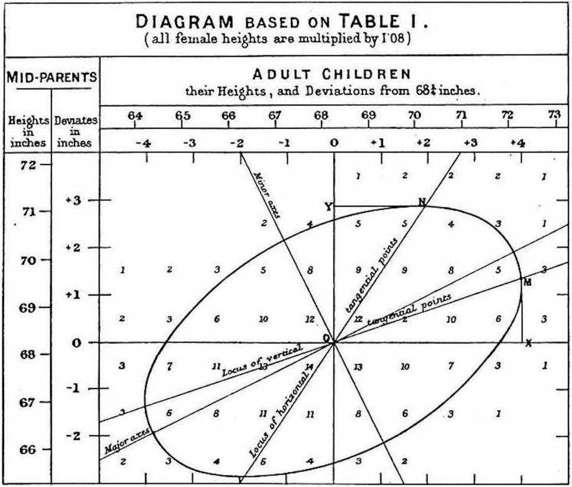
Statistiques pour les sciences (MAT-4681)

Arthur Charpentier

15 - Régression simple

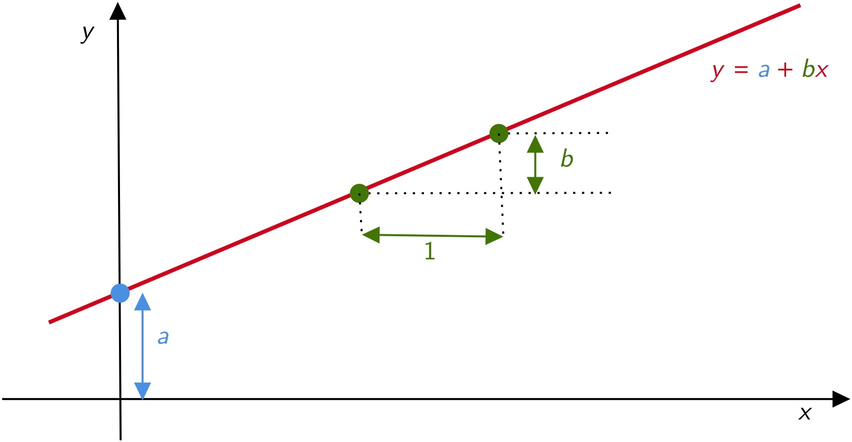
été 2022

Linear Regression



Galton regression towards mediocrity in hereditary stature, 1886.

Droite (dans le plan)



Covariance et corrélation I

Covariance

On appelle covariance d'un couple de variable aléatoire

$$\text{Cov}(X,Y)=\mathbb{E}\big[(X-\mathbb{E}[X])(Y-\mathbb{E}[Y])\big]=\mathbb{E}[XY]-\mathbb{E}[X]\mathbb{E}[Y]$$

(à condition que $\mathbb{E}[X^2]<\infty$ et $\mathbb{E}[Y^2]<\infty$).

Corrélation

On appelle corrélation d'un couple de variable aléatoire

$$\text{Cor}(X,Y)=\frac{\text{Cov}(X,Y)}{\sqrt{\text{Var}(X)\cdot\text{Var}(Y)}}$$

(à condition que $\mathbb{E}[X^2]<\infty$ et $\mathbb{E}[Y^2]<\infty$).

Moindrs carrés

Pour rappel (partie 4)

Moyenne (empirique) / empirical mean / average

$\overline{y}$ est la solution de $\overline{y} = \underset{m\in\mathbb{R}}{\text{argmin}} \left\{ \sum_{i=1}^{n} (y_i - m)^2 \right\}$

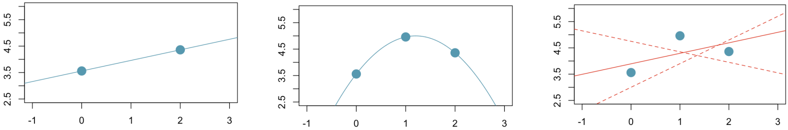
"De tous les principes qu'on peut proposer pour cet objet, je pense qu'il n'en est pas de plus général, de plus exact, ni d'une application plus facile que celui dont nous avons fait usage dans les recherches précédentes, et qui consiste à rendre minimum la somme des quarrés des erreurs. Par ce moyen, il s'établit entre les erreurs une sorte d'équilibre qui empêchant les extrêmes de prévaloir, est très-propre à faire connoître l'état du système le plus proche de la vérité", Legendre (1806)

Moindres carrés

Soit $(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{y}) = \{(x_1, y_1), \cdots, (x_n, y_n)\}$ un échantillon. On suppose que

$$y_i = \alpha + \beta x_i + \varepsilon_i$$

- y est la variable d'intérêt (que l'on veut prédire)
- x est une variable explicative (possible)



Si $n \geq 3$ et que les points ne sont pas alignés, il y a une infinité de droites de régression possibles. On va chercher

$$\min_{\alpha,\beta}\left\{\sum_{i=1}^{n}\varepsilon_i^2\right\} = \min_{\alpha,\beta}\left\{\sum_{i=1}^{n}(y_i - \alpha - \beta x_i)^2\right\}$$

Moindres carrés

Droite de régression, moindres carrées (OLS)

Soit $(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{y}) = \{(x_1, y_1), \cdots, (x_n, y_n)\}$ un échantillon. La droite de régression qui minimise la somme des carrés des erreurs est $y = \widehat{\alpha} + \widehat{\beta} x$ où

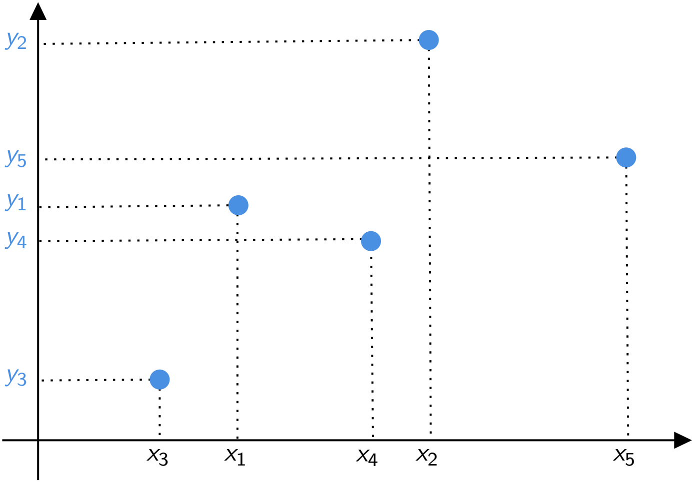
$$(\widehat{\alpha}, \widehat{\beta}) = \underset{\alpha, \beta}{\text{argmin}} \left\{ \sum_{i=1}^{n} \varepsilon_i^2 \right\} = \underset{\alpha, \beta}{\text{argmin}} \left\{ \sum_{i=1}^{n} (y_i - \alpha - \beta x_i)^2 \right\}$$

Note il est possible de considérer d'autre critère, comme la somme des valeurs absolue des erreurs

$$\underset{\alpha, \beta}{\text{argmin}} \left\{ \sum_{i=1}^{n} |\varepsilon_i| \right\} = \underset{\alpha, \beta}{\text{argmin}} \left\{ \sum_{i=1}^{n} |y_i - \alpha - \beta x_i)| \right\}$$

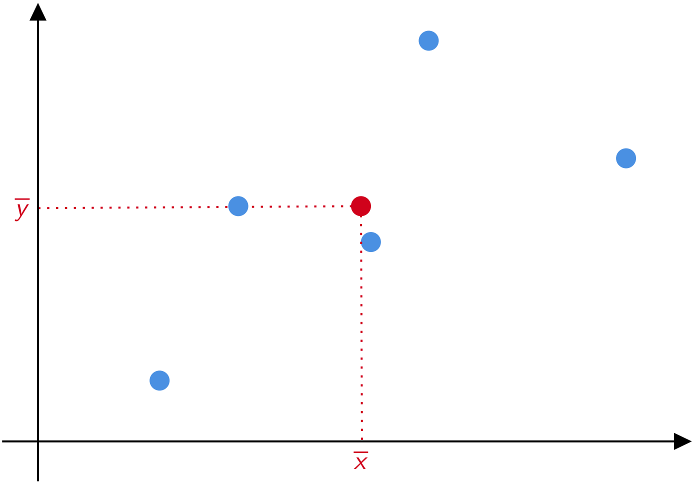
Régression : notations I

On considère l'échantillon $\{(x_1, y_1), \cdots, (x_n, y_n)\}$



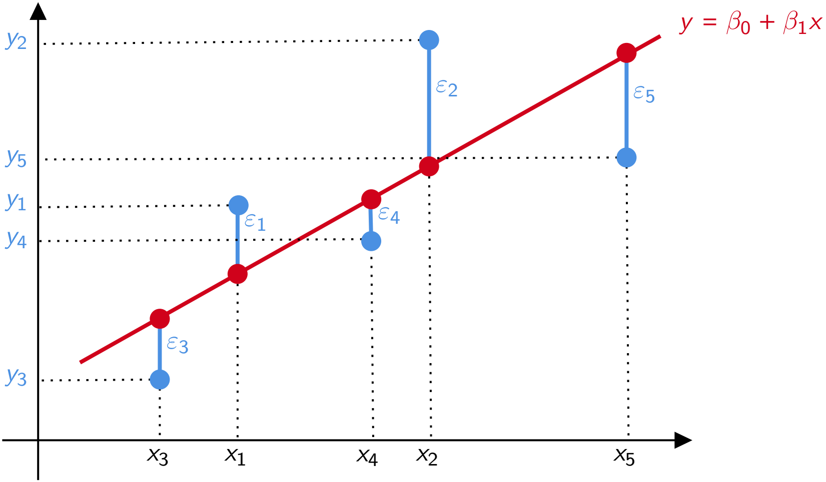
Régression : notations II

On note $\overline{x} = \dfrac{1}{n}\sum_{i=1}^{n} x_i$ et $\overline{y} = \dfrac{1}{n}\sum_{i=1}^{n} y_i$ les moyennes empiriques



Régression : notations III

Les résidus sont $\varepsilon_i = y_i - (\beta_0 + \beta_1 x_i)$



Régression

Droite de régression, moindres carrées (OLS)

Soit $(\boldsymbol{x},\boldsymbol{y})=\{(x_1,y_1),\cdots,(x_n,y_n)\}$ un échantillon. La droite de régression qui minimise la somme des carrés des erreurs est

$$y=\widehat{\alpha}+\widehat{\beta}x$$

$$\text{où}\begin{cases}\widehat{\alpha} & =\overline{y}-\widehat{\beta}\,\overline{x},\\ \widehat{\beta} & =\dfrac{\displaystyle\sum_{i=1}^n(x_i-\overline{x})(y_i-\overline{y})}{\displaystyle\sum_{i=1}^n(x_i-\overline{x})^2}=r_{xy}\dfrac{s_y}{s_x}.\end{cases}$$

(admis)

Régression

Pour obtenir $\widehat{\alpha}$ et $\widehat{\beta}$,

```
> model = lm(weight~height, data=Davis)
> model

Coefficients:
(Intercept)       height
    -130.91         1.15
```

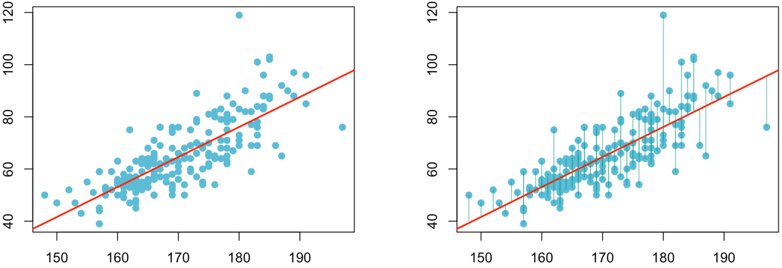
On peut vérifier que $\widehat{\beta} = r_{xy}\dfrac{s_y}{s_x}$

```
> (b = cor(Davis$weight,Davis$height)*sd(Davis$weight)
    /sd(Davis$height))
[1] 1.150092
```

et que $\widehat{\alpha} = \overline{y} - \widehat{\beta}\,\overline{x}$

```
> (a = mean(Davis$weight)-b*mean(Davis$height))
[1] -130.9104
```

Régressions

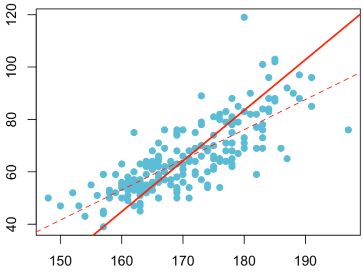


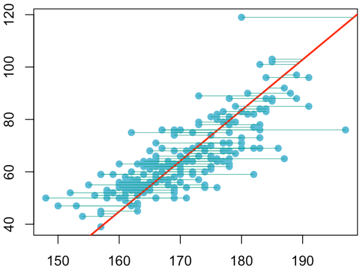
Régresser y sur x et régresser x sur y ne sont pas équivalent...

```
> model = lm(height~weight, data=Davis)
> model

Coefficients:
(Intercept)         weight
    136.831          0.517
```

Régressions

```
> model = lm(height~weight, data=Davis)
> model

Coefficients:
(Intercept)       weight
    136.831        0.517
```





Résidus

Prévision et résidus

Soit $(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{y}) = \{(x_1, y_1), \cdots, (x_n, y_n)\}$ un échantillon. La droite de régression qui minimise la somme des carrés des erreurs est $y = \widehat{\alpha} + \widehat{\beta}x$. La différence entre la valeur observée y_i et la valeur prédite $\widehat{y}_i = \widehat{\alpha} + \widehat{\beta}x_i$ s'appelle le résidu $\widehat{\varepsilon}_i = y_i - \widehat{y}_i$.

Résidus

Soient $\widehat{\varepsilon}_i = y_i - \widehat{y}_i$ les résidus estimés. Les résidus sont centrés et leur variance σ^2 est estimée par s^2 où

$$s^2 = \frac{1}{n-2}\sum_{i=1}^{n}\widehat{\varepsilon}_i^2 \text{ et } \widehat{\varepsilon}_i = 0.$$

Test de significativité

Test $H_0 : \beta = 0$ contre $H_1 : \beta \neq 0$

Soit $(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{y}) = \{(x_1, y_1), \cdots, (x_n, y_n)\}$ un échantillon. Si la droite de régression est $y = \alpha + \beta y$, pour tester $H_0 : \beta = 0$ contre $H_1 : \beta \neq 0$, la statistique de test est

$$T = \frac{\widehat{\beta}}{s_{\widehat{\beta}}} \text{ où } s_{\widehat{\beta}} = \sqrt{\frac{\frac{1}{n-2}\sum_{i=1}^n \widehat{\varepsilon}_i^2}{\sum_{i=1}^n (x_i - \bar{x})^2}}$$

Si $H_0 : \beta = 0$ est vraie, et si $\varepsilon = Y - (\alpha + \beta X) \sim \mathcal{N}(0, \sigma^2)$, $T \sim \mathcal{S}td(n-2)$. Et donc

- on rejette H_0 si $|t| > T_{n-2}^{-1}(1 - \alpha/2)$

où T_ν est la fonction de répartition de la loi de Student $\mathcal{S}td(\nu)$

Test de significativité ★★★

Test $H_0 : \alpha = 0$ contre $H_1 : \alpha \neq 0$

Soit $(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{y}) = \{(x_1, y_1), \cdots, (x_n, y_n)\}$ un échantillon. Si la droite de régression est $y = \alpha + \beta y$, pour tester $H_0 : \beta = 0$ contre $H_1 : \beta \neq 0$, la statistique de test est

$$T = \frac{\widehat{\alpha}}{s_{\widehat{\alpha}}} \text{ où } s_{\widehat{\alpha}} = \sqrt{\frac{1}{n-2}\sum_{i=1}^{n}\widehat{\varepsilon}_i^2\left(\frac{1}{n} + \frac{\overline{x}^2}{\sum_{i=1}^{n}(x_i - \bar{x})^2}\right)}$$

Si $H_0 : \alpha = 0$ est vraie, et si $\varepsilon = Y - (\alpha + \beta X) \sim \mathcal{N}(0, \sigma^2)$, $T \sim \mathcal{S}td(n-2)$. Et donc

- on rejette H_0 si $|t| > T_{n-2}^{-1}(1 - \alpha/2)$

où T_ν est la fonction de répartition de la loi de Student $\mathcal{S}td(\nu)$

Test de significativité

Si $H_0 : \beta = 0$ est accepté, la pente est nulle, et x n'influence pas y

Si $H_0 : \alpha = 0$ est accepté, $y = \beta x$, autrement dit, il y a une relation de proportionalité entre x et y

Regression avec Python

```
> import numpy as np
> import statsmodels.api as sm
> x = np.array([5, 15, 25, 35, 45, 55])
> x = x.reshape((-1, 1))
> x = sm.add_constant(x)
> y = np.array([5, 20, 14, 32, 22, 38])
> model = sm.OLS(y, x)
> results = model.fit()
> print(results.summary())
=====================================================
           coef.  std err       t   P>|t|    [0.025   0.975]
-----------------------------------------------------
const    5.6333   5.872   0.959   0.392   -10.670   21.936
x1       0.5400   0.170   3.175   0.034     0.068    1.012
-----------------------------------------------------
Dep. Variable:   y        R-squared:          0.716
Model:           OLS      Adj. R-squared:     0.645
                          F-statistic:        10.08
```

Regression avec R

```
> df = data.frame(x=c(5, 15, 25, 35, 45, 55),
                  y=c(5, 20, 14, 32, 22, 38))
> model = lm(y~x, data=df)
> summary(model)

Coefficients:
            Estimate Std. Error t value Pr(>|t|)
(Intercept)   5.6333     5.8719   0.959   0.3917
x             0.5400     0.1701   3.175   0.0337 *
---
Signif. codes:  0 '***' 0.001 '**' 0.01 '*' 0.05 '.'

Residual standard error: 7.116 on 4 degrees of freedom
Multiple R-squared: 0.7159, Adjusted R-squared: 0.6448
F-statistic: 10.08 on 1 and 4 DF,  p-value: 0.03371
```

Intervalle de confiance

Intervalle de confiance pour β et α

Soit $(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{y}) = \{(x_1, y_1), \cdots, (x_n, y_n)\}$ un échantillon. Si la droite de régression est $y = \alpha + \beta y$, et si $\varepsilon = Y - (\alpha + \beta X) \sim \mathcal{N}(0, \sigma^2)$, l'intervalle de confiance pour β est

$$\left[\widehat{\beta} \pm t_{n-2,1-\alpha/2} s_{\widehat{\beta}}\right]$$

et l'intervalle de confiance pour α est

$$\left[\widehat{\alpha} \pm t_{n-2,1-\alpha/2} s_{\widehat{\alpha}}\right]$$

```
> confint(model)
                  2.5 %    97.5 %
(Intercept) -10.66959886 21.936266
x             0.06773221  1.012268
```

Décomposition de la variance

Décomposition de la variance

Soit $(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{y}) = \{(x_1, y_1), \cdots, (x_n, y_n)\}$ un échantillon, et $\widehat{y}_i$ la prévision par régression linéaire. Alors

$$\underbrace{\frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n}(y_i - \bar{y})^2}_{\text{variance totale}} = \underbrace{\frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n}(y_i - \hat{y}_i)^2}_{\text{variance résiduelle}} + \underbrace{\frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n}(\hat{y}_i - \bar{y})^2}_{\text{variance expliquée}}$$

(admis)

On décompose aussi la somme des carrés totaux en la somme des carrés des résidus et la somme des carrés expliqués

$$\underbrace{\sum_{i=1}^{n}(y_i - \bar{y})^2}_{\text{SCT}} = \underbrace{\sum_{i=1}^{n}(y_i - \hat{y}_i)^2}_{\text{SCR}} + \underbrace{\sum_{i=1}^{n}(\hat{y}_i - \bar{y})^2}_{\text{SCE}}$$

R^2

R^2

Soit $(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{y}) = \{(x_1, y_1), \cdots, (x_n, y_n)\}$ un échantillon, et $\widehat{y}_i$ la prévision par régression linéaire. Alors

$$R^2 = \frac{\text{variance expliquée}}{\text{variance totale}} \in [0, 1]$$

$$R^2 = \frac{\sum_{i=1}^n (\hat{y}_i - \bar{y})^2}{\sum_{i=1}^n (y_i - \bar{y})^2} = 1 - \frac{\sum_{i=1}^n (y_i - \hat{y}_i)^2}{\sum_{i=1}^n (y_i - \bar{y})^2}$$

R^2

$$R^2 = \text{Cor}(\widehat{y}, y)^2$$

(admis)

Confidence et prédiction

Intervalle de prédiction

Soit $(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{y}) = \{(x_1, y_1), \cdots, (x_n, y_n)\}$ un échantillon. On dispose d'une nouvelle observation x_{n+1}. L'intervalle de confiance de la valeur moyenne prédite est:

$$\hat{y}_{n+1} \pm t_{\alpha/2,n-2} \sqrt{s^2 \left[\frac{1}{n} + \frac{(x_{n+1} - \bar{x})^2}{\sum_{i=1}^{n} (x_i - \bar{x})^2}\right]}$$

L'intervalle de confiance pour une valeur particulière est:

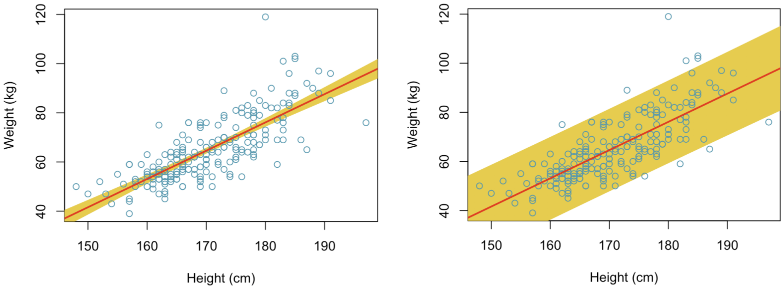
$$\hat{y}_{n+1} \pm t_{\alpha/2,n-2} \sqrt{s^2 \left[1 + \frac{1}{n} + \frac{(x_{n+1} - \bar{x})^2}{\sum_{i=1}^{n} (x_i - \bar{x})^2}\right]}$$

Confidence et prédiction

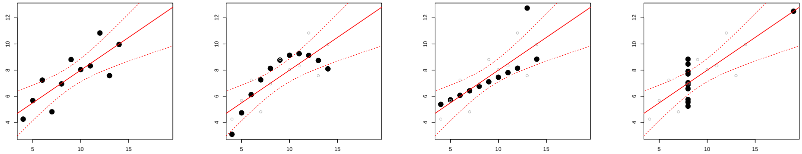
```
> model = lm(weight~height, data=Davis)
> nouvdonnee = data.frame(height=c(170,192))
> predict(model, newdata = nouvdonnee , interval = '
    confidence')
       fit      lwr      upr
1 64.60520 63.41691 65.79349
2 89.90722 86.81755 92.99689
> predict(model, newdata = nouvdonnee , interval = '
    prediction')
       fit      lwr       upr
1 64.60520 47.79186  81.41853
2 89.90722 72.85371 106.96073
```

Confidence et prédiction

Les intervalles à 95% pour $\widehat{y}$ et y sont respectivement



Anscombe's Quartet



```
> library(datasets)
> summary(lm(y1~x1,data=anscombe))
Coefficients:
            Estimate Std. Error t value Pr(>|t|)
(Intercept)   3.0000     1.1247   2.667  0.02573 *
x1            0.5000     0.1179   4.241  0.00217 **
---
Signif. codes:  0 '***' 0.001 '**' 0.01 '*' 0.05 '.'

Residual standard error: 1.237 on 9 degrees of freedom
Multiple R-squared: 0.6665, Adjusted R-squared: 0.6295
F-statistic: 17.99 on 1 and 9 DF,  p-value: 0.00217
```