Modélisation

Partie 1 : construction et sélection de modèles

François Husson

Unité pédagogique de mathématiques appliquées L'Institut Agro

Qui a déjà fait des modélisations complexes?

Qui a déjà fait des modélisations complexes? TOUS ... facilement et sans le savoir!

Qui a déjà fait des modélisations complexes? TOUS ... facilement et sans le savoir!

- Prévoir un temps de trajet
- Estimer le temps d'attente dans une file d'attente
- Estimer si le prix de location de l'appartement est juste
- Choisir de prendre un vêtement de pluie pour la journée (prévoir s'il va pleuvoir)

Qui a déjà fait des modélisations complexes? TOUS ... facilement et sans le savoir!

- Prévoir un temps de trajet
- Estimer le temps d'attente dans une file d'attente
- Estimer si le prix de location de l'appartement est juste
- Choisir de prendre un vêtement de pluie pour la journée (prévoir s'il va pleuvoir)

Et comment faites-vous pour prévoir?

Qui a déjà fait des modélisations complexes? TOUS ... facilement et sans le savoir!

- Prévoir un temps de trajet
- Estimer le temps d'attente dans une file d'attente
- Estimer si le prix de location de l'appartement est juste
- Choisir de prendre un vêtement de pluie pour la journée (prévoir s'il va pleuvoir)

Et comment faites-vous pour prévoir?

- 1 vous listez toutes les variables (les effets) qui peuvent influer sur votre réponse
- 2 vous éliminez les variables qui sont négligeables
- 3 vous essayez de quantifier l'effet des variables restantes sélectionnées

Qui a déjà fait des modélisations complexes? TOUS ... facilement et sans le savoir!

- Prévoir un temps de trajet
- Estimer le temps d'attente dans une file d'attente
- Estimer si le prix de location de l'appartement est juste
- Choisir de prendre un vêtement de pluie pour la journée (prévoir s'il va pleuvoir)

Et comment faites-vous pour prévoir?

- 1 vous listez toutes les variables (les effets) qui peuvent influer sur votre réponse
- 2 vous éliminez les variables qui sont négligeables
- 3 vous essayez de quantifier l'effet des variables restantes sélectionnées

Qui a déjà fait des modélisations complexes? TOUS ... facilement et sans le savoir!

- Prévoir un temps de trajet
- Estimer le temps d'attente dans une file d'attente
- Estimer si le prix de location de l'appartement est juste
- Choisir de prendre un vêtement de pluie pour la journée (prévoir s'il va pleuvoir)

Et comment faites-vous pour prévoir?

- 1 vous listez toutes les variables (les effets) qui peuvent influer sur votre réponse
- vous éliminez les variables qui sont négligeables
- 3 vous essayez de quantifier l'effet des variables restantes sélectionnées

Votre intuition est-elle bien raisonnable?

Qui a déjà fait des modélisations complexes? TOUS ... facilement et sans le savoir!

- Prévoir un temps de trajet
- Estimer le temps d'attente dans une file d'attente
- Estimer si le prix de location de l'appartement est juste
- Choisir de prendre un vêtement de pluie pour la journée (prévoir s'il va pleuvoir)

Et comment faites-vous pour prévoir?

- 1 vous listez toutes les variables (les effets) qui peuvent influer sur votre réponse
- 2 vous éliminez les variables qui sont négligeables
- 3 vous essayez de quantifier l'effet des variables restantes sélectionnées

Votre intuition est-elle bien raisonnable? OUI, C'EST PARFAIT

Qui a déjà fait des modélisations complexes? TOUS ... facilement et sans le savoir!

- Prévoir un temps de trajet
- Estimer le temps d'attente dans une file d'attente
- Estimer si le prix de location de l'appartement est juste
- Choisir de prendre un vêtement de pluie pour la journée (prévoir s'il va pleuvoir)

Et comment faites-vous pour prévoir?

- 1 vous listez toutes les variables (les effets) qui peuvent influer sur votre réponse
- 2 vous éliminez les variables qui sont négligeables
- 3 vous essayez de quantifier l'effet des variables restantes sélectionnées

Votre intuition est-elle bien raisonnable? OUI, C'EST PARFAIT

A quoi servent les statistiques alors?

Qui a déjà fait des modélisations complexes? TOUS ... facilement et sans le savoir!

- Prévoir un temps de trajet
- Estimer le temps d'attente dans une file d'attente
- Estimer si le prix de location de l'appartement est juste
- Choisir de prendre un vêtement de pluie pour la journée (prévoir s'il va pleuvoir)

Et comment faites-vous pour prévoir?

- 1 vous listez toutes les variables (les effets) qui peuvent influer sur votre réponse
- 2 vous éliminez les variables qui sont négligeables
- 3 vous essayez de quantifier l'effet des variables restantes sélectionnées

Votre intuition est-elle bien raisonnable? OUI, C'EST PARFAIT

A quoi servent les statistiques alors? A faire tout cela avec rigueur pour des phénomènes parfois plus complexes

Données, problématique

- Prévoir le temps de cuisson idéal en fonction de la composition et du poids de l'aliment, de la température du four, de l'humidité de l'air, ...
- Prévoir la production de biogaz en fonction de la quantité de déchets agricoles ou agroalimentaires, des résidus de cultures, d'ordures ménagères ou des restaurants, etc.
- Prévoir la production d'une éolienne en fonction de la vitesse du vent à 10m, à 80m, de la température à 2m, de la pression, de l'humidité relative à 2m, (de la direction du vent)
- Comprendre ce qui influe sur le pourcentage de surface à bas niveau d'intrants d'une zone en fonction du type de culture, de la mise en place ou non d'un programme d'aide, si la zone se situe dans une aire de captage
- Optimiser une réaction chimique en fonction du temps et de la température

Objectifs:

- Comprendre quelles variables influent sur une variable réponse quantitative
- Prévoir les valeurs de la variable réponse pour de nouvelles conditions

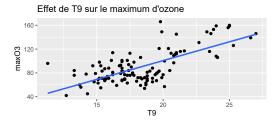
Données, problématique

L'association Air Breizh surveille la qualité de l'air et mesure la concentration de polluants comme l'ozone (O_3) ainsi que les conditions météorologiques comme la température, la nébulosité, le vent, etc.

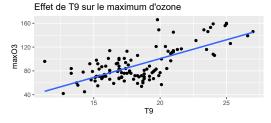
Durant l'été 2001, 112 données ont été relevées à Rennes (https://r-stat-sc-donnees.github.io/ozone.txt)

	maxO3	Т9	T12	T15	Ne9	Ne12	Ne15	Vx9	Vx12	Vx15	maxO3v	vent	pluie
2001-06-01	87	15.6	18.5	18.4	4	4	8	0.6946	-1.7101	-0.6946	84	Nord	Sec
2001-06-02	82	17	18.4	17.7	5	5	7	-4.3301	-4	-3	87	Nord	Sec
2001-06-03	92	15.3	17.6	19.5	2	5	4	2.9544	1.8794	0.5209	82	Est	Sec
2001-06-04	114	16.2	19.7	22.5	1	1	0	0.9848	0.3473	-0.1736	92	Nord	Sec
2001-06-05	94	17.4	20.5	20.4	8	8	7	-0.5	-2.9544	-4.3301	114	Ouest	Sec
2001-06-06	80	17.7	19.8	18.3	6	6	7	-5.6382	-5	-6	94	Ouest	Pluie
2001-06-07	79	16.8	15.6	14.9	7	8	8	-4.3301	-1.8794	-3.7588	80	Ouest	Sec

Leur objectif : prévoir la concentration en ozone du lendemain pour avertir la population en cas de pic de pollution

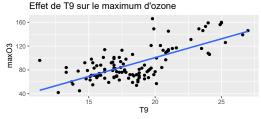


```
library(dplyr)
library(ggplot2)
ozone %>% ggplot() +
   aes(x=T9, y=max03) +
   geom_point() +
   geom_smooth(method="lm", se=FALSE) +
   ggtitle("Effet de T9 sur le maximum d'ozone")
```



```
library(dplyr)
library(ggplot2)
ozone %>% ggplot() +
  aes(x=T9, y=max03) +
  geom_point() +
  geom_smooth(method="lm", se=FALSE) +
  ggtitle("Effet de T9 sur le maximum d'ozone")
```

$$MaxO3 \sim T9 \implies MaxO3_i = \beta_0 + \beta_1 \times T9_i + alea_i$$

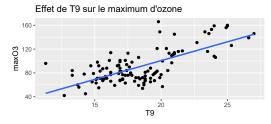


```
library(dplyr)
library(ggplot2)
ozone %% ggplot() +
  aes(x=T9, y=max03) +
  geom_point() +
  geom_smooth(method="lm", se=FALSE) +
  ggtitle("Effet de T9 sur le maximum d'ozone")
```

$$MaxO3 \sim T9 \implies MaxO3_i = \beta_0 + \beta_1 \times T9_i + alea_i$$

Réponse $\sim var_1$

$$\begin{cases} \forall i = 1, ..., n & Y_i = \beta_0 + \beta_1 x_i + \varepsilon_i \\ \forall i = 1, ..., n & \varepsilon_i \text{ i.i.d. }, & \mathbb{E}(\varepsilon_i) = 0, & \mathbb{V}(\varepsilon_i) = \sigma^2 \\ \forall i \neq k & cov(\varepsilon_i, \varepsilon_k) = 0 \end{cases}$$

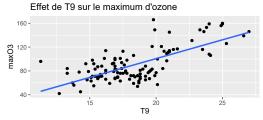


```
library(dplyr)
library(ggplot2)
ozone %>% ggplot() +
  aes(x=T9, y=max03) +
  geom_point() +
  geom_smooth(method="lm", se=FALSE) +
  ggtitle("Effet de T9 sur le maximum d'ozone")
```

$$MaxO3 \sim T9 \implies MaxO3_i = \beta_0 + \beta_1 \times T9_i + alea_i$$

Réponse
$$\sim var_1 + var_2 + ... + var_p$$

$$\begin{cases} \forall i = 1, ..., n & Y_i = \beta_0 + \beta_1 x_i + \beta_2 v_i + \beta_3 w_i + ... + \beta_p z_i + \varepsilon_i \\ \forall i = 1, ..., n & \varepsilon_i \text{ i.i.d. }, & \mathbb{E}(\varepsilon_i) = 0, & \mathbb{V}(\varepsilon_i) = \sigma^2 \\ \forall i \neq k & cov(\varepsilon_i, \varepsilon_k) = 0 \end{cases}$$



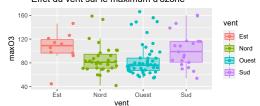
```
library(dplyr)
library(ggplot2)
ozone %>% ggplot() +
  aes(x=T9, y=max03) +
  geom_point() +
  geom_smooth(method="lm", se=FALSE) +
  ggtitle("Effet de T9 sur le maximum d'ozone")
```

$$MaxO3 \sim T9 \implies MaxO3_i = \beta_0 + \beta_1 \times T9_i + alea_i$$

Réponse
$$\sim var_1 + var_2 + ... + var_p$$

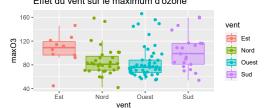
$$\begin{cases} \forall i = 1, ..., n & Y_i = \beta_0 + \beta_1 x_{i1} + \beta_2 x_{i2} + \beta_3 x_{i3} + ... + \beta_p x_{ip} + \varepsilon_i \\ \forall i = 1, ..., n & \varepsilon_i \text{ i.i.d. }, & \mathbb{E}(\varepsilon_i) = 0, & \mathbb{V}(\varepsilon_i) = \sigma^2 \\ \forall i \neq k & cov(\varepsilon_i, \varepsilon_k) = 0 \end{cases}$$

Effet du vent sur le maximum d'ozone



```
ozone %>% ggplot() +
  aes(x=vent, y=max03, fill=vent,col=vent) +
  geom_boxplot(outlier.shape=NA,alpha=0.4) +
  geom_jitter()+
  ggtitle("Effet du vent sur le maximum d'ozone")
```

Effet du vent sur le maximum d'ozone



```
ozone %>% ggplot() +
  aes(x=vent, y=max03, fill=vent,col=vent) +
  geom_boxplot(outlier.shape=NA,alpha=0.4) +
  geom_jitter()+
  ggtitle("Effet du vent sur le maximum d'ozone")
```

$$\mathit{MaxO3} \sim \mathit{vent} \implies \mathit{MaxO3}_{ij} \sim \mu + \left\{ egin{array}{l} lpha_1 & \mathrm{si} & \mathrm{vent} & \mathrm{d'est} \\ lpha_2 & \mathrm{si} & \mathrm{vent} & \mathrm{du} & \mathrm{nord} \\ lpha_3 & \mathrm{si} & \mathrm{vent} & \mathrm{d'ouest} \\ lpha_4 & \mathrm{si} & \mathrm{vent} & \mathrm{du} & \mathrm{sud} \end{array}
ight\} + \mathit{alea}_{ij}$$

Effet du vent sur le maximum d'ozone 160 - vent Est Nord Ouest

Ouest

Nord

Sud

Est

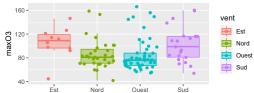
```
ozone %>% ggplot() +
  aes(x=vent, y=max03, fill=vent,col=vent) +
  geom_boxplot(outlier.shape=NA,alpha=0.4) +
  geom_jitter()+
  ggtitle("Effet du vent sur le maximum d'ozone")
```

$$\mathit{MaxO3} \sim \mathit{vent} \implies \mathit{MaxO3}_{ij} \sim \mu + \left\{ egin{array}{l} lpha_1 \ \text{si vent d'est} \\ lpha_2 \ \text{si vent du nord} \\ lpha_3 \ \text{si vent d'ouest} \\ lpha_4 \ \text{si vent du sud} \end{array}
ight\} + \mathit{alea}_{ij}$$

Réponse $\sim var_1$

$$\begin{cases} \forall i,j & Y_{ij} = \mu + \alpha_i + \varepsilon_{ij} \\ \forall i,j & \varepsilon_{ij} \text{ i.i.d. }, \mathbb{E}(\varepsilon_{ij}) = 0, \mathbb{V}(\varepsilon_{ij}) = \sigma^2 \\ \forall i,j & cov(\varepsilon_{ij}, \varepsilon_{i'j'}) = 0 \end{cases}$$

Effet du vent sur le maximum d'ozone



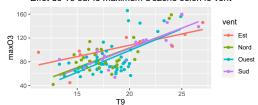
$$\mathit{MaxO3} \sim \mathit{vent} \implies \mathit{MaxO3}_{ij} \sim \mu + \left\{ egin{array}{l} lpha_1 \ \text{si vent d'est} \\ lpha_2 \ \text{si vent du nord} \\ lpha_3 \ \text{si vent d'ouest} \\ lpha_4 \ \text{si vent du sud} \end{array}
ight\} + \mathit{alea}_{ij}$$

Réponse $\sim var_1 + var_2 + ...$

$$\begin{cases} \forall i, j, k & Y_{ijk} = \mu + \alpha_i + \beta_j + \varepsilon_{ijk} \\ \forall i, j, k & \varepsilon_{ijk} \text{ i.i.d. }, & \mathbb{E}(\varepsilon_{ijk}) = 0, & \mathbb{V}(\varepsilon_{ijk}) = \sigma^2 \\ \forall i, j, k & cov(\varepsilon_{ijk}, \varepsilon_{i'j'k'}) = 0 \end{cases}$$

Visualisation de l'effet linéaire d'une variable quanti spécifique selon les modalités d'une variables quali

Effet de T9 sur le maximum d'ozone selon le vent

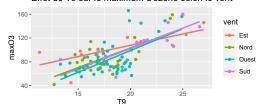


```
ozone %>% ggplot() +
  aes(x=T9, y=max03, col = vent, group=vent) +
  geom_smooth(method="lm", se=FALSE) +
  geom_point()+
  ggtitle("Effet de T9 sur Max03 selon le vent")
```

Visualisation de l'effet linéaire d'une variable quanti spécifique selon les modalités d'une variables quali

Effet de T9 sur le maximum d'ozone selon le vent

Décomposition de la variabilité



```
ozone %>% ggplot() +
  aes(x=T9, y=max03, col = vent, group=vent) +
  geom_smooth(method="lm", se=FALSE) +
  geom_point()+
  ggtitle("Effet de T9 sur Max03 selon le vent")
```

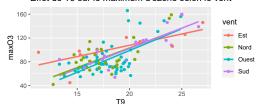
$$MaxO3 \sim vent + T9 + vent : T9$$

$$\textit{MaxO3}_{ij} \sim \mu + \left\{ \begin{array}{l} \alpha_1 \text{ si vent d'est} \\ \alpha_2 \text{ si vent du nord} \\ \alpha_3 \text{ si vent d'ouest} \\ \alpha_4 \text{ si vent du sud} \end{array} \right\} \quad + \quad \left(\beta + \left\{ \begin{array}{l} \gamma_1 \text{ si vent d'est} \\ \gamma_2 \text{ si vent du nord} \\ \gamma_3 \text{ si vent d'ouest} \\ \gamma_4 \text{ si vent du sud} \end{array} \right\} \right) \times \textit{T9}ij + \textit{alea}_{ij}$$

Visualisation de l'effet linéaire d'une variable quanti spécifique selon les modalités d'une variables quali

Effet de T9 sur le maximum d'ozone selon le vent

Décomposition de la variabilité



```
ozone %>% ggplot() +
  aes(x=T9, y=max03, col = vent, group=vent) +
  geom smooth(method="lm", se=FALSE) +
 geom point()+
  ggtitle("Effet de T9 sur MaxO3 selon le vent")
```

 $MaxO3 \sim vent + T9 + vent \cdot T9$

$$\begin{aligned} \textit{MaxO3}_{ij} \sim \mu + \left\{ \begin{array}{l} \alpha_1 \text{ si vent d'est} \\ \alpha_2 \text{ si vent du nord} \\ \alpha_3 \text{ si vent d'ouest} \\ \alpha_4 \text{ si vent du sud} \end{array} \right\} + \left(\beta + \left\{ \begin{array}{l} \gamma_1 \text{ si vent d'est} \\ \gamma_2 \text{ si vent du nord} \\ \gamma_3 \text{ si vent d'ouest} \\ \gamma_4 \text{ si vent du sud} \end{array} \right\} \right) \times T9ij + \textit{alea}_{ij} \\ \left\{ \begin{array}{l} \forall i,j \quad Y_{ij} = \mu + \alpha_i + (\beta + \gamma_i) \times x_{ij} + \varepsilon_{ij} \\ \forall i,j \quad \varepsilon_{ij} \text{ i.i.d.} \quad , \quad \mathbb{E}(\varepsilon_{ij}) = 0, \quad \mathbb{V}(\varepsilon_{ij}) = \sigma^2 \\ \forall i,j \quad cov(\varepsilon_{ii}, \varepsilon_{i'i'}) = 0 \end{array} \right. \end{aligned}$$

Visualisation de l'interaction de 2 variables qualitatives

Définition courante : réaction réciproque de deux phénomènes l'un sur l'autre

Définition statistique : l'effet d'un facteur sur Y diffère selon les modalités de l'autre facteur



```
ozone %>% group_by(vent, pluie) %>%
  summarize(MOY = mean(max03)) %>%
  ggplot() +
  aes(x=vent, y=MOY, col=pluie, group=pluie) +
  geom_line() + geom_point() +
  ggtitle("Interaction pluie:vent sur max03")+
  xlab("Direction du vent")+
  ylab("Maximum d'ozone")
```

Visualisation de l'interaction de 2 variables qualitatives

Définition courante : réaction réciproque de deux phénomènes l'un sur l'autre

Définition statistique : l'effet d'un facteur sur Y diffère selon les modalités de l'autre facteur



```
ozone %>% group_by(vent, pluie) %>%
  summarize(MOY = mean(max03)) %>%
  ggplot() +
  aes(x=vent, y=MOY, col=pluie, group=pluie) +
  geom_line() + geom_point() +
  ggtitle("Interaction pluie:vent sur max03")+
  xlab("Direction du vent")+
  ylab("Maximum d'ozone")
```

 $MaxO3 \sim vent + pluie + vent : pluie$

$$\text{\it MaxO3}_{ijk} \sim \mu + \left\{ \begin{array}{l} \alpha_1 \text{ si vent d'est} \\ \alpha_2 \text{ si vent du nord} \\ \alpha_3 \text{ si vent d'ouest} \\ \alpha_4 \text{ si vent du sud} \end{array} \right\} + \left\{ \begin{array}{l} \beta_1 \text{ si pluie} \\ \beta_2 \text{ si sec} \end{array} \right\} + \left\{ \begin{array}{l} \alpha\beta_{11} \text{ si vent d'est ET pluie} \\ \alpha\beta_{12} \text{ si vent d'est ET sec} \\ \alpha\beta_{21} \text{ si vent du nord ET pluie} \\ \cdots \alpha\beta_{42} \text{ si vent du sud ET sec} \end{array} \right\} + alea_{ijk}$$

Visualisation de l'interaction de 2 variables qualitatives

Définition courante : réaction réciproque de deux phénomènes l'un sur l'autre

Définition statistique : l'effet d'un facteur sur Y diffère selon les modalités de l'autre facteur

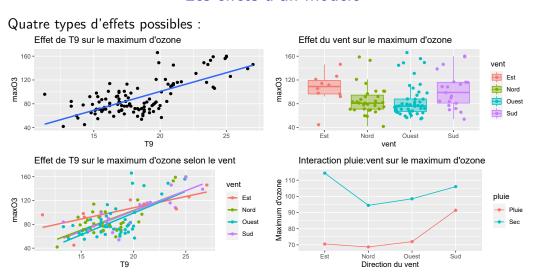


```
ozone %>% group_by(vent, pluie) %>%
  summarize(MOY = mean(max03)) %>%
  ggplot() +
  aes(x=vent, y=MOY, col=pluie, group=pluie) +
  geom_line() + geom_point() +
  ggtitle("Interaction pluie:vent sur max03")+
  xlab("Direction du vent")+
  ylab("Maximum d'ozone")
```

 $MaxO3 \sim vent + pluie + vent : pluie$

$$\begin{aligned} \mathit{MaxO3}_{ijk} \sim \mu + \left\{ \begin{array}{l} \alpha_1 \text{ si vent d'est} \\ \alpha_2 \text{ si vent du nord} \\ \alpha_3 \text{ si vent d'ouest} \\ \alpha_4 \text{ si vent du sud} \end{array} \right\} + \left\{ \begin{array}{l} \beta_1 \text{ si pluie} \\ \beta_2 \text{ si sec} \end{array} \right\} + \left\{ \begin{array}{l} \alpha\beta_{11} \text{ si vent d'est ET pluie} \\ \alpha\beta_{12} \text{ si vent d'est ET sec} \\ \alpha\beta_{21} \text{ si vent du nord ET pluie} \\ \cdots \alpha\beta_{42} \text{ si vent du sud ET sec} \end{array} \right\} + \mathit{alea}_{ijk} \\ \left\{ \begin{array}{l} \forall i,j,k & Y_{ijk} = \mu + \alpha_i + \beta_j + \alpha\beta_{ij} + \varepsilon_{ijk} \\ \forall i,j,k & \varepsilon_{ijk} \text{ i.i.d.} \end{array} \right., \quad \mathbb{E}(\varepsilon_{ijk}) = 0, \quad \mathbb{V}(\varepsilon_{ijk}) = \sigma^2 \\ \forall i,j,k & \mathit{cov}(\varepsilon_{ijk},\varepsilon_{i'j'k'}) = 0 \end{aligned}$$

Les effets d'un modèle



Et avec ça on en ajoute autant qu'on veut pour construire ... tous les modèles avec des effets linéaires et des interactions.

Réponse	Variable(s) explicative(s)	Méthode
Var. quantitative	1 var. quantitative	régression linéaire simple

Réponse	Variable(s) explicative(s)	Méthode
•	1 var. quantitative 1 var. qualitative à <i>I</i> modalités	régression linéaire simple analyse de variance à 1 facteur (rq : si $I = 2$ équivaut à comparaison de 2 moyennes)

Réponse	Variable(s) explicative(s)	Méthode
•	1 var. quantitative 1 var. qualitative à <i>I</i> modalités	régression linéaire simple analyse de variance à 1 facteur (rq : si $I = 2$ équivaut à compa-
Var. quantitative	p var. quantitatives	raison de 2 moyennes) régression linéaire multiple

Réponse	Variable(s) explicative(s)	Méthode
Var. quantitative Var. quantitative	1 var. quantitative 1 var. qualitative à <i>I</i> modalités	régression linéaire simple analyse de variance à 1 facteur (rq : si $I = 2$ équivaut à compa- raison de 2 moyennes)
•	p var. quantitatives K var. qualitatives	régression linéaire multiple analyse de variance à K facteurs

Réponse	Variable(s) explicative(s)	Méthode
Var. quantitative Var. quantitative	1 var. quantitative 1 var. qualitative à <i>l</i> modalités	régression linéaire simple analyse de variance à 1 facteur (rq : si $I = 2$ équivaut à compa-
Var. quantitative Var. quantitative Var. quantitative	p var. quantitatives K var. qualitatives var. quantitatives et qualitatives	raison de 2 moyennes) régression linéaire multiple analyse de variance à K facteurs analyse de covariance

Réponse	Variable(s) explicative(s)	Méthode
Var. quantitative Var. quantitative	1 var. quantitative 1 var. qualitative à <i>l</i> modalités	régression linéaire simple analyse de variance à 1 facteur (rq : si $I = 2$ équivaut à comparaison de 2 moyennes)
Var. quantitative Var. quantitative Var. quantitative	p var. quantitatives K var. qualitatives var. quantitatives et qualitatives	régression linéaire multiple analyse de variance à K facteurs analyse de covariance
Var. qualitative	var. quantitatives et qualitatives	régression logistique

Ecriture du modèle

Modèle de régression multiple (toutes les variables explicatives sont quantitatives) :

$$\begin{cases} \forall i = 1, ..., n & Y_i = \beta_0 + \beta_1 x_i + \beta_2 x_{i2} + \beta_3 x_{i3} + ... + \beta_p x_{ip} + \varepsilon_i \\ \forall i = 1, ..., n & \varepsilon_i \text{ i.i.d. }, & \mathbb{E}(\varepsilon_i) = 0, & \mathbb{V}(\varepsilon_i) = \sigma^2 \\ \forall i \neq k & cov(\varepsilon_i, \varepsilon_k) = 0 \end{cases}$$

paramètres à estimer +1 paramètre de variance σ^2

Ecriture du modèle

Modèle de régression multiple (toutes les variables explicatives sont quantitatives) :

$$\begin{cases} \forall i = 1, ..., n & Y_i = \beta_0 + \beta_1 x_i + \beta_2 x_{i2} + \beta_3 x_{i3} + ... + \beta_p x_{ip} + \varepsilon_i \\ \forall i = 1, ..., n & \varepsilon_i \text{ i.i.d. }, & \mathbb{E}(\varepsilon_i) = 0, & \mathbb{V}(\varepsilon_i) = \sigma^2 \\ \forall i \neq k & cov(\varepsilon_i, \varepsilon_k) = 0 \end{cases}$$

paramètres à estimer +1 paramètre de variance σ^2

Matriciellement :
$$Y = X\beta + E$$
 avec $\mathbb{E}(E) = 0$, $\mathbb{V}(E) = \sigma^2 Id$

$$\begin{pmatrix} Y_1 \\ \vdots \\ Y_i \\ \vdots \\ Y_n \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & x_{11} & x_{12} & \cdots & x_{1p} \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ 1 & x_{i1} & x_{i2} & & x_{ip} \\ \vdots & \vdots & \vdots & & \vdots \\ 1 & x_{n1} & x_{n2} & \cdots & x_{np} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \beta_0 \\ \beta_1 \\ \beta_2 \\ \vdots \\ \beta_p \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} \varepsilon_1 \\ \vdots \\ \varepsilon_i \\ \vdots \\ \varepsilon_n \end{pmatrix}$$

Ecriture du modèle

Modèle de régression multiple (toutes les variables explicatives sont quantitatives) :

$$\begin{cases} \forall i = 1, ..., n & Y_i = \beta_0 + \beta_1 x_i + \beta_2 x_{i2} + \beta_3 x_{i3} + ... + \beta_p x_{ip} + \varepsilon_i \\ \forall i = 1, ..., n & \varepsilon_i \text{ i.i.d. }, & \mathbb{E}(\varepsilon_i) = 0, & \mathbb{V}(\varepsilon_i) = \sigma^2 \\ \forall i \neq k & cov(\varepsilon_i, \varepsilon_k) = 0 \end{cases}$$

paramètres à estimer + 1 paramètre de variance σ^2

Matriciellement : $Y = X\beta + E$ avec $\mathbb{E}(E) = 0$, $\mathbb{V}(E) = \sigma^2 Id$

$$\begin{pmatrix} Y_1 \\ \vdots \\ Y_i \\ \vdots \\ Y_n \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & x_{11} & x_{12} & \cdots & x_{1p} \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ 1 & x_{i1} & x_{i2} & & x_{ip} \\ \vdots & \vdots & \vdots & & \vdots \\ 1 & x_{n1} & x_{n2} & \cdots & x_{np} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \beta_0 \\ \beta_1 \\ \beta_2 \\ \vdots \\ \beta_p \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} \varepsilon_1 \\ \vdots \\ \varepsilon_i \\ \vdots \\ \varepsilon_n \end{pmatrix}$$

Remarque : Les modèles d'analyse de variance et d'analyse de covariance peuvent aussi s'écrire sous cette forme!!

$$\left\{ \begin{array}{l} \forall i,j,k \quad Y_{ijk} = \frac{\mu + \alpha_i + \beta_j + \alpha\beta_{ij} + \varepsilon_{ijk}}{\forall i,j,k \quad \varepsilon_{ijk} \text{ i.i.d.}}, \quad \mathbb{E}(\varepsilon_{ijk}) = 0, \quad \mathbb{V}(\varepsilon_{ijk}) = \sigma^2 \\ \forall i,j,k \quad cov(\varepsilon_{ijk},\varepsilon_{i'j'k'}) = 0 \end{array} \right. \\ \left\{ \begin{array}{l} \forall i,j \quad Y_{ij} = \frac{\mu + \alpha_i + (\beta + \gamma_i) \times x_{ij} + \varepsilon_{ij}}{\forall i,j \quad \varepsilon_{ij} \text{ i.i.d.}}, \quad \mathbb{E}(\varepsilon_{ij}) = 0, \quad \mathbb{V}(\varepsilon_{ij}) = \sigma^2 \\ \forall i,j \quad cov(\varepsilon_{ij},\varepsilon_{i'j'}) = 0 \end{array} \right.$$

Critère des moindres carrés : estimer les paramètres en minimisant la somme des carrés des écarts entre observations et prévisions par le modèle

Critère des moindres carrés : estimer les paramètres en minimisant la somme des carrés des écarts entre observations et prévisions par le modèle

$$Y pprox X eta$$

$$X'Y pprox X'X eta$$

$$\hat{eta} = (X'X)^{-1}X'Y \quad \text{si } X'X \text{ est inversible}$$

Critère des moindres carrés : estimer les paramètres en minimisant la somme des carrés des écarts entre observations et prévisions par le modèle

$$Y \approx X\beta$$

$$X'Y \approx X'X\beta$$

$$\hat{\beta} = (X'X)^{-1}X'Y \quad \text{si } X'X \text{ est inversible}$$

$$\text{Propriétés}: \mathbb{E}(\hat{\beta}) = \beta \,; \ \mathbb{V}(\hat{\beta}) = (X'X)^{-1}\sigma^2$$

Critère des moindres carrés : estimer les paramètres en minimisant la somme des carrés des écarts entre observations et prévisions par le modèle

$$Y\approx X\beta$$

$$X'Y\approx X'X\beta$$

$$\hat{\beta}=(X'X)^{-1}X'Y\quad \text{si }X'X\text{ est inversible}$$

$$\text{Propriétés}: \mathbb{E}(\hat{\beta})=\beta\,;\ \mathbb{V}(\hat{\beta})=(X'X)^{-1}\sigma^2$$

La variance des résidus σ^2 est estimée par :

$$\hat{\sigma}^2 = \frac{\sum_i (Y_i - \hat{Y}_i)^2}{\text{nb donn\'es} - \text{nb param\'etres estim\'es \'a partir des donn\'es}} \qquad \mathbb{E}(\hat{\sigma}^2) = \sigma^2$$

Décomposition de la variabilité

$$\sum_{i=1}^n (y_i - \bar{y})^2 = \sum_{i=1}^n (\hat{y}_i - \bar{y})^2 + \sum_{i=1}^n (y_i - \hat{y}_i)^2$$
 Variabilité totale modèle résiduelle

Pourcentage de variabilité de Y expliquée par le modèle : $R^2 = \frac{SC_{modele}}{SC_{total}}$

Propriétés : $0 \le R^2 \le 1$

Décomposition de la variabilité

$$\sum_{i=1}^n (y_i - \bar{y})^2 = \sum_{i=1}^n (\hat{y}_i - \bar{y})^2 + \sum_{i=1}^n (y_i - \hat{y}_i)^2$$
 Variabilité totale modèle résiduelle

Pourcentage de variabilité de
$$Y$$
 expliquée par le modèle : $R^2 = \frac{SC_{modele}}{SC_{total}}$

Propriétés : $0 < R^2 < 1$

La variabilité du modèle peut être décomposée par variable de 2 façons :

- en calculant la variabilité expliquée par chaque variable les unes après les autres (pb : la variabilité d'une variable dépend de l'ordre d'introduction des variables)
- en calculant la variabilité expliquée exclusivement par une variable (pb : la somme des variabilités de toutes les variables n'est pas égale à la variabilité du modèle)

Dans certains cas (données équilibrées), la variabilité du modèle se décompose parfaitement et ces 2 calculs donnent les mêmes résultats

Exemple sur l'ozone

```
library(FactoMineR)
LinearModel(max03 ~ ., data = ozone, selection="none")
```

Residual standard error: 14.51 on 97 degrees of freedom

Multiple R-squared: 0.7686

Residuals 20410.2 97

F-statistic: 23.01 on 14 and 97 DF, p-value: 8.744e-25

Ftest SS df Pr(>F) MS F value T9 0.2 1 0.2 0.0011 0.97325 T12 376.0 376.0 1.7868 0.18445 T15 30.3 1 30.3 0.1439 0.70526 Ne9 1016.5 1 1016.5 4.8312 0.03033 Ne12 37.9 37.9 0.1803 0.67208 Ne15 0.1 1 0.1 0.0003 0.98680 Vx9 50.2 50.2 0.2388 0.62619 Vx12 35.7 1 35.7 0.1697 0.68127 Vx15 122.6 122.6 0.5826 0.44715 max03v 5560.4 1 5560.4 26.4261 1.421e-06 297.8 3 99.3 0.4718 0.70267 vent pluie 182.9 1 182.9 0.8694 0.35344

210.4

Test de l'effet d'une ou plusieurs variables

Question : l'ensemble de variables $\mathcal V$ apporte-t-il des informations complémentaires intéressantes sachant que les autres variables sont déjà dans le modèle?

Hypothèses: H_0 : "tous les coefficients associés aux variables de $\mathcal V$ sont égaux à 0" contre H_1 : "au moins un coefficient des variables $\mathcal V$ est différent de 0

Statistique de test : $F_{obs} = \frac{SC_V/ddl_V}{SC_R/ddl_R} = \frac{CM_V}{CM_R}$

Loi de la statistique de test : Sous H_0 , $\mathcal{L}(F_{obs}) = \mathcal{F}_{ddl_0}^{ddl_V}$

Décomposition de la variabilité

Décision: $\mathbb{P}(\mathcal{F}_{ddl_2}^{ddl_R} > F_{obs}) < 0.05 \implies \text{Rejet de } H_0$

Test de l'effet d'une ou plusieurs variables

Question : l'ensemble de variables $\mathcal V$ apporte-t-il des informations complémentaires intéressantes sachant que les autres variables sont déjà dans le modèle ?

Hypothèses : H_0 : "tous les coefficients associés aux variables de $\mathcal V$ sont égaux à 0" contre H_1 : "au moins un coefficient des variables $\mathcal V$ est différent de 0

Statistique de test :
$$F_{obs} = \frac{SC_{\mathcal{V}}/ddI_{\mathcal{V}}}{SC_R/ddI_R} = \frac{CM_{\mathcal{V}}}{CM_R}$$

Loi de la statistique de test : Sous H_0 , $\mathcal{L}(F_{obs}) = \mathcal{F}_{ddl_R}^{ddl_V}$

Décision:
$$\mathbb{P}(\mathcal{F}_{ddl_N}^{ddl_R} > F_{obs}) < 0.05 \implies \text{Rejet de } H_0$$

- Revient à choisir entre le sous-modèle sans les variables ${\mathcal V}$ ou le modèle complet
- ullet On teste le plus souvent ${\mathcal V}$ avec 1 variable ou avec toutes les variables
- Si V contient tous les effets : revient à tester si R^2 est significativement différent de 0, i.e. si toutes les variables sont inutiles (versus au moins une utile)
- On somme les degrés de liberté associés à l'ensemble $\mathcal V$ sachant qu'1 variable quanti à 1 ddl, 1 variable quali à I-1 ddl et une interaction a comme ddl le produit des ddl de chaque facteur

Sélection de variables

Comment sélectionner un « bon » sous-modèle?

- sélectionner le modèle pour lequel la probabilité critique du test du R^2 est la plus petite (rejet de l'hypothèse : le modèle n'est pas intéressant)
- sélectionner le modèle qui minimise le critère AIC pour mieux prédire (ou BIC pour mieux sélectionner les variables): ces critères sont un compromis entre un modèle qui maximise la vraisemblance (i.e. qui s'ajuste bien aux données), et qui n'a pas trop de paramètres (pénalité augmente avec le nombre de variables retenues)

Plusieurs stratégies :

- Méthode descendante (backward): construire le modèle complet; supprimer la variable explicative la moins intéressante et reconstruire le modèle sans cette variable; itérer jusqu'à ce que toutes les variables explicatives soient intéressantes
- Méthode ascendante (forward): partir du modèle avec la variable la plus intéressante; ajouter la variable qui, connaissant les autres variables du modèle, apporte le plus d'information complémentaire; itérer jusqu'à ce qu'aucune variable n'apporte d'information intéressante
- Méthode stepwise : compromis entre les 2 méthodes ci-dessus
- Construction exhaustive de tous les sous-modèles (long et même impossible si trop de variables)

Exemple sur l'ozone : sélection de variables

```
library(FactoMineR)
LinearModel(max03~., data=ozone, selection="bic")
Results for the complete model:
_____
Call:
LinearModel(formula = max03 ~ .. data = ozone, selection = "bic")
Residual standard error: 14.51 on 97 degrees of freedom
Multiple R-squared: 0.7686
F-statistic: 23.01 on 14 and 97 DF, p-value: 8.744e-25
Results for the model selected by BIC criterion:
Call:
LinearModel(formula = max03 ~ T12 + Ne9 + Vx9 + max03v, data = ozone,
   selection = "bic")
Residual standard error: 14 on 107 degrees of freedom
Multiple R-squared: 0.7622
F-statistic: 85.75 on 4 and 107 DF, p-value: 1.763e-32
```

Exemple sur l'ozone : sélection de variables (suite)

```
Results for the model selected by BIC criterion:
```

Call:

```
LinearModel(formula = max03 ~ T12 + Ne9 + Vx9 + max03v, data = ozone, selection = "bic")
```

Residual standard error: 14 on 107 degrees of freedom

Multiple R-squared: 0.7622

F-statistic: 85.75 on 4 and 107 DF, p-value: 1.763e-32

Ftest

	SS	dÍ	MS	F value	Pr(>F)
T12	6650.39	1	6650.39	33.9334	6.073e-08
Ne9	2714.81	1	2714.81	13.8522	0.0003172
Vx9	903.37	1	903.37	4.6094	0.0340547
max03v	7363.50	1	7363.50	37.5721	1.499e-08
Residuals	20970 24	107	195 98	NΔ	NΔ

Ttest

```
Estimate Std. Error t value Pr(>|t|)
(Intercept) 12.631310 11.000877 1.1482
                                0.25344
T12
          2.764090 0.474502 5.8252 < 2e-16
Ne9
         -2.515402 0.675845 -3.7219 0.00032
Vx9
         1.292857 0.602180 2.1470 0.03405
         max03v
```

Démarche en modélisation

- 1 Lister les variables qui entrent en jeu pour expliquer ou prédire la variable réponse
- 2 Visualiser les données et notamment les liaisons avec la variable réponse
- 3 Ecrire puis construire le modèle en choisissant effets et interactions qui expliquent potentiellement la réponse (ne pas nécessairement tout mettre dans le modèle)
- 4 Sélectionner le sous-modèle qui minimise l'AIC (ou le BIC ou à la main) en supprimant les interactions et effets non utiles
- 5 Construire ce sous-modèle
- 6 Interpréter les résultats (les effets significatifs comme ceux non significatifs)
- Interpréter les coefficients du modèle (attention aux confusions possibles notamment pour les variables quantitatives)
- 8 Prédire pour de nouvelles valeurs si vous avez un objectif de prédiction

Modélisation

Partie 2 : interprétation et prédiction

François Husson

Unité pédagogique de mathématiques appliquées L'Institut Agro

Retour sur le codage et les contraintes pour variables qualitatives

La matrice X (dans $Y = X\beta + E$) a autant de lignes que d'individus et pour colonnes :

- une colonne de 1 est utilisée pour les constantes comme μ ou $\beta_0 \implies 1$ ddl
- ullet chaque variable quantitative correspond à une colonne $\Longrightarrow 1$ ddl
- chaque variable qualitative est transformée en autant d'indicatrices qu'elle a de modalités II suffit d'avoir I-1 indicatrices pour estimer tous les paramètres \Longrightarrow on pose une contrainte, le mieux est de prendre $\sum_{i=1}^{I} \alpha_i = 0 \implies (I-1)$ ddl
- chaque interaction est codée par autant d'indicatrices qu'il y a de paires de modalités On a alors besoin de seulement (I-1)(J-1) indicatrices, d'où des contraintes $\forall i, \sum_j \alpha \beta_{ij} = 0$ et $\forall j, \sum_i \alpha \beta_{ij} = 0 \implies (I-1)(J-1)$ ddl

Remarque : le choix de la contrainte impacte FORTEMENT l'interprétation

- avec $\sum_{\bf i} \alpha_{\bf i} = {\bf 0}$, la comparaison se fait pas rapport à la moyenne des moyennes par modalité (un coefficient égal à 0 signifie que les résultats de la modalité ne sont pas différents de l'effet moyen)
- avec α₁ = 0 (par défaut pour certaines fonctions de R, par ex. 1m), la comparaison se fait par rapport au niveau 1 qui sert de référence ⇒ contrainte à proscrire quand il y a des interactions car l'interprétation devient très compliquée

Interprétation des résultats

Une fois le modèle sélectionné, on interprète l'absence ou la présence des différents effets (variable quantitative, variable qualitative, interactions)

Deux situations bien distinctes :

- Le cas d'interprétation idéal quand les données sont équilibrées
- La difficile interprétation des résultats pour des données déséquilibrées

Remarques:

- Le choix des données avec des plans d'expériences permet d'avoir des données équilibrées, et donc des résultats facilement interprétables
- Souvent en analyse de variance les données sont équilibrées (ou peu déséquilibrées)
- En régression ou analyse de covariance les données sont déséquilibrées dès qu'il y a une corrélation non nulle entre les variables explicatives (ce qui est quasi systématique sans plan d'expériences)

Décomposition de la variabilité : variables qualitatives, données équilibrées

Quand les données sont équilibrées, la décomposition de la variabilité est parfaite :

$$\sum_{i,j,k} (y_{ijk} - y_{\bullet\bullet\bullet})^2 = \sum_{i,j,k} (y_{i\bullet\bullet} - y_{\bullet\bullet\bullet})^2 + \sum_{i,j,k} (y_{\bullet j\bullet} - y_{\bullet\bullet\bullet})^2 + \sum_{i,i,k} (y_{ij\bullet} - y_{i\bullet\bullet} - y_{\bullet j\bullet} + y_{\bullet\bullet\bullet})^2 + \sum_{i,i,k} (y_{ijk} - y_{ij\bullet})^2$$

Quand les données sont équilibrées, les coefficients s'estiment simplement :

$$\hat{\mu} = y_{\bullet \bullet \bullet} \qquad \forall i, \ \hat{\alpha}_i = y_{i \bullet \bullet} - y_{\bullet \bullet \bullet}
\forall j, \ \hat{\beta}_j = y_{\bullet j \bullet} - y_{\bullet \bullet \bullet} \qquad \forall i, j \ \widehat{\alpha} \widehat{\beta}_{ij} = y_{ij \bullet} - y_{i \bullet \bullet} - y_{\bullet j \bullet} + y_{\bullet \bullet \bullet}$$

On peut donc écrire :

$$\sum_{i,j,k} (y_{ijk} - y_{\bullet\bullet\bullet})^2 = \sum_{i,j,k} \hat{\alpha}_i^2 + \sum_{i,j,k} \hat{\beta}_j^2 + \sum_{i,j,k} \widehat{\alpha}_{ij}^2 + \sum_{i,j,k} \varepsilon_{ijk}^2$$

⇒ On quantifie parfaitement ce qui est expliqué par chaque variable ou interaction

Décomposition de la variabilité

Décomposition de la variabilité : données déséquilibrées

Quand les données sont déséquilibrées, impossible de distinguer quel effet ou variable explique la variabilité. On parle de confusion (alias en anglais)

En sommant les variabilités de toutes les variables et de la résiduelle, on ne retrouve pas la variabilité totale (la somme est plus petite que la variabilité totale)

Quand les variables explicatives sont très corrélées, l'interprétation est très difficile \Longrightarrow la sélection de variables évite les mauvaises interprétations (signe du coefficient de régression différent de celui de la corrélation), mais derrière l'effet d'une variable explicative, il peut y avoir celui d'autres variables non sélectionnées dans le modèle (non sélectionnée car elle n'apporte pas d'information supplémentaire significative par rapport aux autres variables ... même si elle influe sur la variable réponse)

Test de l'effet d'une variable qualitative – d'une interaction

Test de l'effet d'une variable qualitative (on l'a déjà vu!!) :

Question: Y a-t'il un effet du facteur A? Est-ce que pour au moins une modalité les individus prennent des valeurs significativement différentes?

Hypothèses: H_0 : $\forall i \ \alpha_i = 0 \ \text{contre} \ H_1$: $\exists i \ / \ \alpha_i \neq 0$

Statistique de test : $F_{obs} = \frac{SC_A/ddI_A}{SC_R/ddI_R} = \frac{CM_A}{CM_R}$

Loi de la statistique de test : Sous H_0 , $\mathcal{L}(F_{obs}) = \mathcal{F}_{ddI_R}^{ddI_R}$

Décision : $\mathbb{P}(\mathcal{F}_{ddl_R}^{ddl_A} > F_{obs}) < 0.05 \implies \text{Rejet de } H_0$

Test de l'effet d'une variable qualitative – d'une interaction

Test de l'effet d'une variable qualitative (on l'a déjà vu!!) :

Question : Y a-t'il un effet du facteur A? Est-ce que pour au moins une modalité les individus prennent des valeurs significativement différentes?

Hypothèses : H_0 : $\forall i \ \alpha_i = 0$ contre H_1 : $\exists i \ / \ \alpha_i \neq 0$

Statistique de test : $F_{obs} = \frac{SC_A/ddI_A}{SC_R/ddI_R} = \frac{CM_A}{CM_R}$

Loi de la statistique de test : Sous H_0 , $\mathcal{L}(F_{obs}) = \mathcal{F}_{ddI_R}^{ddI_R}$

Décision : $\mathbb{P}(\mathcal{F}_{ddl_R}^{ddl_A} > F_{obs}) < 0.05 \implies \text{Rejet de } H_0$

Test de l'effet d'une interaction : (c'est exactement pareil!!)

Question: Y a-t-il un effet de l'interaction? Y a-t'il un effet conjoint (une interaction) des facteurs A et B sur Y? Est-ce que pour une combinaison d'une modalité de A avec une modalité de B on a des valeurs de Y significativement plus élevées ou plus faibles qu'attendu avec un modèle additif?

Hypothèses: $H_0: \forall i, j \quad \alpha \beta_{ij} = 0 \text{ contre } H_1: \exists (i, j) / \alpha \beta_{ij} \neq 0$

Statistique de test : $F_{obs} = \frac{\overline{SC_{interaction}}/ddl_{interaction}}{SC_R/ddl_R} = \frac{CM_{interaction}}{CM_R}$

Loi de la statistique de test : Sous H_0 , $\mathcal{L}(F_{obs}) = \mathcal{F}_{ddl_R}^{ddl_{interaction}}$

Décision : $\mathbb{P}(\mathcal{F}_{ddl_R}^{ddl_{interaction}} > F_{obs}) < 0.05 \implies \text{Rejet de } H_0$

Inférence : test d'un coefficient

Question : ce coefficient α_1 (par exemple) est-il différent de 0? La modalité 1 donne-t-elle des résultats significativement différents de la moyenne?

Hypothèses : H_0 : " $\alpha_1 = 0$ " contre H_1 : " $\alpha_1 \neq 0$ "

Statistique de test : $T_{obs} = \frac{\hat{\alpha}_1}{\hat{\sigma}_{\hat{\alpha}_1}}$

Loi de la statistique de test sous $H_0: \mathcal{L}(T_{obs}) = \mathcal{T}_{ddl_R}$ (loi de Student)

Décision : $\mathbb{P}(T_{ddl_R} > |T_{obs}|) < 0.05 \implies \text{Rejet de } H_0$

Inférence : test d'un coefficient

Question: ce coefficient α_1 (par exemple) est-il différent de 0? La modalité 1 donne-t-elle des résultats significativement différents de la moyenne?

Hypothèses : H_0 : " $\alpha_1 = 0$ " contre H_1 : " $\alpha_1 \neq 0$ "

Statistique de test : $T_{obs} = \frac{\hat{\alpha}_1}{\hat{\sigma}_{\hat{\alpha}}}$.

Loi de la statistique de test sous $H_0: \mathcal{L}(T_{obs}) = \mathcal{T}_{ddl_D}$ (loi de Student)

Décision : $\mathbb{P}(T_{ddl_{P}} > |T_{obs}|) < 0.05 \implies \text{Rejet de } H_0$

Remarque : ce test en régression revient à tester si 1 variable quantitative a un effet significatif

Comparaison des moyennes ajustées

Travailler sur les moyennes ajustées $(\hat{\mu} + \hat{\alpha}_i)$ permet de s'affranchir de l'effet des autres variables, i.e. de neutraliser l'effet des autres variables

On peut comparer les modalités 2 à 2 grâce à un test de comparaison par paire, avec une correction de Bonferroni par exemple

```
mod <- LinearModel(Sweetness~Product*Panelist, data=chocolats, selection="none")</pre>
meansComp(mod,~Produit, adjust="bonferonni")
$adjMean
Product emmean
                    SE
                       df lower.CL upper.CL
                                                           Comparaison de moyennes ajustées
choc1
           3.14 0.243 174
                                2.66
                                          3.62
choc2
           4.62 0.243 174
                                4.14
                                          5.10
                                                       choc3 -
choc3
          7.60 0.243 174 7.12
                                          8.08
                                                       choc6 -
choc4
           4.29 0.243 174
                                3.81
                                          4.77
choc5
           5.22 0.243 174
                                4.74
                                          5.70
                                                     to choc5 -
Loc2 -
 choc6
           5.62 0.243 174
                                5.14
                                          6.10
Results are averaged over the levels of: Panelist
                                                       choc4 -
Confidence level used: 0.95
                                                       choc1 -
$groupComp
                                                                          Moyennes ajustées
choc1 choc4 choc2 choc5 choc6 choc3
  "a"
```

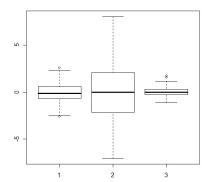
Prévisions

```
\hat{Y} = \hat{\beta}_0 + \hat{\beta}_1 x_{i1} + \hat{\beta}_2 x_{i2} + ... \hat{\beta}_p x_{ip}
Prédire Y pour : (T12=19, Ne9=8, V×9=1.2, maxO3v=70) et (T12=23, Ne9=10, V×9=0.9, maxO3v=95)
              Estimate Std. Error t value Pr(>|t|)
(Intercept) 12.631310 11.000877 1.1482 0.25344
              2.764090 0.474502 5.8252 < 2e-16
T12
Ne9
           -2.515402 0.675845 -3.7219 0.00032
            1.292857 0.602180 2.1470 0.03405
V<sub>x</sub>9
            0.354832 0.057888 6.1296 < 2e-16
max03v
Calcul à la main de la prédiction 1 = 12.63 + 2.764*19 - 2.515*8 + 1.292*1.2 + 0.354*70 = 71.41544
Sur ordinateur :
xnew \leftarrow data.frame(T12=c(19,23), Ne9=c(8,10), Vx9=c(1.2,0.9), max03v=c(70,95))
predict(model,xnew,interval="pred")
       fit
                 lwr
                            upr
1 71.41544 42.90026 99.93063
2 85.92393 56.76803 115.07983
predict(model,xnew,interval="confidence")
       fit
                 lwr
                           upr
1 71.41544 64.86327 77.96761
2 85.92393 76.98627 94.86159
```

Analyse des résidus du modèle

des Résidus

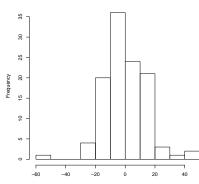
```
model <- lm(max03~T12+...,data=ozone)</pre>
res <- residuals(model)
boxplot(res~vent,data=ozone)
bartlett.test(res~vent,data=ozone)
```



Test de Bartlett de l'homoscédasticité Test de Shapiro-Wilk de normalité des Résidus (Rq : la non-normalité n'est pas un pb tant que la distribution est symétrique)

```
model <- lm(max03~T12+...,data=ozone)</pre>
res <- residuals(model)
hist(res,main="Histogramme résidus",xlab="Résidus")
shapiro.test(res)
```





Retour sur l'exemple ozone

- On s'intéresse au maximum d'ozone : variable réponse
- Les variables de températures, nébulosité, vitesse de vent (quanti), et la direction et la plus (quali) sont prises en compte
- On ne sait pas si les interactions entre variables quali et entre les variables quali et quanti sont négligeables ⇒ on les met dans le modèle
- On écrit le modèle :

```
LinearModel(max03~(T9+T12+T15+Ne9+Ne12+Ne15+Vx9+Vx12+Vx15+max03v+pluie+vent)*(pluie+vent), data=ozone. selection="bic")
```

On sélectionne le sous-modèle

```
Results for the complete model:
Call:
LinearModel(formula = max03 ~ (T9 + T12 + T15 + Ne9 + Ne12 + Ne15 +
    Vx9 + Vx12 + Vx15 + max03v + pluie + vent) * (pluie + vent),
    data = ozone. selection = "bic")
Residual standard error: 14.54 on 56 degrees of freedom
Multiple R-squared: 0.8658
F-statistic: 6.569 on 55 and 56 DF, p-value: 2.585e-11
Results for the model selected by BIC criterion:
Call:
LinearModel(formula = max03 \sim T9 + T15 + Ne12 + Vx9 + max03v + vent +
    T9:vent + T15:vent, data = ozone, selection = "bic")
Residual standard error: 13.8 on 97 degrees of freedom
Multiple R-squared: 0.7906
F-statistic: 26.16 on 14 and 97 DF, p-value: 8.082e-27
```

Et maintenant le plus intéressant : l'interprétation des résultats

On donne quelques extraits d'interprétation!

Ftest Pr(>F) MS F value Т9 698.9 3.6710 0.0583123 T15 557.5 557.5 2.9279 0.0902552 1 2107.0 11.0664 0.0012425 Ne12 2107.0 V_x9 1657.3 1 1657.3 8.7046 0.0039790 max03v 5160.8 1 5160.8 27.1060 1.078e-06 182.9 61.0 0.3202 0.8107707 vent T9:vent 2587.1 862.4 4.5294 0.0051335 T15:vent 3722.1 3 1240.7 6.5165 0.0004613 Residuals 18468.3 97 190.4

On peut dire (à partir des effets significatifs) :

- il y a des effets significatifs de T^o, nébulosité, vitesse de vent maximum d'O3 de la veille sur le max d'O3
- la direction du vent influe aussi sur le maximum d'ozone
- la direction du vent modifie l'effet de la T^o (i.e. amplifie l'effet de la T^o ou la diminue selon la direction du vent)

Et maintenant le plus intéressant : l'interprétation des résultats

On donne quelques extraits d'interprétation!

Ftest Pr(>F) MS F value Т9 698.9 3.6710 0.0583123 T15 557.5 557.5 2.9279 0.0902552 1 2107.0 11.0664 0.0012425 Ne12 2107.0 V_x9 1657.3 1 1657.3 8.7046 0.0039790 5160.8 1 5160.8 27.1060 1.078e-06 max03v 182.9 61.0 0.3202 0.8107707 vent. T9:vent 2587.1 862.4 4.5294 0.0051335 T15:vent 3722.1 3 1240.7 6.5165 0.0004613 Residuals 18468.3 97 190.4

On peut dire (à partir des effets significatifs) :

- il y a des effets significatifs de T^o, nébulosité, vitesse de vent maximum d'O3 de la veille sur le max d'O3
- la direction du vent influe aussi sur le maximum d'ozone
- la direction du vent modifie l'effet de la T^o (i.e. amplifie l'effet de la T^o ou la diminue selon la direction du vent)

On peut aussi dire (à partir des absences d'effets significatifs) :

- la pluviométrie n'est pas un facteur déterminant qui influe sur le max d'03
- une seule nébulosité (Ne12) est conservée dans le modèle : cela ne veut pas dire que les autres nébulosité n'ont pas d'effet (elles peuvent avoir un effet similaire). Idem pour la vitesse de vent.
- pour la T^o, on a besoin des T^o à 9h et à 15h pour mieux prévoir le maximum d'ozone. L'effet de la T^o n'est pas exactement le même entre 9h et 15h (mais 12h n'est pas utile comme info)
- l'effet de la nébulosité est le même quelle que soit la direction du vent. Idem pour la vitesse du vent.
- etc.

Et maintenant le plus intéressant : l'interprétation des résultats

Et on affine les interprétations

Ttest

```
Estimate Std. Error t value
                                                   Pr(>|t|)
(Intercept)
                    18.206308
                               13.705946
                                          1.3284
                                                   0.187179 •
T9
                     1.826916
                                1.023832
                                          1.7844
                                                   0.077487
                                                  0.252022
T15
                     1.020017
                                0.885187
                                          1.1523
Ne12
                    -3.013169
                                0.905775 - 3.3266
                                                   0.001243
Vx9
                    2.221261
                                0.752878
                                          2.9504
                                                   0.003979
max03v
                    0.346696
                                0.066591
                                          5.2063 1.078e-06
vent - Est
                    0.473424
                               17.010219
                                          0.0278
                                                  0.977854
                    3.297358
                               15.035620
                                          0.2193
                                                   0.826875
vent - Nord
                   -1.125022
                               14.006616 -0.0803
                                                   0.936148
vent - Ouest
vent - Sud
                    -2.645761
                               15.148862 -0.1747
                                                   0.861718
vent - Est : T9
                   -4.744227
                                2.141774 -2.2151
                                                   0.029094
vent - Nord : T9
                    6.140768
                                1.701384
                                          3,6093
                                                   0.000488
vent - Ouest : T9
                   -0.950539
                                1.345534 -0.7064
                                                  0.481608
                                                   0.770142 •
                    -0.446002
vent - Sud : T9
                                1.522150 -0.2930
vent - Est : T15
                    3.680964
                                1.796744
                                          2.0487
                                                  0.043194
vent - Nord : T15
                    -5.227943
                                1.215336 -4.3016 4.045e-05
vent - Ouest : T15
                    0.979689
                                0.930826
                                          1.0525
                                                  0.295188
vent - Sud : T15
                    0.567290
                                1.111141
                                          0.5105
                                                   0.610828
```

- plus les T^o sont élevées, plus le max d'O3 est grand (on vérifie que le signe est le même que celui de la corrélation).
 C'est encore plus vrai pour la T^o à 9h qui a un coefficient de 1.83
- plus il y a de nébulosité, moins le max d'O3 est grand
- plus le maximum d'O3 de la veille est grand, plus le maximum d'O3 est grand
- les jours de vents d'est et surtout du nord ont des max d'O3 supérieur aux jours de vents d'ouest et du sud
- les jours de vent du nord, l'effet de la T° à 9h est plus important (coef = 6.14); au contraire quand le vent vient de l'est. C'est l'inverse pour la T° à 15h
- Ainsi, quand le vent vient du nord, l'effet de la T^o à 9h est particulièrement fort (donc s'il fait chaud à 9h quand le vent vient du nord, le max d'O3 risque d'être important)

Pour conclure : démarche en modélisation

- 1 Lister les variables qui entrent en jeu pour expliquer ou prédire la variable réponse
- 2 Visualiser les données et notamment les liaisons avec la variable réponse
- 3 Ecrire puis construire le modèle en choisissant effets et interactions qui expliquent potentiellement la réponse (ne pas nécessairement tout mettre dans le modèle)
- Sélectionner le sous-modèle qui minimise le BIC en supprimant les interactions et effets non utiles
- 5 Construire ce sous-modèle
- 6 Interpréter les résultats (les effets significatifs comme ceux non significatifs)
- Interpréter les coefficients du modèle (attention aux confusions possibles notamment pour les variables quantitatives)
- 8 Prédire pour de nouvelles valeurs si vous avez un objectif de prédiction

Et évidemment, cela peut suggérer de nouvelles analyses!! (synthétiser des variables, rendre qualitatives certaines variables, ajouter d'autres variables, etc.)