

Formation — Module 2

Nicolas Bez, Jérôme Guitton,

Pascal Neveu *, Emmanuel Paradis

Sète, 27–29 novembre 2007



Programme

	Mardi 27	Mercredi 28	Jeudi 29
9:00–12:00	Rappel sur R (EP)	Interface R et bases de données (JG, PN)	Données spatiales et cartographie
	Programmation R (PN)		(NB, JG)
13:30–17:00	Manipulation de chaînes de caractères (EP)	Modèles linéaires (EP)	Modèles mixtes, méthodes multivariées (EP)
	Graphiques avancés (EP)		questions ouvertes

I Rappel sur R

La structure des données dans R

R ne manipule que des données en mémoire vive (RAM).

Les lectures et écritures de fichiers de données doivent être faites explicitement.

La structure de base des données est le *vecteur* (*atomic object*).

Les informations supplémentaires sont stockées dans les attributs.

Tous les objets ont deux attributs intrinsèques : le *mode* et la *longueur*.

```
> x <- c("B", "R")
> mode(x); length(x)
[1] "character"
[1] 2
```

Les autres structures de données sont créées soit en ajoutant des attributs (facteur, matrice, 'Date', 'ts', ...), soit en assemblant des objets (tableau, liste).

```
> attributes(x)
NULL
> f <- factor(x)</pre>
> f
[1] B R
Levels: B R
> attributes(f)
$levels
[1] "B" "R"
$class
[1] "factor"
> mode(f)
[1] "numeric"
> str(f)
Factor w/ 2 levels "B", "R": 1 2
```

La *classe* est un attribut qui va affecter l'action des fonctions *génériques* : print, summary, plot, ... > print function (x, ...)UseMethod("print") <environment: namespace:base> > print.factor function (x, quote = FALSE, max.levels = NULL,width = getOption("width"), ...) ord <- is.ordered(x)</pre> if $(length(x) \ll 0)$ cat(if (ord)

print.factor est une method dans le jargon de R.

"ordered"

```
> z <- as.Date(as.character(2001:2005), "%Y")
> z
[1] "2001-11-15" "2002-11-15" "2003-11-15" "2004-11-15"
[5] "2005-11-15"
> str(z)
Class 'Date' num [1:5] 11637 12002 12367 12733 13098
> attributes(z)
$class
[1] "Date"
> str(co2)
Time-Series [1:468] from 1959 to 1998: 315 316 316 318 318 ...
> mode(co2)
[1] "numeric"
```

```
> attributes(co2)
$tsp
[1] 1959.000 1997.917 12.000
$class
[1] "ts"
> plot(co2)
```

La plupart des fonctions faisant une analyse dans R retournent un objet de classe du même nom :

```
> class(lm(1 ~ 1))
[1] "lm"
> class(aov(1 ~ 1))
[1] "aov" "lm"
```

Utilisation des fonctions de R

Les arguments sont passés par leurs positions ou par leur noms :

En pratique, le passage de plusieurs arguments par position est à éviter pour les fonctions avec beaucoup d'options (plot, read.table, legend, ...).

Dans certaines fonctions, les arguments ne peuvent pas être passés par position : save, rm, cat ...

Si le nom de l'argument est abrégé de façon non-ambigüe, une correspondance est faite :

R recycle largement les arguments :

L'indexation logique recycle les indices, mais pas l'indexation numérique :

```
> x[1] # != x[c(1, 1)]
[1] "B"
> x[TRUE] # == x[c(TRUE, TRUE)]
[1] "B" "R"
```

Les données sont souvent converties implicitement (coercion) :

```
> c(1, "a")
[1] "1" "a"
> if (0) print("OK")
>
```

Les « packages »

```
> sessionInfo()
R version 2.6.0 (2007-10-03)
i486-pc-linux-gnu
locale:
attached base packages:
[1] stats graphics grDevices utils datasets
[6] methods base
loaded via a namespace (and not attached):
[1] rcompgen_0.1-15
```

```
> search()
                    "package:stats"
[1] ".GlobalEnv"
[3] "package:graphics"
                    "package:grDevices"
[7] "package:methods" "Autoloads"
[9] "package:base"
> library()
> library(lattice)
> library(help = lattice) # ou help.start() -> HTML
> install.packages("plotrix")
> update.packages()
```

http://bg9.imslab.co.jp/Rhelp/

Il Manipulation des chaînes de caractères

- Gestion des 'names', 'dimnames', 'levels', . . .
- Annotation de figures : série 1, série 2, . . .
- « post-processing » de fichiers non conformes :

```
 \begin{array}{|c|c|c|c|c|}\hline 1 & & "1" \\ 1 \text{ ou 2} & \rightarrow \text{ read.table} \rightarrow & "1 \text{ ou 2"} \\ \hline 2 & & "2" \\ \hline \end{array}  as.numeric(gsub("ou.+", "", x))
```

■ Gérer les expressions :

```
> e <- parse(text = "1 + 2")
> e
expression(1 + 2)
attr(,"srcfile")
<text>
> eval(e)
[1] 3
```

Couper et coller des chaînes

```
> args(paste)
function (..., sep = " ", collapse = NULL)
NUTIT
> paste("site", 1:3)
[1] "site 1" "site 2" "site 3"
> paste("site", 1:3, sep = "")
[1] "site1" "site2" "site3"
> paste(letters[24:26], 1:3, sep = " < ")</pre>
[1] "x < 1" "y < 2" "z < 3"
> paste(1:5, "x", letters[1:2], sep = "+")
[1] "1+x+a" "2+x+b" "3+x+a" "4+x+b" "5+x+a"
> paste(LETTERS, collapse = "")
[1] "ABCDEFGHIJKLMNOPORSTUVWXYZ"
> paste(1:5, collapse = "-")
[1] "1-2-3-4-5"
> paste("x", 1:5, sep = "*", collapse = "; ")
[1] "x*1; x*2; x*3; x*4; x*5"
```

```
> x <- c("1", "1 ou 2", "2")
> strsplit(x, "") # pas de défaut pour 2nd argument
[[1]]
[1] "1"
[[2]]
[1] "1" " "o" "u" " "2"
[[3]]
[1] "2"
> strsplit(x, "ou")
[[1]]
[1] "1"
[[2]]
[1] "1 " " 2"
[[3]]
[1] "2"
```

```
> strsplit(x, " ou ")
[[1]]
[1] "1"
[[2]]
[1] "1" "2"
[[3]]
[1] "2"
> unlist(strsplit(x, " ou "))
[1] "1" "1" "2" "2"
```

Le second argument de strsplit est interprété, par défaut, comme une expression régulière (regexp).

Les expressions régulières

Kit de survie (tous les détails : ?regexp) :

```
nimporte quel caractère
                l'un des caractères entre crochets
[azerty]
[a-h] ou [0-9] idem que [abcdefgh] ou [0123456789]
a{6}
              idem que aaaaaa
a\{n, \}
                 le caractère en question n fois ou plus
                idem que a\{1,\}
a+
a\{n,m\}
                le caractère en question n à m fois
^aze
       au début de la chaîne
                à la fin de la chaîne
rty$
```

Les caractères { } [] + ^ \$ \ font partie de la syntaxe des *regexp* et doivent être précédés de \\.

Note : [A-Za-z] signifie « une lettre (majuscule ou minuscule) », alors que [A-Z] [a-z] signifie « une majuscule suivie d'une minuscule ».

Le caractère '\' étant lui-même doublé s'il est présent dans une chaîne, il sera quadruplé dans la *regexp* correspondante :

```
> strsplit("C:\\Program Files", "C:\\")
Error in strsplit("C:\\Program Files", "C:\\") :
  invalid split pattern 'C:\'
> strsplit("C:\\Program Files", "C:\\\\")
[[1]]
                     "Program Files"
[1] ""
Note: "\\", "\t" ou "\n" est un caractère unique:
> strsplit("new\nline", "\n")
[[1]]
[1] "new" "line"
> nchar("\n")
\lceil 1 \rceil 1
```

```
> strsplit("abcde", "bd")
[[1]]
[1] "abcde"
> strsplit("abcde", "[bd]")
[[1]]
[1] "a" "c" "e"
> strsplit("abcde", "[b-d]")
[[1]]
[1] "a" "" "e"
> strsplit("abcde", c("b", "c", "d")) # == strsplit("abcde", "b")
[[1]]
[1] "a" "cde"
> strsplit("abcde", "bcd")
[[1]]
[1] "a" "e"
> strsplit("abcde", "b-d")
[[1]]
[1] "abcde"
```

```
> strsplit("a[bcd]e", "\\[bcd\\]")
[[1]]
[1] "a" "e"
> strsplit("a[bcd]e", "\\[[b-d]{3}\\]") # 27 combinaisons
[[1]]
[1] "a" "e"
> # utile avec: strsplit(X, "\\[.+\\]")
> strsplit("a[bcd]e", "[bcd]", fixed = TRUE)
[[1]]
[1] "a" "e"
```

Remplacer des caractères

```
> sub("a", "?", c("aaa", "aba"))
[1] "?aa" "?ba"
> gsub("a", "?", c("aaa", "aba"))
[1] "???" "?b?"
```

On notera les options fixed et ignore.case (FALSE par défaut les deux).

```
> nms_form <- c("Nicolas Bez", "Jérôme Guitton",
+ "Pascal Neveu", "Emmanuel Paradis")
> gsub("[a-zéô]+ ", ". ", nms_form)
[1] "N. Bez" "J. Guitton" "P. Neveu" "E. Paradis"
> sub("[a-zéô]+", ".", nms_form)
[1] "N. Bez" "J. Guitton" "P. Neveu" "E. Paradis"
```

```
> as.Date("15 jan 2001", "%d %b %Y")
[1] "2001-01-15"
> as.Date("15 janvier 2001", "%d %B %Y")
[1] NA
> x <- gsub("janvier", "01", "15 janvier 2001")
> x
[1] "15 01 2001"
> as.Date(x, "%d %m %Y")
[1] "2001-01-15"
```

Des fonctions plus simples à utiliser (sans *regexp*) :

```
> x <- "AAACGGTTCGTA"
> tolower(x)
[1] "aaacggttcgta"
> toupper(tolower(x))
[1] "AAACGGTTCGTA"
> chartr("AGCT", "TCGA", x)
[1] "TTTGCCAAGCAT"
```

Avec chartr, les deux premiers arguments doivent avoir le même nombre de caractères.

substr sert à extraire ou modifier une sous-chaîne dans un vecteur de mode caractère :

```
> substr(x, 1, 2)
[1] "AA"
> substr(x, 1, 2) <- "NN"
> x
[1] "NNACGGTTCGTA"
```

Recherche de motifs

```
> grep("Emmanuel", nms_form)
[1] 4
> grep("Emmanuel", nms_form, value = TRUE)
[1] "Emmanuel Paradis"
> grep("P", nms_form)
[1] 3 4
> grep("^P", nms_form)
[1] 3
```

Exemple: recherche de 'names' (applicable également aux 'dimnames' bien sûr):

```
> sel <- grep("^Pan ", names(x))
> x[sel]
   Pan paniscus Pan troglodytes
   1 2
```

Note: apropos et ls supportent aussi les expressions régulières (la seconde via l'option pattern).

Exercices II

- 1. Faites afficher la liste des fonctions dont le nom n'est composé que d'un caractère.
- 2. À l'aide de la fonction scan, lire le fichier 'Mammal_lifehistories_v2.txt' dans un vecteur de mode caractère tel que chaque ligne corresponde à un élément de ce vecteur. Quels sont les n° des lignes se rapportant aux Mustelidae? Enregistrer les données de cette famille dans un fichier séparé.
- 3. Concevoir un code qui changera dans un vecteur de mode caractère les noms de mois dans le no correspondant. On procédera progressivement :
 - (a) considérer uniquement "janvier" et "février";
 - (b) inclure la possibilité que ces mois soient abrégés ;
 - (c) inclure la possibilité que les mois soient en anglais ;
 - (d) résoudre le problème de la casse (majuscules/minuscules) ;
 - (e) généraliser aux douze mois.

III Graphiques avancés

Distinguer plusieurs séries sur un même graphe à l'aide d'un ou plusieurs facteurs.

```
> x <- iris[, 1]; y <- iris[, 2]; g <- iris$Species
> co <- c("blue", "red", "yellow")
> plot(x, y, col = co[g])
> co <- c("blue", "red", "red")
> psym <- c(1, 1, 19)
> plot(x, y, col = co[g], pch = psym[g])
> legend(6.5, 4.5, levels(g), pch = psym, col = co)
```

Le même principe peut être utilisé avec font et/ou cex.

Représenter les points avec des noms :

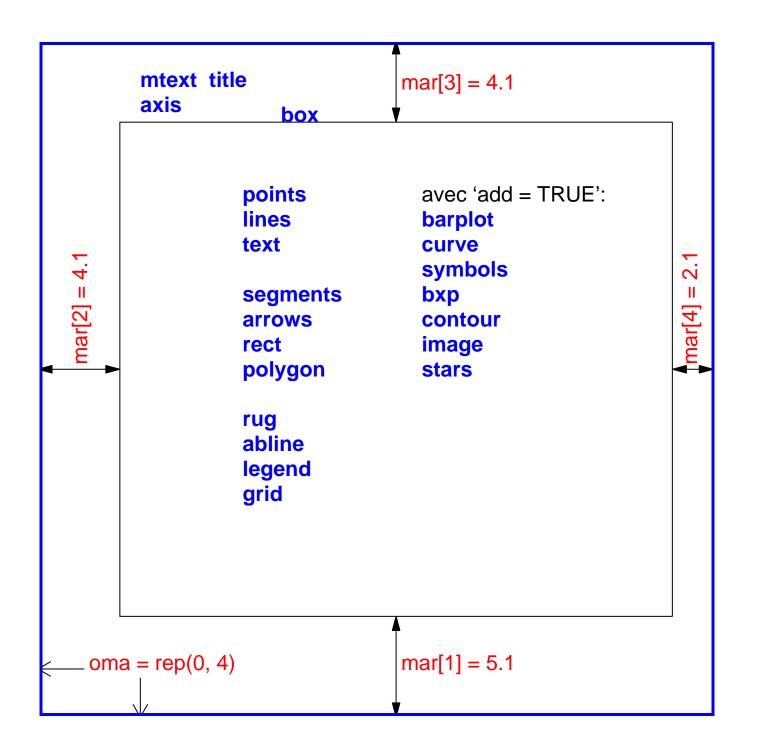
```
> plot(x, y, "n")
> text(x, y, as.character(g))
```

Application typique:

```
plot(DF$V1, DF$V2, "n")
text(DF$V1, DF$V2, rownames(DF))
```

Annotations de graphes

Vue d'ensemble des fonctions graphiques secondaires :



Exemple: polygon

```
> args(polygon)
function (x, y = NULL, density = NULL, angle = 45,
  border = NULL, col = NA, lty = par("lty"), ...)
> plot(rnorm(100))
> a <- c(1, 50, 100, 50)
> b < -c(0, -2, 0, 2)
> polygon(a, b)
> polygon(a, b, col = "white")
> polygon(a, b, col = "yellow", border = NA) # border="yellow")
mtext (marginal text) :
> par(oma = rep(1, 4))
> plot (1)
> mtext("Texte marginal")
> mtext("Texte marginal \"externe\"", outer = TRUE)
```

Le second appel à mtext n'a aucun effet si oma a ses valeurs par défaut.

oma (outer margin) est utile en conjonction avec layout :

```
> par(oma = c(3, 3, 0, 0))
> layout(matrix(1:4, 2, 2))
> layout.show()
> par(mar = rep(2, 4))
> for (i in 1:4) plot(runif(50), xlab="", ylab="")
> mtext("index", 1, outer = TRUE, line = 1)
> mtext("runif(50)", 2, outer = TRUE, line = 1)
```

Le paramètre mar peut-être fixé individuellement pour chaque graphe.

Produire une zone de « dessin » 100×100 :

```
par(mar = rep(0, 4))
plot(0, type = "n", xlim = c(0, 100), ylim = c(0, 100),
    xlab = "", ylab = "", xaxt = "n", yaxt = "n", xaxs = "i",
    yaxs = "i", bty = "n")
```

```
« clipping » avec par (xpd = TRUE) :
> x11()
> plot(0)
> points(0.8, 1.25)
> par(xpd = TRUE)
> points(0.8, 1.25)
Utile pour placer une légende (avec les données iris) :
> x11()
> plot(x, y, col = co[g], pch = psym[g])
> par(xpd = TRUE)
> legend(5, 4.7, levels(g), pch = psym, col = co,
+ bty = "n", horiz = TRUE)
```

Un script typique avec iris:

```
## png("iris.png") # pour page Web
## postscript("iris.eps", width = 8, height = 6)
x <- iris[, 1]; y <- iris[, 2]; g <- iris$Species
co <- c("blue", "red", "yellow")
## co <- rep("black", 3)
psym < -c(19, 19, 19)
## psym <- c(1, 2, 3)
par(bg = "lightslategrey")
plot(x, y, col = co[g], pch = psym[g], xlab = "Sepal.Length",
     vlab = "Sepal.Width")
par(xpd = TRUE)
legend(5, 4.7, levels(g), pch = psym, col = co,
       bty = "n", horiz = TRUE)
## dev.copy2eps(file = "iris.eps") # respecte dim du "device"
## dev.off()
```

... plus sophistiqué:

```
COLOR <- TRUE # FALSE (ou 1 # 0)
if (COLOR) {
    par(bg = "lightslategrey")
    co <- c("blue", "red", "yellow")</pre>
    psym < -c(19, 19, 19)
} else {
    par(bg = "transparent") # au cas où...
    co <- rep("black", 3)</pre>
    psym < -c(1, 2, 3)
```

plotrix (par Jim Lemon) est un package spécialisé dans les fonctions graphiques de haut niveau (avec de nombreux exemples) :

```
axis.break axis.mult
barp color2D.matplot
count.overplot gantt.chart
pie3D plotCI
polar.plot radial.plot
triax.plot
```

La plupart des packages spécialisés fournissent des fonctions graphiques appropriées (ade4, ape, maps, ...) utilisant notamment la fonction générique plot.

Lattice et Grid

```
> library(lattice)
> xyplot(y ~ x | g)
> xyplot(Sepal.Width ~ Sepal.Length | Species, data = iris)
> histogram(~ Sepal.Length | Species, data = iris)
> m < sample(1:5, size = 1e3, replace = TRUE)
> v < - sample(1:5, size = 1e3, replace = TRUE)
> x <- rnorm(1e3, m, v)
> table(m, v)
> hist(x) # != histogram(~x)
> histogram(~x | m * v)
> histogram(~x | v * m)
> m <- factor(m, labels = paste("mean =", 1:5))</pre>
> v <- factor(v, labels = paste("var =", 1:5))</pre>
> histogram(~x | m * v)
```

Principales caractéristiques de lattice :

- les fonctions graphiques « traditionnelles » ne peuvent pas être utilisées ;
- l'argument principal est une formule;
- il est possible d'utiliser un argument data pour localiser les variables;
- les objets graphiques sont modifiables.
- Les graphes conditionnés sont des outils puissants pour l'exploration des données.
 - Les fonctionnalités de lattice sont vastes : histogrammes, graphes 3D, ...
- Les fonctions ayant de nombreuses options il est difficile de s'y retrouver.
 Les paramètres graphiques sont difficiles à trouver et à modifier.
 Les fonctions panel* sont difficiles à utiliser, bien que très puissantes.

Les fonctions graphiques secondaires sont dans le package grid :

```
> library(grid)
> apropos("^grid\\.")
```

Pour démarrer, il est préférable d'utiliser lattice avec les paramètres par défaut. De plus le package est encore à un stade de développement (ver. 0.17 avec R 2.6.0).

rgl

Le package rgl est un « port » d'OpenGL à R :

```
> data(volcano)
> nr <- nrow(volcano)
> nc <- ncol(volcano)
> library(rgl)
> surface3d(1:nr, 1:nc, volcano, col = "green")
> clear3d()
> surface3d(1:nr*10, 1:nc*10, volcano, col = "green")
> surface3d(1:nr, 1:nc, volcano, col = "blue")
> # à comparer avec:
> persp(1:nr, 1:nc, volcano, col = "blue")
```

Exercices III

1. Écrire un script qui ajoutera une "zone" colorée à partir de trois vecteurs de même longueur (il n'est pas interdit de faire un brouillon avant d'écrire le code). On testera ce code avec :

```
x <- 1:100
tmin <- runif(100, 12, 15)
tmax <- runif(100, 22, 35)</pre>
```

2. Créer une fonction graphique secondaire à partir du code écrit cidessus.

IV Les Modèles Linéaires

Le modèle : $E(y) = \beta_1 x_1 + \beta_2 x_2 + \cdots + \alpha$

y: réponse x_1,x_2,\ldots : prédicteurs $\beta_1,\beta_2,\ldots,\alpha$: paramètres

Les observations : $y_i = \beta_1 x_{1i} + \beta_2 x_{2i} + \cdots + \alpha + \epsilon_i$

$$\epsilon_i \sim \mathcal{N}(0, \sigma^2)$$

Une régression « simple » :

```
> x <- 1:50
> y <- x + 3 + rnorm(50, 0, 10)
> mod <- lm(y ~ x)
> summary(mod)
```

Call:

lm(formula = y ~ x)

Residuals:

Min 1Q Median 3Q Max -17.1684 -4.6348 0.8496 6.7277 16.4951

Coefficients:

Estimate Std. Error t value Pr(>|t|) (Intercept) 3.81285 2.46452 1.547 0.128 x 0.93191 0.08411 11.079 7.95e-15

Residual standard error: 8.583 on 48 degrees of freedom Multiple R-Squared: 0.7189, Adjusted R-squared: 0.713 F-statistic: 122.8 on 1 and 48 DF, p-value: 7.952e-15

- > plot(x, y)
- > abline(mod)
- > abline(b = 1, a = 3, lty = 2)

```
> legend("topleft", legend = c("Modèle estimé",
+ "Modèle simulé"), lty = 1:2)
```

Les variables qualitatives sont codées avec les contrastes.

Cas avec deux classes : $z = \{R, B\}$, z est substitutée par x_z :

$$z = R \rightarrow x_z = 0$$
$$z = B \rightarrow x_z = 1$$

Cas avec trois classes : $z = \{R, B, V\}$, z est substitutée par x_{z_1} et x_{z_2} :

Cas général : pour une variable avec n catégories, n-1 variables 0/1 sont créées ; il y a donc n-1 paramètres supplémentaires associés à l'effet de cette variable.

Une analyse de variance à un facteur à trois niveaux :

```
> yb <- rnorm(60, 1:3)</pre>
> z < -q1(3, 1, 60)
> mod.b <- lm(yb ~z)
> summary(mod.b)
Call:
lm(formula = yb ~ z)
Residuals:
    Min 10 Median 30 Max
-2.00118 -0.52484 \quad 0.07318 \quad 0.78672 \quad 1.93827
Coefficients:
           Estimate Std. Error t value Pr(>|t|)
(Intercept) 1.3646 0.2210 6.174 7.44e-08
     0.4141 0.3126 1.325 0.190
z_2
       2.1182 0.3126 6.777 7.48e-09
z3
```

Note: il y a plusieurs type de contrastes:

Les tests statistiques (des effets) ne sont pas affectés par le choix du type de contrastes, mais les paramètres estimés seront différents :

```
> contr.treatment(gl(3, 1)) # défaut dans R, pas dans S-PLUS
2 3
1 0 0
2 1 0
3 0 1
> contr.SAS(gl(3, 1))
1 2
1 1 0
2 0 1
3 0 0
```

Cela peut avoir des conséquences pour comparer les résultats de différents logiciels.

Formulation générale des modèles linéaires

$$E(y) = \beta x$$
 Régression linéaire $E(y) = \beta z$ Analyse de variance (ANOVA) $E(y) = \beta_1 x + \beta_2 z$ Analyse de covariance (ANCOVA)

Dans tous les cas les erreurs sont normalement distribuées autour de la moyenne : ces modèles sont ajustés par la méthode des moindres carrés (minimiser $\sum (y_i - \hat{y}_i)^2$).

Dans R, aov et lm produisent le même ajustement; la différence est dans l'affichage des résultats.

Certaines fonctions nécessitent un objet de classe "aov", comme TukeyHSD (Tukey's honest significant difference):

```
> TukeyHSD(aov(yb ~ z))
  Tukey multiple comparisons of means
    95% family-wise confidence level
Fit: aov(formula = yb ~ z)
$ z
        diff lwr upr p adj
2-1 0.7669532 0.0253120 1.508594 0.0411461
3-1 1.9325080 1.1908668 2.674149 0.0000002
3-2 1.1655548 0.4239136 1.907196 0.0010780
> plot(TukeyHSD(aov(yb ~ z)))
```

Les interactions

Pour coder une interaction, de nouvelles variables sont créées par le produit des variables ou de leurs codages numériques. Si une variable qualitative a plus de deux niveaux, de nouvelles variables sont créées avec le produit de toutes les combinaisons 2 à 2 possibles entre les deux variables.

Pour deux variables avec n_1 et n_2 catégories, respectivement, $(n_1 - 1)(n_2 - 1)$ nouvelles variables 0/1 sont créées.

Pour les interactions d'ordre supérieur (entre trois variables ou plus), les combinaisons 3 à 3, 4 à 4, etc, sont utilisées.

model.matrix permet de visualiser le modèle numérique créé par une formule (notez la première colonne de 1) :

```
> model.matrix(yb ~ z)
> data.frame(model.matrix(yb ~ z), z)
```

Les diagnostiques de régression

```
> plot(y, mod$fitted.values)
> abline(a = 0, b = 1, lty = 3)
> hist(mod$residuals)

> par(mfcol = c(2, 2))
> plot(mod)
```

- 1. Valeurs prédites par le modèle \hat{y}_i (en x) et résidus r_i (en y); idem que plot (mod\$fitted.values, mod\$residuals).
- 2. Valeurs prédites (en x) et racine carrée des résidus standardisés, pour la $i^{\text{ème}}$ observation :

$$e_i = r_i / \left(\hat{\sigma} \sqrt{1 - h_{ii}} \right)$$

Les résidus r_i ne sont en fait pas indépendants et de variance homogène. La matrice de variance-covariance H est calculée avec $H = X(X^TX)^{-1}X^T$

(dans R : H <- x %*% solve(t(x) %*% x) %*% t(x), en prenant éventuellement x <- cbind(1, x), ou x <- model.matrix(mod)); les h_{ii} sont les éléments sur la diagonale de cette matrice (H[i, i]) qui peuvent être aussi calculés par hatvalues (mod).

- 3. Vu que $e_i \sim \mathcal{N}(0, 1)$, le graphe des valeurs de distribution prédites par cette loi et celles observées doit donner x = y.
- 4. $leverage = h_{ii}$, mesure de l'influence de chaque observation sur la régression.

Pour apprécier la différence entre résidus et influence :

```
> mod.new <- lm(c(y, 75) ~ c(x, 100))
> plot(mod.new)
```

Les tests d'hypothèse

```
> LIFEHIST <- read.table("Mammal_lifehistories_v2.txt",</pre>
                         header = TRUE, sep = "\t",
+
                         na.strings = c("-999", "-999.00"))
+
> LIFEHIST <- LIFEHIST[1:1440, ]
> m1 <- lm(litter.size ~ mass.q., data = LIFEHIST)</pre>
> summary(m1)
Call:
lm(formula = litter.size ~ mass.g., data = LIFEHIST)
Residuals:
   Min 10 Median 30 Max
-1.8053 -1.7253 -0.3053 1.1947 11.3747
Coefficients:
             Estimate Std. Error t value Pr(>|t|)
(Intercept) 2.805e+00 4.949e-02 56.68 < 2e-16
```

```
mass.g. -2.605e-08 9.238e-09 -2.82 0.00488
Residual standard error: 1.769 on 1284 degrees of freedom
  (154 observations deleted due to missingness)
Multiple R-Squared: 0.006156, Adjusted R-squared: 0.005382
F-statistic: 7.953 on 1 and 1284 DF, p-value: 0.004875
> m2 <- lm(litter.size ~ order, data = LIFEHIST)
> summary(m2)
Call:
lm(formula = litter.size ~ order, data = LIFEHIST)
Residuals:
   Min 10 Median 30 Max
-3.0338 - 0.7268 - 0.1844 0.5615 10.5390
Coefficients:
                   Estimate Std. Error t value Pr(>|t|)
```

```
(Intercept) 1.27192 0.11261 11.295 <2e-16
orderCarnivora 1.49249 0.15108 9.879 <2e-16
orderCetacea -0.25953 0.23598 -1.100 0.2716
[\ldots]
Residual standard error: 1.406 on 1339 degrees of freedom
  (84 observations deleted due to missingness)
Multiple R-Squared: 0.3791, Adjusted R-squared: 0.3716
F-statistic: 51.09 on 16 and 1339 DF, p-value: < 2.2e-16
> anova(m2) # == summary(aov(litter.size ~ order ...
Analysis of Variance Table
Response: litter.size
           Df Sum Sq Mean Sq F value Pr(>F)
order 16 1616.98 101.06 51.087 < 2.2e-16
Residuals 1339 2648.85 1.98
> m3 <- lm(litter.size ~ mass.g.*order, data = LIFEHIST)</pre>
> summary(m3)
```

```
Call:
lm(formula = litter.size ~ mass.g. * order, data = LIFEHIST)

Residuals:
    Min     1Q Median     3Q Max
-3.1418 -0.6929 -0.1807     0.5588 10.4874

Coefficients: (2 not defined because of singularities)
[...]
```

```
Residual standard error: 1.381 on 1254 degrees of freedom (154 observations deleted due to missingness)

Multiple R-Squared: 0.4086, Adjusted R-squared: 0.394

F-statistic: 27.95 on 31 and 1254 DF, p-value: < 2.2e-16
```

> anova(m3)

Analysis of Variance Table

```
Response: litter.size
             Df Sum Sq Mean Sq F value Pr(>F)
mass.g. 1 24.90 24.90 13.0521 0.0003149
order 16 1548.57 96.79 50.7338 < 2.2e-16
mass.g.:order 14 79.29 5.66 2.9688 0.0001725
Residuals 1254 2392.27 1.91
> anova(lm(litter.size ~ order*mass.g., data = LIFEHIST))
Analysis of Variance Table
Response: litter.size
             Df Sum Sq Mean Sq F value Pr(>F)
      16 1573.46 98.34 51.5493 < 2.2e-16
order
mass.g. 1 0.01 0.0044 0.9470630
order:mass.g. 14 79.29 5.66 2.9688 0.0001725
Residuals 1254 2392.27 1.91
> drop1(m3, test = "F")
Single term deletions
```

Model:

```
litter.size ~ mass.g. * order
            Df Sum of Sq RSS AIC F value Pr(F)
                        2392.27 862.23
<none>
mass.g.:order 14 79.29 2471.56 876.16 2.9688 0.0001725
> drop1(lm(litter.size~order+mass.g., data=LIFEHIST), test="F")
Single term deletions
Model:
litter.size ~ order + mass.q.
       Df Sum of Sq RSS AIC F value Pr(F)
              2471.6 876.2
<none>
order 16 1548.6 4020.1 1469.8 49.6544 <2e-16
mass.g. 1 0.008413 2471.6 874.2 0.0043 0.9476
```

- > library(lattice)
- > xyplot(litter.size ~ log(mass.g.) | order, data = LIFEHIST)

Les modèles ne peuvent être comparés que s'ils ont été ajustés au même vecteur de réponses :

- y ~ x et log(y) ~ x ne peuvent *pas* être comparés!
- y ~ x et y ~ x + z ne seront pas ajustés aux mêmes données si x et z ont des NA à des observations différentes.

```
res.lm <- lm(....
res.aov <- aov(....</pre>
```

- 1. summary (res.aov) : tableau d'ANOVA (= tests sur les effets $\sim F$) summary (res.lm) : tests sur paramètres ($\sim t$)
- 2. anova

Si un modèle : tableau d'ANOVA en incluant les effets dans l'ordre de la formule.

Si plusieurs modèles : tableau d'ANOVA entre les modèles.

- (a) anova (res.lm) et summary (res.aov) sont identiques.
- (b) L'ordre des termes dans la formule est important s'il y a plusieurs prédicteurs qualitatifs et que les effectifs retournés par table sont inégaux (unbalanced design).

- 3. drop1 : teste les effets individuels vs. le modèle complet.
 - (a) Le principe de marginalité est respecté.
 - (b) drop1 (res.lm) et summary (res.lm) sont identiques si tous les prédicteurs sont continus ou avec deux catégories (car chaque effet a 1 ddl) et qu'il n'y a pas d'interaction dans le modèle.
- 4. add1 teste l'ajout d'un ou plusieurs effets.
 - Ex.: si le modèle initial n'inclut pas d'interaction : add1 (res, ~.^2) testera l'addition de chaque interaction individuellement.
- 5. predict calcule les valeurs prédites par le modèle. L'option newdata sert à spécifier de nouvelles valeurs pour les prédicteurs; ceux-ci doivent être nommés de la même façon que dans la formule :

```
> predict(m1, newdata = 1e9)
Error in eval(predvars, data, env) :
    not that many frames on the stack
> predict(m1, newdata = data.frame(mass.g. = 1e9))
[1] -23.24696
> ndf <- data.frame(mass.g. = 1e9)</pre>
```

```
> predict(m1, newdata = ndf)
[1] -23.24696
```

anova, drop1 add1 et predict sont des fonctions génériques.

Les 'méthodes' sont documentées séparément : ?anova donne peu d'information; c'est ?anova.lm (ou ?anova.glm, ...) qu'il faut généralement consulter.

V Les modèles linéaires généralisés

Deux caractéristiques du modèle linéaire classique sont limitantes : (i) la moyenne prédite est distribuée entre $-\infty$ et $+\infty$, (ii) l'hypothèse de normalité des résidus.

Les transformations de la réponse font perdre la nature des données analysées (fécondité, effectifs, durée de vie, ...).

L'idée des modèles linéaires généralisés (MLG ou *GLM* pour *generalized linear models*) est de reprendre le modèle linéaire $E(y) = \beta x$ et de l'étendre à d'autres distributions. Pour prendre en compte que la moyenne peut être distribuée sur un intervalle fini, on considérera une fonction de celle-ci :

$$g[E(y)] = \beta x$$

telle que $-\infty < g[E(y)] < +\infty$. g est appelée une fonction de *lien* (*link*).

Les données originales ne sont pas transformées $g[E(y)] \neq g(y)$.

Quatre distributions sont couramment utilisées :

Gaussienne : réponse continue entre $-\infty$ et $+\infty$

Poisson : réponse entière entre 0 et $+\infty$

Binomiale : réponse entière entre 0 et n (nb de cas)

Gamma : réponse continue entre 0 et $+\infty$

La distribution des données pouvant être asymétrique, la méthode des moindres carrés n'est pas appliquable : les MLG sont ajustés par la méthode du maximum de vraisemblance (ML pour *maximum likelihood*).

```
> gm1 <- glm(litter.size ~ mass.g., data = LIFEHIST)
> summary(gm1)

Call:
glm(formula = litter.size ~ mass.g., data = LIFEHIST)
```

Deviance Residuals:

```
Min 1Q Median 3Q Max -1.8053 -1.7253 -0.3053 1.1947 11.3747
```

Coefficients:

```
Estimate Std. Error t value Pr(>|t|) (Intercept) 2.805e+00 4.949e-02 56.68 < 2e-16 mass.g. -2.605e-08 9.238e-09 -2.82 0.00488
```

(Dispersion parameter for gaussian family taken to be 3.130944)

Null deviance: 4045.0 on 1285 degrees of freedom Residual deviance: 4020.1 on 1284 degrees of freedom (154 observations deleted due to missingness)

AIC: 5121.3

Number of Fisher Scoring iterations: 2

La déviance est $-2 \ln L$ (L vraisemblance à son maximum).

AIC: Akaike Information Criterion

 $AIC = -2 \ln L + 2k \ (k : nombre de paramètres estimés)$

Pour une distribution gaussienne, moindres carrés et maximum de vraisemblance donnent les mêmes résultats.

Avec la méthode du maximum de vraisemblance, la significativité des effets est testée par les quotients de vraisemblance (*likelihood ratio tests, LRT*). Sous H_0 (pas d'effet), ce test suit une loi du χ^2 avec un nombre de ddl égal au nombre de paramètres associés à l'effet :

```
> anova(gm1, test = "Chisq")
Analysis of Deviance Table

Model: gaussian, link: identity

Response: litter.size

Terms added sequentially (first to last)
```

```
Df Deviance Resid. Df Resid. Dev P(>|Chi|)
NULL 1285 4045.0
mass.g. 1 24.9 1284 4020.1 0.004801
> 1 - pchisq(24.9/3.14, 1)
[1] 0.004862351
```

AIC peut être utilisé à la place du LRT :

- 1. modèles non-emboîtés;
- 2. grand nombre de modèles considérés a priori (évite tests 2 à 2);
- 3. l'objectif est de sélectionner un modèle à but prédictif (car AIC est moins conservateur que LRT).

Note: LRT et AIC sont applicables à tout type de modèles ajustés par maximum de vraisemblance (pas seulement les MLG).

Le second argument de glm est family qui est une fonction et par défaut family = gaussian:

```
> args(gaussian)
function (link = "identity")
```

Par défaut glm ajuste le même modèle que lm.

Trois liens sont possibles pour gaussian: "identity", "log" et "inverse".

Essayons le lien inverse :

Deviance Residuals:

Min 1Q Median 3Q Max -2.5995 -1.0753 0.1331 0.9656 10.5914

Coefficients:

Estimate Std. Error t value Pr(>|t|) (Intercept) 2.774e-01 4.676e-03 59.315 <2e-16 mass.g. 2.882e-05 3.218e-06 8.957 <2e-16

(Dispersion parameter for gaussian family taken to be 2.418827)

Null deviance: 4045.0 on 1285 degrees of freedom Residual deviance: 3105.3 on 1284 degrees of freedom (154 observations deleted due to missingness)

AIC: 4789.2

Number of Fisher Scoring iterations: 23

Les deux modèles sont :

gm1:
$$E(y) = -2.60 \times 10^{-8} \text{ mass} + 2.80 \quad \hat{\sigma}^2 = 3.13$$
 gm1inv: $\frac{1}{E(y)} = 2.88 \times 10^{-5} \text{ mass} + 0.28 \quad \hat{\sigma}^2 = 2.42$

L'ajustement est sensiblement amélioré par le lien inverse (mais n'oublions pas les données sont hétérogènes).

Les diagnostiques de régression sont identiques à ceux du modèle linéaire, avec la différence que, par défaut, les résidus de déviance sont calculés.

Distribution de Poisson

Les liens permis sont "log" (le defaut), "identity" et "sqrt".

```
> x <- runif(50, 1, 50)
> y <- rpois(50, x)
> plot(x, y)
> gm4 <- glm(y ~x)
> gm5 <- glm(y ~x, poisson)
> summary(gm4)
Call:
glm(formula = y ~ x)
Deviance Residuals:
   Min 1Q Median 3Q Max
-7.8011 -2.0088 -0.5986 1.8911 11.3623
Coefficients:
```

```
Estimate Std. Error t value Pr(>|t|)
(Intercept) -1.70545 0.95811 -1.78 0.0814
 1.11443 0.03506 31.79 <2e-16
X
(Dispersion parameter for gaussian family taken to be 13.40717)
   Null deviance: 14191.68 on 49 degrees of freedom
Residual deviance: 643.54 on 48 degrees of freedom
AIC: 275.64
Number of Fisher Scoring iterations: 2
> summary(qm5)
Call:
glm(formula = y ~ x, family = poisson)
Deviance Residuals:
    Min 10 Median
                                 30
                                         Max
```

```
-3.73525 -0.79706 -0.02801 0.79571 1.84332
```

Coefficients:

```
Estimate Std. Error z value Pr(>|z|) (Intercept) 1.830827 0.075914 24.12 <2e-16 x 0.047641 0.002117 22.51 <2e-16
```

(Dispersion parameter for poisson family taken to be 1)

```
Null deviance: 630.755 on 49 degrees of freedom
Residual deviance: 66.642 on 48 degrees of freedom
```

AIC: 302.63

Number of Fisher Scoring iterations: 4

La prise en compte de la nature de la distribution de la réponse améliore très nettement la dispersion des résidus.

On notera le paramètre de dispersion égal à 1 (car la variance est contrainte à être égale à la moyenne dans la loi de Poisson).

Distribution binomiale

La réponse est spécifiée dans glm avec :

- 1. une matrice à deux colonnes où la première est le nombre de « succès » et la seconde le nombre d'« échecs » ;
- 2. un vecteur avec des 0 et des 1 (ou FALSE et TRUE);
- 3. un facteur où le premier niveau (codé 1) est pris comme « échec » et les autres comme « succès ».

```
> y <- sample(0:1, size = 20, replace = TRUE)
> x <- 1:20
> gmb1 <- glm(y ~ x, binomial)
> gmb2 <- glm(cbind(y, 1 - y) ~ x, binomial)
> gmb3 <- glm(factor(y) ~ x, binomial)
> AIC(gmb1); AIC(gmb2); AIC(gmb3)
[1] 23.67469
[1] 23.67469
```

Dans les deux premières situations il est aisé d'inverser les succès et les échecs :

```
> glm(!y ~ x, binomial)
> glm(cbind(1 - y, y) ~ x, binomial)
```

Les coefficients seront de signe opposé. Si on a préparé une matrice au préalable :

```
> Y <- cbind(y, 1 - y)
> glm(Y ~ x, binomial)
> glm(Y[, 2:1] ~ x, binomial)
```

Par défaut le lien est la fonction logit. Les choix possibles sont :

"logit"
$$\ln \frac{p}{1-p}$$
, le défaut "probit" $F_{\mathcal{N}}^{-1}(p)$ "cauchit" $F_{\mathcal{C}}^{-1}(p)$ "log" $\ln p$ "cloglog" $\ln (-\ln(1-p))$

p = E(y); F^{-1} est l'inverse de la fonction de densité de probabilité cumulée.

Le choix d'un lien n'est pas trivial. Il est recommandé, pour débuter, d'utiliser le lien par défaut.

Données Aids2

```
> library(MASS)
> data(Aids2)
```

> ?Aids2

Le genre a-t-il un effet sur la « survie »?

```
> aids.m1 <- glm(status ~ sex, binomial, data = Aids2)
> anova(aids.m1, test = "Chisq")
Analysis of Deviance Table
Model: binomial, link: logit
```

```
Response: status

Terms added sequentially (first to last)

Df Deviance Resid. Df Resid. Dev P(>|Chi|)

NULL
2842 3777.5

sex 1 0.2 2841 3777.3 0.6
```

L'âge a-t-il un effet sur la « survie »?

```
> aids.m2 <- glm(status ~ age, binomial, data = Aids2)
> anova(aids.m2, test = "Chisq")
Analysis of Deviance Table
```

Model: binomial, link: logit

Response: status

```
Terms added sequentially (first to last)
```

```
Df Deviance Resid. Df Resid. Dev P(>|Chi|)

NULL 2842 3777.5

age 1 6.8 2841 3770.7 0.009191
```

Une fois l'effet de l'âge pris en compte, le genre a-t-il un effet ? On prend soin de mettre sex après age dans la formule, sinon, il faudra tester les effets avec drop1 (mais sans interaction).

```
> aids.m3 <- glm(status ~ age*sex, binomial, data = Aids2)
> anova(aids.m3, test = "Chisq")
Analysis of Deviance Table
```

Model: binomial, link: logit

Response: status

Terms added sequentially (first to last)

	Df De	viance	Resid. Df	Resid. Dev	<pre>P (> Chi)</pre>
NULL			2842	3777.5	
age	1	6.8	2841	3770.7	0.009191
sex	1	0.2	2840	3770.5	0.6
age:sex	1	3.8	2839	3766.6	0.1

> summary(aids.m2)

Call:

glm(formula = status ~ age, family = binomial, data = Aids2)

Deviance Residuals:

Min 1Q Median 3Q Max -1.5696 -1.3663 0.9450 0.9917 1.1303

Coefficients:

Estimate Std. Error z value Pr(>|z|) (Intercept) 0.111819 0.149300 0.749 0.4539 age 0.010065 0.003881 2.593 0.0095

(Dispersion parameter for binomial family taken to be 1)

Null deviance: 3777.5 on 2842 degrees of freedom Residual deviance: 3770.7 on 2841 degrees of freedom AIC: 3774.7

Number of Fisher Scoring iterations: 4

Le modèle sélectionné est donc (p : probabilité de décès) :

$$\ln\left(\frac{p}{1-p}\right) = 0.01 \text{ age} + 0.11$$

La page d'aide de predict.glm inclut des informations très intéressantes sur comment calculer un intervalle de prédiction.

Loi gamma

```
Gamma () donne la loi gamma pour un MLG;
gamma (x) calcule la fonction \Gamma(x) = 1 \times 2 \times \cdots \times (x-1) pour x entier.
Les liens permis sont "inverse" (le défaut), "identity" et "log".
> Aids2$surv <- Aids2$death - Aids2$diag
> surv.m1 <- glm(surv ~ age, Gamma, data = Aids2,
                   subset = surv > 0
+
> anova(surv.m1, test = "Chisq")
Analysis of Deviance Table
Model: Gamma, link: inverse
Response: surv
Terms added sequentially (first to last)
```

```
Df Deviance Resid. Df Resid. Dev P(>|Chi|)
                     2813 3219.5
NULL
   1 27.5 2812 3192.0 3.945e-09
age
> summary(surv.m1)
Call:
glm(formula = surv ~ age, family = Gamma, data = Aids2, subset :
   0)
Deviance Residuals:
   Min 10 Median 30 Max
-3.2565 -0.9426 -0.2280 0.3740 3.0442
Coefficients:
           Estimate Std. Error t value Pr(>|t|)
(Intercept) 1.539e-03 1.543e-04 9.969 < 2e-16
age 2.471e-05 4.199e-06 5.884 4.47e-09
```

(Dispersion parameter for Gamma family taken to be 0.7935563)

Null deviance: 3219.5 on 2813 degrees of freedom

Residual deviance: 3192.0 on 2812 degrees of freedom

AIC: 39502

Number of Fisher Scoring iterations: 6

Formulation générale des MLG

$$g(E[y]) = \beta X$$
 $Var(y_i) = \phi \mathcal{V}(E[y_i])$

 ϕ : paramètre de dispersion; $\mathcal V$: fonction de variance

Réponse	g^*	ϕ	\mathcal{V}	$Var(y_i)$
normale	identité	σ^2	•_	σ^2
gamma	inverse	1/ u	μ^2	μ^2/ν
Poisson	log	1	μ	μ
binomiale	logit	1	$\mu(1-\mu)$	$\mu(1-\mu)n_i$

*fonction de lien par défaut dans R

L'utilisateur choisit la distribution de la réponse et la fonction de lien. Le reste découle de ces choix.

Sur- (sous-) dispersion avec les lois binomiale et de Poisson

Avec ces deux lois de distribution, la variance est contrainte par la moyenne. La méthode de quasivraisemblance permet de lever cette contrainte.

Seules la moyenne et la variance des observations sont considérées : il n'est donc pas possible de calculer la vraisemblance (pas d'AIC). La comparaison avec un MLG standard par LRT n'est donc pas possible.

En pratique, on considère que si $\phi > 4$ (ou $\phi < 0.25$), il y a sur- (sous) dispersion. Ces phénomènes sont généralement dûs à une dépendance entre observations.

-1.5696 -1.3663 0.9450 0.9917 1.1303

Coefficients:

```
Estimate Std. Error t value Pr(>|t|) (Intercept) 0.111819 0.149342 0.749 0.45407 age 0.010065 0.003882 2.593 0.00957
```

(Dispersion parameter for quasibinomial family taken to be 1.00

Null deviance: 3777.5 on 2842 degrees of freedom

Residual deviance: 3770.7 on 2841 degrees of freedom

AIC: NA

Number of Fisher Scoring iterations: 4

La fonction quasi permet de construire une famille avec lien et fonction de variance spécifiques (?quasi pour tous les détails : toutes les familles de distributions sont documentées sur cette page).

Exercices V

- 1. Reprendre le modèle aids.m2 et tracer l'intervalle de confiance à 95% du risque préduit. Le graphe sera légendé.
- 2. Charger les données eagles du package MASS.
 - (a) Reprendre le modèle eagles.glm dans les exemples et analyser le avec anova et summary. Commenter.
 - (b) Ré-ajuster ces modèles avec family = quasibinomial. Que constatez-vous? (Comparer notamment les résultats avec ou sans la variable V.) Commenter sur la récolte des données.

VI Modèles mixtes linéaires

```
> X <- read.table("Donnees_sevrage.txt", header=TRUE, dec=",")</pre>
> X$Bac <- factor(X$Bac)</pre>
> summary(X)
     Bac Colonne Sevrage Longueur
5
     : 82 d:180 D:128 Min. : 9.205
11 : 81 q:173 L:233 1st Qu.:14.080
15 : 70 m:206 R:198 Median :15.463
16 : 70
                            Mean :15.912
  : 69
                            3rd Ou.:17.009
  : 59
                            Max. :35.102
(Other):128
> table(X$Bac)
3 4 5 9 10 11 15 16 17
39 59 82 69 56 81 70 70 33
> densityplot(~ Longueur | Sevrage, data = X, groups = Bac)
```

Pour avoir une (autre) vue de la variabilité au sein de chaque traitement :

```
> histogram(~ Longueur | Bac, data = X, subset = Sevrage=="D")
> histogram(~ Longueur | Bac, data = X, subset = Sevrage=="L")
> histogram(~ Longueur | Bac, data = X, subset = Sevrage=="R")
```

Il n'y a pas de variation systématique liée aux bacs; l'effet « Bac » est une nuisance.

```
> library(nlme)
> X.lme <- lme(Longueur ~ Sevrage, random = ~ 1 | Bac, data=X)
> summary(X.lme)
Linear mixed-effects model fit by REML
Data: X
         AIC     BIC     logLik
2836.525 2858.129 -1413.263
```

Random effects:

Formula: ~1 | Bac

(Intercept) Residual

StdDev: 0.7111282 3.007008

Fixed effects: Longueur ~ Sevrage

Value Std.Error DF t-value p-value

(Intercept) 14.847844 0.4916370 550 30.200825 0.0000

SevrageL 2.302461 0.6702563 6 3.435194 0.0139

SevrageR 0.330652 0.6753925 6 0.489571 0.6418

Correlation:

(Intr) SevrqL

SevrageL -0.734

SevrageR -0.728 0.534

Standardized Within-Group Residuals:

Min Q1 Med Q3 Max -2.0219390 -0.5700525 -0.1843231 0.3517755 5.7724699

Number of Observations: 559

Number of Groups: 9

- > X.lm <- lm(Longueur ~ Sevrage, data = X)</pre>
- > summary(X.lm)

Call:

lm(formula = Longueur ~ Sevrage, data = X)

Residuals:

Min 1Q Median 3Q Max -5.6337 -1.7641 -0.5778 1.0163 17.9830

Coefficients:

Estimate Std. Error t value Pr(>|t|) (Intercept) 14.8383 0.2701 54.932 <2e-16 SevrageL 2.2810 0.3362 6.784 3e-11 SevrageR 0.3459 0.3466 0.998 0.319

Residual standard error: 3.056 on 556 degrees of freedom Multiple R-Squared: 0.1023, Adjusted R-squared: 0.09911

```
F-statistic: 31.69 on 2 and 556 DF, p-value: 9.22e-14
```

La prise en compte de l'effet aléatoire associé aux bacs améliore nettement la distribution des résidus.

REML (*residual maximum likelihood*) corrige le biais dans l'estimation des composants de variance dû au fait que des effets fixes sont estimés (on retrouve cette idée dans l'estimation de la variance d'un échantillon sur n-1 et non n).

La significativité des effets aléatoires peut être testée en comparant avec le même modèle ajusté par lm, mais le modèle mixte doit être ajusté par ML et non REML.

X.lme.ML

X.lm 5.530973 0.0187

Le modèle statistique derrière X.lme est :

$$Longueur_i = \beta Sevrage_i + \zeta_j + \epsilon_i$$

où j est l'indice du bac, $\zeta_j \sim \mathcal{N}(0, \sigma_B^2)$, $\epsilon_i \sim \mathcal{N}(0, \sigma^2)$.

Les composants de variance estimés sont $\hat{\sigma}_B = 0.71$ et $\hat{\sigma} = 3.01$.

Considérer l'effet bac comme fixe est problématique car l'effet sevrage est emboîté dans celui-ci :

- > X.lm2 <- lm(Longueur ~ Sevrage + Bac, data = X)
- > summary(X.lm2)

```
Coefficients: (2 not defined because of singularities)
> drop1(X.lm2, test = "F")
Single term deletions
Model:
Longueur ~ Sevrage + Bac
       Df Sum of Sq RSS AIC F value Pr(F)
                   4970.2 1239.5
<none>
Sevrage 0 0.0 4970.2 1239.5
Bac 6 222.5 5192.8 1251.9 4.1044 0.0004843
```

L'estimation des effets fixes (le vecteur β) n'est pas biaisée par la présence d'effets aléatoires, mais les erreurs-standards sont sous-estimées si ces derniers sont ignorés. Cela se comprend dans le sens où la variation aléatoire entre les bacs est « captée » par le modèle à effet fixe.

Une analyse de variance à effets mixtes se contente de tester l'effet fixe au sein de chaque niveau (= strate) de Bac :

Dépendance entre observations

lme a l'option correlation qui prend pour argument une fonction qui spécifie la forme de la dépendance entre observations; celles fournies avec nlme sont documentées à ?corClasses.

La plus simple est corcompsymm qui spécifie que toutes les observations sont corrélées de façon identique : il n'y a donc qu'un paramètre à estimer. L'option form permet de spécifier, à l'aide d'une formule, les éventuelles strates de cette dépendance.

```
-8.468964e-08
```

Il est possible de spécifier que les données sont corrélées sans stratification avec corcompSymm (form = ~ 1) : les résultats ne sont pas changés.

La fonction gls (*generalized least squares*) dans nlme permet d'ajuster un modèle avec données corrélées sans effets aléatoires (lme en requiert au moins un):

```
> X.gls.cor <- gls(Longueur ~ Sevrage, data = X,
+ correlation = corCompSymm(form = ~ 1 | Bac))
> X.gls.cor
Generalized least squares fit by REML
   Model: Longueur ~ Sevrage
   Data: X
   Log-restricted-likelihood: -1413.263
```

```
Coefficients:

(Intercept) SevrageL SevrageR

14.8478443 2.3024604 0.3306525

Correlation Structure: Compound symmetry
Formula: ~1 | Bac
Parameter estimate(s):
Rho

0.05296477

Degrees of freedom: 559 total; 556 residual
Residual standard error: 3.089951
```

Il est intéressant que d'ignorer la stratification entre bacs rend la corrélation entre observations nulle :

```
> gls(Longueur ~ Sevrage, data = X,
+ correlation = corCompSymm(form = ~ 1))
Generalized least squares fit by REML
```

Model: Longueur ~ Sevrage

Data: X

Log-restricted-likelihood: -1417.847

Coefficients:

(Intercept) SevrageL SevrageR 14.8383493 2.2809583 0.3459145

Correlation Structure: Compound symmetry

Formula: ~1

Parameter estimate(s):

Rho

2.164525e-19

Degrees of freedom: 559 total; 556 residual

Residual standard error: 3.056057

Le même modèle mais avec observations indépendantes :

```
> X.gls <- gls(Longueur ~ Sevrage, data = X)</pre>
> X.qls
Generalized least squares fit by REML
 Model: Longueur ~ Sevrage
 Data: X
 Log-restricted-likelihood: -1417.847
Coefficients:
(Intercept) SevrageL SevrageR
 14.8383493 2.2809583 0.3459145
Degrees of freedom: 559 total; 556 residual
Residual standard error: 3.056057
> AIC(X.gls.cor); AIC(X.gls)
[1] 2836.780
[1] 2843.694
```

Le modèle avec corrélation intra-bac semble préférable. On réajuste les modèles par ML pour faire un LRT :

Les résultats de gls sont cohérents avec ceux de lme, mais lme est ici plus facile à interpréter.

VII Méthodes multivariées

Les méthodes multivariées considèrent un ensemble de variables sur le même plan, par opposition aux modèles de régression où les variables ont des rôles différents.

Réduction du nombre de dimensions

Analyse en composantes principales (ACP)

Toutes les variables sont continues. Le but est de chercher une combinaison linéaire qui maximise la dispersion (variance) des points.

Deux fonctions dans le package stats :

prcomp: par décomposition en valeurs singulières (recommandée pour précision numérique);

princomp: décomposition en valeurs et vecteurs propres (compatible avec S-PLUS)

```
> data(iris)
> cov(iris[, c(1, 3)])
            Sepal.Length Petal.Length
Sepal.Length 0.6856935 1.274315
Petal.Length 1.2743154 3.116278
> plot(iris[, c(1, 3)], asp = 1)
> prcomp(iris[, c(1, 3)])
Standard deviations:
[1] 1.9136088 0.3742627
Rotation:
                  PC1 PC2
Sepal.Length 0.3936059 -0.9192793
Petal.Length 0.9192793 0.3936059
> princomp(iris[, c(1, 3)])
Call:
princomp(x = iris[, c(1, 3)])
Standard deviations:
```

```
Comp.1 Comp.2
1.9072195 0.3730131
 2 variables and 150 observations.
L'option scale = TRUE réalise l'ACP sur la matrice de corrélation.
> prcomp(iris[, c(1, 3)], scale = TRUE)
Standard deviations:
[1] 1.3681205 0.3581148
Rotation:
```

Sepal.Length 0.7071068 -0.7071068

Petal.Length 0.7071068 0.7071068

> X <- as.matrix(iris[, c(1, 3)])</pre>

> acp.iris <- prcomp(X)</pre>

PC1 PC2

> summary(acp.iris)

Importance of components:

PC1 PC2
Standard deviation 1.914 0.3743
Proportion of Variance 0.963 0.0368

Cumulative Proportion 0.963 1.0000

L'élément nommé rotation de acp.iris contient les coefficients ρ de l'ACP tels que :

$$y^{(1)} = \rho_1^{(1)} x_1 + \rho_2^{(1)} x_2$$

$$y^{(2)} = \rho_1^{(2)} x_1 + \rho_2^{(2)} x_2$$

Ce qui peut être calculé dans R par :

acp.iris\$rotation[1,1]*X[,1] + acp.iris\$rotation[2,1]*X[,2]
acp.iris\$rotation[1,2]*X[,1] + acp.iris\$rotation[2,2]*X[,2]

ou plus simplement par le produit matriciel (qui ne prend pas les 'data frame') :

```
> Y <- as.matrix(X) %*% acp.iris$rotation
> plot(Y, asp = 1)
```

La fonction predict fait tous ces calculs:

```
> X11() # pour comparaison
> plot(predict(acp.iris))
```

La première composante principale peut être tracée, de façon approximative, sur les données originales avec :

```
> dev.set(2)
> a <- acp.iris$center + 10*acp.iris$rotation[, 1]
> b <- acp.iris$center - 10*acp.iris$rotation[, 1]
> lines(rbind(a, b), col = "red")
```

La fonction biplot représente simultanément les observations et les variables. Le second argument choices = 1:2 sélectionne les composantes principales :

```
> biplot(acp.iris)
> biplot(prcomp(iris[, 1:4]), 2:3)
```

Rappel: si toutes les variables sont positivement corrélées, elles auront toutes une contribution positive au premier axe principal qui est nommé « axe de taille », ce qui peut se vérifier avec :

```
> all(cor(iris[, 1:4]) > 0)
[1] FALSE
```

Analyse des correspondances

Les variables sont des effectifs, typiquement un tableau espèces \times localités. La fonction corresp se trouve dans le package MASS.

```
> library(MASS)
> ?corresp
```

Une A(F)C est en fait une double ACP sur les lignes et les colonnes des fréquences calculées à partir des effectifs.

Un tableau de contingences peut être interprété comme une compilation des effectifs de deux facteurs :

```
> sp <- paste("S", 1:5, sep = "")
> SP <- sample(sp, size = 50, replace = TRUE)</pre>
> SP <- factor(SP)
> hab <- paste("H", 1:3, sep = "")
> HAB <- sample(hab, size = 50, replace = TRUE)
> HAB <- factor(HAB)
> table(SP, HAB)
   HAB
SP H1 H2 H3
 S1 2 6 4
 S2 2 1 8
 S3 4 5 1
 S4 4 2 3
 S5 2 3 3
```

L'AFC peut être réalisée soit à partir des facteurs originaux, soit à partir du tableau de contingence.

Le tableau retourné par table n'est pas accepté par corresp, et la conversion avec as.matrix ne suffit pas. Il faut supprimer la classe avec unclass ou calculer ce tableau avec xtabs.

```
> corresp(SP, HAB)
First canonical correlation(s): 0.4344339
x scores:
                              S3
             S2
                                          S4
                                                     S5
0.37781925 - 1.68252230  1.30761935  0.04473031  0.06189349
y scores:
       H1
          H2 H3
0.4807207 1.0016592 -1.2504367
> corresp(unclass(table(SP, HAB)))
First canonical correlation(s): 0.4344339
```

```
SP scores:
         S1
                     S2
                                 S3
                                             S4
                                                         S5
 0.37781925 - 1.68252230  1.30761935  0.04473031  0.06189349
HAB scores:
        H1
            H2
                             Н3
0.4807207 1.0016592 -1.2504367
> corresp(xtabs(~ SP + HAB))
First canonical correlation(s): 0.4344339
 SP scores:
         S1
                     S2
                                 S3
                                             S4
                                                         S5
 0.37781925 - 1.68252230  1.30761935  0.04473031  0.06189349
HAB scores:
        H1
                  Н2
                              Н3
 0.4807207 1.0016592 -1.2504367
```

Analyse des correspondances multiples

L'ACM est une généralisation de l'AC pour plusieurs facteurs. La fonction mca dans MASS prend pour argument une série de facteurs dans un tableau 'data frame'.

Une matrice est construite où chaque colonne correspond à un niveau des facteurs, et 1 si ce niveau a été observé, 0 sinon. Exemple :

	SP.S1	SP.S2	SP.S3	SP.S4	SP.S5	HAB.H1	HAB.H2	нав.н3
[1,]	1	0	0	0	0	0	0	1
[2,]	1	0	0	0	0	0	1	0
[3,]	0	0	1	0	0	0	1	0
[4,]	0	0	0	1	0	1	0	0
[5,]	0	1	0	0	0	0	0	1
[]								

Les résultats seront donc différents que ceux d'une AC même avec les mêmes données :

```
> mca(data.frame(SP, HAB))
Call:
mca(df = data.frame(SP, HAB))

Multiple correspondence analysis of 50 cases of 2 factors

Correlations 0.847 0.784 cumulative % explained 84.69 163.10
```

Méthodes plus sophistiquées : ade4 sur CRAN.

Méthodes discriminantes

Dans MASS: 1da (*linear discriminant anaysis*) et qda (*quadratic . . .*); toutes les deux ont une option data et méthode predict correspondante.

Ces deux fonctions cherchent des combinaisons, linéaires ou quadratiques, des variables originales qui maximisent la variance inter-groupes.

Méthodes plus sophistiquées : mda (mixture discriminant anaysis) sur CRAN.

Classification hiérarchique

Calcul de distances

dist(x, method = "euclidean"), six méthodes disponibles (retourne un objet de classe "dist").

Package cluster: daisy(x, metric = "euclidean"), plus appropriée pour données non-continues.

Distances génétiques : ade4 à partir de fréquences alléliques, ape (sur CRAN) à partir de séquences d'ADN.

Classification

hclust(d, method = "complete"), sept méthodes disponibles; retourne un objet de classe "hclust" pour laquelle il y a des méthodes print et plot:

```
> x <- matrix(rnorm(500), 50, 10)
> d <- dist(x)</pre>
```

```
> str(d)
Class 'dist' atomic [1:1225] 5.55 5.26 4.80 3.34 4.95 ...
  ... attr(\star, "Size") = int 50
  ..- attr(*, "Diag") = logi FALSE
  ..- attr(*, "Upper") = logi FALSE
  ..- attr(*, "method") = chr "euclidean"
  ... attr(\star, "call") = language dist(x = x)
> hist(d)
> hc <- hclust(d)</pre>
> hc # == print(hc)
Call:
hclust(d = d)
Cluster method : complete
Distance
         : euclidean
Number of objects: 50
> plot(hc)
```

Méthodes alternatives : cluster, ade4.

Arbres évolutifs : ape.

Exercices VII

1. Faire une analyse des correspondances avec les données du fichier 'santa-unix.txt' (ou 'santa-DOS.txt' suivant votre système d'exploitation. On fera attention à l'option nf de la fonction corresp.