de projection orthogonale de $\mathbb{R}^n$ dans $Vect(X)$ et $h_i$ le i-ème terme de la diagonale de $H$.
$h_i$ s'appelle l'effet levier (leverage). Une grande valeur de $h_i$ est due aux valeurs extrêmes de $X$, donc a une observation influente.

## Observations aberrantes

### Définition

On définit respectivement les **résidus** et les **résidus standardisés** :

$$\begin{aligned} \mathbf{e} &= (Id - H)\mathbf{y} \\ \mathbf{r} &= diag[\hat{\sigma}^2(1-h_i)]^{-1/2}\mathbf{e} \end{aligned}$$

Si le modèle est correct, 95% des résidus standardisés, i.e. centrés réduits, ne doivent pas dépasser la valeur 3 en valeur absolue.

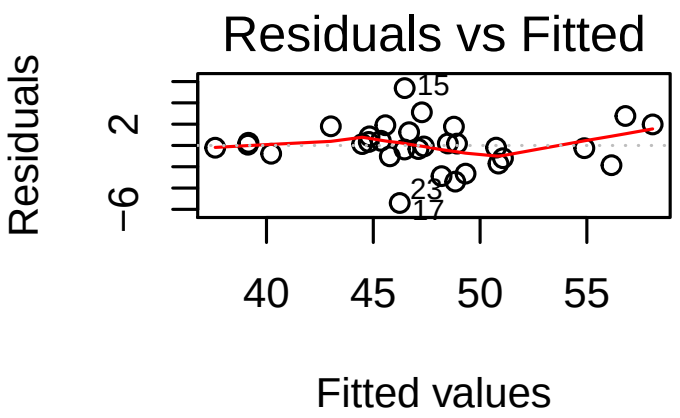
Les deux diagnostics précédents (effet levier et résidu élévé) sont combinés dans des mesures synthétiques. La plus utilisée est la distance de Cook's définie par

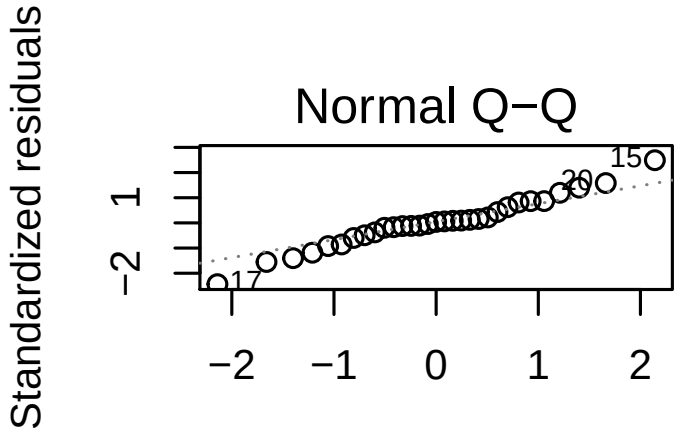
$$D_i = \frac{1}{\hat{\sigma}^2(p+1)} \left\| \hat{y} - \hat{y}_{(i)} \right\|^2 = \left( \frac{h_i}{1-h_i} \right) \frac{r_i^2}{p+1}.$$

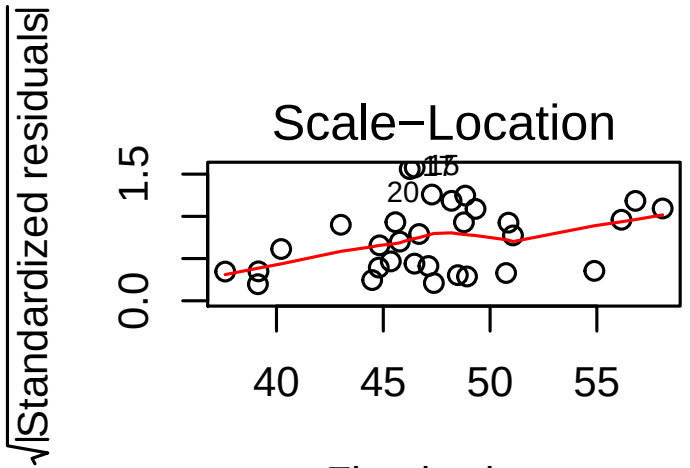
Une distance $D_i > 1$ indique en général une **valeur influente anormale**.

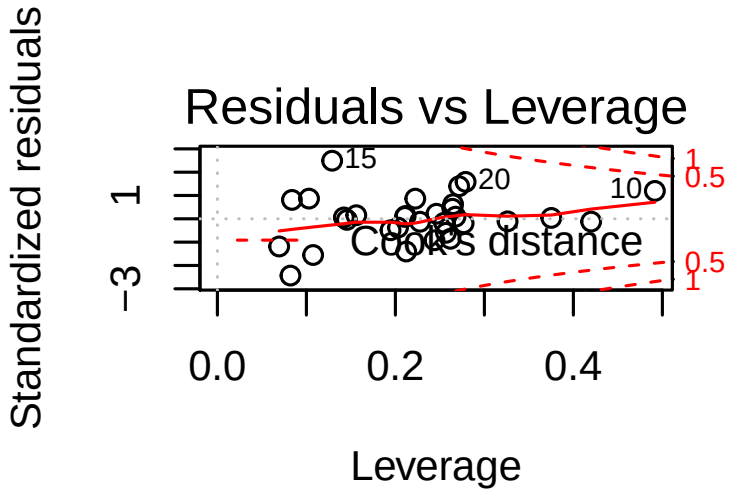
1. Graphe des résidus : Les points doivent être uniformément répartis, sans forme.
2. Droite des QQ-plot : L'hypothèse de normalité des résidus est rejetée si les points ne sont pas alignés.
3. Graphique de la racine des résidus en fonction des valeurs prédites (idem que le 1).
4. Graphique des résidus standardisés en fonction de l'effet levier avec les valeurs critiques de $D_i$.

```
>plot(lm1)
```


Residuals vs Fitted
Residuals
Fitted values
15
23
17
40
45
50
55
−6
2


Normal Q−Q
Standardized residuals
Theoretical Quantiles
15
20
17
−2
−1
0
1
2


Scale−Location
√|Standardized residuals|
Fitted values
20
40
45
50
55
0.0
1.5


Residuals vs Leverage
Standardized residuals
Leverage
Cook's distance
15
20
10
0.0
0.2
0.4
−3
1
0.5

# Plan

Soit $x_0 = (1, x_{01}, ..x_{0p})$ une nouvelle observation, on a les résultats suivants :

## Théorème

- $\hat{\mathbf{y}}_0 = {}^t x_0 \mathbf{B}$ *est une v.a.* $\mathcal{N}_n({}^t x_0 \beta; \sigma^2({}^t x_0({}^t XX)^{-1} x_0))$
- *Intervalle de Confiance pour* ${}^t x_0 \beta$ *:*

$$ {}^t x_0 b \pm t_{\alpha/2;n-p-1} \cdot \sqrt{\hat{\sigma}^2({}^t x_0({}^t XX)^{-1} x_0)} $$

- *Intervalle de Prédiction pour* $\mathbf{y_0}$ *:*

$$ \hat{y}_0 \pm t_{\alpha/2;n-p-1} \cdot \sqrt{\hat{\sigma}^2(1 + {}^t x_0({}^t XX)^{-1} x_0)} $$

Soit $x_0 = (1, x_{01}, ..x_{0p})$ une nouvelle observation, on a les résultats suivants :

## Théorème

- $\hat{\mathbf{y}}_0 = {}^t x_0 \mathbf{B}$ *est une v.a.* $\mathcal{N}_n({}^t x_0 \beta; \sigma^2({}^t x_0({}^t XX)^{-1} x_0))$
- *Intervalle de Confiance pour* ${}^t x_0 \beta$ *:*

$$ {}^t x_0 b \pm t_{\alpha/2;n-p-1} \cdot \sqrt{\hat{\sigma}^2({}^t x_0({}^t XX)^{-1} x_0)} $$

- *Intervalle de Prédiction pour* $\mathbf{y_0}$ *:*

$$ \hat{y}_0 \pm t_{\alpha/2;n-p-1} \cdot \sqrt{\hat{\sigma}^2(1 + {}^t x_0({}^t XX)^{-1} x_0)} $$

Soit $x_0 = (1, x_{01}, ..x_{0p})$ une nouvelle observation, on a les résultats suivants :

## Théorème

- $\hat{\mathbf{y}}_0 = {}^t x_0 \mathbf{B}$ *est une v.a.* $\mathcal{N}_n({}^t x_0 \beta; \sigma^2({}^t x_0({}^t XX)^{-1} x_0))$
- *Intervalle de Confiance pour* ${}^t x_0 \beta$ *:*

$$ {}^t x_0 b \pm t_{\alpha/2;n-p-1} \cdot \sqrt{\hat{\sigma}^2({}^t x_0({}^t XX)^{-1} x_0)} $$

- *Intervalle de Prédiction pour* $\mathbf{y_0}$ *:*

$$ \hat{y}_0 \pm t_{\alpha/2;n-p-1} \cdot \sqrt{\hat{\sigma}^2(1 + {}^t x_0({}^t XX)^{-1} x_0)} $$

# Cas - consommation en oxygène

```
>Fitness2 <-matrix(c(40,65,10, 60,170,185),1,6)
>colnames(Fitness2) <- c('Age','Weight','RunTime','RestPulse','RunPulse','MaxPulse')
>Fitness2
     Age Weight RunTime RestPulse RunPulse  MaxPulse
[1,]  40     65      10         60      170       185
>Fitness2 <- data.frame(Fitness2)
```

```
>predict(lm1,newdata =Fitness2)

      1
54.7139

>predict(lm1,newdata =Fitness2,interval = c( "confidence"),level = 0.95)

      fit      lwr      upr
1 54.7139 50.95357 58.47423

>predict(lm1,newdata =Fitness2,interval = c( "prediction"),level = 0.95)

      fit      lwr      upr
1 54.7139 48.63055 60.79724
```

# Plan

Rappel : $\mathbf{B} \rightsquigarrow N(\beta, \sigma^2({}^tXX)^{-1})$ et aussi $\mathbf{b_i} \rightsquigarrow N(\beta_i, \sigma^2({}^tXX)^{-1}_{ii})$
Si les variables $x_1$, ..., $x_p$ sont redondantes (colinéarité entre les variables explicatives) alors :

- $\mathbf{b_1}$, ..., $\mathbf{b_p}$ sont fortement corrélés
- ${}^tXX$ est mal conditionnée donc $({}^tXX)^{-1}$ a des termes élevés (forte variance pour certains coefficients).

Attention : la qualité de l'estimation dépend du plan d'expériences ! ! !

Rappel : $\mathbf{B} \rightsquigarrow N(\beta, \sigma^2({}^tXX)^{-1})$ et aussi $\mathbf{b_i} \rightsquigarrow N(\beta_i, \sigma^2({}^tXX)^{-1}_{ii})$
Si les variables $x_1$, ..., $x_p$ sont redondantes (colinéarité entre les variables explicatives) alors :

- $\mathbf{b_1}$, ..., $\mathbf{b_p}$ sont fortement corrélés
- ${}^tXX$ est mal conditionnée donc $({}^tXX)^{-1}$ a des termes élevés (forte variance pour certains coefficients).

Attention : la qualité de l'estimation dépend du plan d'expériences ! ! !

## cas - consommation en oxygène.

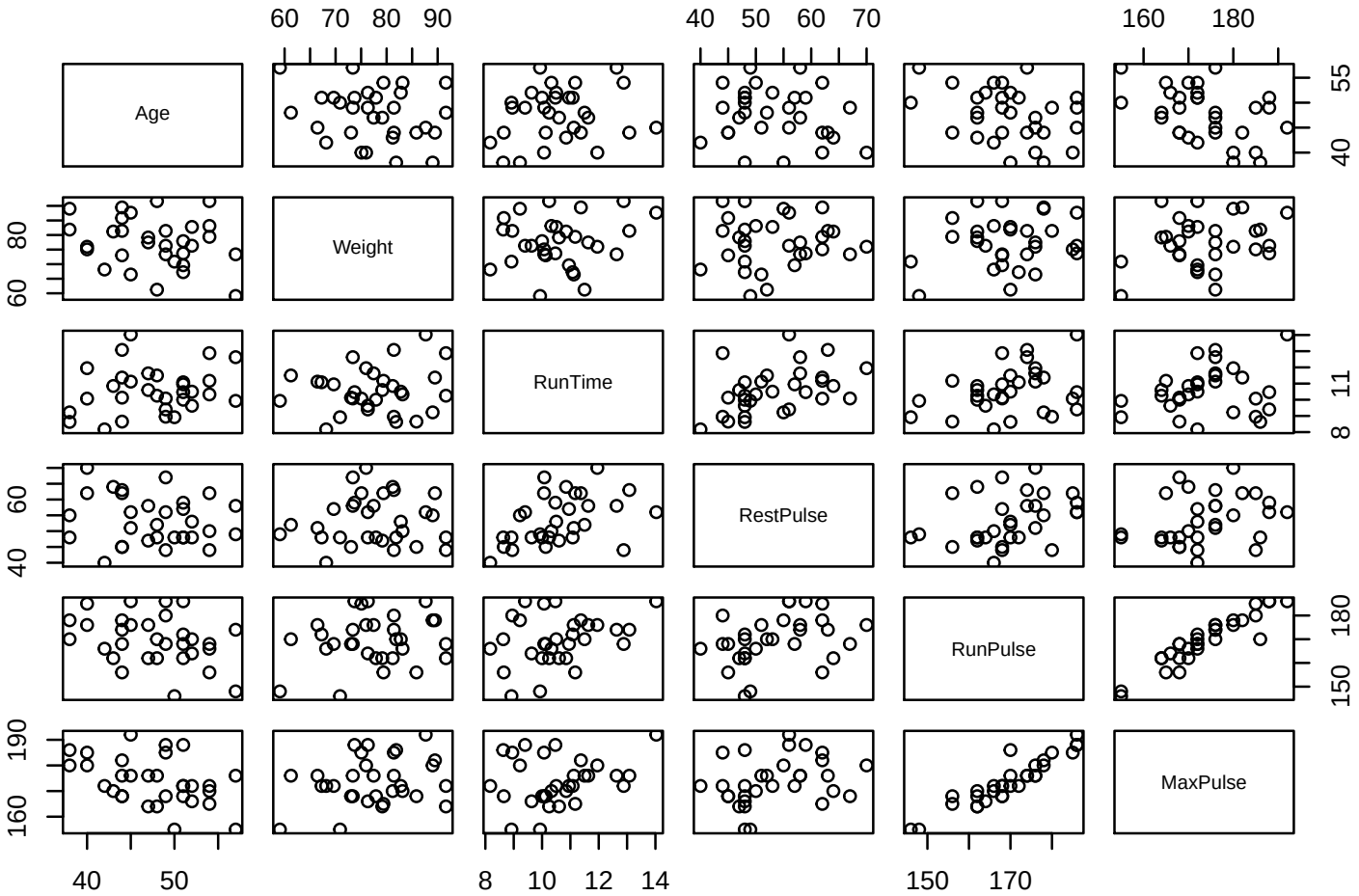
```
> vp = eigen(t(as.matrix(Fitness[,-3]))%*%as.matrix(Fitness[,-3]))$values
> max(vp)/min(vp)

[1] 59800.16

> corbeta
```

| | Age | Weight | RunTime | RestPulse | RunPulse | MaxPulse |
|---|---|---|---|---|---|---|
| Age | 1.000000000 | -0.006437788 | -0.3732403 | 0.14002167 | 0.05497320 | -0.15999696 |
| Weight | -0.006437788 | 1.000000000 | -0.1764922 | 0.06093716 | 0.20807273 | -0.37338795 |
| RunTime | -0.373240335 | -0.176492158 | 1.0000000 | -0.41270841 | -0.23391674 | 0.19468469 |
| RestPulse | 0.140021667 | 0.060937164 | -0.4127084 | 1.00000000 | -0.06466442 | -0.05936214 |
| RunPulse | 0.054973197 | 0.208072734 | -0.2339167 | -0.06466442 | 1.00000000 | -0.96035444 |
| MaxPulse | -0.159996964 | -0.373387952 | 0.1946847 | -0.05936214 | -0.96035444 | 1.00000000 |

Il est donc important de visualiser ou mesurer l'effet de la colinéarité entre les prédicteurs.



L'objectif de la régression linéaire est d'obtenir un modèle **prédictif**. Or si le conditionnement est mauvais (redondance d'information parmi les prédicteurs), la variance de prédiction est grande, le modèle est donc peu prédictif. C'est le contexte du surapprentissage (trop de paramètres à estimer). On cherche alors à simplifier le modèle pour gagner en prédiction (compromis biais variance).

Les critères suivants peuvent être utilisés pour sélectionner un modèle plus parcimonieux :

- $R^2$ : uniquement pour comparer des modèles comprenant le même nombre de variables
- Rsquare ajusté : $R^2_{adj} = 1 - \frac{n-1}{n-p-1}(1 - R^2)$
- Statistique de Student : attention à la corrélation entre les prédicteurs
- Critère d'Akaike : $AIC = -2 * logL + 2(p + 1)$ dans R
- Critère Bayesien : $BIC = -2 * logL + ln(n)(p + 1)$ dans R

Pas à pas sur le test de Student :

**forward** (Sélection) A chaque pas, une variable est ajoutée au modèle. C'est celle dont la valeur de $P(>|t|)$ (test de student) est minimum (variable la plus influente). La procédure s'arrête lorsque toutes les variables sont introduites ou lorsque $P(>|t|)$ reste plus grande qu'une valeur seuil fixée par défaut à 0.05.

**backward** (Élimination) L'algorithme démarre cette fois du modèle complet. A chaque étape, la variable associée ła plus grande valeur de $P(>|t|)$ est éliminée du modèle. La procédure s'arrête lorsque les variables restant dans le modèle ont des valeurs de $P(>|t|)$ plus petite qu'une valeur seuil fixée par défaut à 0.05.

Pas à pas sur le critère AIC (resp. BIC) :

**forward** (Sélection) A chaque pas, une variable est ajoutée au modèle. C'est celle qui fait le plus décroitre le critère AIC (resp. BIC). La procédure s'arrête lorsque toutes les variables sont introduites ou lorsque quelque soit la variable à ajouter le critère AIC (resp. BIC) remonte.

**backward** (Élimination) L'algorithme démarre cette fois du modèle complet. A chaque étape, la variable associée ła plus grande diminution de l'AIC est éliminée du modèle. La procédure s'arrête lorsque quelque soit la variable à retirer le critère AIC (resp. BIC) remonte.

# Commande Summary

```
Coefficients:
             Estimate Std. Error t value Pr(>|t|)
(Intercept) 102.93448   12.40326   8.299 1.64e-08 ***
Age          -0.22697    0.09984  -2.273  0.03224 *
Weight       -0.07418    0.05459  -1.359  0.18687
RunTime      -2.62865    0.38456  -6.835 4.54e-07 ***
RestPulse    -0.02153    0.06605  -0.326  0.74725
RunPulse     -0.36963    0.11985  -3.084  0.00508 **
MaxPulse      0.30322    0.13650   2.221  0.03601 *
---
Signif. codes:  0 '***' 0.001 '**' 0.01 '*' 0.05 '.' 0.1 ' ' 1

Residual standard error: 2.317 on 24 degrees of freedom
Multiple R-squared: 0.8487,         Adjusted R-squared: 0.8108
F-statistic: 22.43 on 6 and 24 DF,  p-value: 9.715e-09
```

# Sans *RestPulse*

```
Call:
lm(formula = Oxygen ~ . - RestPulse, data = Fitness)

Residuals:
    Min      1Q  Median      3Q     Max
-5.4724 -0.8476  0.0094  0.9976  5.3807

Coefficients:
             Estimate Std. Error t value Pr(>|t|)
(Intercept) 102.20428   11.97929   8.532 7.13e-09 ***
Age          -0.21962    0.09550  -2.300  0.03010 *
Weight       -0.07230    0.05331  -1.356  0.18714
RunTime      -2.68252    0.34099  -7.867 3.19e-08 ***
RunPulse     -0.37340    0.11714  -3.188  0.00383 **
MaxPulse      0.30491    0.13394   2.277  0.03164 *
---
Signif. codes:  0 '***' 0.001 '**' 0.01 '*' 0.05 '.' 0.1 ' ' 1

Residual standard error: 2.275 on 25 degrees of freedom
Multiple R-squared:  0.848,        Adjusted R-squared:  0.8176
F-statistic:  27.9 on 5 and 25 DF,  p-value: 1.811e-09
```

# Sans *Weight*

```
Call:
lm(formula = Oxygen ~ . - Weight - RestPulse, data = Fitness)

Residuals:
    Min      1Q  Median      3Q     Max
-4.9685 -1.1654 -0.0636  1.2004  4.7726

Coefficients:
            Estimate Std. Error t value Pr(>|t|)
(Intercept) 98.14789   11.78569   8.328 8.26e-09 ***
Age         -0.19773    0.09564  -2.068  0.04877 *
RunTime     -2.76758    0.34054  -8.127 1.31e-08 ***
RunPulse    -0.34811    0.11750  -2.963  0.00644 **
MaxPulse     0.27051    0.13362   2.024  0.05330 .
---
Signif. codes:  0 '***' 0.001 '**' 0.01 '*' 0.05 '.' 0.1 ' ' 1

Residual standard error: 2.312 on 26 degrees of freedom
Multiple R-squared:  0.8368,        Adjusted R-squared:  0.8117
F-statistic: 33.33 on 4 and 26 DF,  p-value: 6.91e-10
```

# Sans *MaxPulse*

```
Call:
lm(formula = Oxygen ~ . - Weight - RestPuls\e - MaxPulse, data = Fitness)

Residuals:
    Min      1Q  Median      3Q     Max
-4.8752 -1.2493  0.2606  1.0324  4.8994

Coefficients:
            Estimate Std. Error t value Pr(>|t|)
(Intercept) 111.71806   10.23509  10.915 2.10e-11 ***
Age          -0.25640    0.09623  -2.664   0.0129 *
RunTime      -2.82538    0.35828  -7.886 1.77e-08 ***
RunPulse     -0.13091    0.05059  -2.588   0.0154 *
---
Signif. codes:  0 '***' 0.001 '**' 0.01 '*' 0.05 '.' 0.1 ' ' 1

Residual standard error: 2.441 on 27 degrees of freedom
Multiple R-squared:  0.8111,        Adjusted R-squared:  0.7901
F-statistic: 38.64 on 3 and 27 DF,  p-value: 6.557e-10
```

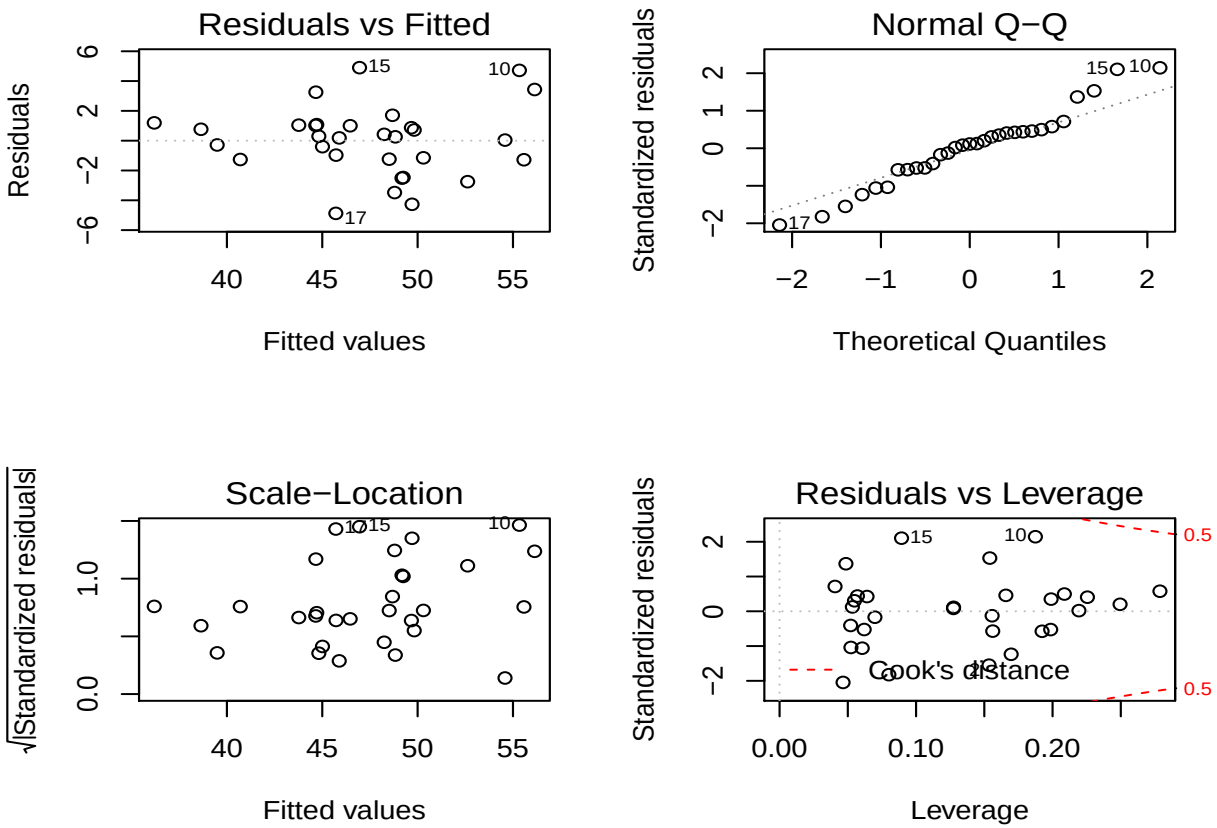



Figure – Modèle réduit 2

# Sélection avec le Critère AIC ou BIC

```
>slm_AIC <- step(lm1,direction= "backward",k = 2)
>slm_BIC <- step(lm1,direction= "backward",k = log(nrow(Fitness)))
>coef(slm_AIC)

 (Intercept)          Age       Weight      RunTime     RunPulse     MaxPulse
102.20427520  -0.21962138  -0.07230234  -2.68252297  -0.37340085   0.30490783

>coef(slm_BIC)

(Intercept)          Age      RunTime    RunPulse     MaxPulse
 98.1478880  -0.1977347  -2.7675788  -0.3481079   0.2705130
```

# Plan

Une des méthodes les plus utilisées pour estimer les paramètres d'un modèle probabiliste est la méthode du maximum de vraisemblance. L'idée est de choisir les paramètres qui rendent les observations les plus vraisemblables.

## Définition

La vraisemblance d'un échantillon $(X_1, \ldots, X_n)$ de la v.a. $X$ est la famille indicée par $\theta \in \Theta$ des lois du vecteur $(X_1, \ldots, X_n)$ sous l'hypothèse que $X$ suit la loi $\mathcal{L}(\theta)$.

## Définition

On suppose que, pour tout $\theta \in \Theta$, $X$ suit une loi discrète prenant ses valeurs dans un ensemble dénombrable $D_\theta$. La vraisemblance de l'échantillon $(X_1, \ldots, X_n)$ est la famille indicée par $\theta \in \Theta$, des applications, $\mathcal{L}(.;\theta) : D_\theta^n \to [0,1]$ définies pour tout $(x_1, \ldots, x_n) \in D_\theta^n$ sous l'hypothèse que $X$ suit la loi $\mathcal{L}(\theta)$, par

$$\mathcal{L}(x_1, \ldots, x_n; \theta) = P[X = x_1] \ldots . P[X = x_n].$$

## Définition

On suppose que, pour tout $\theta \in \Theta$, $X$ suit une loi de densité $f_\theta$. La vraisemblance de l'échantillon $(X_1, \ldots, X_n)$ est la famille indicée par $\theta \in \Theta$, des applications, $\mathcal{L}(.;\theta) : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}^+$ définies pour tout $(x_1, \ldots, x_n) \in \mathbb{R}^n$ sous l'hypothèse que $X$ suit la loi $\mathcal{L}(\theta)$, par

$$\mathcal{L}(x_1, \ldots, x_n; \theta) = f_\theta(x_1)....f_\theta(x_n).$$

La méthode du maximum de vraisemblance consiste à déterminer, pour tout $(x_1, ..., x_n)$, un paramètre réalisant le suprémum de $\mathcal{L}(x_1, ..., x_n; \theta)$ sur tous les paramètres possibles $\theta \in \Theta$. Puisqu'un tel paramètre dépend a priori de $(x_1, ..., x_n)$, on peut le noter $g(x_1, ..., x_n)$. Un estimateur du maximum de vraisemblance est alors un estimateur $T$ s'écrivant $T = g(X_1, \ldots, X_n)$, où l'on admet que g est mesurable.

Soit un échantillon $(X_1, \ldots, X_n)$ de la v.a. $X$ de loi $\mathcal{N}(m, \sigma^2)$, trouver l'estimateur du maximum de vraisemblance. Dans le cas gaussien, la vraisemblance a l'expression suivante :

$$\mathcal{L}(x_1, \ldots, x_n; m, \sigma^2) = \prod_{i=1}^{n} \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma^2}} exp(-\frac{(x_i - m)^2}{2\sigma^2})$$

Il est souvent plus simple d'optimiser le logarithme de la vraisemblance $-ln(\mathcal{L}(x_1, \ldots, x_n; m, \sigma^2))$, où :

$$\begin{aligned} l(x_1, \ldots, x_n; m, \sigma^2) &= -ln\left(\mathcal{L}(x_1, \ldots, x_n; m, \sigma^2)\right) \\ &= \frac{n}{2} ln(2\pi\sigma^2) + \sum_{i=1}^{n} \frac{(x_i - m)^2}{2\sigma^2} \end{aligned}$$

La fonction étant convexe, l'optimum existe et est obtenu au point où le gradient est nul. On obtient :

$$\hat{m} = \frac{\sum_{i=1}^{n} x_i}{n}$$

$$\hat{\sigma^2} = \frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n}(x_i - \hat{m})^2$$

1. Montrer que $\mathbf{B}$, l'estimateur de $\beta$ par moindres carrés, correspond à l'estimateur du maximum de vraisemblance. Pour ce faire, on écrira la vraisemblance du vecteur aléatoire ${}^t(\mathbf{y_1}, \ldots, \mathbf{y_n})$ où $\mathbf{y_i}$ est gaussien de moyenne $\beta_0 + \sum_{j=1}^{p} \beta_j x_{ij}$ et de variance $\sigma^2$.
2. Trouver l'estimateur de $\sigma^2$ par maximum de vraisemblance.