Régression linéaire

David Causeur
Laboratoire de Mathématiques Appliquées
Agrocampus Rennes
IRMAR CNRS UMR 6625
http://www.agrocampus-rennes.fr/math/causeur/

Plan de la présentation

Problématique

Etude du lien entre 2 variables quantitatives

- L'appréciation globale dépend-t'elle de l'amertume perçue ?

Problématique

Etude du lien entre 2 variables quantitatives

- L'appréciation globale dépend-t'elle de l'amertume perçue ?
- Peut-on prévoir le chiffre de ventes du mois prochain ?

Problématique

Etude du lien entre 2 variables quantitatives

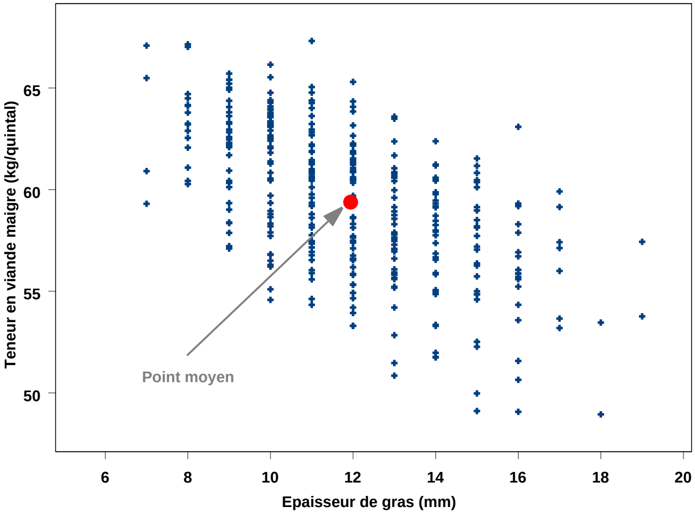
- L'appréciation globale dépend-t'elle de l'amertume perçue ?
- Peut-on prévoir le chiffre de ventes du mois prochain ?
- La note au bac est-elle liée à celle du 3ème trimestre ?
- …

Un problème de prédiction

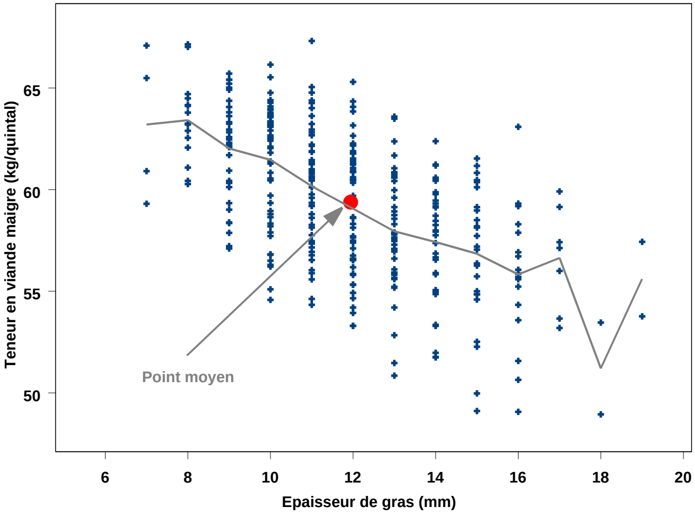
	x = Épaisseur de gras (mm)	y = Teneur en viande maigre (kg/quintal)
1	12	56.52
2	13	57.58
3	11	55.89
4	10	61.82
5	9	62.96
6	10	54.58
7	7	67.09
8	15	55.00
9	10	60.49
⋮	⋮	⋮

Plan de la présentation

Nuage de points



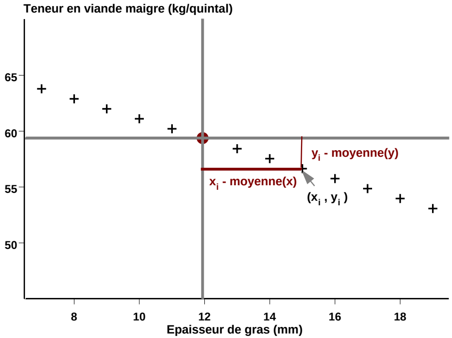
Forme de la relation



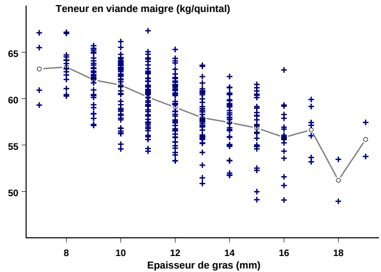
Lien linéaire parfait

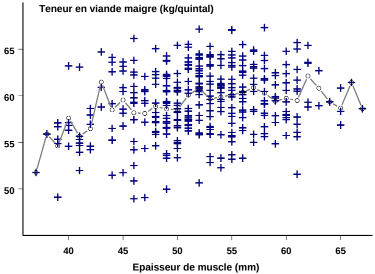
Les variations de y sont proportionnelles à celles de x

$$(y_i - \bar{y}) = k(x_i - \bar{x})$$



Intensité du lien linéaire





Intuition :

le lien *Teneur en viande maigre* $\times$ *Ép. de gras*
est plus fort que
le lien *Teneur en viande maigre* $\times$ *Ép. de muscle*

Mesure de la corrélation linéaire

Objectif : mesurer l'intensité du lien linéaire

Mesure de la corrélation linéaire

Objectif : mesurer l'intensité du lien linéaire

Propriété : mesure indépendante des unités de mesure

Mesure de la corrélation linéaire

Objectif : mesurer l'intensité du lien linéaire

Propriété : mesure indépendante des unités de mesure

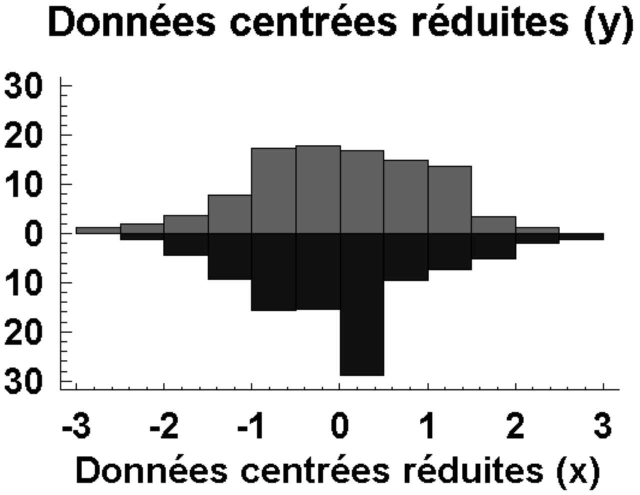
Idée . . . : mesurer les variations en nombres d'écarts-types

Variable	Valeur observée	Écart à la moyenne	Écart à la moyenne (en nb d'écarts-types)
x	x_i	$x_i - \bar{x}$	$\frac{x_i - \bar{x}}{S_x}$
y	y_i	$y_i - \bar{y}$	$\frac{y_i - \bar{y}}{S_y}$

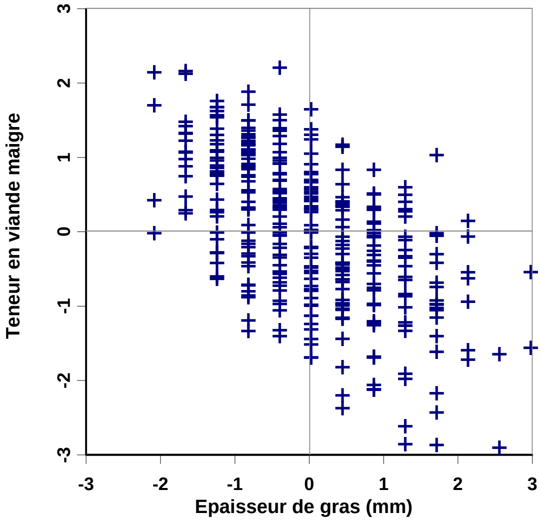
Données centrées-réduites

	x = Épaisseur de gras		y = Teneur en viande maigre	
	Donnée (mm)	Donnée centrée-réduite	Donnée (kg/quintal)	Donnée centrée-réduite
1	12	0.03	56.52	-0.79
2	13	0.45	57.58	-0.50
3	11	-0.40	55.89	-0.97
4	10	-0.82	61.82	0.68
5	9	-1.24	62.96	1.00
6	10	-0.82	54.58	-1.33
7	7	-2.08	67.09	2.14
⋮	⋮	⋮	⋮	⋮

Répartition des données centrées réduites



Nuage des données centrées réduites



Coefficient de corrélation linéaire $r(x, y)$

$$
\begin{aligned}
r(x,y) &= \frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n}\left(\frac{x_i-\bar{x}}{S_x}\right)\left(\frac{y_i-\bar{y}}{S_y}\right),\\
&= \frac{\frac{\sum_{i=1}^{n}(x_i-\bar{x})(y_i-\bar{y})}{n}}{S_x S_y} = \frac{S_{xy}}{S_x S_y}
\end{aligned}
$$

Coefficient de corrélation linéaire $r(x, y)$

$$
\begin{aligned}
r(x, y) &= \frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n}\left(\frac{x_i - \bar{x}}{S_x}\right)\left(\frac{y_i - \bar{y}}{S_y}\right), \\
&= \frac{\frac{\sum_{i=1}^{n}(x_i - \bar{x})(y_i - \bar{y})}{n}}{S_x S_y} = \frac{S_{xy}}{S_x S_y}
\end{aligned}
$$

Propriétés

- $-1 \leq r(x, y) \leq 1$

Coefficient de corrélation linéaire $r(x, y)$

$$
\begin{aligned}
r(x,y) &= \frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n}\left(\frac{x_i - \bar{x}}{S_x}\right)\left(\frac{y_i - \bar{y}}{S_y}\right), \\
&= \frac{\frac{\sum_{i=1}^{n}(x_i-\bar{x})(y_i-\bar{y})}{n}}{S_x S_y} = \frac{S_{xy}}{S_x S_y}
\end{aligned}
$$

Propriétés

- $-1 \leq r(x,y) \leq 1$
- $r(x,y) > 0 \ \Rightarrow$ relation linéaire croissante

Coefficient de corrélation linéaire $r(x, y)$

$$
\begin{aligned}
r(x,y) &= \frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n}\left(\frac{x_i-\bar{x}}{S_x}\right)\left(\frac{y_i-\bar{y}}{S_y}\right), \\
&= \frac{\frac{\sum_{i=1}^{n}(x_i-\bar{x})(y_i-\bar{y})}{n}}{S_x S_y} = \frac{S_{xy}}{S_x S_y}
\end{aligned}
$$

Propriétés

- $-1 \leq r(x,y) \leq 1$
- $r(x,y) > 0 \Rightarrow$ relation linéaire croissante
- $r(x,y) < 0 \Rightarrow$ relation linéaire décroissante

Coefficient de corrélation linéaire $r(x, y)$

$$
\begin{aligned}
r(x,y) &= \frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n}\left(\frac{x_i-\bar{x}}{S_x}\right)\left(\frac{y_i-\bar{y}}{S_y}\right),\\
&= \frac{\frac{\sum_{i=1}^{n}(x_i-\bar{x})(y_i-\bar{y})}{n}}{S_x S_y} = \frac{S_{xy}}{S_x S_y}
\end{aligned}
$$

Propriétés

- $-1 \leq r(x,y) \leq 1$
- $r(x,y) > 0 \;\Rightarrow$ relation linéaire croissante
- $r(x,y) < 0 \;\Rightarrow$ relation linéaire décroissante
- $r(x,y) = 0 \;\Rightarrow$ pas de relation linéaire

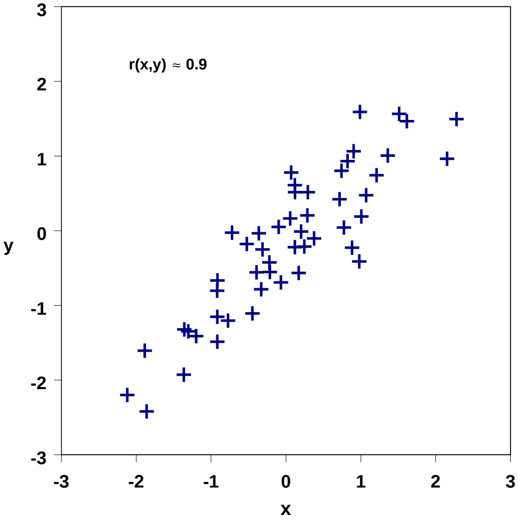
Coefficient de corrélation linéaire $r(x, y)$

$$\begin{aligned} r(x,y) &= \frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n}\left(\frac{x_i-\bar{x}}{S_x}\right)\left(\frac{y_i-\bar{y}}{S_y}\right), \\ &= \frac{\frac{\sum_{i=1}^{n}(x_i-\bar{x})(y_i-\bar{y})}{n}}{S_x S_y} = \frac{S_{xy}}{S_x S_y} \end{aligned}$$

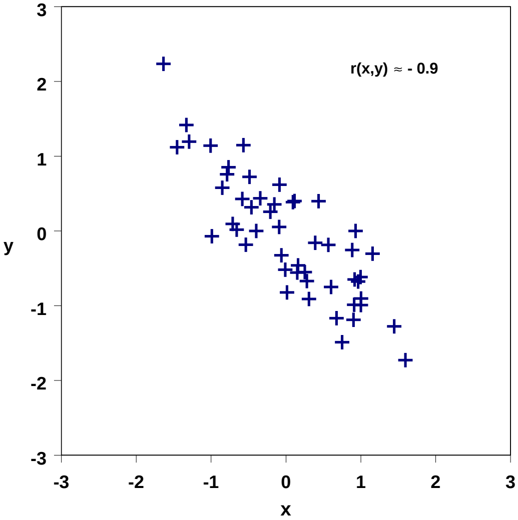
Propriétés

- $-1 \leq r(x,y) \leq 1$
- $r(x,y) > 0 \Rightarrow$ relation linéaire croissante
- $r(x,y) < 0 \Rightarrow$ relation linéaire décroissante
- $r(x,y) = 0 \Rightarrow$ pas de relation linéaire
- $r(x,y) = \pm 1 \Rightarrow y = \beta_0 + \beta_1 x$

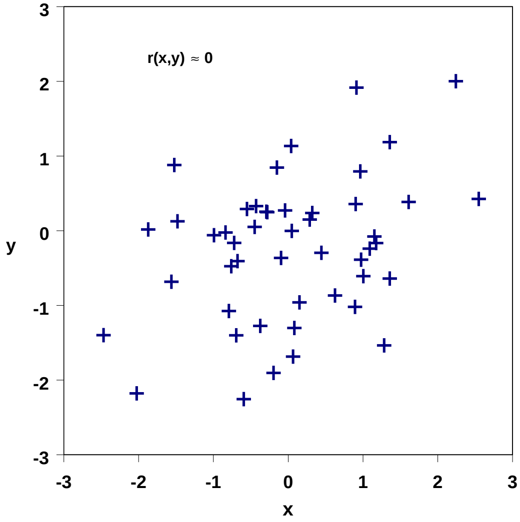
Relation linéaire croissante



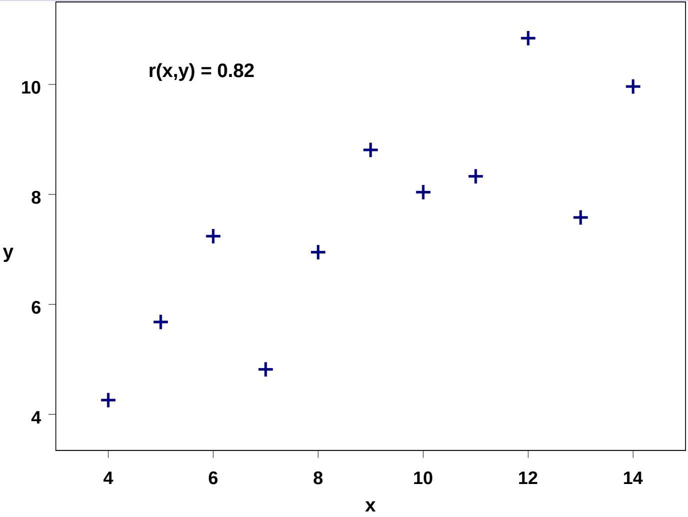
Relation linéaire décroissante



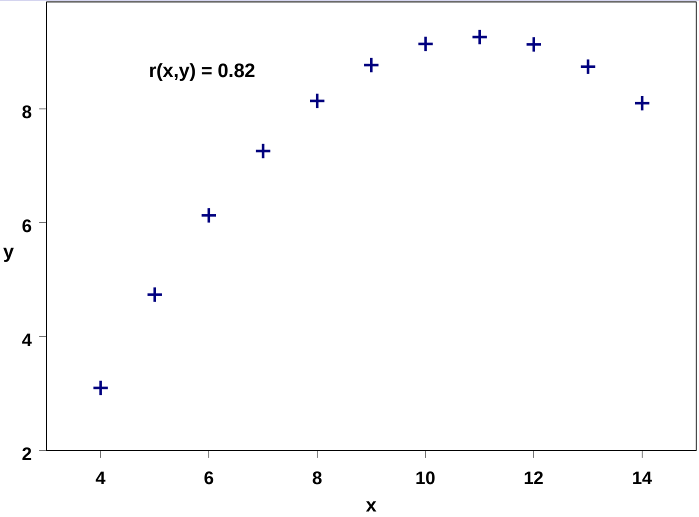
Pas de relation linéaire



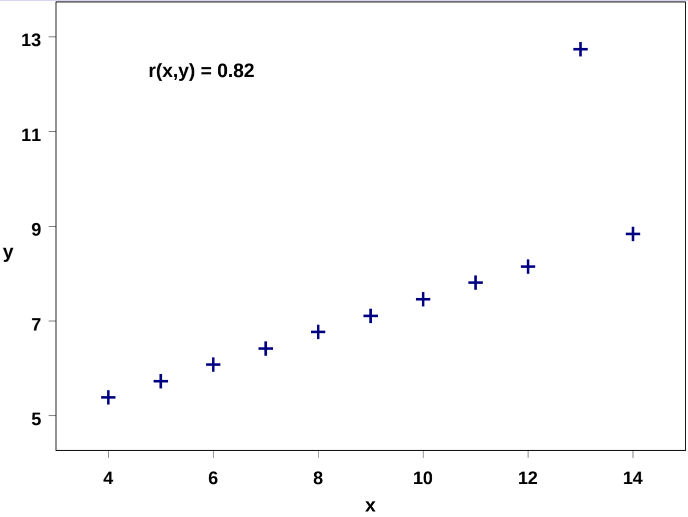
Attention à l'interprétation !



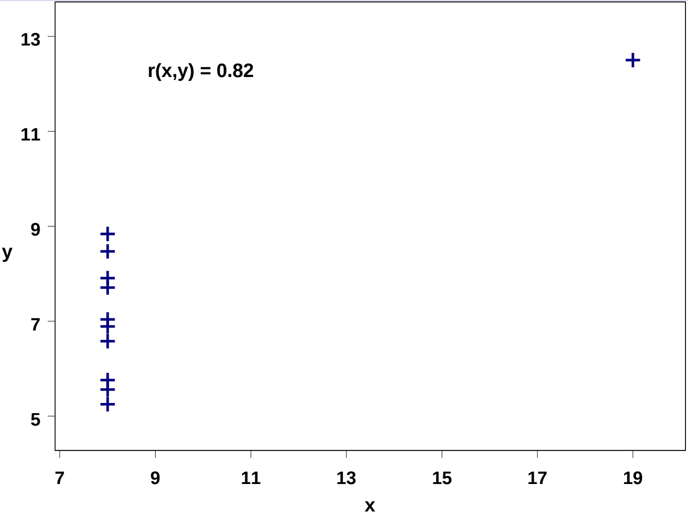
Attention à l'interprétation !



Attention à l'interprétation !



Attention à l'interprétation !



Matrice de corrélation

	Maths				Philosophie			
	1er t.	2ème t.	3ème t.	Bac	1er t.	2ème t.	3ème t.	Bac
M_1	1.00	0.77	0.72	0.58	0.19	0.22	0.16	0.24
M_2	0.77	1.00	0.81	0.66	0.20	0.25	0.22	0.30
M_3	0.72	0.81	1.00	0.68	0.22	0.26	0.24	0.30
M_{bac}	0.58	0.66	0.68	1.00	0.17	0.23	0.21	0.28
P_1	0.19	0.20	0.22	0.17	1.00	0.64	0.61	0.42
P_2	0.22	0.25	0.26	0.23	0.64	1.00	0.69	0.43
P_3	0.16	0.22	0.24	0.21	0.61	0.69	1.00	0.47
P_{bac}	0.24	0.30	0.30	0.28	0.42	0.43	0.47	1.00

Plan de la présentation

Approche inférentielle

Objectifs

- Tester l'existence d'une relation entre x et y

Approche inférentielle

Objectifs

- Tester l'existence d'une relation entre x et y
- Construire une équation de prédiction de y par x

Approche inférentielle

Objectifs

- Tester l'existence d'une relation entre x et y
- Construire une équation de prédiction de y par x
- Calculer un intervalle de confiance (d'estimation, de prédiction, ...)

Le modèle de régression linéaire simple

Y : variable à expliquer (à prédire, endogène, réponse, dépendante) quantitative

x : variable explicative (prédictrice, exogène, covariable, indépendante) quantitative

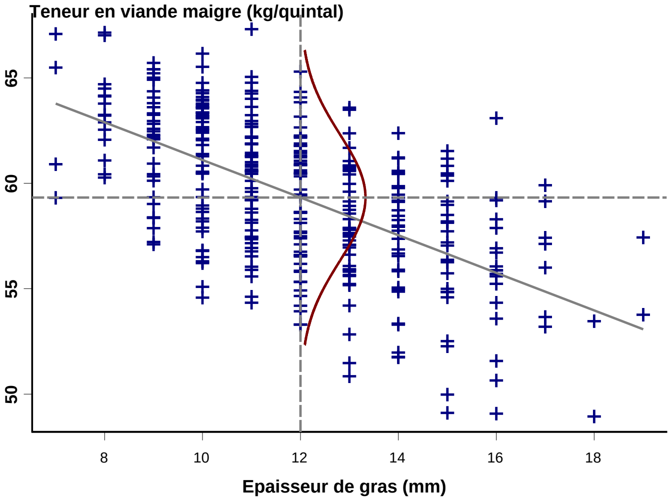
Le modèle de régression linéaire simple

Y : variable à expliquer (à prédire, endogène, réponse, dépendante) quantitative

x : variable explicative (prédictrice, exogène, covariable, indépendante) quantitative

Pour un x fixé, Y est une variable aléatoire

Le modèle de régression linéaire simple



Le modèle de régression linéaire simple

Y : variable à expliquer (à prédire, endogène, réponse, dépendante) quantitative

x : variable explicative (prédictrice, exogène, covariable, indépendante) quantitative

Pour un x fixé, Y est une variable aléatoire

$$Y = \underbrace{\beta_0 + \beta_1 x}_{\text{Variations imputables à x}} + \underbrace{\varepsilon}_{\text{Variations non}-\text{imputables à x}}$$

$$\varepsilon \sim \mathcal{N}(0; \sigma)$$

Paramètres du modèle

- Coefficients du modèle :
  - β_0 ordonnée à l'origine
  - β_1 pente

Paramètres du modèle

- Coefficients du modèle :
  - β_0 ordonnée à l'origine
  - β_1 pente
- Écart-type résiduel : σ

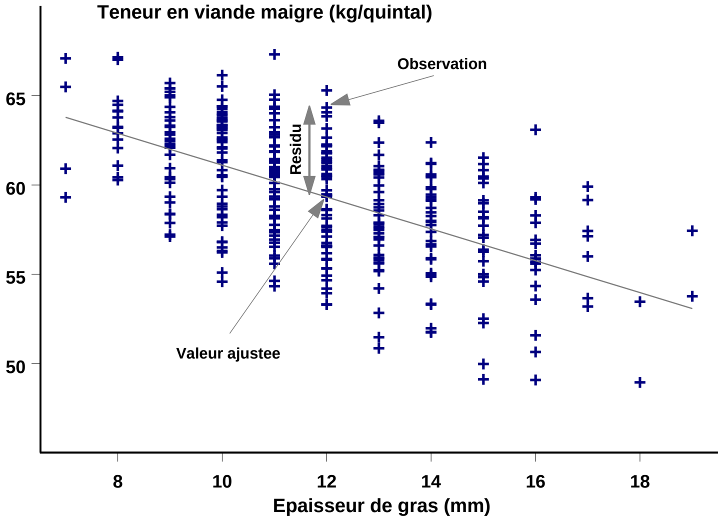
Existence d'un lien entre x et Y

$$
\begin{aligned}
H_0 &: \text{il n'y a pas de lien entre } x \text{ et } Y \\
H_1 &: \text{il y a un lien entre } x \text{ et } Y
\end{aligned}
$$

ou encore …

$$
\begin{aligned}
H_0 &: \beta_1 = 0 \, , \\
H_1 &: \beta_1 \neq 0
\end{aligned}
$$

Décomposition de la variabilité de Y



Décomposition de la variabilité de Y

Equation d'«analyse de la variance»

$$\underbrace{\sum_{i=1}^{n}\left(Y_i-\bar{Y}\right)^2}_{\text{SCET}} = \underbrace{\sum_{i=1}^{n}\left(\hat{Y}_i-\bar{Y}\right)^2}_{\text{SCEM}} + \underbrace{\sum_{i=1}^{n}\left(Y_i-\hat{Y}_i\right)^2}_{\text{SCER}}$$

Décomposition de la variabilité de Y

Equation d'«analyse de la variance»

$$\underbrace{\sum_{i=1}^{n}\left(Y_i-\bar{Y}\right)^2}_{\text{SCET}} = \underbrace{\sum_{i=1}^{n}\left(\hat{Y}_i-\bar{Y}\right)^2}_{\text{SCEM}} + \underbrace{\sum_{i=1}^{n}\left(Y_i-\hat{Y}_i\right)^2}_{\text{SCER}}$$

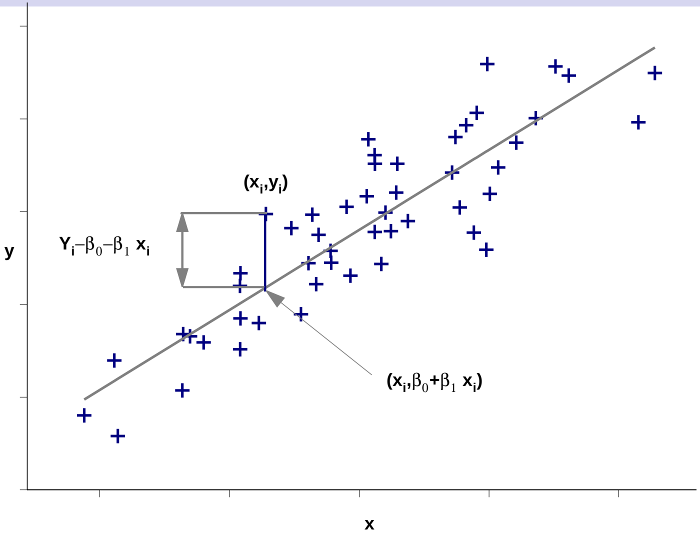
Problème : ajustement du modèle ($\hat{Y}_i = \hat{\beta}_0 + \hat{\beta}_1 x_i$)

Ajustement par la méthode des moindres carrés

Une mesure de l'adéquation entre modèle et données : le critère des moindres carrés $SC(\beta_0, \beta_1)$

$$SC(\beta_0, \beta_1) = \sum_{i=1}^{n} (Y_i - \beta_0 - \beta_1 x_i)^2$$

Ajustement par la méthode des moindres carrés



Ajustement par la méthode des moindres carrés

Une mesure de l'adéquation entre modèle et données : le critère des moindres carrés $SC(\beta_0, \beta_1)$

$$SC(\beta_0, \beta_1) = \sum_{i=1}^{n} (Y_i - \beta_0 - \beta_1 x_i)^2$$

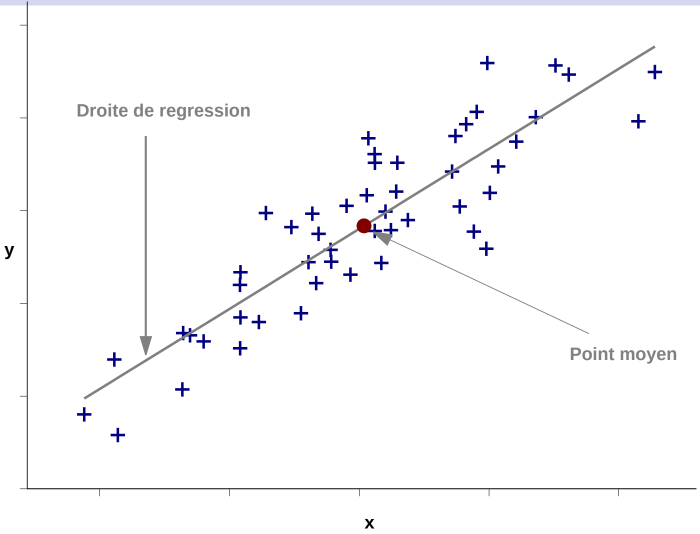
Les estimateurs $\hat{\beta}_0$ et $\hat{\beta}_1$ minimisent $SC(\beta_0, \beta_1)$

$x \mapsto \hat{\beta}_0 + \hat{\beta}_1 x$ droite de régression

Minimisation du critère des moindres carrés

$$
\begin{aligned}
\frac{\partial SC}{\partial \beta_0}(\hat{\beta}_0, \hat{\beta}_1) &= 0 \\
-2\sum_{i=1}^{n}\left(Y_i - \hat{\beta}_0 - \hat{\beta}_1 x_i\right) &= 0 \\
\bar{Y} - \hat{\beta}_0 - \hat{\beta}_1 \bar{x} &= 0 \\
\bar{Y} &= \hat{\beta}_0 + \hat{\beta}_1 \bar{x}
\end{aligned}
$$

Minimisation du critère des moindres carrés



Minimisation du critère des moindres carrés

$$
\begin{aligned}
\frac{\partial SC}{\partial \beta_0}(\hat{\beta}_0, \hat{\beta}_1) &= 0 \\
-2\sum_{i=1}^{n}\left(Y_i - \hat{\beta}_0 - \hat{\beta}_1 x_i\right) &= 0 \\
\bar{Y} - \hat{\beta}_0 - \hat{\beta}_1 \bar{x} &= 0 \\
\bar{Y} &= \hat{\beta}_0 + \hat{\beta}_1 \bar{x}
\end{aligned}
$$

Le point moyen $(\bar{x}, \bar{Y})$ est sur la droite de régression

$$
\hat{\beta}_0 = \bar{Y} - \hat{\beta}_1 \bar{x}
$$

Estimation de la pente

$$SC(\hat{\beta}_0, \beta_1) \;=\; \sum_{i=1}^{n} \Big(\big[Y_i - \bar{Y} \big] - \hat{\beta}_1 \left[x_i - \bar{x} \right] \Big)^2$$

D'où :

Estimation de la pente

$$SC(\hat{\beta}_0, \beta_1) \quad = \quad \sum_{i=1}^{n} \left(\left[Y_i - \bar{Y} \right] - \hat{\beta}_1 \left[x_i - \bar{x} \right] \right)^2$$

D'où :

$$\frac{\partial SC}{\partial \beta_1}(\hat{\beta}_0, \hat{\beta}_1) \quad = \quad 0$$

Estimation de la pente

$$SC(\hat{\beta}_0, \beta_1) \;=\; \sum_{i=1}^{n} \left(\left[Y_i - \bar{Y} \right] - \hat{\beta}_1 \left[x_i - \bar{x} \right] \right)^2$$

D'où :

$$\begin{aligned} \frac{\partial SC}{\partial \beta_1}(\hat{\beta}_0, \hat{\beta}_1) &= 0 \\ -2 \sum_{i=1}^{n} \left[x_i - \bar{x} \right] \left(\left[Y_i - \bar{Y} \right] - \hat{\beta}_1 \left[x_i - \bar{x} \right] \right) &= 0 \end{aligned}$$

Estimation de la pente

$$SC(\hat{\beta}_0, \beta_1) = \sum_{i=1}^{n} \Big(\big[Y_i - \bar{Y} \big] - \hat{\beta}_1 \left[x_i - \bar{x} \right] \Big)^2$$

D'où :

$$\begin{aligned} \frac{\partial SC}{\partial \beta_1}(\hat{\beta}_0, \hat{\beta}_1) &= 0 \\ -2 \sum_{i=1}^{n} \left[x_i - \bar{x} \right] \Big(\big[Y_i - \bar{Y} \big] - \hat{\beta}_1 \left[x_i - \bar{x} \right] \Big) &= 0 \\ S_{xy} - \hat{\beta}_1 S_x^2 &= 0 \end{aligned}$$

Estimation de la pente

$$SC(\hat{\beta}_0, \beta_1) = \sum_{i=1}^{n} \left(\left[Y_i - \bar{Y} \right] - \hat{\beta}_1 \left[x_i - \bar{x} \right] \right)^2$$

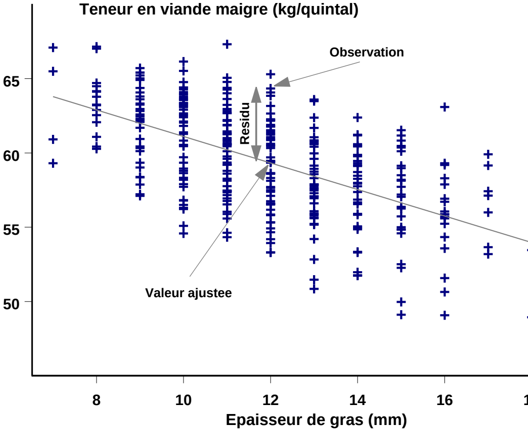
D'où :

$$\begin{aligned}
\frac{\partial SC}{\partial \beta_1}(\hat{\beta}_0, \hat{\beta}_1) &= 0 \\
-2 \sum_{i=1}^{n} [x_i - \bar{x}] \left(\left[Y_i - \bar{Y} \right] - \hat{\beta}_1 [x_i - \bar{x}] \right) &= 0 \\
S_{xy} - \hat{\beta}_1 S_x^2 &= 0 \\
\hat{\beta}_1 &= \frac{S_{xy}}{S_x^2}
\end{aligned}$$

Valeurs ajustées et résidus d'ajustement

- **Valeurs ajustées**

$$\hat{Y}_i = \hat{\beta}_0 + \hat{\beta}_1 x_i$$



Valeurs ajustées et résidus d'ajustement

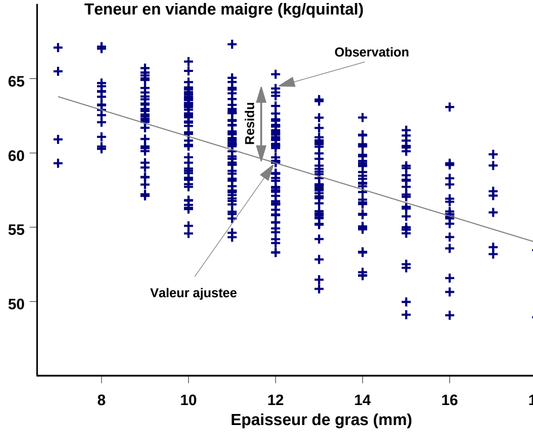
- **Valeurs ajustées**

$$\hat{Y}_i = \hat{\beta}_0 + \hat{\beta}_1 x_i$$

- **Résidus**

$$\hat{\varepsilon}_i = Y_i - \hat{Y}_i$$

$$\frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n} \hat{\varepsilon}_i = 0$$



Valeurs ajustées et résidus d'ajustement

- **Valeurs ajustées**

$$\hat{Y}_i = \hat{\beta}_0 + \hat{\beta}_1 x_i$$

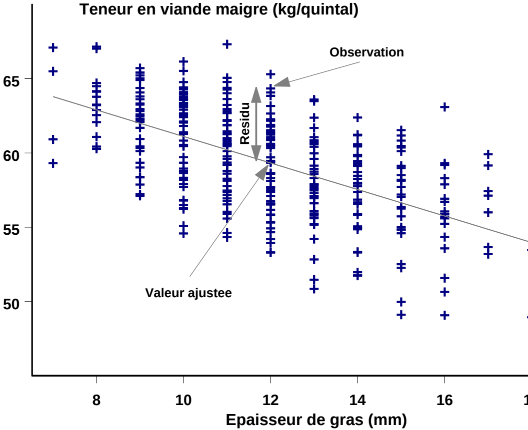
- **Résidus**

$$\hat{\varepsilon}_i = Y_i - \hat{Y}_i$$

$$\frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n} \hat{\varepsilon}_i = 0$$

- **Décomposition**

$$Y_i = \hat{Y}_i + \hat{\varepsilon}_i$$



Part de variabilité de Y imputable à x

Equation d'«analyse de la variance»

$$\underbrace{\sum_{i=1}^{n}\left(Y_i-\bar{Y}\right)^2}_{\text{SCET}} = \underbrace{\sum_{i=1}^{n}\left(\hat{Y}_i-\bar{Y}\right)^2}_{\text{SCEM}} + \underbrace{\sum_{i=1}^{n}\left(Y_i-\hat{Y}_i\right)^2}_{\text{SCER}}$$

Part de variabilité de Y imputable à x

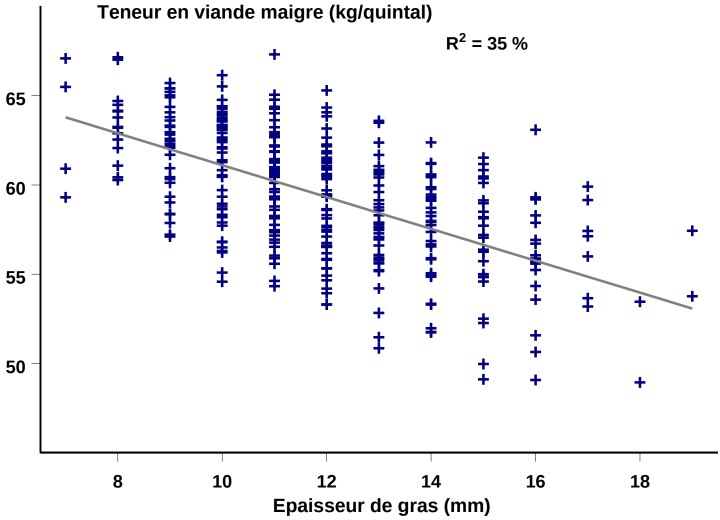
Equation d'«analyse de la variance»

$$\underbrace{\sum_{i=1}^{n}\left(Y_i-\bar{Y}\right)^2}_{\text{SCET}} = \underbrace{\sum_{i=1}^{n}\left(\hat{Y}_i-\bar{Y}\right)^2}_{\text{SCEM}}+\underbrace{\sum_{i=1}^{n}\left(Y_i-\hat{Y}_i\right)^2}_{\text{SCER}}$$

Part de variabilité expliquée par le modèle

$$\begin{aligned} \mathrm{R}^2 &= \frac{\text{SCEM}}{\text{SCET}} = 1-\frac{\text{SCER}}{\text{SCET}} \\ &= [r(x,y)]^2 \end{aligned}$$

Part de variabilité de Y imputable à x



Test du lien entre x et Y

Equation d'«analyse de la variance»

$$\underbrace{\sum_{i=1}^{n}\left(Y_i - \bar{Y}\right)^2}_{\text{SCET}} = \underbrace{\sum_{i=1}^{n}\left(\hat{Y}_i - \bar{Y}\right)^2}_{\text{SCEM}} + \underbrace{\sum_{i=1}^{n}\left(Y_i - \hat{Y}_i\right)^2}_{\text{SCER}}$$

Test du lien entre x et Y

Equation d'«analyse de la variance»

$$\underbrace{\sum_{i=1}^{n}\left(Y_i - \bar{Y}\right)^2}_{\text{SCET}} = \underbrace{\sum_{i=1}^{n}\left(\hat{Y}_i - \bar{Y}\right)^2}_{\text{SCEM}} + \underbrace{\sum_{i=1}^{n}\left(Y_i - \hat{Y}_i\right)^2}_{\text{SCER}}$$

Sous l'hypothèse d'absence de lien

$$\mathrm{F} = \frac{\frac{\text{SCEM}}{2-1}}{\frac{\text{SCER}}{n-2}} = \frac{\text{CMF}}{\text{CMR}} \sim \mathcal{F}_{1,n-2}$$

Illustration

Table d'analyse de la variance

	Degrés de liberté	SC	CM	F	Probabilité critique
Epaisseur de gras	1	1535.53	1535.53	181.04	0.00
Résiduelle	342	2900.69	8.48		

Estimation des coefficients

- $\hat{\beta}_0$, $\hat{\beta}_1$ sont sans biais

Estimation des coefficients

- $\hat{\beta}_0$, $\hat{\beta}_1$ sont sans biais
- **Variance d'estimation** :

$$\mathrm{Var}(\hat{\beta}_1) = \frac{1}{n}\frac{\sigma^2}{S_x^2}$$

Estimation des coefficients

- $\hat{\beta}_0$, $\hat{\beta}_1$ sont sans biais
- **Variance d'estimation** :

$$\mathrm{Var}(\hat{\beta}_1) = \frac{1}{n}\frac{\sigma^2}{S_x^2}$$

- **Estimation de la variance d'estimation** :

$$\widehat{\mathrm{Var}}(\hat{\beta}_1) = \frac{1}{n}\frac{\hat{\sigma}^2}{S_x^2}$$

Estimation de σ

σ^2, variance résiduelle

$$\hat{\sigma}^2 = \frac{1}{n-2} \underbrace{\sum_{i=1}^{n} \left[Y_i - \hat{\beta}_0 - \hat{\beta}_1 x_i \right]^2}_{\text{SCER}}$$

Nombre de degrés de liberté de SCER

$$\mathrm{ddl}_r = n - 2$$

Exemple

	Coefficients	Écart-type	Statistique t	Probabilité critique
Constante	70,03	0,81	86,75	6,02E-235
Variable X 1	-0,89	0,07	-13,46	2,05E-33

	Limite inférieure (seuil de confiance = 95%)	Limite supérieure
Constante	68,45	71,62
Variable X 1	-1,02	-0,76

Écart-type résiduel : 2.91

Tous différents de 0 !

	Maths				Philosophie			
	1er t.	2ème t.	3ème t.	Bac	1er t.	2ème t.	3ème t.	Bac
M_1	1.00	0.77	0.72	0.58	0.19	0.22	0.16	0.24
M_2	0.77	1.00	0.81	0.66	0.20	0.25	0.22	0.30
M_3	0.72	0.81	1.00	0.68	0.22	0.26	0.24	0.30
M_{bac}	0.58	0.66	0.68	1.00	0.17	0.23	0.21	0.28
P_1	0.19	0.20	0.22	0.17	1.00	0.64	0.61	0.42
P_2	0.22	0.25	0.26	0.23	0.64	1.00	0.69	0.43
P_3	0.16	0.22	0.24	0.21	0.61	0.69	1.00	0.47
P_{bac}	0.24	0.30	0.30	0.28	0.42	0.43	0.47	1.00

Problématique

On connaît x_0 mais pas Y_0

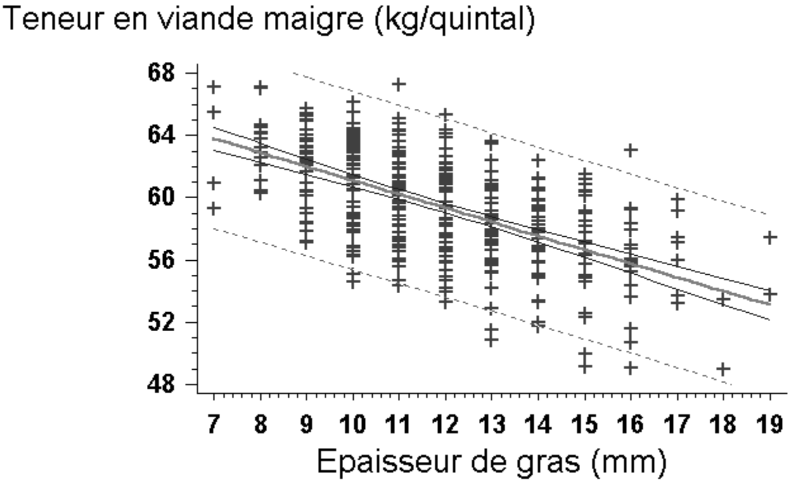
Prédicteur

$$\hat{Y}_0 = \hat{\beta}_0 + \hat{\beta}_1 x_0$$

Erreur de prédiction

$$\begin{aligned} \hat{\varepsilon}_0 &= Y_0 - \hat{Y}_0 \\ \mathbb{E}\left(\hat{\varepsilon}_0\right) &= 0 \end{aligned}$$

Variance de prédiction



Plan de la présentation

Ouverture

- Extension à plusieurs variables explicatives (Module suivant)

Ouverture

- Extension à plusieurs variables explicatives (Module suivant)
- Extensions non-linéaires (Microbiologie, Economie, ...)

Ouverture

- Extension à plusieurs variables explicatives (Module suivant)
- Extensions non-linéaires (Microbiologie, Economie, ...)
- Prise en compte de variables explicatives quantitatives et qualitatives (Analyse de la covariance)