

Statistiques appliquées aux sciences

SCI 1018

Régression linéaire simple et corrélation

Marc J. Mazerolle

Institut de recherche sur les forêts, Université du Québec en Abitibi-Témiscamingue



© TÉLUQ, 2014

Table des matières

1	Introduction	2
2	La régression linéaire	2
2.1	Équation de régression	3
2.2	Estimation	5
2.3	Suppositions	13
2.4	Valeurs extrêmes	15
2.4.1	Résidus de Student	15
2.5	Tests d'hypothèses	17
2.6	Évaluer le pouvoir prédictif	21
2.7	Prédiction	22
3	Corrélation	29
3.1	Corrélation de Pearson	30
4	Corrélation vs régression	33
	Conclusion	33
	Index	35

1 Introduction

Dans le texte de la leçon précédente, nous avons vu illustré de nombreux éléments importants à considérer lors de l'élaboration de plans d'échantillonnage. Certains problèmes liés à l'échantillonnage ont été présentés, notamment la pseudoréplication et des sources de confusion. Ces conseils s'appliquent aussi à d'autres types d'analyses. Dans la présente leçon, nous introduirons la régression linéaire simple et la corrélation. Les conditions d'utilisation et les tests d'hypothèses qui y sont associés seront présentés.

Dans les dernières leçons, la variable réponse était numérique et l'objectif était de déterminer comment cette variable changeait selon les niveaux d'un ou de plusieurs facteurs (p. ex., test t , ANOVA). Les facteurs définissaient des groupes et les moyennes des groupes étaient comparées entre elles. Nous allons maintenant voir des applications où on veut déterminer la relation entre une variable réponse et une variable explicative numérique (au lieu d'un facteur). Ici, la variable explicative est mesurée sur une échelle numérique (p. ex., âge) au lieu d'être exprimée en niveaux (p. ex., classes d'âge).

2 La régression linéaire

La **régression linéaire simple** (*simple linear regression*) est le cas où une variable réponse, aussi appelée **variable dépendante** (*dependent variable*), varie en fonction d'une variable explicative, aussi appelée **variable indépendante** (*independent variable*) ou **prédicteur** (*predictor*). On utilise l'appellation régression **linéaire** puisque la relation entre les deux variables est linéaire : on trace une droite linéaire pour représenter la relation entre les deux variables. La régression linéaire implique une relation de cause à effet. Les variations des observations de la variable réponse (variable dépendante) sont causées, du moins en partie, par une variable explicative (variable indépendante).

2.1 Équation de régression

On peut représenter l'équation de la droite de régression linéaire comme suit :

$$y_i = a + bx_i + \epsilon_i$$

où y_i correspond à l'observation i de la variable réponse y , a correspond à l'**ordonnée à l'origine** (*intercept*). L'ordonnée à l'origine représente le point sur l'axe des y 's qui est croisé par la droite de régression. Le terme b correspond à l'estimation de la pente, qui indique le taux d'accroissement de y avec une augmentation d'une unité de la variable explicative x . Le terme x_i correspond à l'observation i de la variable explicative x , et ϵ_i correspond au terme d'erreur associé à l'estimation de l'observation y_i . Une notation équivalente utilise des termes β , tels que :

$$y_i = \beta_0 + \beta_x x_i + \epsilon_i$$

où β_0 représente l'ordonnée à l'origine et β_x indique la pente de la variable explicative x . C'est cette dernière notation que nous utiliserons dans cette leçon. De manière générale, on emploie le terme générique **coefficient** pour désigner β_0 , β_x , a et b . Ces coefficients représentent l'estimation de paramètres de la population (*parameter estimate*) pour désigner la valeur numérique de l'ordonnée à l'origine et de la pente. Le prochain exemple présente un jeu de données typique sur lequel on peut réaliser une régression linéaire.

Exemple 11.1 Nous nous intéressons à la relation entre la longueur de l'aile en cm de bruants (oiseaux) et l'âge en jours après l'éclosion. Spécifiquement, nous voulons décrire le taux de croissance de la longueur de l'aile chez des oisillons à la suite de l'éclosion dans des nids. Le jeu de données est contenu dans le fichier `Bruant_ailles.csv`.

```
> ##on importe les données
```

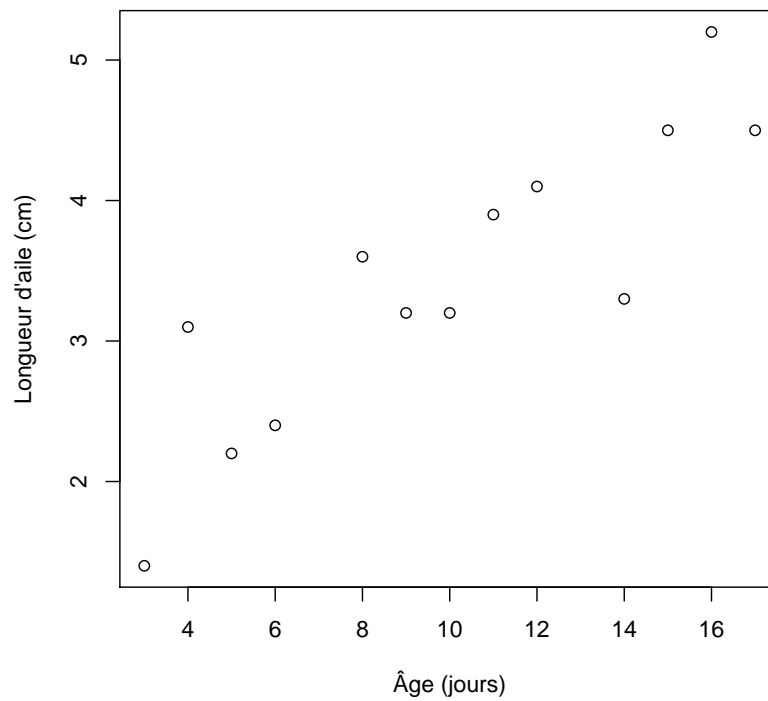


FIGURE 1 – Longueurs des ailes de bruants au nid en fonction du nombre de jours écoulés depuis l'éclosion.

```
> bruants <- read.table(file = "Bruant_ailes.csv",
                        header = TRUE)
```

```
> head(bruants)
```

	Age	Longueur
1	3	1.4
2	4	3.1
3	5	2.2
4	6	2.4
5	8	3.6
6	9	3.2

La figure 1 illustre les données. On remarque déjà un patron linéaire et la droite

de régression décrira formellement cette relation.

2.2 Estimation

La régression linéaire minimise la somme des carrés des erreurs (SSE)¹ par la méthode des moindres carrés pour obtenir les estimations de l'ordonnée à l'origine et de la pente. Autrement dit, pour un jeu de données, l'équation de régression est l'équation qui donne la plus faible distance verticale entre chaque point (y_i) et la droite de régression (\hat{y}_i). Pour des problèmes plus complexes, comme la régression multiple que nous ne verrons pas dans le cours, les paramètres sont estimés à l'aide d'algèbre matricielle.

On peut calculer différentes sommes des carrés à partir des données de la régression linéaire, un peu comme nous l'avons effectué pour l'ANOVA. Les prochaines lignes montrent les sommes des carrés qui nous permettront d'obtenir les estimations des paramètres (variance résiduelle et coefficients de régression) à l'aide de la méthode des moindres carrés.

La somme des carrés des erreurs (SSE) donne la somme des carrés de la déviation entre les valeurs observées de la variable dépendante (y_i) et les valeurs prédites (\hat{y}_i) par l'équation de régression :

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

La somme des carrés totale de Y (SSY) donne la somme des carrés de la déviation entre les valeurs observées de la variable dépendante (y_i) et la moyenne de cette variable (\bar{y}) :

$$SSY = \sum_{i=1}^n (y_i - \bar{y})^2$$

La somme des carrés totale de X (SSX) donne la somme des carrés de la déviation entre

1. Rappel : la somme des carrés des erreurs s'obtient avec l'équation $SSE = \sum_{i=1}^n (y_i - \hat{y}_i)^2$, où y_i correspond aux observations de la variable réponse et \hat{y}_i représente les valeurs prédites par l'équation de régression.

les valeurs observées de la variable explicative (x_i) et la moyenne de cette variable (\bar{x}) :

$$SSX = \sum_{i=1}^n (x_i - \bar{x})^2$$

La somme des produits croisés ($SSXY$, *sum of cross products*) donne la somme du produit des déviations entre la variable dépendante et sa moyenne et des déviations entre la variable explicative et sa moyenne :

$$SSXY = \sum_{i=1}^n (x_i - \bar{x})(y_i - \bar{y})$$

À partir de ces valeurs, nous pouvons obtenir la somme des carrés de la régression ($SS_{\text{régression}}$) :

$$SS_{\text{régression}} = \frac{SSXY^2}{SSX}$$

La somme des carrés totale de Y (SSY), la somme des carrés de la régression ($SS_{\text{régression}}$) et la somme des carrés des erreurs (SSE) sont reliées par la relation suivante :

$$SSE = SSY - SS_{\text{régression}}$$

La pente (b, β_x) s'obtient :

$$\beta_x = \frac{SSXY}{SSX}$$

Puisque la droite de régression passe par le point \bar{y} et \bar{x} , on peut trouver l'ordonnée à l'origine (a, β_0) :

$$\bar{y} = \beta_0 + \beta_x \bar{x}$$

$$\bar{y} - \beta_x \bar{x} = \beta_0$$

$$\beta_0 = \bar{y} - \beta_x \bar{x}$$

Tout comme avec l'ANOVA, on peut estimer la variance résiduelle (σ^2) à l'aide du carré moyen des erreurs (MSE), où la variance résiduelle correspond à la partie de la variance des observations de y qui n'est pas expliquée par x :

$$MSE = \frac{SSE}{n - 2}$$

Appliquons maintenant ces calculs à l'exemple de la croissance des bruants.

Exemple 11.2 Nous allons estimer les paramètres décrivant la croissance des ailes de bruants dans le nid à partir des équations vues dans la section précédente.

La somme des carrés de Y :

$$\begin{aligned}SSY &= \sum_{i=1}^n (y_i - \bar{y})^2 \\SSY &= (1.4 - 3.43)^2 + \dots + (4.5 - 3.43)^2 \\SSY &= 13.05\end{aligned}$$

La somme des carrés de X :

$$\begin{aligned}SSX &= \sum_{i=1}^n (x_i - \bar{x})^2 \\SSX &= (3 - 10)^2 + \dots + (17 - 10)^2 \\SSX &= 262\end{aligned}$$

La somme des produits croisés :

$$\begin{aligned}SSXY &= \sum_{i=1}^n (x_i - \bar{x})(y_i - \bar{y}) \\SSXY &= (1.4 - 3.43)(3 - 10) + \dots + (4.5 - 3.43)(17 - 10) \\SSXY &= 51.1\end{aligned}$$

La somme des carrés de la régression :

$$\begin{aligned}SS_{\text{régression}} &= \frac{SSXY^2}{SSX} \\SS_{\text{régression}} &= \frac{51.1^2}{262} \\SS_{\text{régression}} &= 9.97\end{aligned}$$

La somme des carrés des erreurs :

$$\begin{aligned}SSE &= SSY - SS_{\text{régression}} \\SSE &= 13.05 - 9.97 \\SSE &= 3.08\end{aligned}$$

Nous pouvons ensuite calculer la pente de la droite de régression :

$$\begin{aligned}\beta_x &= \frac{SSXY}{SSX} \\ \beta_x &= \frac{51.1}{262} \\ \beta_x &= 0.2\end{aligned}$$

L'ordonnée à l'origine s'obtient comme suit :

$$\beta_0 = \bar{y} - \beta_x \bar{x}$$

$$\beta_0 = 3.43 - 0.195 * 10$$

$$\beta_0 = 1.48$$

Et la variance résiduelle est donnée par :

$$MSE = \frac{SSE}{n - 2}$$

$$MSE = \frac{3.08}{13 - 2}$$

$$MSE = 0.28$$

Nous pouvons réaliser rapidement tous ces calculs en appliquant les formules dans

R ou encore en utilisant directement la fonction `lm()` :

```
> ##on crée des objets pour stocker chaque variable
> age <- bruants$Age
> long <- bruants$Longueur
> ##SSY
> SSY <- sum((long - mean(long))^2)
> SSY

[1] 13.04769

> ##SSX
> SSX <- sum((age - mean(age))^2)
> SSX

[1] 262

> ##SSXY
```

```

> SSXY <- sum((long - mean(long)) * (age - mean(age)))
> SSXY
[1] 51.1
> ##SSReg
> SSReg <- (SSXY^2)/SSX
> SSReg
[1] 9.96645
> ##SSE
> SSE <- SSY - SSReg
> SSE
[1] 3.081242
> ##pente
> beta.x <- SSXY/SSX
> beta.x
[1] 0.1950382
> ##ordonnée à l'origine
> beta.0 <- mean(long) - beta.x * mean(age)
> beta.0
[1] 1.480388
> ##variance résiduelle
> MSE <- SSE/(length(long) - 2)
> MSE
[1] 0.2801129
> ##régression linéaire avec lm( )
> m1 <- lm(Longueur ~ Age, data = bruants)
> m1

```

```

Call:
lm(formula = Longueur ~ Age, data = bruants)

Coefficients:
(Intercept)      Age
      1.480      0.195

> ##SSE à partir des valeurs prédites
> SSE <- sum((long - fitted(m1))^2)
> SSE

[1] 3.081242

```

En assemblant les coefficients de régression, nous obtenons l'équation de régression linéaire suivante :

$$y_i = \beta_0 + \beta_x x_i + \epsilon_i$$

$$y_i = 1.48 + 0.2Age_i + \epsilon_i$$

À noter que les valeurs prédites (\hat{y}_i) sont obtenues avec $1.48 + 0.2Age_i$. Par exemple, nous avons observé une valeur de 1.4 cm à 3 jours. Nous pouvons calculer la longueur d'aile prédite par la régression (c.-à-d., \hat{y}_i à 3 jours) :

$$\begin{aligned}\hat{y}_1 &= 1.48 + 0.2 \cdot 3 \\ &= 2.07 \text{ cm}\end{aligned}$$

On peut procéder de la même façon pour calculer les autres valeurs prédites. Finalement, on ajoute la droite de régression sur le graphique présentant la longueur de l'aile en fonction de l'âge (fig. [2a](#)).

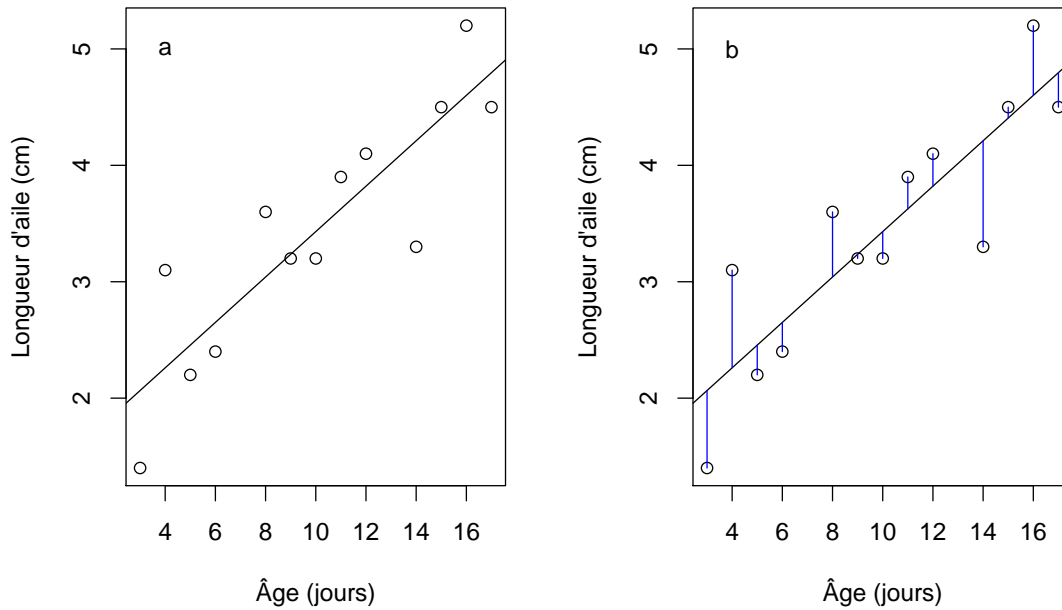


FIGURE 2 – Droite de régression linéaire de la longueur des ailes de bruants en fonction du nombre de jours depuis l’éclosion (a) et distance entre les observations (y_i) et la valeur prédite correspondante (\hat{y}_i) (b).

Puisque les erreurs (ϵ_i) correspondent aux résidus, on peut réécrire :

$$y_i = \hat{y}_i + \epsilon_i$$

$$y_i - \hat{y}_i = \epsilon_i$$

$$\epsilon_i = y_i - \hat{y}_i$$

La droite de régression minimise la somme des carrés des erreurs qui dépend directement de la distance (verticale) entre chaque y_i et sa valeur prédite \hat{y}_i correspondante (fig. 2b). Dans R, on peut extraire les résidus du modèle de régression à l’aide de la fonction `residuals()` en fournissant comme argument l’objet qui contient le résultat du modèle, alors que la fonction `fitted()` extrait les valeurs prédites du modèle. Nous utiliserons ces deux éléments pour vérifier les supposi-

tions de la régression linéaire.

2.3 Suppositions

La régression linéaire comporte les suppositions suivantes :

1. **existence** : à chaque valeur de x , il existe une distribution de valeurs de y dans la population. Cette supposition ne peut être vérifiée formellement, mais implique qu'il y a une série de valeurs de y possibles à chaque valeur de x ;
2. **normalité** : les erreurs proviennent d'une distribution normale. Cette supposition peut être vérifiée à l'aide d'un graphique quantile-quantile à partir des résidus ;
3. **homoscédasticité** : la variance de y (et des erreurs) est la même pour chaque x .
Le graphique des résidus en fonction des valeurs prédites permet de diagnostiquer des problèmes associés à l'hétérogénéité de la variance ;
4. **indépendance** : les valeurs de y (et les erreurs) sont indépendantes les unes des autres.
L'échantillonnage aléatoire des observations assure l'indépendance des observations et des erreurs ;
5. **linéarité** : la relation entre y et x est linéaire. La régression linéaire implique une relation linéaire : un graphique des valeurs observées (y) en fonction de la variable explicative (x) permet de vérifier la plausibilité de cette supposition. Si la relation n'a pas une forme linéaire (une relation exponentielle par exemple), on peut considérer une transformation afin de linéariser la relation².
6. **mesure de x sans erreur** : les valeurs de x sont mesurées sans erreur. Un assouplissement de cette supposition consiste à supposer que l'erreur sur x est très faible par

2. Dans le cas de certaines relations comme une relation exponentielle, transformer la variable réponse à l'échelle log peut linéariser la relation. Si le patron est plutôt quadratique (p. ex., une courbe avec un optimum), on peut aussi considérer un terme quadratique dans l'équation, c'est-à-dire, utiliser une régression polynomiale avec variable $x + x^2$

rapport à l'erreur de mesure de y . La prévention et la rigueur dans la prise de mesure permet de satisfaire à cette condition.

Exemple 11.3 Poursuivons le développement de l'exemple sur la longueur des ailes d'oisillons en vérifiant les suppositions pour la régression linéaire. Nous pouvons vérifier l'homogénéité des variances et la normalité à l'aide des mêmes outils que pour l'ANOVA.

```
> par(mfrow = c(1, 2), cex = 1.2)
> ##homogénéité de la variance
> plot(residuals(m1) ~ fitted(m1), ylab = "Résidus",
       xlab = "Valeurs prédites",
       main = "Homogénéité des variances")
> ##normalité
> qqnorm(residuals(m1), ylab = "Quantiles observés",
       xlab = "Quantiles théoriques",
       main = "Normalité des résidus")
> qqline(residuals(m1))
```

La figure 3 montre que les variances sont homogènes. Comme pour l'ANOVA, la supposition d'homogénéité des variances doit être respectée. Bien que quelques résidus dévient de la normalité, la régression linéaire est appropriée. Nous pouvons procéder à l'interprétation de la régression.

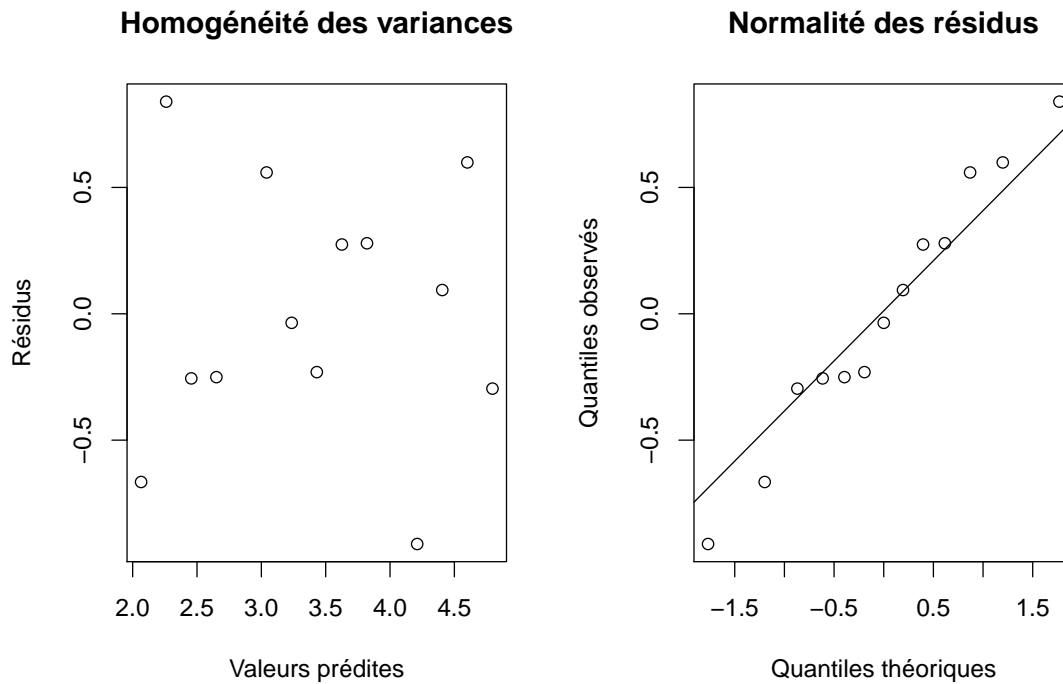


FIGURE 3 – Homogénéité des variances et normalité des résidus obtenus à partir de la droite de régression linéaire de la longueur des ailes de bruants en fonction du nombre de jours depuis l’éclosion.

2.4 Valeurs extrêmes

Une observation qui se démarque du reste des observations est une observation **extrême** (*outlier*). Cette caractéristique d’une observation peut entraîner des problèmes d’estimation. La présence d’une valeur extrême dans une variable peut fortement influencer la moyenne arithmétique de cette même variable. Par exemple, dans un vecteur avec les 5 valeurs suivantes 0.1, 0.1, 0.2, 0.2, 0.3, nous obtenons une moyenne arithmétique de 0.18. Si on remplace la valeur de 0.3 par 30, la moyenne deviendra 6.12 et très différente de la moyenne originale. Le même phénomène se produit avec la régression.

2.4.1 Résidus de Student

Les résidus de Student (*Student residuals*) permettent d’identifier des valeurs extrêmes dans une régression. Pour ce faire, chaque observation est comparée aux autres au moyen

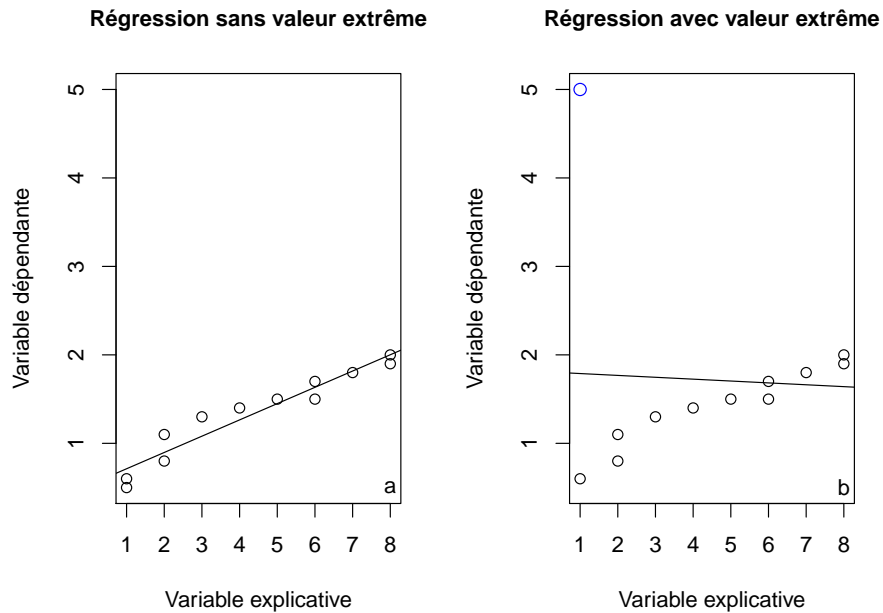


FIGURE 4 – Régression sans valeur extrême (a) où la pente est de 0.2 et (b) régression avec les mêmes données sauf pour une observation extrême identifiée en bleu ($x = 1$, $y = 2$) qui modifie la pente à la valeur -0.02.

d'une variable binaire qui prend la valeur de 1 pour coder cette observation et de 0 pour les autres valeurs. Cette nouvelle variable est ajoutée à la régression et le test t associé à ce coefficient donne le résidu de Student pour cette observation. La fonction `rstudent()` extrait directement ces valeurs. Le code ci-dessous montre l'extraction des résidus de Student pour les deux premières observations.

```
> ##on crée une variable binaire pour obs1
> bruants$obs1 <- ifelse(rownames(bruants) == "1", 1, 0)
> ##on crée une variable binaire pour obs2
> bruants$obs2 <- ifelse(rownames(bruants) == "2", 1, 0)
> ##on ajoute cette variable à la régression
> m1.obs1 <- lm(Longueur ~ Age + obs1, data = bruants)
> m1.obs2 <- lm(Longueur ~ Age + obs2, data = bruants)
> summary(m1.obs1)$coef
```

```

              Estimate Std. Error   t value    Pr(>|t|)
(Intercept)  1.7915038   0.3919162   4.571140 0.0010244634
Age          0.1708815   0.0344507   4.960176 0.0005698837
obs1        -0.9041484   0.5804032  -1.557794 0.1503394339

> summary(m1.obs2)$coef

              Estimate Std. Error   t value    Pr(>|t|)
(Intercept)  1.1535127   0.35523771  3.247157 8.762565e-03
Age          0.2195067   0.03129716  7.013631 3.655048e-05
obs2         1.0684604   0.52727435  2.026384 7.022757e-02

> ##extraction des deux premiers résidus de Student du modèle m1
> rstudent(m1)[1:2]

           1           2
-1.557794   2.026384

> plot(rstudent(m1) ~ fitted(m1),
       ylab = "Résidus de Student",
       xlab = "Valeurs prédites")

```

Puisque les résidus de Student sont sur l'échelle du t de Student, des valeurs supérieures à 4 ou inférieures à -4 indiquent des valeurs qui se démarquent nettement des autres. On peut visualiser rapidement les résidus de Student en fonction des valeurs prédites (fig. 5).

2.5 Tests d'hypothèses

Nous pouvons tester une série d'hypothèses statistiques à partir de la régression linéaire, notamment des tests d'hypothèses sur les coefficients ainsi que sur la régression. La fonction `summary()` permet d'obtenir un bref résumé de l'analyse et le résultat de ces tests d'hypothèses. Nous utilisons cette fonction afin d'aller chercher le résumé de l'analyse des longueurs d'ailes de bruant en fonction de l'âge réalisé plus tôt :

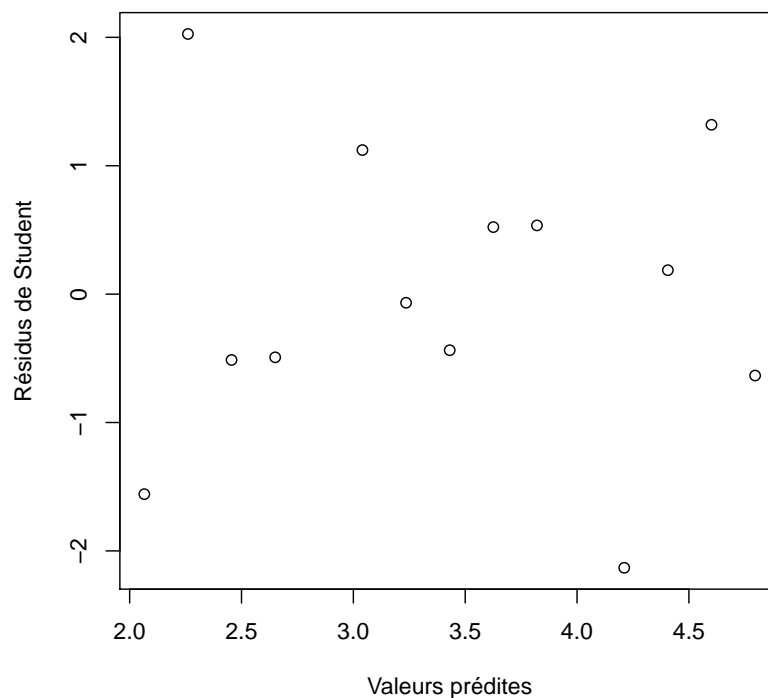


FIGURE 5 – Résidus de Student en fonction des valeurs prédites de la régression de longueurs d’ailes d’oisillons.

```
> summary(m1)
```

Call:

```
lm(formula = Longueur ~ Age, data = bruants)
```

Residuals:

Min	1Q	Median	3Q	Max
-0.91092	-0.25558	-0.03573	0.27915	0.83946

Coefficients:

	Estimate	Std. Error	t value	Pr(> t)
(Intercept)	1.4804	0.3584	4.130	0.00167 **

```

Age                0.1950      0.0327    5.965 9.39e-05 ***
---
Signif. codes:
0 '***' 0.001 '**' 0.01 '*' 0.05 '.' 0.1 ' ' 1

Residual standard error: 0.5293 on 11 degrees of freedom

Multiple R-squared:  0.7638,    Adjusted R-squared:  0.7424

F-statistic: 35.58 on 1 and 11 DF,  p-value: 9.388e-05

```

Nous remarquons différents éléments dans les résultats de `summary()`, incluant l'appel à la fonction (`Call:`), les quantiles des résidus (`Residuals`), suivi des coefficients de la régression (`Coefficients`). Pour chaque coefficient de régression, on retrouve quatre colonnes. La première colonne présente l'estimation (`Estimate`) et la deuxième donne l'erreur-type de l'estimation (`Std. Error`). La troisième colonne correspond à un test d'hypothèse sur l'estimation, à savoir, si sa valeur diffère significativement de 0 ($H_0 : \beta = 0$). Cette hypothèse est testée à l'aide d'un test t de Wald, un test qui est formé de l'estimation divisée par son erreur-type ($t \text{ de Wald} = \frac{\hat{\beta}}{SE_{\hat{\beta}}}$). La quatrième colonne correspond à la probabilité cumulative associée à un test t pour l'hypothèse nulle sur l'estimation et aux degrés de liberté résiduels du modèle ($P(t_{df} \geq |t_{obs,df}|)$). À noter qu'on teste rarement si l'ordonnée à l'origine diffère de 0, puisque l'ordonnée à l'origine diffère la plupart du temps de 0. C'est pourquoi on se limite généralement à tester la pente.

La dernière portion des résultats indique l'erreur-type résiduelle (\sqrt{MSE}), les degrés de liberté résiduels du modèle de régression, ainsi le coefficient de détermination (R^2) qui est une mesure de la force de la régression que nous verrons dans la prochaine section. La dernière ligne nous présente le F sur l'ANOVA de la régression et la probabilité cumulative de cette statistique. Ce test détermine si globalement la portion de la variance expliquée par la variable explicative est supérieure à la portion inexpliquée (variance résiduelle, MSE).

Une alternative aux tests d'hypothèses classiques s'avère l'usage d'intervalles de confiance

afin d'évaluer l'effet de l'estimation de la pente. La construction d'un intervalle de confiance autour d'une estimation est similaire à celle autour d'une moyenne d'un échantillon. On calculera l'intervalle de confiance à $1 - \alpha \%$ comme suit :

IC à $1 - \alpha \%$:

$$P(\beta_x - t_{\alpha/2, \text{degrés de liberté résiduels}} \cdot SE_{\beta_x} \leq \mu \leq \beta_x + t_{\alpha/2, \text{degrés de liberté résiduels}} \cdot SE_{\beta_x}) = (1 - \alpha)$$

où β_x représente l'estimation de la pente, SE_{β_x} donne la précision de cette estimation et $t_{\alpha/2, \text{degrés de liberté résiduels}}$ correspond à la statistique du t de Student associée à la portion $\alpha/2 \%$ de la courbe et aux degrés de libertés résiduels. Ainsi, si l'intervalle de confiance exclut 0, nous déclarerons que l'estimation du coefficient diffère de 0. En poursuivant l'exemple de régression linéaire sur les données de croissance des ailes de bruants, nous obtenons un intervalle de confiance à 95 % autour de la pente de $[0.12, 0.27]$ et nous concluons que l'estimation diffère de 0.

```
> ##extraction de pente
> pente <- coef(m1)[2]
> ##extraction de SE de pente
> ##à partir de la matrice de
> ##variance-covariance
> SE.pente <- sqrt(diag(vcov(m1)))[2]
> ##df résiduels
> df.res <- m1$df.residual
> ##limites de IC
> inf95 <- pente + qt(p = 0.025, df = df.res) * SE.pente
> sup95 <- pente - qt(p = 0.025, df = df.res) * SE.pente
> ##IC
> c(inf95, sup95)
```

Age	Age
0.1230712	0.2670051

2.6 Évaluer le pouvoir prédictif

Le **coefficient de détermination** ou R^2 est une mesure de la force de la régression. Elle indique si les observations sont près de la droite de régression. Le coefficient de détermination peut prendre des valeurs entre 0 (la régression n'explique aucune partie de la variance de y) et 1 (la régression explique complètement la variance de y). En multipliant le coefficient de détermination par 100, on peut l'interpréter comme un pourcentage de variance de la variable réponse (y) expliquée par la variable explicative (x). Le coefficient de détermination peut se calculer :

$$R^2 = \frac{SSReg}{SSY}$$

où $SSReg$ correspond à la somme des carrés de la régression et SSY correspond à la somme des carrés totale de y . Le R^2 donne la fraction de la variance totale de y expliquée par la régression. Pour l'exemple sur la longueur des ailes de bruants, nous obtenons $R^2 = \frac{9.97}{13.05} = 0.76$. Nous pourrions conclure que 76 % de la variabilité de y est expliquée par la régression, ce qui est très élevé. Avec certains jeux de données en sciences de l'environnement, nous nous réjouissons souvent d'avoir un R^2 de 0.30.

Bien que les tests d'hypothèses puissent être informatifs, il faut être conscient que dans certains cas, le rejet d'une hypothèse nulle n'entraîne pas nécessairement un résultat significatif du point de vue pratique (biologique). Avec un nombre d'observations suffisamment élevé, on peut rejeter pratiquement n'importe quelle hypothèse nulle statistique. C'est pourquoi l'utilisation de mesures de précision autour de la pente, telles que l'erreur-type ou l'intervalle de confiance, permettent de nous aider à évaluer la relation. Le coefficient de détermination aide à conclure sur la force de la relation et de la distance des points par rapport à la droite de régression – même avec un $P < 0.0001$, il est possible d'avoir un R^2 très près de 0. Le cas

échéant, nous modulerons notre interprétation des résultats.

2.7 Prédiction

Un des objectifs de la régression linéaire est souvent de faire des prédictions. Pour ce faire, nous pouvons utiliser l'équation de régression et substituer la valeur de x pour laquelle nous désirons une valeur prédite. Dans l'exemple de longueur d'ailes, l'équation de droite de régression est :

$$\hat{y}_i = \beta_0 + \beta_x x_i$$

$$\hat{y}_i = 1.48 + 0.2 \cdot Age_i$$

Il est possible de faire des prédictions à l'intérieur de l'étendue des valeurs de la variable explicative. Ici, l'âge en jours varie de 3 à 17 jours. Il est fortement déconseillé de tenter de prédire des valeurs de y à l'extérieur de cet intervalle, car on ne peut savoir si la relation est la même au-delà de cet intervalle. En d'autres mots, on ne peut pas prédire la longueur des ailes pour des oisillons plus jeune que 3 jours ou plus vieux que 17 jours. Si nous voulons obtenir la longueur d'ailes d'un oisillon de 13 jours, nous n'avons qu'à substituer cette valeur dans l'équation qui donnera :

$$\hat{y}_i = 1.48 + 0.2 \cdot 13$$

$$\hat{y}_i = 4.02$$

Nous concluons qu'un oisillon âgé de 13 jours aura une aile de 4.02 cm. Cette réponse est seulement partielle pour l'instant. Bien que nous ayons une valeur prédite, cette valeur est difficile à interpréter sans mesure de précision. N'importe quel modèle peut nous produire une valeur prédite, mais les bons modèles fourniront des prédictions avec une bonne précision. On peut calculer l'erreur-type de la prédiction avec l'algèbre matricielle, mais la fonction

`predict()` dans **R** permet d'extraire ces valeurs facilement. Par la suite, on peut calculer un intervalle de confiance autour de la valeur prédite selon la méthode habituelle :

IC à $(1 - \alpha) \%$:

$$P(\hat{y}_i - t_{\alpha/2, \text{degrés de liberté résiduels}} \cdot SE_{\hat{y}_i} \leq \mu \leq \hat{y}_i + t_{\alpha/2, \text{degrés de liberté résiduels}} \cdot SE_{\hat{y}_i} = (1 - \alpha)$$

où \hat{y}_i représente l'estimation de la valeur prédite par l'équation de régression, $SE_{\hat{y}_i}$ donne la précision de cette estimation et $t_{\alpha/2, \text{degrés de liberté résiduels}}$ correspond à la statistique du t de Student associée à la portion $(\alpha * 100)/2 \%$ de la courbe et degrés de libertés résiduels. Afin d'utiliser `predict()`, il faut fournir à l'argument `newdata` un jeu de données à partir duquel on fera les prédictions :

```
> ##jeu de données à partir duquel on fait des prédictions
> jeu.pred <- data.frame(Age = 13)
> ##on effectue la prédiction avec SE
> pred <- predict(m1, newdata = jeu.pred, se.fit = TRUE)
> ##on calcule IC à 95 %
> inf95 <- pred$fit +
      qt(p = 0.025, df = m1$df.residual) * pred$se.fit
> sup95 <- pred$fit -
      qt(p = 0.025, df = m1$df.residual) * pred$se.fit
> c(inf95, sup95)
      1      1
3.627303 4.404464
```

Nous concluons qu'un oisillon âgé de 13 jours aura une aile de 4.02 cm avec un intervalle de confiance à 95 % : (3.63, 4.4).

On peut utiliser la même stratégie afin d'ajouter des intervalles de confiance autour de la droite de régression (fig. 6).


```

> par(cex = 1.2)

> ##jeu de données à partir duquel on fait des prédictions
> jeu.pred <- data.frame(Age = seq(from = min(bruants$Age),
                                     to = max(bruants$Age),
                                     by = 1))

> ##on effectue la prédiction avec SE
> pred <- predict(m1, newdata = jeu.pred, se.fit = TRUE)

> ##ajout à jeu.pred
> jeu.pred$fit <- pred$fit
> jeu.pred$se.fit <- pred$se.fit
> ##on calcule IC à 95 %
> jeu.pred$inf95 <- jeu.pred$fit +
    qt(p = 0.025, df = m1$df.residual) * jeu.pred$se.fit
> jeu.pred$sup95 <- jeu.pred$fit -
    qt(p = 0.025, df = m1$df.residual) * jeu.pred$se.fit
> ##graphique avec points originaux
> plot(bruants$Longueur ~ bruants$Age,
       ylab = "Longueur d'aile (cm)", xlab = "Âge (jours)",
       ylim = c(min(jeu.pred$inf95), max(jeu.pred$sup95)),
       col = "blue")

> ##ajoute droite
> lines(y = jeu.pred$fit, x = jeu.pred$Age)

> ##ajoute limites de confiance
> lines(y = jeu.pred$inf95, x = jeu.pred$Age, lty = "dotted")
> lines(y = jeu.pred$sup95, x = jeu.pred$Age, lty = "dotted")

```

Dans le reste du document, nous développons un autre exemple complet de régression linéaire afin d'appliquer les notions que nous avons apprises.

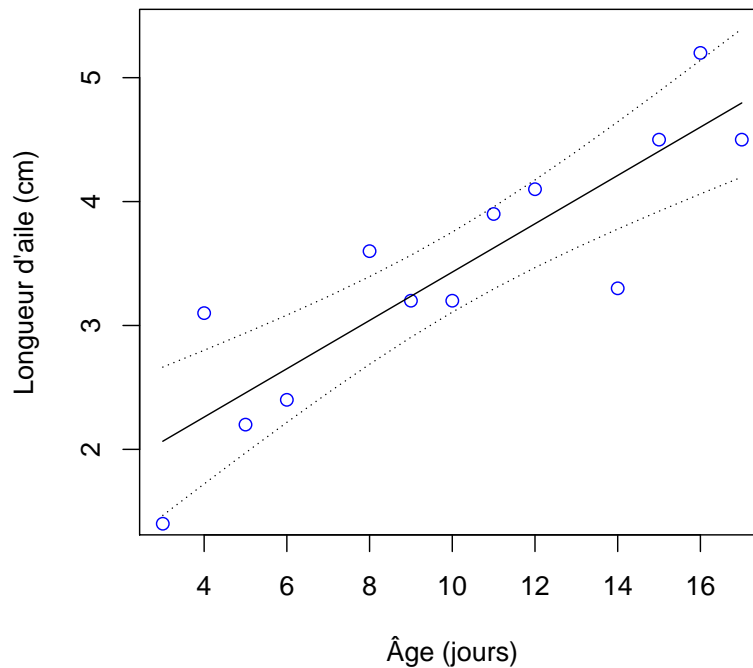


FIGURE 6 – Droite de régression avec limites de confiance à 95 % en pointillés et valeurs observées.

Exemple 11.4 Nous voulons déterminer si le prix de tablettes de chocolat (en dollars australiens) dépend de la masse en grammes de la tablette de chocolat. Une série de différentes tablettes de chocolat, toutes de différentes marques, ont été sélectionnées. Le fichier `chocolats.txt` contient ces données.

```
> ##importation
> chocs <- read.table("chocolats.txt", header = TRUE)
> head(chocs)
```

	Masse	Prix
Dark.Bounty	50	0.88
Bounty	50	0.88

Milo.Bar	40	1.15
Viking	80	1.54
KitKat.White	45	1.15
KitKat.Chunky	78	1.40

```

> ##graphique des données
> par(cex = 1.2)
> plot(chocs$Prix ~ chocs$Masse, ylab = "Prix (dollars australiens)",
      xlab = "Masse (g)")

```

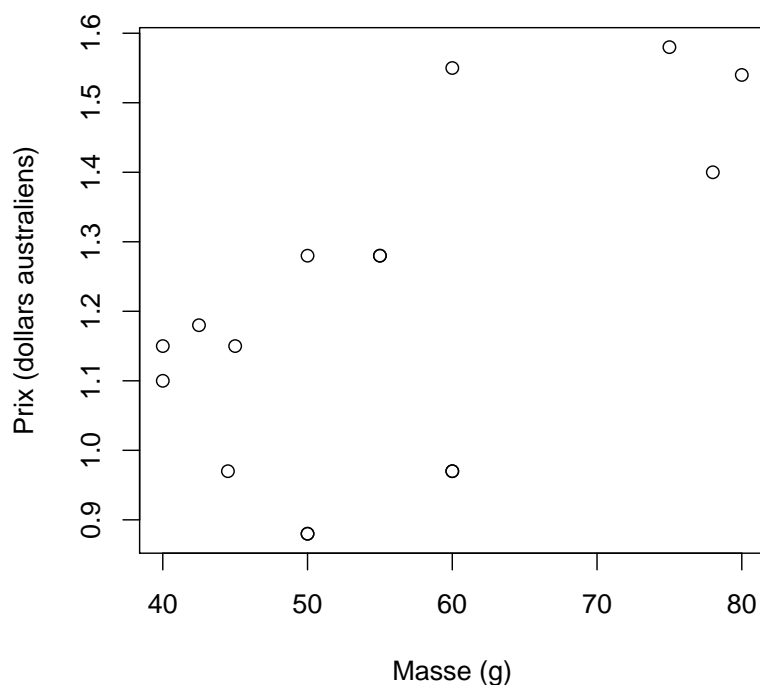


FIGURE 7 – Graphique du prix de tablettes de chocolat australiennes en fonction de leur prix.

Nous voyons qu'une relation linéaire entre ces deux variables est plausible (fig. 7).

Nous pouvons essayer d'ajuster la régression linéaire aux données.

```

> m.chocs <- lm(Prix ~ Masse, data = chocs)
> ##vérifications des suppositions
> par(mfrow = c(1, 2), cex = 1.2)
> plot(rstudent(m.chocs) ~ fitted(m.chocs),
       ylab = "Résidus de Student",
       xlab = "Valeurs prédites",
       main = "Homogénéité des variances")
> text(y = 1.5, x = 1.025, labels = "a")
> qqnorm(rstudent(m.chocs), ylab = "Quantiles observés",
        xlab = "Quantiles observés",
        main = "Normalité des résidus")
> qqline(rstudent(m.chocs))
> text(y = 1.5, x = -1.9, labels = "b")

```

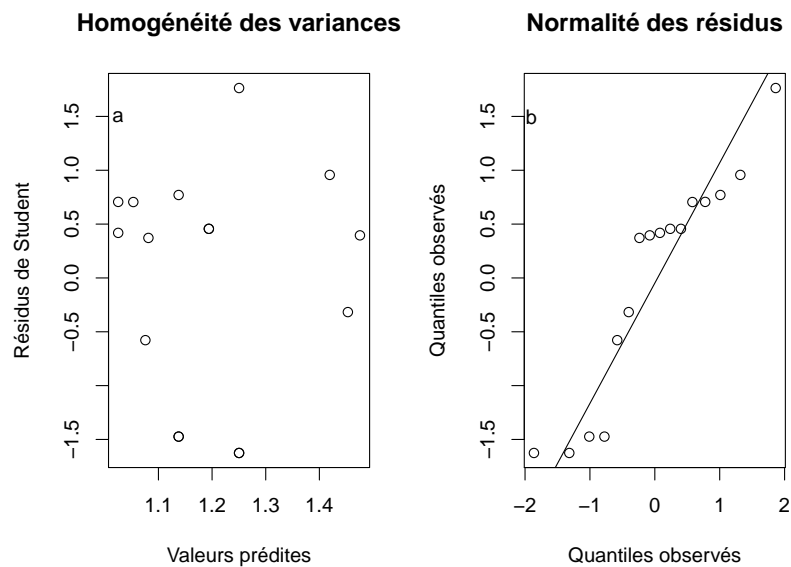


FIGURE 8 – Diagnostics des suppositions d’homogénéité des variances (a) et de normalité des résidus (b).

Les graphiques diagnostiques montrent que les variances sont sensiblement ho-

mogènes et que les résidus suivent approximativement une distribution normale (fig. 8). Puisque nous avons utilisé les résidus de Student, nous avons pu confirmer du même coup l'absence de valeurs extrêmes dans la fig. 8a).

La fonction `summary()` indique :

```
> summary(m.chocs)

Call:
lm(formula = Prix ~ Masse, data = chocs)

Residuals:
    Min       1Q   Median       3Q      Max
-0.28031 -0.14368  0.07184  0.12546  0.29969

Coefficients:
            Estimate Std. Error t value Pr(>|t|)
(Intercept)  0.574368   0.213738   2.687  0.01769 *
Masse        0.011266   0.003768   2.989  0.00975 **
---
Signif. codes:
  0 '***' 0.001 '**' 0.01 '*' 0.05 '.' 0.1 ' ' 1
```

```
Residual standard error: 0.1891 on 14 degrees of freedom
Multiple R-squared:  0.3896,    Adjusted R-squared:  0.346
F-statistic: 8.937 on 1 and 14 DF,  p-value: 0.009753
```

Nous concluons que la masse augmente significativement le prix de tablettes de chocolat en Australie avec une pente de 0.01 et un intervalle de confiance à 95 % de (0, 0.02). La masse explique 39 % de la variance du prix, ce qui est satisfaisant

avec ce type de données. Nous pouvons présenter la droite de régression avec un intervalle de confiance à 95 % (fig. 9).

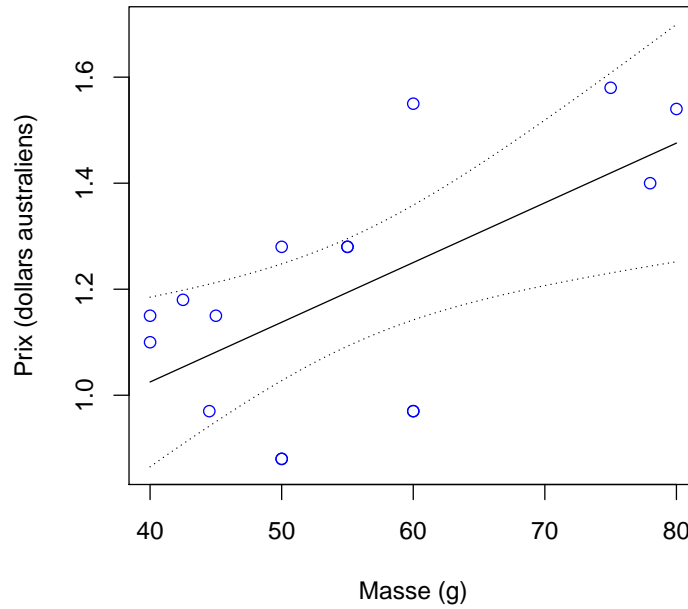


FIGURE 9 – Droite de régression et limites de confiance à 95 % (pointillés) à partir de l’analyse du prix en fonction de la masse de tablettes de chocolat australiennes et valeurs observées.

3 Corrélation

La **corrélation** est une relation d’association entre deux variables. Contrairement à la régression, il n’y a aucune allusion à une relation de cause à effet avec la corrélation. En d’autres mots, on ne distingue pas entre variable dépendante (y) et indépendante (x) – les deux variables varient en même temps et une troisième variable peut potentiellement agir sur les deux. Pour distinguer entre la régression et la corrélation, considérons un exemple où

on veut expliquer le nombre moyen de verres cassés par jour dans des restaurants d’une ville selon le nombre de clients. Si le nombre de clients influence le nombre de verres cassés, nous aurons un cas de régression linéaire. À l’opposé, si on mesure le nombre moyen de verres cassé par jour dans des restaurants d’une ville et la température moyenne dans un lac à 1 m de profondeur, la relation entre les deux variables serait plutôt une corrélation.

3.1 Corrélation de Pearson

Le **coefficient de corrélation de Pearson** (*Pearson’s product-moment correlation coefficient*) nous donne la corrélation entre deux variables³ :

$$r = \frac{SSXY}{\sqrt{SSX \cdot SSY}}$$

où $SSXY$, SSX et SSY sont les mêmes termes que l’on calcule dans la régression. La figure 10 présente différents degrés de corrélation positive, alors que la figure 11 illustre des corrélations négatives.

Dans **R**, on peut obtenir la corrélation de Pearson entre deux variables à l’aide de la fonction `cor()`. Nous pouvons aussi effectuer un test d’hypothèse sur le coefficient de corrélation, à savoir s’il diffère de 0 ($H_0 : \rho = 0$) avec la fonction `cor.test()`. Néanmoins, il faut demeurer vigilant car une valeur de P faible n’est pas une garantie que la corrélation est forte. Une meilleure mesure s’avère le r^2 (c.-à-d., le coefficient de Pearson au carré) et est en fait le coefficient de détermination. Dans le cas d’une corrélation, il indique le pourcentage de la variation d’une variable qui est associée à la deuxième variable.

Exemple 11.5 Dans ce petit exemple, nous montrons le coefficient de corrélation entre deux variables aléatoires ainsi que le test d’hypothèse sur ce coefficient.

3. Il existe aussi des analogues non-paramétriques de la corrélation, tels que la corrélation de Spearman ou de Kendall.

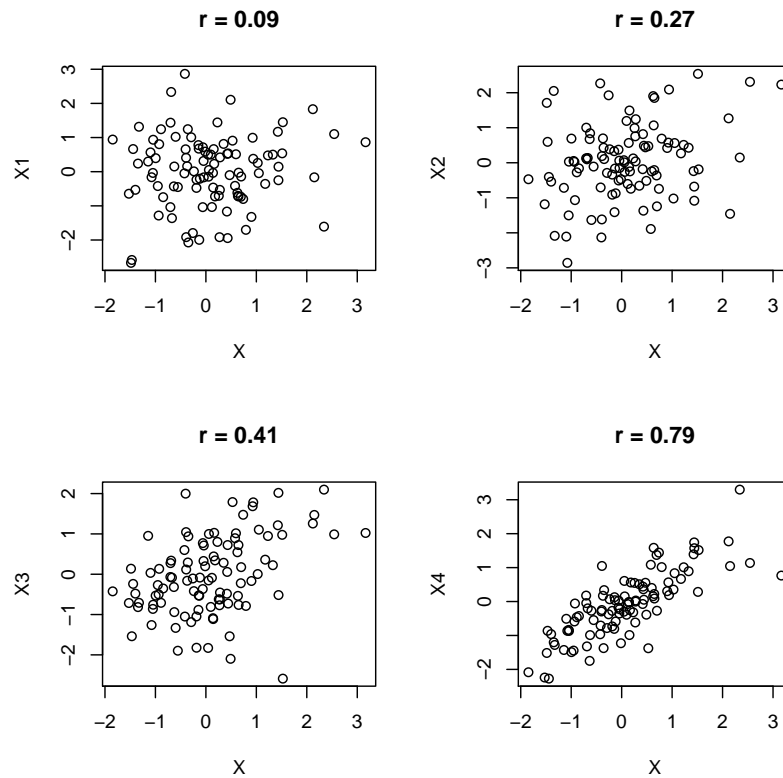


FIGURE 10 – Différents degrés de corrélation positive ($r > 0$) entre deux variables.

```
> ##on crée deux variables aléatoires
> set.seed(seed = 10)
> x1 <- rnorm(1000)
> set.seed(seed = 11)
> x2 <- rnorm(1000)
> ##corrélation
> cor(x1, x2)

[1] -0.0710729

> ##test d'hypothèse
> cor.test(x1, x2)

Pearson's product-moment correlation
```

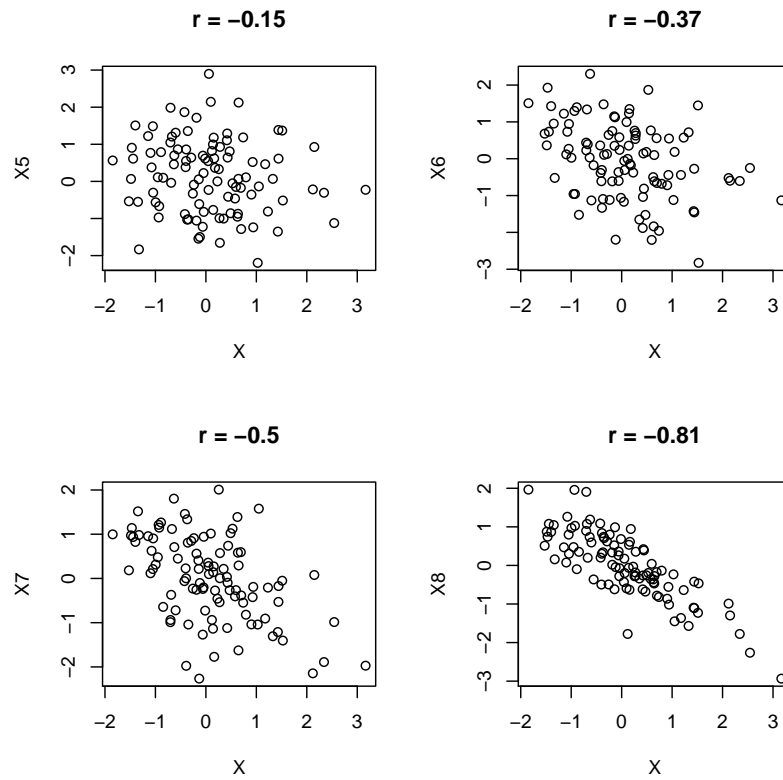



FIGURE 11 – Différents degrés de corrélation négative ($r < 0$) entre deux variables.

```
data:  x1 and x2
t = -2.251, df = 998, p-value = 0.0246
alternative hypothesis: true correlation is not equal to 0
95 percent confidence interval:
 -0.132482263 -0.009120001
sample estimates:
      cor
-0.0710729
> ##r^2
> cor(x1, x2)^2
```

[1] 0.005051357

Chaque variable comporte 1000 valeurs et la corrélation de Pearson donne -0.07. Malgré cette faible corrélation, le test d'hypothèse rejette l'hypothèse nulle principalement en raison de l'énorme taille d'échantillon. Le r^2 est aussi très faible (0.005), indiquant que seulement 0.5% de la variabilité de x_1 est associée à x_2 . Nous concluons que la corrélation est très faible et qu'à toute fin pratique, il n'y a pas d'association entre les deux variables (pas d'effet pratique).

4 Corrélation vs régression

La régression est souvent utilisée pour des études d'observation. Dans de telles conditions, une relation de cause à effet peut difficilement être établie sans avoir contrôlé les autres variables ou avoir mesuré toutes les variables pertinentes. Il faut faire attention à l'interprétation et les résultats peuvent suggérer le besoin de réaliser des expériences plus formelles. Les mêmes conseils de plan d'échantillonnage de l'ANOVA s'appliquent à la régression (e.g., randomisation, sélection aléatoire des unités expérimentales, répartition spatiale). La corrélation est surtout utilisée pour déterminer l'association entre deux variables sans être une relation de cause à effet. La corrélation est utile surtout dans la phase de préanalyse pour déterminer les relations entre différentes variables explicatives.

Conclusion

Cette leçon a présenté la régression linéaire simple, les suppositions et conditions nécessaires à son application, l'interprétation et la présentation des résultats. Nous avons vu les tests d'hypothèses associés aux coefficients de la régression ainsi que l'utilisation d'intervalles de confiance comme mesure de précision autour des coefficients et des valeurs prédites.

Nous avons également présenté la corrélation linéaire et nous l'avons comparé à la régression linéaire simple.

Index

`fitted()`, [12](#)

`lm()`, [9](#)

`predict()`, [23](#)

`residuals()`, [12](#)

`rstudent()`, [16](#)

carré moyen des erreurs, [7](#)

coefficient, [3](#)

coefficient de corrélation de Pearson, [30](#)

coefficient de détermination, [21](#)

corrélation, [29](#)

corrélation vs régression, [33](#)

équation, [3](#)

estimation, [5](#)

méthode des moindres carrés, [5](#)

ordonnée à l'origine, [3](#)

pende, [3](#)

prédiction, [22](#)

régression, [2](#)

résidus de Student, [15](#)

suppositions, [13](#)

existence, [13](#)

homoscédasticité, [13](#)

indépendance, [13](#)

linéarité, [13](#)

mesure de x sans erreur, [13](#)

normalité, [13](#)

tests d'hypothèses, [17](#)

valeur extrême, [15](#)

variable dépendante, [2](#)

variable indépendante, [2](#)