

# STT3030 - Cours #0

Arthur Charpentier

Automne 2024

# Lois Binomiales & Multinomiales

$Y \sim \mathcal{B}(p)$  :

$$\mathbb{P}[Y = y] = p^y(1 - p)^{1-y} \begin{cases} p & \text{si } y = 1 \\ 1 - p & \text{si } y = 0 \end{cases}, \text{ où } y \in \{0, 1\}$$

cf loi de Bernoulli, où  $p = \mathbb{P}[Y = 1] = \mathbb{E}[Y] \in [0, 1]$ .

$Y \sim \mathcal{B}(n, p)$  :

$$\mathbb{P}[Y = y] = \binom{n}{y} p^y(1 - p)^{n-y} \text{ où } y \in \{0, 1, 2, \dots, n\}$$

cf loi binomiale, où  $\mathbb{E}[Y] = np$ .

$Y_1, \dots, Y_n$  i.i.d.  $\mathcal{B}(p)$  alors  $Y = \sum_{i=1}^n Y_i \sim \mathcal{B}(n, p)$

## Lois Binomiales & Multinomiales

$\mathbf{Y} = (Y_1, \dots, Y_d) \sim \mathcal{M}(\mathbf{p})$  où  $\mathbf{p} = (p_1, \dots, p_d)$  si

$$Y_1 + \dots + Y_d = 1 \text{ et } Y_j \sim \mathcal{B}(p_j), \forall j \in \{1, \dots, d\}$$

i.e.  $\mathbf{Y} = (\mathbf{1}_{C_1}, \mathbf{1}_{C_2}, \dots, \mathbf{1}_{C_d})$

$\mathbf{Y} = (Y_1, \dots, Y_d) \sim \mathcal{M}(n, \mathbf{p})$  où  $\mathbf{p} = (p_1, \dots, p_d)$  si

$$Y_1 + \dots + Y_d = n \text{ et } Y_j \sim \mathcal{B}(n, p_j), \forall j \in \{1, \dots, d\}$$

cf loi multinomiale. Pour  $(y_1, \dots, y_d) \in \mathcal{S}_{d,n} = \{(y_1, \dots, y_d) \in \mathbb{N}^d : (y_1 + \dots + y_d = n)\}$

$$\mathbb{P}[(Y_1, \dots, Y_d) = (y_1, \dots, y_d)] = \frac{n!}{y_1! \dots y_d!} p_1^{y_1} \dots p_d^{y_d}$$

Example:  $\mathbf{Y} = (Y_0, Y_1) \sim \mathcal{M}(n, \mathbf{p})$  où  $\mathbf{p} = (p_0, p_1)$ .

## Lois Binomiales : Inférence

$y_1, y_2, \dots, y_n$  i.i.d de loi  $\mathcal{B}(p)$ , alors

$$\mathcal{L}(p; \mathbf{y}) = \prod_{i=1}^n \mathbb{P}(Y_i = y_i) = \prod_{i=1}^n p^{y_i} [1 - p]^{1-y_i}$$

et la **log-vraisemblance** est

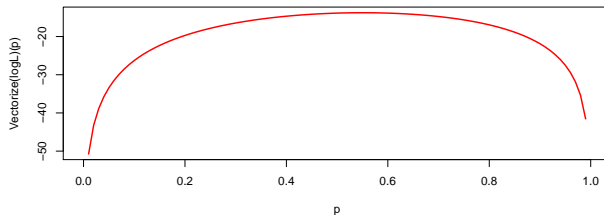
$$\log \mathcal{L}(p; \mathbf{y}) = \sum_{i=1}^n y_i \log[p] + (1 - y_i) \log[1 - p]$$

La condition du premier ordre est

$$\left. \frac{\partial \log \mathcal{L}(p; \mathbf{y})}{\partial p} \right|_{p=\hat{p}} = \sum_{i=1}^n \left( \frac{y_i}{\hat{p}} - \frac{1 - y_i}{1 - \hat{p}} \right) = 0, \text{ i.e. } \hat{p} = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n y_i$$

# Lois Binomiales : Inférence

```
1 > set.seed(1)
2 > n=20
3 > (Y=sample(0:1,size=n,replace=TRUE))
4 [1] 0 0 1 1 0 1 1 1 1 0 0 0 1 0 1 0 1 1 0 1
5 > (pn = mean(Y))
6 [1] 0.55
7 > p=seq(0,1,by=.01)
8 > neglogL = function(p){-sum(log(dbinom(Y,1,p)))}
9 > plot(p,-Vectorize(neglogL)(p))
10 > pml = optim(fn=neglogL,par=.5,method="BFGS")$par
11 [1] 0.5499996
```



# Lois Binomiales : Inférence

Propriété du maximum de vraisemblance

$$\sqrt{n}(p - \hat{p}) \xrightarrow{\mathcal{L}} \mathcal{N}(0, I^{-1}(p))$$

où  $I(p)$  est l'information de Fisher, i.e.

$$I(p) = -\mathbb{E} \left[ \frac{\partial^2}{\partial p^2} \log f(Y, p) \right] = \frac{1}{p[1-p]}$$

$$\sqrt{n} \frac{p - \hat{p}}{\sqrt{p(1-p)}} \xrightarrow{\mathcal{L}} \mathcal{N}(0, 1) \text{ et } \sqrt{n} \frac{p - \hat{p}}{\sqrt{\hat{p}(1-\hat{p})}} \xrightarrow{\mathcal{L}} \mathcal{N}(0, 1)$$

d'où un intervalle de confiance approché (à 95%) pour  $p$  de la forme

$$\left[ \hat{p} \pm \frac{1.96}{\sqrt{n}} \sqrt{\hat{p}[1-\hat{p}]} \right].$$

## Lois Binomiales : Inférence

On peut aussi construire un intervalle de confiance, par le théorème central limite, car  $\hat{p} = \bar{y}$ . On sait que

$$\sqrt{n} \frac{\bar{Y} - \mathbb{E}(Y)}{\sqrt{\text{Var}(Y)}} \xrightarrow{\mathcal{L}} \mathcal{N}(0, 1),$$

avec ici  $\bar{Y} = \hat{p}$ ,  $\mathbb{E}(Y) = p$  et  $\text{Var}(Y) = p(1 - p)$ , i.e. un intervalle de confiance est obtenu par l'approximation

$$\sqrt{n} \frac{\hat{p} - p}{\sqrt{\hat{p}[1 - \hat{p}]}} \xrightarrow{\mathcal{L}} \mathcal{N}(0, 1),$$

d'où un intervalle de confiance (à 95%) pour  $p$  de la forme

$$\left[ \hat{p} \pm \frac{1.96}{\sqrt{n}} \sqrt{\hat{p}[1 - \hat{p}]} \right].$$

## Lois Binomiales : Inférence

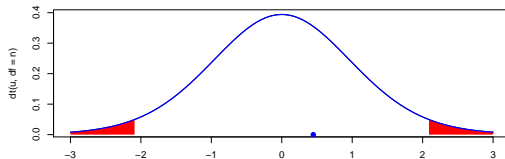
On peut faire un test de  $H_0 : p = p_0$  contre  $H_1 : p \neq p_0$  (par exemple 50%). On peut utiliser le test de Student,

$$T = \sqrt{n} \frac{\hat{p} - p_0}{\sqrt{p_0(1 - p_0)}}$$

qui tend, sous  $H_0$ , vers une loi normale

```
1 > p0 = .5
2 > (T=sqrt(n)*(pn-p0)/(sqrt(p0*(1-p0))))
3 [1] 0.4472136
4 > 0.4472136<qnorm(1-alpha/2)
5 [1] TRUE
```

On est ici dans la région d'acceptation du test.

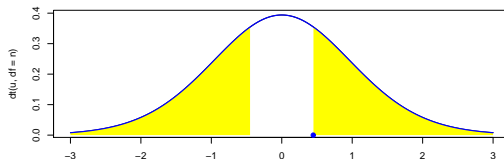




# Lois Binomiales : Inférence

On peut aussi calculer la  $p$ -value,  $\mathbb{P}(|T| > |t_{obs}|)$ ,

```
1 > 2*(1-pnorm(abs(T)))  
2 [1] 0.6547208
```



# Lois Binomiales : Inférence

**Test de Wald** l'idée est d'étudier la différence entre  $\hat{p}$  et  $p_0$ . Sous  $H_0$ ,

$$T = n \frac{(\hat{p} - p_0)^2}{I^{-1}(p_0)} \xrightarrow{\mathcal{L}} \chi^2(1)$$

**Test du rapport de vraisemblance** l'idée est d'étudier la différence entre  $\log \mathcal{L}(\hat{p})$  et  $\log \mathcal{L}(p_0)$ . Sous  $H_0$ ,

$$T = 2 \log \left( \frac{\mathcal{L}(p_0)}{\mathcal{L}(\hat{p})} \right) \xrightarrow{\mathcal{L}} \chi^2(1)$$

**Test du score** l'idée est d'étudier la différence entre  $\frac{\partial \log \mathcal{L}(p_0)}{\partial p}$  et 0. Sous  $H_0$ ,

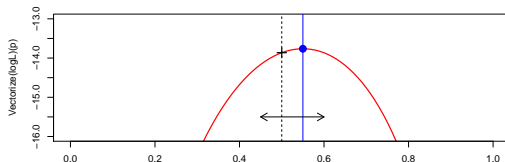
$$T = \left( \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n \frac{\partial \log f_{p_0}(x_i)}{\partial p} \right)^2 \xrightarrow{\mathcal{L}} \chi^2(1)$$

# Lois Binomiales : Inférence

Test de Wald différence entre  $\hat{p}$  et  $p_0$ , test de Wald. Sous  $H_0$ ,

$$T = n \frac{(\hat{p} - p_0)^2}{I^{-1}(p_0)} \xrightarrow{\mathcal{L}} \chi^2(1)$$

```
1 > neglogL = function(p){-sum(log(dbinom(X,1,p)))}  
2 > (IF = 1/(p0*(1-p0)/n))  
3 [1] 80  
4 > pml=optim(fn=neglogL,par=p0,method="BFGS")$par  
5 > (T=(pml-p0)^2*IF)  
6 [1] 0.199997  
7 > T<qchisq(1-alpha,df=1)  
8 [1] TRUE
```

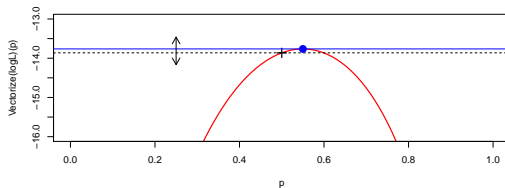


# Lois Binomiales : Inférence

**Test du rapport de vraisemblance** l'idée est d'étudier la différence entre  $\log \mathcal{L}(\hat{p})$  et  $\log \mathcal{L}(p_0)$ , **LRT**. Sous  $H_0$ ,

$$T = 2 \log \left( \frac{\mathcal{L}(p_0)}{\mathcal{L}(\hat{p})} \right) \xrightarrow{\mathcal{L}} \chi^2(1)$$

```
1 > logL = function(p){sum(log(dbinom(X,1,p)))}  
2 > (T=2*(logL(pml)-logL(p0)))  
3 [1] 0.2003347  
4 > T<qchisq(1-alpha,df=1)  
5 [1] TRUE
```

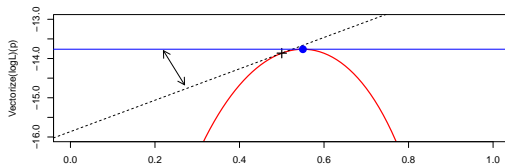


# Lois Binomiales : Inférence

Test du score comparer  $\frac{\partial \log \mathcal{L}(p_0)}{\partial p}$  et 0, test de Rao. Sous  $H_0$

$$T = \left( \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n \frac{\partial \log f_{p_0}(x_i)}{\partial p} \right)^2 \xrightarrow{\mathcal{L}} \chi^2(1)$$

```
1 > nx=sum(X==1)
2 > f = expression(nx*log(p)+(n-nx)*log(1-p))
3 > Df = D(f, "p")
4 > p=p0
5 > score=eval(Df)
6 > (T=score^2/IF)
7 [1] 0.2
```



## Lois Multinomiales : Inférence

$\mathbf{y}_1, \mathbf{y}_2, \dots, \mathbf{y}_n$  i.i.d de loi  $\mathcal{M}(\mathbf{p})$ , alors

$$\mathcal{L}(\mathbf{p}; \mathbf{y}) = \prod_{i=1}^n \mathbb{P}(\mathbf{Y}_i = \mathbf{y}_i) = \prod_{i=1}^n \prod_{j=1}^d p_j^{y_{i,j}}$$

sous la contrainte que  $\mathbf{p}^\top \mathbf{1} = 1$ .

Posons  $\mathbf{x} = (\mathbf{x}_{(d)}, x_d)$ , i.e.  $p_d = 1 - \mathbf{p}_{(d)}^\top \mathbf{1}$

$$\mathcal{L} = \prod_{i=1}^n \mathbb{P}(\mathbf{Y}_i = \mathbf{y}_i) = \prod_{i=1}^n \left( \prod_{j=1}^{d-1} p_j^{y_{i,j}} \right) \left( 1 - \mathbf{p}_{(d)}^\top \mathbf{1} \right)^{y_{i(d)}^\top \mathbf{1}}$$

La jème condition du premier ordre est, si  $s_j = \sum_{i=1}^n y_{i,j}$

$$\left. \frac{\partial \log \mathcal{L}}{\partial p_j} \right|_{\mathbf{p}=\hat{\mathbf{p}}} = \frac{s_j}{\hat{p}_j} - \frac{n - \mathbf{s}_{(d)}^\top \mathbf{1}}{1 - \hat{\mathbf{p}}_{(d)}^\top \mathbf{1}} = 0, \text{ i.e. } \hat{p}_j = \frac{s_j}{n}.$$

# Lois Multinomiales : Inférence

L'estimateur du maximum de vraisemblance est

$$\hat{\mathbf{p}} = (\hat{p}_1, \dots, \hat{p}_d) = \left( \frac{s_1}{n}, \dots, \frac{s_d}{n} \right)$$

**Propriété:**  $\mathbb{E}(\hat{\mathbf{p}}) = \mathbf{p}$  et  $\text{Var}(\hat{\mathbf{p}}) = \frac{1}{n}\mathbf{\Omega}$ , où

$$\mathbf{\Omega} = \begin{pmatrix} p_1(1-p_1) & -p_1p_2 & \cdots & -p_1p_d \\ -p_2p_1 & p_2(1-p_2) & \cdots & -p_2p_d \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ -p_dp_1 & -p_dp_2 & \cdots & p_d(1-p_d) \end{pmatrix}$$

$$\sqrt{n}(\hat{\mathbf{p}} - \mathbf{p}) \xrightarrow{\mathcal{L}} \mathcal{N}(\mathbf{0}, \mathbf{\Omega}),$$

**Remarque**  $\text{rang}(\mathbf{\Omega}) = d - 1$ .

# Lois Multinomiales : Inférence

Test de Pearson:  $H_0 : \mathbf{p} = \mathbf{p}_0$ , on utilise

$$Q = \sum_{j=1}^d \frac{(S_j - np_{0,j})^2}{np_{0,j}} \xrightarrow{\mathcal{L}} \chi^2(d-1), \quad n \rightarrow \infty,$$

si  $H_0$  est vraie, cf **test du chi-deux**.

On retrouvera ce test comme test d'indépendance.



# Loi de Bernoulli : Application

$y$  : indicatrice de survie d'un passager du Titanic

```
1 > loc = "http://freakonometrics.free.fr/titanic.RData"
2 > download.file(loc, "titanic.RData")
3 > load("titanic.RData")
4 > base = base[,1:7]
5 > n = nrow(base)
6 > (p = mean(base$Survived))
7 [1] 0.3838384
8 > p + qnorm(c(.025,.975))/sqrt(n)*sqrt(p*(1-p))
9 [1] 0.3519060 0.4157707
```

Si  $p = \mathbb{P}(Y = 1)$ ,  $\hat{p} = \frac{342}{891} = 38.38\%$ , et

$$\mathbb{P}(p \in [35.19\%; 41.58\%]) = 95\%.$$

# Loi de Bernoulli : Application

$y$  : port d'embarquement des passagers du Titanic,  
(Cherbourg, Queenstown, Southampton),  $y = (1_C, 1_Q, 1_S)$

```
1 > loc = "http://freakonometrics.free.fr/titanic.RData"
2 > download.file(loc, "titanic.RData")
3 > load("titanic.RData")
4 > base = base[base$Embarked!="",]
5 > table(base$Embarked[base$Survived == 1])/sum(base$Survived == 1)
6
7           C           Q           S
8 0.27352941 0.08823529 0.63823529
```

$$\text{Ici } \hat{p} = \left( \frac{93}{340}, \frac{30}{340}, \frac{217}{340} \right) = (27.4\%, 8.8\%, 63.8\%)$$

## Modèle de régression

$$p_i = \mathbb{E}(Y_i | \mathbf{X}_i = \mathbf{x}_i) \in [0, 1] \quad \neq \mathbf{x}_i^\top \boldsymbol{\beta}$$

→ utilisation de la **côte**

$$\text{odds}_i = \frac{\mathbb{P}[Y_i = 1]}{\mathbb{P}[Y_i = 0]} = \frac{p_i}{1 - p_i} \in [0, \infty].$$

soit, en passant au logarithme

$$\log(\text{odds}_i) = \log\left(\frac{p_i}{1 - p_i}\right) \in \mathbb{R}.$$

On appelle **logit** cette transformation,

$$\text{logit}(p_i) = \log\left(\frac{p_i}{1 - p_i}\right) = \mathbf{x}_i^\top \boldsymbol{\beta}$$

ou

$$p_i = \text{logit}^{-1}(\mathbf{x}_i^\top \boldsymbol{\beta}) = \frac{\exp[\mathbf{x}_i^\top \boldsymbol{\beta}]}{1 + \exp[\mathbf{x}_i^\top \boldsymbol{\beta}]}.$$

# Maximum de Vraisemblance

La log-vraisemblance est ici

$$\log \mathcal{L}(\beta) = \sum_{i=1}^n y_i \log(p_i(\beta)) + (1 - y_i) \log(1 - p_i(\beta))$$

Conditions du premier ordre,

$$\left. \frac{\partial \log \mathcal{L}(\beta)}{\partial \beta_k} \right|_{\beta=\hat{\beta}} = \sum_{i=1}^n \frac{y_i}{p_i(\beta)} \frac{\partial p_i(\beta)}{\partial \beta_k} - \frac{1 - y_i}{p_i(\beta)} \frac{\partial p_i(\beta)}{\partial \beta_k} = 0$$

or compte tenu de la forme de  $p_i(\beta)$ ,

$$\frac{\partial p_i(\beta)}{\partial \beta_k} = p_i(\beta)[1 - p_i(\beta)]x_{k,i}$$

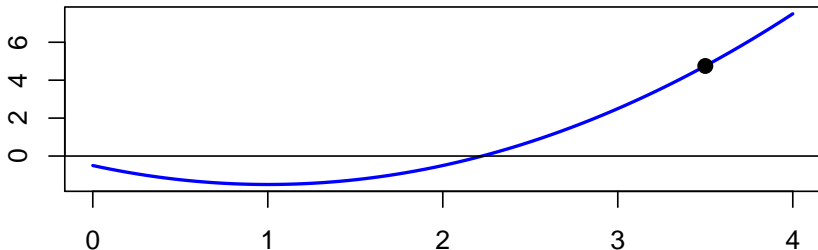
on obtient

$$\left. \frac{\partial \log \mathcal{L}(\beta)}{\partial \beta_k} \right|_{\beta=\hat{\beta}} = \sum_{i=1}^n x_{k,i} [y_i - p_i(\hat{\beta})] = 0, \quad \forall k.$$

# Algorithme de Newton

On veut résoudre (numériquement)  $f(x) = 0$ , où  $f: \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$

On commence en  $x_0$ , et à l'étape  $k$ :  $x_k \leftarrow x_{k-1} - \frac{f(x_{k-1})}{f'(x_{k-1})}$



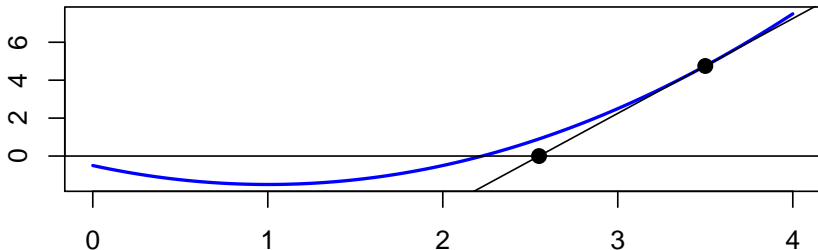
On veut résoudre (numériquement)  $f(\mathbf{x}) = \mathbf{0}$ , où  $f: \mathbb{R}^d \rightarrow \mathbb{R}$

On commence avec  $\mathbf{x}_0$ , et à l'étape  $k$ :  $\mathbf{x}_k \leftarrow \mathbf{x}_{k-1} - \nabla f(\mathbf{x}_{k-1})^{-1} f(\mathbf{x}_{k-1})$

# Algorithme de Newton

On veut résoudre (numériquement)  $f(x) = 0$ , où  $f: \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$

On commence en  $x_0$ , et à l'étape  $k$ :  $x_k \leftarrow x_{k-1} - \frac{f(x_{k-1})}{f'(x_{k-1})}$



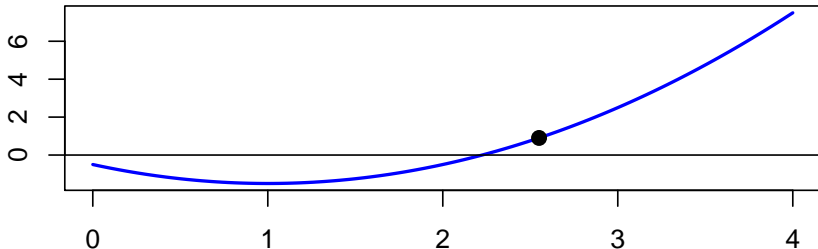
On veut résoudre (numériquement)  $f(\mathbf{x}) = \mathbf{0}$ , où  $f: \mathbb{R}^d \rightarrow \mathbb{R}$

On commence avec  $\mathbf{x}_0$ , et à l'étape  $k$ :  $\mathbf{x}_k \leftarrow \mathbf{x}_{k-1} - \nabla f(\mathbf{x}_{k-1})^{-1} f(\mathbf{x}_{k-1})$

# Algorithme de Newton

On veut résoudre (numériquement)  $f(x) = 0$ , où  $f: \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$

On commence en  $x_0$ , et à l'étape  $k$ :  $x_k \leftarrow x_{k-1} - \frac{f(x_{k-1})}{f'(x_{k-1})}$



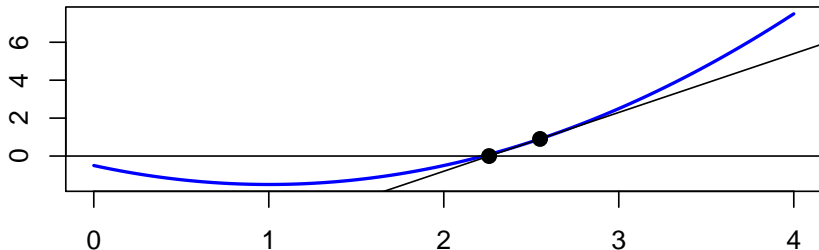
On veut résoudre (numériquement)  $f(\mathbf{x}) = \mathbf{0}$ , où  $f: \mathbb{R}^d \rightarrow \mathbb{R}$

On commence avec  $\mathbf{x}_0$ , et à l'étape  $k$ :  $\mathbf{x}_k \leftarrow \mathbf{x}_{k-1} - \nabla f(\mathbf{x}_{k-1})^{-1} f(\mathbf{x}_{k-1})$

# Algorithme de Newton

On veut résoudre (numériquement)  $f(x) = 0$ , où  $f: \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$

On commence en  $x_0$ , et à l'étape  $k$ :  $x_k \leftarrow x_{k-1} - \frac{f(x_{k-1})}{f'(x_{k-1})}$



On veut résoudre (numériquement)  $f(\mathbf{x}) = \mathbf{0}$ , où  $f: \mathbb{R}^d \rightarrow \mathbb{R}$

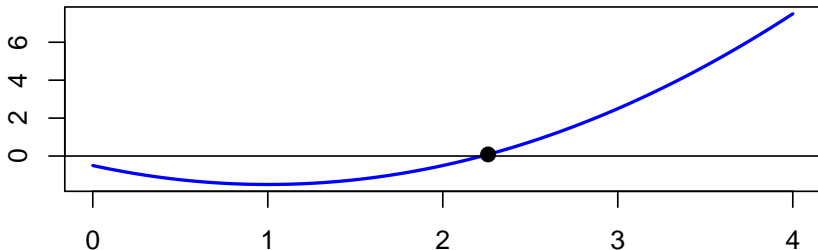
On commence avec  $\mathbf{x}_0$ , et à l'étape  $k$ :  $\mathbf{x}_k \leftarrow \mathbf{x}_{k-1} - \nabla f(\mathbf{x}_{k-1})^{-1} f(\mathbf{x}_{k-1})$



# Algorithme de Newton

On veut résoudre (numériquement)  $f(x) = 0$ , où  $f: \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$

On commence en  $x_0$ , et à l'étape  $k$ :  $x_k \leftarrow x_{k-1} - \frac{f(x_{k-1})}{f'(x_{k-1})}$



On veut résoudre (numériquement)  $f(\mathbf{x}) = \mathbf{0}$ , où  $f: \mathbb{R}^d \rightarrow \mathbb{R}$

On commence avec  $\mathbf{x}_0$ , et à l'étape  $k$ :  $\mathbf{x}_k \leftarrow \mathbf{x}_{k-1} - \nabla f(\mathbf{x}_{k-1})^{-1} f(\mathbf{x}_{k-1})$

# Algorithme de Newton

On veut résoudre ici  $\nabla \log \mathcal{L}(\beta) = \mathbf{0}$

On commence avec  $\beta_0$  et à l'étape  $j$ :  $\beta_k \leftarrow \beta^{j-1} - H(\beta^{j-1})^{-1} \nabla \log \mathcal{L}(\beta^{j-1})$

$H(\beta) = [H_{j,k}]$  est la matrice Hessienne, où

$$H_{j,k} = \frac{\partial^2 \log \mathcal{L}(\beta)}{\partial \beta_j \partial \beta_k} = - \sum_{i=1}^n x_{j,i} x_{k,i} p_i(\beta) [1 - p_i(\beta)]$$

soit  $H(\beta) = -\mathbf{X}^\top \mathbf{\Omega} \mathbf{X}$  où  $\mathbf{\Omega} = \text{diag}(\mathbf{p}(1 - \mathbf{p}))$ .

# Algorithme de Newton

Posons  $\mathbf{\Omega} = \text{diag}(\mathbf{p}(1 - \mathbf{p}))$ ,

$$\nabla \log \mathcal{L}(\beta) = \frac{\partial \log \mathcal{L}(\beta)}{\partial \beta} = \mathbf{X}^\top (\mathbf{y} - \mathbf{p}) \quad (\text{avec } \mathbf{p} = \mathbf{p}(\beta))$$

$$H(\beta) = \frac{\partial^2 \log \mathcal{L}(\beta)}{\partial \beta \partial \beta^\top} = -\mathbf{X}^\top \mathbf{\Omega} \mathbf{X} \quad (\text{avec } \mathbf{\Omega} = \mathbf{\Omega}(\beta))$$

Algorithme de Newton:

$$\beta^j = \beta^{j-1} + (\mathbf{X}^\top \mathbf{\Omega}^{j-1} \mathbf{X})^{-1} \mathbf{X}^\top \mathbf{\Omega}^{j-1} (\mathbf{y} - \mu^{j-1})$$

$$\beta^j = (\mathbf{X}^\top \mathbf{\Omega} \mathbf{X})^{-1} \mathbf{X}^\top \mathbf{\Omega} \mathbf{Z} \text{ où } \mathbf{Z} = \mathbf{X} \beta^{j-1} + \mathbf{\Omega}^{-1} (\mathbf{y} - \mathbf{p}^{j-1}),$$

qui est une régression pondérée

$$\beta^j = \operatorname{argmin} \left\{ (\mathbf{Z} - \mathbf{X} \beta)^\top \mathbf{\Omega} (\mathbf{Z} - \mathbf{X} \beta) \right\}$$

# Maximum de Vraisemblance

Critère d'arrêt : si  $\|\beta_k - \beta_{k-1}\| < \epsilon$ ,  $\hat{\beta} = \beta_k$

**Proposition:**  $\hat{\beta} \xrightarrow{\mathbb{P}} \beta$ , et en posant  $l(\beta) = -H(\beta) = \mathbf{X}^\top \Omega \mathbf{X}$

$$(\hat{\beta} - \beta) \xrightarrow{\mathcal{L}} \mathcal{N}(\mathbf{0}, l(\beta)^{-1})$$

lorsque  $n \rightarrow \infty$ .

# Survie des Passagers du Titanic

$y$  : indicatrice de survie d'un passager du Titanic

```
1 > base = base[!is.na(base$Age),]  
2 > y = base$Survived  
3 > X = cbind(1,(base$Sex == "male"),(base$Pclass == 2),(base$Pclass == 3),  
             base$Age)
```

Approche par descente de gradient

```
1 > beta = matrix(NA,5,7)  
2 > beta[,1]=lm(y~0+X)$coefficients  
3 > for(s in 2:7){  
4   eta = X%%beta[,s-1]  
5   p = exp(eta)/(1+exp(eta))  
6   Omega = diag(as.numeric(p*(1-p)),length(p),length(p))  
7   gradient=t(X)%%(y-p)  
8   Hessian=-t(X)%%Omega%%X  
9   beta[,s]=beta[,s-1]-solve(Hessian)%%gradient  
10 }
```

# Survie des Passagers du Titanic

```
1 > beta
2           [,1]      [,2]      [,3]      [,4]      [,5]      [,6]      [,7]
3 [1,]  1.125    2.716    3.566    3.761    3.769    3.769    3.769
4 [2,] -0.478   -2.021   -2.415   -2.510   -2.514   -2.514   -2.514
5 [3,] -0.207   -0.913   -1.230   -1.298   -1.301   -1.301   -1.301
6 [4,] -0.406   -1.729   -2.414   -2.566   -2.572   -2.572   -2.572
7 [5,] -0.006   -0.023   -0.035   -0.037   -0.037   -0.037   -0.037
8 > solve(-Hessian)
9           [,1]      [,2]      [,3]      [,4]      [,5]
10 [1,]  0.1609  -0.0372  -0.0681  -0.0881  -0.0024
11 [2,] -0.0372   0.0431   0.0091   0.0146   0.0001
12 [3,] -0.0681   0.0091   0.0774   0.0486   0.0007
13 [4,] -0.0881   0.0146   0.0486   0.0792   0.0011
14 [5,] -0.0024   0.0001   0.0007   0.0011   0.0001
```

# Survie des Passagers du Titanic

Ce qui donne  $\hat{\beta}$  et la variance asymptotique (estimée)  $\text{Var}(\hat{\beta})$

Approche par moindres carrés pondérés itérés (IWLS)

```
1 > beta = matrix(NA,5,7)
2 > beta[,1]=lm(y~0+X)$coefficients
3 > for(s in 2:7){
4   eta = X%*%beta[,s-1]
5   p    = exp(eta)/(1+exp(eta))
6   Omega = diag(as.numeric(p*(1-p)),length(p),length(p))
7   Z     = eta + solve(Omega)%*%(y-p)
8   beta[,s]=lm(Z~0+X,weights=diag(Omega))$coefficients
9 }
```

# Survie des Passagers du Titanic

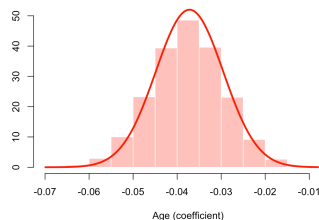
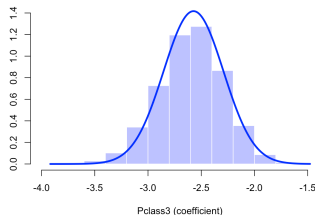
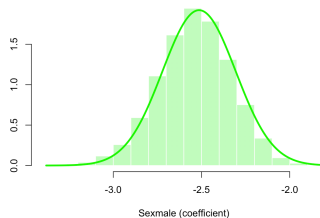
```
1 > beta
2           [,1]      [,2]      [,3]      [,4]      [,5]      [,6]      [,7]
3 [1,]  1.125    2.716    3.566    3.761    3.769    3.769    3.769
4 [2,] -0.478   -2.021   -2.415   -2.510   -2.514   -2.514   -2.514
5 [3,] -0.207   -0.913   -1.230   -1.298   -1.301   -1.301   -1.301
6 [4,] -0.406   -1.729   -2.414   -2.566   -2.572   -2.572   -2.572
7 [5,] -0.006   -0.023   -0.035   -0.037   -0.037   -0.037   -0.037
8 > solve(t(X)%*%Omega%*%X)
9           [,1]      [,2]      [,3]      [,4]      [,5]
10 [1,]  0.1609  -0.0372  -0.0681  -0.0881  -0.0024
11 [2,] -0.0372   0.0431   0.0091   0.0146   0.0001
12 [3,] -0.0681   0.0091   0.0774   0.0486   0.0007
13 [4,] -0.0881   0.0146   0.0486   0.0792   0.0011
14 [5,] -0.0024   0.0001   0.0007   0.0011   0.0001
```



# Intervalle de Confiance

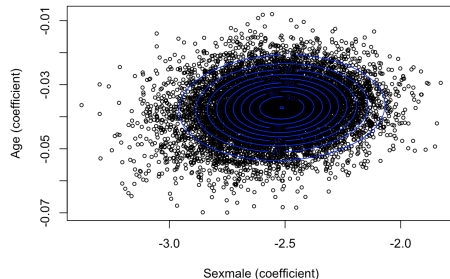
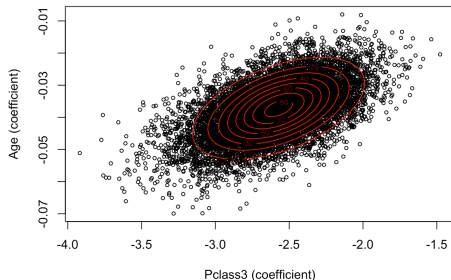
L'incertitude des estimateurs peut s'appréhender par simulations  
(bootstrap - rééchantillonnage)

```
1 > B = summary(glm(Survived~Sex+Pclass+Age,data=base,family="binomial"))  
   $coefficients  
2 > beta = matrix(NA,5,9999)  
3 > n = nrow(base)  
4 > for(b in 1:9999){  
5   idx = sample(1:n,size=n,replace=TRUE)  
6   beta[,b] = glm(Survived~Sex+Pclass+Age,data=  
7   base[idx,],family="binomial")$coefficients }
```



# Intervalles de Confiance

```
1 > plot(beta[4,],beta[5,])
2 > m = B[4:5,1]
3 > V = vcov(glm(Survived~Sex+Pclass+Age,data=base,family="binomial"))
  [4:5,4:5]
4 > library(mnormt)
5 > dn = function(x,y) dmnorm(cbind(x,y),m,V)
```



donc  $\hat{\beta} \approx \mathcal{N}(\beta, \Sigma)$

```
1 > reg = glm(Survived~Sex+Pclass+Age,data=base,family="binomial")
```

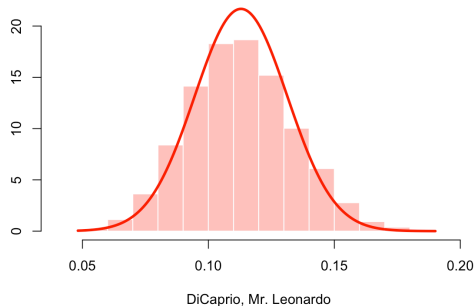
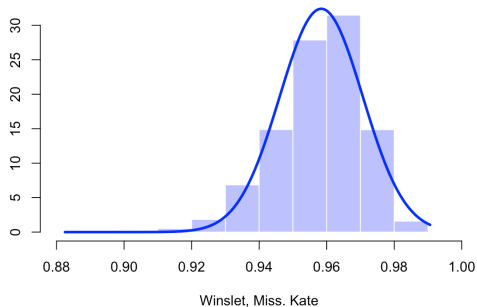
# Intervalles de Confiance

On peut regarder pour un intervalle de confiance pour  $p_{\mathbf{x}} = \mathbb{P}(Y = 1 | \mathbf{X} = \mathbf{x})$

```
1 > newbase = data.frame(  
2   Pclass = as.factor(c(1,3)),  
3   Sex = as.factor(c("female","male")),  
4   Age = c(17,20),  
5   SibSp = c(1,0),  
6   Parch = c(2,0),  
7   Embarked = as.factor(c("S","S")),  
8   Name = as.factor(c("Winslet, Miss. Kate","DiCaprio, Mr. Leonardo")))  
9 > (PRD = predict(reg,newdata=newbase,se.fit = TRUE,type="response"))  
10 $fit  
11           1           2  
12 0.9583891 0.1129489  
13 $se.fit  
14           1           2  
15 0.01231372 0.01840634
```

# Intervalles de Confiance

```
1 > prd = matrix(NA,2,9999)
2 > for(b in 1:9999){
3   idx = sample(1:n,size=n,replace=TRUE)
4   regb = glm(Survived~Sex+Pclass+Age,data=base[idx,],family="binomial")
5   prd[,b] = predict(regb,newdata=newbase,type="response")}
```



donc  $\hat{p}_x \approx \mathcal{N}(p_x, \sigma_x^2)$

## Delta Method

$$(\hat{\beta} - \beta) \xrightarrow{\mathcal{L}} \mathcal{N}(\mathbf{0}, \Sigma)$$

soit  $h : \mathbb{R}^p \rightarrow \mathbb{R}^d$ , différentiable, alors (Taylor)

$$h(\hat{\beta}) \approx h(\beta) + \nabla h(\beta)^\top (\hat{\beta} - \beta)$$

si  $\nabla h(\beta) \neq \mathbf{0}$ , alors

$$\begin{aligned}\text{Var}(h(\hat{\beta})) &= \text{Var}(h(\beta) + \nabla h(\beta)^\top (\hat{\beta} - \beta)) \\ &= \nabla h(\beta)^\top \Sigma \nabla h(\beta)\end{aligned}$$

$$\text{et } (h(\hat{\beta}) - h(\beta)) \xrightarrow{\mathcal{L}} \mathcal{N}(\mathbf{0}, \nabla h(\beta)^\top \Sigma \nabla h(\beta))$$

Pour rappel,  $\hat{p}_x = h(\mathbf{x}^\top \hat{\beta})$  où  $h(x) = \frac{e^x}{1 + e^x}$ .

# Régression Bernoulli $y = 1_A$

```
1 > reg1 = glm((Survived==1)~Pclass+Sex+Age+I(Age^2)+I(Age^3)+SibSp,
2   family=binomial, data=base)
3
4 Coefficients:
5             Estimate Std. Error z value Pr(>|z|)
6 (Intercept)  5.616e+00  6.565e-01   8.554  < 2e-16 ***
7 Pclass2     -1.360e+00  2.842e-01  -4.786  1.7e-06 ***
8 Pclass3     -2.557e+00  2.853e-01  -8.962  < 2e-16 ***
9 Sexmale     -2.658e+00  2.176e-01 -12.216  < 2e-16 ***
10 Age         -1.905e-01  5.528e-02  -3.446  0.000569 ***
11 I(Age^2)      4.290e-03  1.854e-03   2.314  0.020669 *
12 I(Age^3)     -3.520e-05  1.843e-05  -1.910  0.056188 .
13 SibSp        -5.041e-01  1.317e-01  -3.828  0.000129 ***
14 > predict(reg1)[1]
15 -2.592995
16 > predict(reg1,type="response")[1]
17 0.06959063
```

# Régression Bernoulli $y = 1_{A^c}$

```
1 > reg0 = glm((Survived==0)~Pclass+Sex+Age+I(Age^2)+I(Age^3)+SibSp, family
  =binomial, data=base)
2 > summary(reg0)
3
4 Coefficients:
5             Estimate Std. Error z value Pr(>|z|)
6 (Intercept) -5.616e+00  6.565e-01  -8.554  < 2e-16 ***
7 Pclass2      1.360e+00  2.842e-01   4.786  1.7e-06 ***
8 Pclass3      2.557e+00  2.853e-01   8.962  < 2e-16 ***
9 Sexmale      2.658e+00  2.176e-01  12.216  < 2e-16 ***
10 Age          1.905e-01  5.528e-02   3.446  0.000569 ***
11 I(Age^2)     -4.290e-03  1.854e-03  -2.314  0.020669 *
12 I(Age^3)      3.520e-05  1.843e-05   1.910  0.056188 .
13 SibSp        5.041e-01  1.317e-01   3.828  0.000129 ***
14
15 > predict(reg0)[1]
16 2.592995
17 > predict(reg0,type="response")[1]
18 0.9304094
```

# Régression Binomiale

Au lieu de  $Y_i \sim \mathcal{B}(p_i)$ ,  $Y_i \sim \mathcal{B}(n_i, p_i)$  où  $n_i$  est connue.

$$\mathbb{E}\left(\frac{Y_i}{n_i}\right) = p_i = \frac{e^{\mathbf{x}_i^\top \beta}}{1 + e^{\mathbf{x}_i^\top \beta}}$$

```
1 > reg = glm(cbind(cbind(Y,n-Y) ~ X1+X2, data = base, family=binomial)
```

On pose  $z_i = y_i/n_i$ , dont la densité est

$$f(y_i, p_i) = \binom{n_i}{n_i y_i} \exp \left[ n_i y_i \log \left( \frac{p}{1-p} \right) + n_i \log(1-p) \right]$$

et on estime  $\beta$  par maximum de vraisemblance



# Régression Multinomiale

Pour une loi de Bernoulli,  $y \in \{0, 1\}$ ,

$$\mathbb{P}(Y = 1) = \frac{e^{x^\top \beta}}{1 + e^{x^\top \beta}} = \frac{p_1}{p_0 + p_1} \text{ et } \mathbb{P}(Y = 0) = \frac{1}{1 + e^{x^\top \beta}} = \frac{p_0}{p_0 + p_1}$$

Pour une loi multinomiale,  $y \in \{A, B, C\}$ ,  $\mathbf{y} = (\mathbf{1}_A, \mathbf{1}_B, \mathbf{1}_C)$

$$\mathbb{P}(Y = A) = \frac{p_A}{p_A + p_B + p_C} \propto p_A \text{ i.e. } \mathbb{P}(Y = A) = \frac{e^{x^\top \beta_A}}{e^{x^\top \beta_B} + e^{x^\top \beta_B} + 1}$$

$$\mathbb{P}(Y = B) = \frac{p_B}{p_A + p_B + p_C} \propto p_B \text{ i.e. } \mathbb{P}(Y = B) = \frac{e^{x^\top \beta_B}}{e^{x^\top \beta_A} + e^{x^\top \beta_B} + 1}$$

$$\mathbb{P}(Y = C) = \frac{p_C}{p_A + p_B + p_C} \propto p_C \text{ i.e. } \mathbb{P}(Y = C) = \frac{1}{e^{x^\top \beta_A} + e^{x^\top \beta_B} + 1}$$

# Régression Multinomiale

On va essayer de comprendre la classe  $y \in \{1, 2, 3\}$  sur les données du Titanic

```
1 > loc = "http://freakonometrics.free.fr/titanic.RData"
2 > download.file(loc_fichier, "titanic.RData")
3 > load("titanic.RData")
4 > regclass = multinom(Pclass ~ Sex+Age+SibSp, base)
5 > regclass
6
7 Coefficients:
8   (Intercept)    Sexmale         Age         SibSp
9 2      1.416426  0.2662196 -0.04526865 -0.2150871
10 3      2.420469  1.0330840 -0.07541502 -0.1149161
11
12 Residual Deviance: 1347.672
13 AIC: 1363.672
```

# Régression Multinomiale

```
1 > (b = coefficients(regclass))
2   (Intercept)    Sexmale          Age          SibSp
3 2      1.416426  0.2662196 -0.04526865 -0.2150871
4 3      2.420469  1.0330840 -0.07541502 -0.1149161
```

Avec ici  $\beta_2$  et  $\beta_3$  (la class 1 est la référence)

```
1 > newbase = data.frame(Sex="female",Age =60,SibSp=0)
2 > predict(regclass,newdata=newbase,"probs")
3           1           2           3
4 0.71708728 0.19548915 0.08742357
```

Idée : comme la class 1 est la référence,

$$\mathbb{P}(Y=1) \propto 1, \mathbb{P}(Y=2) \propto e^{x^\top \beta_2} \text{ et } \mathbb{P}(Y=3) \propto e^{x^\top \beta_3}$$

# Régression Multinomiale

$$\mathbb{P}(Y=1) \propto 1, \mathbb{P}(Y=2) \propto e^{x^\top \beta_2} \text{ et } \mathbb{P}(Y=3) \propto e^{x^\top \beta_3}$$

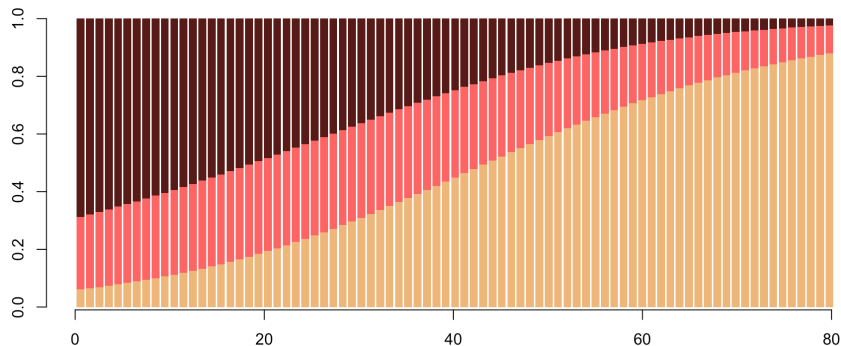
```
1 > x = c(1,0,60,0)
2 > b = rbind(rep(0,ncol(b)),b)
3 > t(exp(b%*%x))
4           1           2           3
5 [1,] 1 0.2726156 0.1219148
```

$$\mathbb{P}(Y=1) = \frac{1}{e^{x^\top \beta_2} + e^{x^\top \beta_3} + 1}, \mathbb{P}(Y=2) = \frac{e^{x^\top \beta_A}}{e^{x^\top \beta_B} + e^{x^\top \beta_B} + 1}, \dots$$

```
1 > t(exp(b%*%x))/sum(exp(b%*%x))
2           1           2           3
3 [1,] 0.7170873 0.1954892 0.08742357
```

# Régression Multinomiale

```
1 > x = cbind(1,0,0:80,0)
2 > p2 = exp(apply((x%*%b[2,]),1,sum))
3 > p3 = exp(apply((x%*%b[3,]),1,sum))
4 > pp2 = p2/(1+p2+p3)
5 > pp3 = p3/(1+p2+p3)
6 > p = rbind(1-pp2-pp3,pp2,pp3)
7 > barplot(p)
```



# Régression Multinomiale

Considérons une approche alternative : régressions Bernoulli itérées

considérons un premier modèle de Bernoulli  $y_1 = \mathbf{1}_A$

```
1 > reg1 = glm((Pclass==1) ~ Sex+Age+SibSp, base, family=binomial)
```

considérons un premier modèle de Bernoulli  $y_2 = \mathbf{1}_B$ , entre les classes B et C

```
1 > reg2 = glm((Pclass==2) ~ Sex+Age+SibSp, base, family=binomial, subset =  
  (Pclass!=1))
```

Idée :  $\mathbb{P}(y = B) = \mathbb{P}(y = B | y \neq A) \cdot \mathbb{P}(y \neq A)$

```
1 > p11 = predict (reg1, newdata=base, type="response")  
2 > p12 = predict (reg2, newdata=base, type="response")  
3 > itp = cbind(p11, (1-p11)*p12, (1-p11)*(1-p12))
```

# Régression Multinomiale

On peut comparer les modèles logit itérés (à gauche)  
et le modèle multinomial (à droite)

```
1 > mmp = predict(regclass,newdata=base,"probs")
2 > head(cbind(itp,mmp))
3      1      2      3      1      2      3
4 1 0.129 0.204 0.668 0.126 0.201 0.673
5 2 0.459 0.274 0.267 0.462 0.275 0.264
6 3 0.256 0.328 0.416 0.259 0.330 0.411
7 4 0.412 0.285 0.303 0.417 0.284 0.299
8 5 0.227 0.253 0.521 0.229 0.253 0.518
```

# Références

Hilbe, J. (2009). Logistic regression models.

Hilbe, J. M. (2016). *Practical guide to logistic regression*. CRC Press.

Hosmer Jr, D. W., Lemeshow, S., and Sturdivant, R. X. (2013). *Applied logistic regression*. John Wiley & Sons.

James, G., Witten, D., Hastie, T., Tibshirani, R., et al. (2013). *An introduction to statistical learning*, volume 112. Springer.