Science des données II : module 1

Régression linéaire

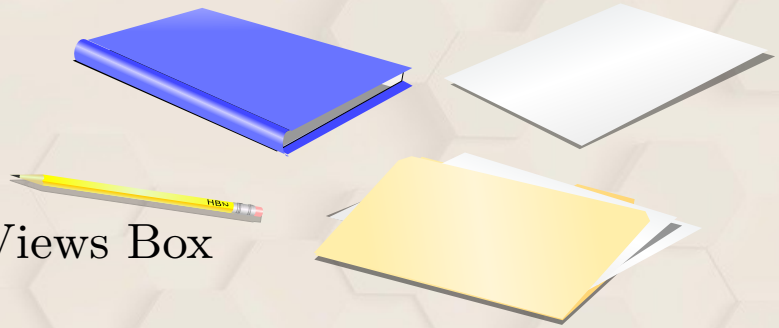
Philippe Grosjean & Guyliann Engels

Université de Mons, Belgique
Laboratoire d'Écologie numérique des Milieux aquatiques

http://biodatascience-course.sciviews.org
sdd@sciviews.org

UMONS

Objectifs du module



- Retrouver ses marques avec R, RStudio, SciViews Box
- Découvrir la régression linaire
- Appréhender les différentes formes de régressions linéaires
- Choisir sa régression linéaire de manière judicieuse
- Savoir utiliser les outils de diagnostic de la régression linéaire, en particulier l'analyse des résidus.

UMONS

Point de départ - association entre deux variables quantitatives

- Trois niveaux d'association de force croissante: corrélation, relation et causalité.
- Deux coefficients de corrélation différents : celui de **Pearson** et celui de **Spearman**.
- Nous venons d'aborder la notion de modèle dans le cadre de l'ANOVA.
- La régression linéaire n'est autre qu'une généralisation du modèle de l'ANOVA qui permet de représenter, quantifier et analyser une relation linéaire entre deux variables.

(si non linéaire, il faut essayer de transformer les données).

UMONS

La régression linéaire simple

- Comme pour la corrélation, la régression nécessite deux (au moins) variables quantitatives.
- Contrairement à la corrélation, la régression linéaire simple ne traite pas les deux variables sur un pied d'égalité :
  - Une des deux variables est dite dépendante (dependent)
  - de l'autre (qui est dite indépendante).
- La représentation graphique associée est le nuage de points à travers duquel on tracera la droite qui symbolise la régression linéaire considérée.
- Par convention, la variable indépendante est toujours présentée en abscisse et la variable dépendante en ordonnée.

UMONS

Cas d'utilisation

- La régression s'applique **dans deux cas** :
  1) Dans une expérience, une variable est fixée par l'expérimentateur et l'autre, appelée **réponse**, est mesurée. Dans ce cas la variable dépendante est toujours le réponse.
  2) Lors d'observations, des pairs de valeurs sont mesurées pour deux variables, et on suspecte une relation entre elles. Dans ce cas, il est plus difficile de décider quelle est la variable indépendante et quelle est la variable dépendante => choix selon le point de vue.

UMONS

Exemple

- Circonférence, hauteur et volume de cerisiers : jeu de données **Cerisiers.csv**.
- Étudions ces données (analyse descriptive).
- Question : Y a-t-il des relations linéaires entre les variables mesurées ? Peut-on prédire le volume de bois sur pied à partir du diamètre ou de la hauteur de ces arbres ?

UMONS

Test autour de la régression linéaire simple

- Notre critère de détermination de la droite : la minimisation de la somme des carrés des résidus => régression par les moindres carrés.
- On considère que les résidus ont une distribution normale de **moyenne** nulle et d'**écart type** σ constant (homoscédasticité).
- Une fois le modèle paramétrisé (parameterized), la droite est définie, et nous pouvons calculer les **résidus**.

UMONS

Distribution des résidus

- Comment calculer l'écart type ?
- On ne le connaît pas... mais on peut l'estimer à partir de l'écart type des résidus $s_{y|x}$ (analogie avec l'écart type de l'échantillon, s_y).

$$s_{y|x} = \sqrt{\frac{\sum (y_i - \hat{y}_i)^2}{n-2}} \qquad s_y = \sqrt{\frac{\sum (y_i - \bar{y})^2}{n-1}}$$

- **Calcul de l'intervalle de confiance sur une valeur prédite par le modèle pour Y :**

$$\mathrm{CI}_{1-\alpha} = \hat{y}_i \pm t^{n-2}_{\alpha/2} . \frac{s_{y|x}}{\sqrt{n}} \qquad \mathrm{CI}_{1-\alpha} = \bar{y} \pm t^{n-1}_{\alpha/2} . \frac{s_y}{\sqrt{n}}$$

UMONS

Significativité de la pente de la droite

- On considère la droite de régression observée $Y = \mathrm{a}X + \mathrm{b}$ comme une estimation de la droite de régression $Y = \alpha X + \beta$ de la population.
- Le paramètre **a** suit une distribution dans un méta-expérience, et la valeur observée est en fait l'une parmi toutes ses valeurs possibles.
- Si on considère une méta-expérience, on pourra générer la distribution de a et donc, inférer à l'aide d'un I.C. sur α, (pente exacte pour la population).
- Par analogie avec la distribution de la moyenne d'un échantillon, on peut dire que a suit une distribution de Student de moyenne a et d'écart type valant :

$$S_a = \frac{s_{y|x}}{\sqrt{\sum_{i=1}^{n} (x_i - \bar{x})^2}}$$

D'où on déduit l'IC sur a :

$$\mathrm{CI}_{1-\alpha} = a \pm t_{\alpha/2}^{n-2} . S_a$$

Ce qui nous ramène à un test de Student classique pour déterminer la significativité de la pente de la droite (0 compris ou non dans l'IC ?)

UMONS

Coefficient de détermination et ANOVA

- De même que lors de la décomposition de la variance s^2 dans une ANOVA, on peut décomposer la variance conditionnelle $s^2_{y|x}$ liée à la régression linéaire :

SS(total) = SS(reg) + SS(residus) avec :

$$SS(total) = \sum (y_i - \bar{y})^2$$

$$SS(reg) = \sum (\hat{y}_i - \bar{y})^2$$

$$SS(residus) = \sum (y_i - \hat{y}_i)^2$$

- Le coefficient de détermination R^2 = *SS(reg) / SS(total)*. C'est la fraction de variance expliquée par le modèle (valeur comprise entre 0 et 1 ; plus il est élevé, plus la régression explique une part de variance importante).
- Comme pour l'ANOVA, on peut effectuer un test de la significativité de la régression car *MS(reg) / MS(residus)* suit une distribution *F* à respectivement *1* et *n-2* ddl.

UMONS

Régression linéaire multiple

$$y = \alpha_1.x_1 + \alpha_2.x_2 + ... + \alpha_n.x_n + \beta + \epsilon$$

- L'erreur ϵ suit une loi Normale de moyenne nulle et d'écart type constant σ: $\epsilon \sim \mathrm{N}(0, \sigma)$
- La variance des résidus est constante (homoscedasticité)
- L'erreur est indépendante (problèmes des mesures répliquées dans le temps ou dans l'espace)
- L'**analyse des résidus** permet de vérifier ces différentes conditions, de détecter des valeurs aberrantes, et de mettre en évidence des relations non-linéaires

UMONS

Régression linéaire multiple (2)

- La régression linéaire simple est apparentée à l'ANOVA à 1 facteur (même principe).
- De même, la régression linéaire multiple est apparentée à l'ANOVA à plusieurs facteurs.
- **Une variable réponse** qui dépend de **plusieurs variables indépendantes** simultanément.
- Dans R, la régression multiple est une extension naturelle de la régression linéaire simple. Les mêmes outils sont utilisables. **Les snippets proposent des variantes pour régressions multiples**

Exemple

Le jeu de données *trees* (ou son équivalent *cerisiers*), volume de bois en fonction de la hauteur et du diamètre de l'arbre.

UMONS

Régression polynomiale

- **Rappel:** un polynome est une expression du type (*notez la ressemblance avec l'équation de la régression multiple*):

$$a_0 + a_1.x + a_2.x^2 + ... + a_n.x^n$$

- Un polynome d'**ordre 2** (x élevé jusqu'à la puissance 2) donne une parabole; un polynôme d'**ordre 3** correspond à une courbe en S.
- En considérant les puissances successives de la même variable dans la régression multiple, on obtient une régression polynômiale.
- Ce qui est intéressant : on utilise alors la régression **linéaire** pour ajuster en réalité une **courbe** (parabole, etc.)

Exemple

Utilisons la régression polynomiale sur *cerisiers*.

UMONS

Analyse des résidus

- Utiliser les différentes présentations graphiques pour visualiser graphiquement la distribution des résidus
  - **Résidus en fonction des valeurs prédites**: vue générale et détection de non linéarité et de valeurs extrêmes
  - **Graphqiue quantile-quantile** pour vérifier leur distribution nomale
  - **Racine carré des résidus standardisés en fonction des valeurs prédites** pour vérifier l'homoscédasticité.

Exemple

Illustration de l'utilisation de ces graphiques sur le jeu de données *cerisiers*

UMONS

Critère d'Akaike

- Le R^2 peut servir à quantifier la qualité d'ajustement d'un **modèle linéaire simple**.
- Dans le cas d'un **modèle multiple**, la complexité du modèle est liée au nombre de paramètres à estimer
- Plus un modèle est complexe, plus il est **flexible** et donc, il s'ajuste bien sur les points. Donc, c'est normal que le R^2 **augmente**

=> *mauvais critère pour comparer des modèles de complexité différente*

Le critère d'Akaike

introduit un terme de pénalisation en fonction du nombre de paramètres (*nbrpar*) à prédire qui rétablit l'équilibre (et au lieu d'utiliser le R^2, il utilise une autre descripteur statistique qui quantifie le degré d'ajustement, la *log-vraissemblance*) :

$$\text{AIC} = -2.\text{log-vraisemblance} + 2.\text{nbrpar}$$

UMONS