

Chapitre I

Régression linéaire simple

Licence 3 MIASHS - Université de Bordeaux

Marie Chavent

1. Le modèle

On cherche à modéliser la relation entre **deux variables quantitatives continues**.
Un **modèle de régression linéaire simple** est de la forme suivante :

$$y = \beta_0 + \beta_1 x + \varepsilon \quad (1)$$

où :

- y est la **variable à expliquer** (à valeurs dans \mathbb{R});
- x est la **variable explicative** (à valeurs dans \mathbb{R});
- ε est le **terme d'erreur aléatoire** du modèle;
- β_0 et β_1 sont deux paramètres à estimer.

Commentaires :

- La désignation “**simple**” fait référence au fait qu’il n’y a qu’une seule variable explicative x pour expliquer y .
- La désignation “**linéaire**” correspond au fait que le modèle (1) est linéaire en β_0 et β_1 .

Pour n observations, on peut écrire le modèle de régression linéaire simple sous la forme :

$$y_i = \beta_0 + \beta_1 x_i + \varepsilon_i \quad (2)$$

Dans ce chapitre, on suppose que :

- ε_i est une variable *aléatoire*, non observée,
- x_i est observée et *non aléatoire*,
- y_i est observée et *aléatoire*.

On fait les trois **hypothèses additionnelles** suivantes :

(A1) $\mathbb{E}[\varepsilon_i] = 0, \forall i = 1, \dots, n,$

ou de manière équivalente :

$$\mathbb{E}[y_i] = \beta_0 + \beta_1 x_i, \forall i = 1, \dots, n.$$

Commentaire sur l'hypothèse (A1) : elle indique que **les erreurs sont centrées** ce qui implique que y_i dépend seulement de x_i et que les autres sources de variations de y_i sont aléatoires.

(A2) $\mathbb{V}(\varepsilon_i) = \sigma^2, \forall i = 1, \dots, n,$

ou de manière équivalente :

$$\mathbb{V}(y_i) = \sigma^2, \forall i = 1, \dots, n.$$

Commentaires sur l'hypothèse (A2) :

- On parle d'hypothèse d'**homoscédasticité** (\simeq homogénéité des variances).
- Cette variance est supposée **constante et indépendante de x_i** .
- Cette variance σ^2 est un **paramètre du modèle qu'il faudra estimer**.

(A3) $\text{Cov}(\varepsilon_i, \varepsilon_j) = 0, \forall i \neq j$

ou de manière équivalente :

$$\text{Cov}(y_i, y_j) = 0, \forall i \neq j.$$

Commentaire sur l'hypothèse (A3) :

- Sous cette hypothèse, **les termes d'erreur ε_i sont non corrélés** .
- Lorsque l'on rajoutera une **hypothèse de normalité** sur les ε_i , les erreurs ε_i seront alors **indépendantes**.

On peut écrire **matriciellement** le modèle (2) de la manière suivante :

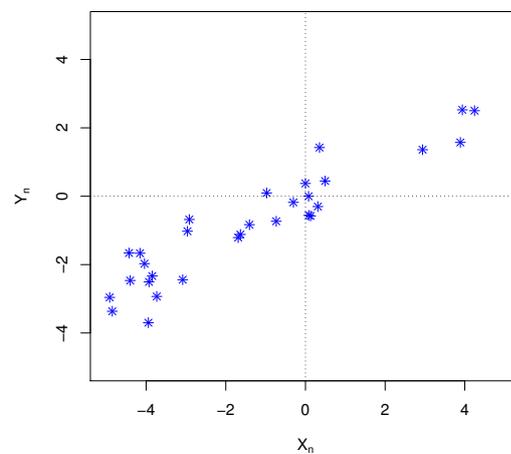
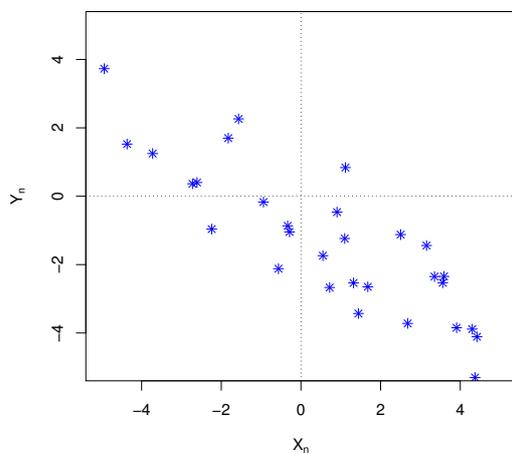
$$Y = X\beta + \varepsilon \quad (3)$$

où

$$Y = \begin{pmatrix} y_1 \\ y_2 \\ \vdots \\ y_n \end{pmatrix}, \quad X = \begin{pmatrix} 1 & x_1 \\ 1 & x_2 \\ \vdots & \vdots \\ 1 & x_n \end{pmatrix}, \quad \beta = \begin{pmatrix} \beta_0 \\ \beta_1 \end{pmatrix}, \quad \text{et} \quad \varepsilon = \begin{pmatrix} \varepsilon_1 \\ \varepsilon_2 \\ \vdots \\ \varepsilon_n \end{pmatrix}.$$

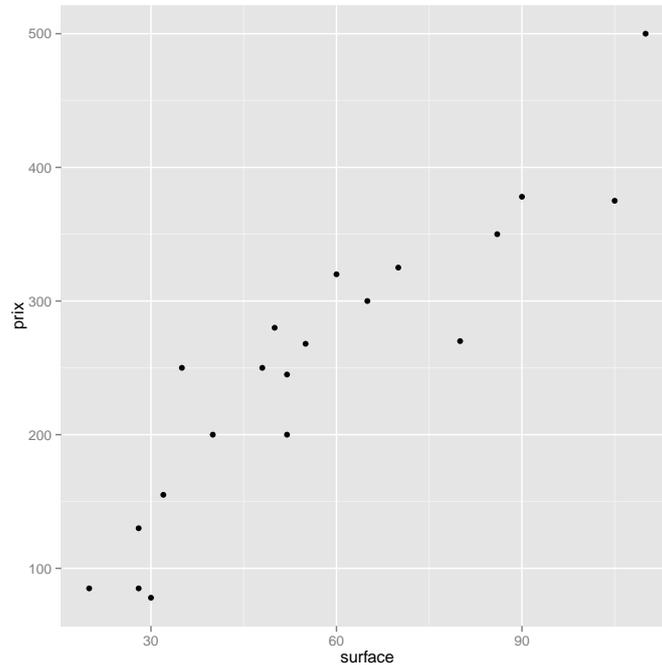
- Y désigne le vecteur à expliquer de taille $n \times 1$,
- X la matrice explicative de taille $n \times 2$,
- ε le vecteur d'erreurs de taille $n \times 1$.

Exemples de deux échantillons (x_1, \dots, x_n) et (y_1, \dots, y_n) **simulés** :



Exemple de données réelles (données sur des appartements Parisiens).

- y = prix en euros/1000,
- x = surface en m^2 .



2. Estimation des paramètres β_0 , β_1 et σ^2

A partir de l'échantillon (aléatoire) de n observations

$$\{(x_i, y_i), i = 1, \dots, n\},$$

on veut estimer les paramètres

$$\beta_0, \beta_1 \text{ et } \sigma^2.$$

- Pour estimer β_0 et β_1 , on peut utiliser la méthode des moindres carrés qui ne nécessite pas d'hypothèse supplémentaire sur la distribution de ε_i (ou de y_i), contrairement à la méthode du maximum de vraisemblance (que l'on peut aussi utiliser) qui est fondée sur la normalité de ε_i (ou de y_i).
- La méthode des moindres carrés ne fournit pas un estimateur de σ^2 .

Estimation de β_0 et β_1 par les moindres carrés

On cherche $\hat{\beta}_0$ et $\hat{\beta}_1$ qui minimisent la somme des carrés des résidus

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

où \hat{y}_i est valeur prédite par le modèle (2) lorsque $x = x_i$:

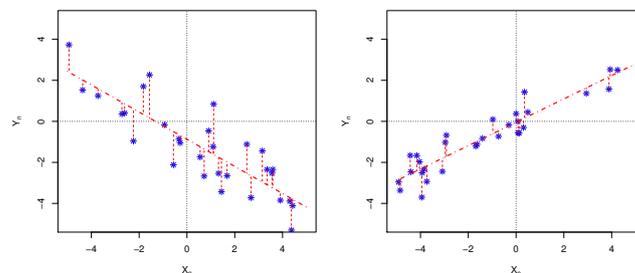
$$\hat{y}_i = \hat{\beta}_0 + \hat{\beta}_1 x_i$$

On doit donc résoudre le problème d'optimisation suivant :

$$(\hat{\beta}_0, \hat{\beta}_1) = \text{Arg} \min_{(\beta_0, \beta_1) \in \mathbb{R}^2} \sum_{i=1}^n [y_i - (\beta_0 + \beta_1 x_i)]^2. \quad (4)$$

Interprétation graphique

Graphiquement, $\hat{\beta}_0$ et $\hat{\beta}_1$ sont construits pour minimiser les distances verticales entre les observations (y_n) et la droite de régression théorique $y = \beta_0 + \beta_1 x$. Nous avons représenté ces distances sur les figures ci-dessous.



La droite d'équation $y = \hat{\beta}_0 + \hat{\beta}_1 x$ est la droite de régression estimée sur le nuage de points

Résolution du problème d'optimisation

Le problème d'optimisation est :

$$\min_{(\beta_0, \beta_1)} F(\beta_0, \beta_1),$$

$$\text{avec } F(\beta_0, \beta_1) = \sum_{i=1}^n \{y_i - (\beta_0 + \beta_1 x_i)\}^2.$$

Le minimum est atteint pour

$$\begin{cases} \frac{\partial F(\beta_0, \beta_1)}{\partial \beta_0} \Big|_{\beta_0 = \hat{\beta}_0, \beta_1 = \hat{\beta}_1} = 0, \\ \frac{\partial F(\beta_0, \beta_1)}{\partial \beta_1} \Big|_{\beta_0 = \hat{\beta}_0, \beta_1 = \hat{\beta}_1} = 0, \end{cases}$$

soit après quelques calculs :

$$\begin{cases} -2 \sum_{i=1}^n (y_i - \hat{\beta}_0 - \hat{\beta}_1 x_i) = 0, \\ -2 \sum_{i=1}^n (y_i - \hat{\beta}_0 - \hat{\beta}_1 x_i) x_i = 0. \end{cases}$$

Solution du problème d'optimisation

On en déduit après quelques manipulations :

$$\begin{cases} \hat{\beta}_1 = \frac{\frac{1}{n} \sum_{i=1}^n (x_i - \bar{x}_n)(y_i - \bar{y}_n)}{\frac{1}{n} \sum_{i=1}^n (x_i - \bar{x}_n)^2} = \frac{c_{x,y}}{s_x^2}, \\ \hat{\beta}_0 = \bar{y}_n - \hat{\beta}_1 \bar{x}_n. \end{cases}$$

où $c_{x,y}$ est la covariance empirique entre les x_i et les y_i et s_x^2 est la variance empirique des x_i .

Commentaires

- Le minimum de F est égal à $\sum_{i=1}^n \hat{\varepsilon}_i^2$. Ce minimum est appelé la **somme des carrés des résidus** (SCR).
- La valeur prédite \hat{y}_i estime $\mathbb{E}[y_i] = \beta_0 + \beta_1 x_i$ et non pas y_i . Une meilleure notation serait $\mathbb{E}[\hat{y}_i]$.
- Aucune des hypothèses (A1), (A2) et (A3) n'a été utilisée ici pour obtenir les estimateurs $\hat{\beta}_0$ et $\hat{\beta}_1$.

Propriétés des estimateurs $\hat{\beta}_0$ et $\hat{\beta}_1$

Sous les hypothèses (A1), (A2) et (A3), on peut montrer que

- $\mathbb{E}[\hat{\beta}_0] = \beta_0$,
- $\mathbb{E}[\hat{\beta}_1] = \beta_1$,
- $\mathbb{V}(\hat{\beta}_0) = \sigma^2 \left(\frac{1}{n} + \frac{(\bar{x}_n)^2}{\sum_{i=1}^n (x_i - \bar{x}_n)^2} \right)$,
- $\mathbb{V}(\hat{\beta}_1) = \frac{\sigma^2}{\sum_{i=1}^n (x_i - \bar{x}_n)^2}$.

Commentaires

- Les estimateurs $\hat{\beta}_0$ et $\hat{\beta}_1$ sont **sans biais**.
- Ils sont aussi **de variance minimale** parmi tous les estimateurs linéaires (par rapport à y_1, \dots, y_n) sans biais (propriété dite de Gauss-Markov).

Estimation de σ^2

Le paramètre σ^2 est défini par

$$\sigma^2 = \mathbb{V}(\varepsilon_i) = \mathbb{V}(y_i) = \mathbb{E}[(y_i - \mathbb{E}[y_i])^2].$$

En prenant $\hat{y}_i = \hat{\beta}_0 + \hat{\beta}_1 x_i$ comme estimateur de $\mathbb{E}[y_i]$, il apparaît naturel d'**estimer** σ^2 par

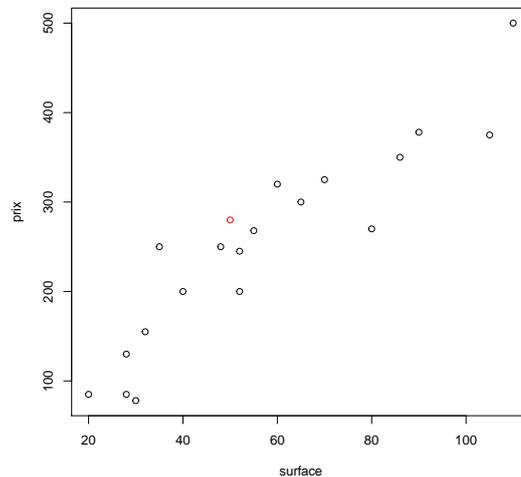
$$s^2 = \frac{\sum_{i=1}^n (y_i - \hat{y}_i)^2}{n-2} = \frac{\sum_{i=1}^n (\hat{\varepsilon}_i)^2}{n-2} = \frac{SCR}{n-2}.$$

Commentaires

- s^2 est un estimateur **sans biais** de σ^2
- La perte de deux degrés de liberté dans l'expression de s^2 est le "coût" de l'estimation de β_0 et de β_1 nécessaire pour obtenir les \hat{y}_i .

Exemple de données réelles : les appartements Parisiens.

```
##   prix surface
## 1  130      28
## 2  280      50
## 3  268      55
## 4  500     110
## 5  320      60
## 6  250      48
```



Navigation icons: back, forward, search, etc.

Sorties R

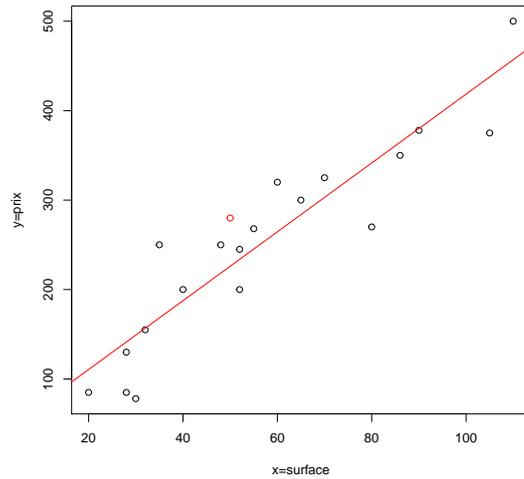
```
mod <- lm(y ~ x) #fonction linear model
names(mod)

## [1] "coefficients" "residuals" "effects" "rank" "fitted.values" "assign"
## [7] "qr" "df.residual" "xlevels" "call" "terms" "model"

summary(mod)

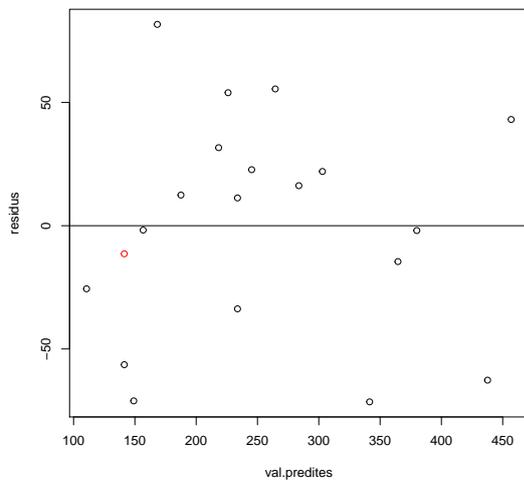
##
## Call:
## lm(formula = y ~ x)
##
## Residuals:
## Min 1Q Median 3Q Max
## -71.47 -27.63 4.75 24.96 81.68
##
## Coefficients:
## Estimate Std. Error t value Pr(>|t|)
## (Intercept) 33.644 24.445 1.38 0.19
## x 3.848 0.392 9.81 1.2e-08 ***
## ---
## Signif. codes: 0 '***' 0.001 '**' 0.01 '*' 0.05 '.' 0.1 ' ' 1
##
## Residual standard error: 45 on 18 degrees of freedom
## Multiple R-squared: 0.842, Adjusted R-squared: 0.834
## F-statistic: 96.3 on 1 and 18 DF, p-value: 1.2e-08
```

Navigation icons: back, forward, search, etc.

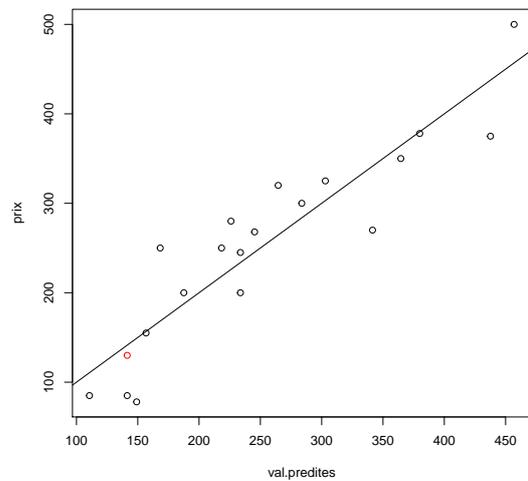


##	y	val.predites	residus
## 1	130	141	-11
## 2	280	226	54
## 3	268	245	23
## 4	500	457	43
## 5	320	265	55

Graphique croisant les valeurs prédites \hat{y}_i et les résidus $\hat{\epsilon}_i = y_i - \hat{y}_i$



Graphique croisant les valeurs prédites \hat{y}_i et les valeurs observées y_i



Typiquement, les hypothèses portant sur β_1 ont plus d'intérêt que celles portant sur β_0 . On va donc se limiter à tester la nullité de la pente β_1 (**absence de liaison linéaire entre x et y**) :

$$\mathcal{H}_0 : \beta_1 = 0 \quad \text{contre} \quad \mathcal{H}_1 : \beta_1 \neq 0$$

Pour faire ce test, il est nécessaire de faire une **hypothèse supplémentaire** :

$$(A4) \quad \varepsilon_i \sim \mathcal{N}(0, \sigma^2)$$

ou de manière équivalente

$$y_i \sim \mathcal{N}(\beta_0 + \beta_1 x_i, \sigma^2).$$

Commentaire. L'unique "nouveau" ici est la **normalité**.

Nouvelles propriétés pour les estimateurs $\hat{\beta}_1$ et s^2

Sous les hypothèses (A1)-(A4), on a :

$$(a) \quad \hat{\beta}_1 \sim \mathcal{N}\left(\beta_1, \frac{\sigma^2}{\sum_{i=1}^n (x_i - \bar{x}_n)^2}\right);$$

$$(b) \quad \frac{(n-2)s^2}{\sigma^2} \sim \chi^2(n-2);$$

$$(c) \quad \hat{\beta}_1 \text{ et } s^2 \text{ sont indépendants.}$$

Commentaires. La propriété (a) est facile à établir. Les propriétés (b) et (c) seront démontrées ultérieurement.

Un rappel de probabilité

Si $U \sim \mathcal{N}(0, 1)$, $V \sim \chi^2(\nu)$ et U est indépendant de V , alors $\frac{U}{\sqrt{\frac{V}{\nu}}} \sim T(\nu)$.

On déduit alors des propriétés (a)-(c) que

$$\frac{\frac{\hat{\beta}_1 - \beta_1}{\sqrt{\frac{\sigma^2}{\sum_{i=1}^n (x_i - \bar{x}_n)^2}}}}{\sqrt{\frac{(n-2)s^2}{\sigma^2}}}}{n-2} = \frac{\hat{\beta}_1 - \beta_1}{s/\sqrt{\sum_{i=1}^n (x_i - \bar{x}_n)^2}} \sim T(n-2).$$

Commentaire. On peut remarquer que le dénominateur $s/\sqrt{\sum_{i=1}^n (x_i - \bar{x}_n)^2}$ est un estimateur de $\sqrt{\text{V}(\hat{\beta}_1)}$, l'écart-type de $\hat{\beta}_1$.

On utilisera la **statistique** suivante :

$$T_n = \frac{\hat{\beta}_1 - \beta_1}{s/\sqrt{\sum_{i=1}^n (x_i - \bar{x}_n)^2}},$$

qui est distribuée selon **une loi de Student** à $n - 2$ degrés de libertés.

Test de \mathcal{H}_0 contre \mathcal{H}_1

Sous l'hypothèse $\mathcal{H}_0 : \beta_1 = 0$, on a

$$T_n = \frac{\hat{\beta}_1}{s/\sqrt{\sum_{i=1}^n (x_i - \bar{x}_n)^2}} \sim T(n-2). \quad (5)$$

Pour une hypothèse alternative $\mathcal{H}_1 : \beta_1 \neq 0$ bilatérale, on **rejette** \mathcal{H}_0 avec un risque $0 \leq \alpha \leq 1$ si

$$|t| \geq t_{n-2, 1-\alpha/2}$$

où t est la réalisation de T_n et $t_{n-2, 1-\alpha/2}$ est le fractile d'ordre $1 - \alpha/2$ de la loi $T(n-2)$.

Commentaire. Pour réaliser ce test, on peut également regarder la **p-valeur** aussi appelée niveau de signification du test : si **p-valeur** $\leq \alpha$, on rejette \mathcal{H}_0 . Dans le cas d'un test bilatéral ($\mathcal{H}_1 : \beta_1 \neq 0$), on a :

$$\text{p-valeur} = \mathbb{P}(|T_n| > |t| / \mathcal{H}_0). \quad (6)$$

On **rejette** \mathcal{H}_0 si **p-valeur** $\leq \alpha$

Intervalle de confiance pour β_1 au niveau de confiance $1 - \alpha$:

L'intervalle de confiance de β_1 est :

$$\left[\hat{\beta}_1 \pm t_{n-2, 1-\alpha/2} \frac{s}{\sqrt{\sum_{i=1}^n (x_i - \bar{x}_n)^2}} \right].$$

Commentaire. On rejette \mathcal{H}_0 si 0 n'appartient pas à cet intervalle.

Exemple des données appartements.

```
summary(mod)$coefficients
```

```
##           Estimate Std. Error t value Pr(>|t|)
## (Intercept)    33.6      24.44     1.4  1.9e-01
## x              3.8       0.39     9.8  1.2e-08
```

```
confint(mod)
```

```
##           2.5 % 97.5 %
## (Intercept)   -18  85.0
## x              3   4.7
```

Table d'analyse de la variance (ANOVA) : On complète souvent l'étude en construisant la table d'ANOVA.

Source de variation	Somme des carrés	ddl	carré moyen	F
régression (expliquée)	$SCE = \sum_{i=1}^n (\hat{y}_i - \bar{y}_n)^2$	1	$\sum_{i=1}^n (\hat{y}_i - \bar{y}_n)^2$	$\frac{SCE}{SCR/(n-2)}$
Résiduelle	$SCR = \sum_{i=1}^n (y_i - \hat{y}_i)^2$	n-2	$\frac{1}{n-2} \sum_{i=1}^n (y_i - \hat{y}_i)^2$	
Totale	$SCT = \sum_{i=1}^n (y_i - \bar{y}_n)^2$	n-1	$\frac{1}{n-1} \sum_{i=1}^n (y_i - \bar{y}_n)^2$	

Commentaire. La statistique F , dite **statistique de Fisher**, permet de tester $\mathcal{H}_0 : \beta_1 = 0$ contre $\mathcal{H}_1 : \beta_1 \neq 0$.

On rejette \mathcal{H}_0 si

$$F > f_{1, n-2, 1-\alpha}$$

où $f_{1, n-2, 1-\alpha}$ est le fractile d'ordre $1 - \alpha$ d'une loi $F(1, n - 2)$.

On désire **prévoir** à l'aide du modèle la valeur de la variable y **pour une valeur non observé** x_0 de x .

D'après le modèle on a $y_0 = \beta_0 + \beta_1 x_0 + \varepsilon_0$, où y_0 et ε_0 sont des variables aléatoires. La prédiction naturelle est alors :

$$\hat{y}_0 = \mathbb{E}[\hat{y}_0] = \hat{\beta}_0 + \hat{\beta}_1 x_0.$$

L'erreur de prédiction est définie par $\hat{y}_0 - y_0$ et on peut montrer que sous les hypothèses du modèle (incluant l'hypothèse de normalité), on a :

$$\hat{y}_0 - y_0 \sim \mathcal{N}\left(0, \sigma^2 \left(1 + \frac{1}{n} + \frac{(x_0 - \bar{x}_n)^2}{\sum_{i=1}^n (x_i - \bar{x}_n)^2}\right)\right). \quad (7)$$

On en déduit que :

$$\frac{y_0 - \hat{y}_0}{\sigma \sqrt{1 + \frac{1}{n} + \frac{(x_0 - \bar{x}_n)^2}{\sum_{i=1}^n (x_i - \bar{x}_n)^2}}} \sim \mathcal{N}(0, 1).$$

On peut montrer que :

$$\frac{y_0 - \hat{y}_0}{s \sqrt{1 + \frac{1}{n} + \frac{(x_0 - \bar{x}_n)^2}{\sum_{i=1}^n (x_i - \bar{x}_n)^2}}} \sim T(n - 2).$$

On utilise ce résultat pour construire un **intervalle de prédiction** pour y_0 , c'est à dire l'intervalle $[A, B]$ tel que

$$\mathbb{P}(A \leq y_0 \leq B) = 1 - \alpha.$$

Ici, y_0 est une variable aléatoire et non pas un paramètre. L'intervalle de prédiction est donc un **intervalle dans lequel une future observation y_0 va tomber avec une certaine probabilité** (différent d'un intervalle de confiance).

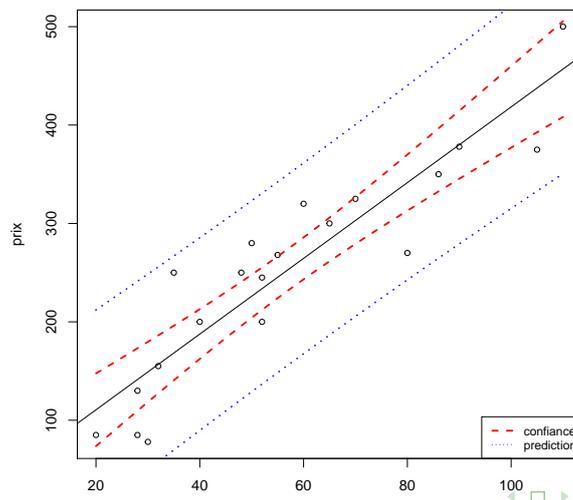
Exemple des données appartements.

```
x0 <- 50
predict(mod,data.frame(x=x0),interval="prediction")

## fit lwr upr
## 1 226 129 323

predict(mod,data.frame(x=x0),interval="confidence")

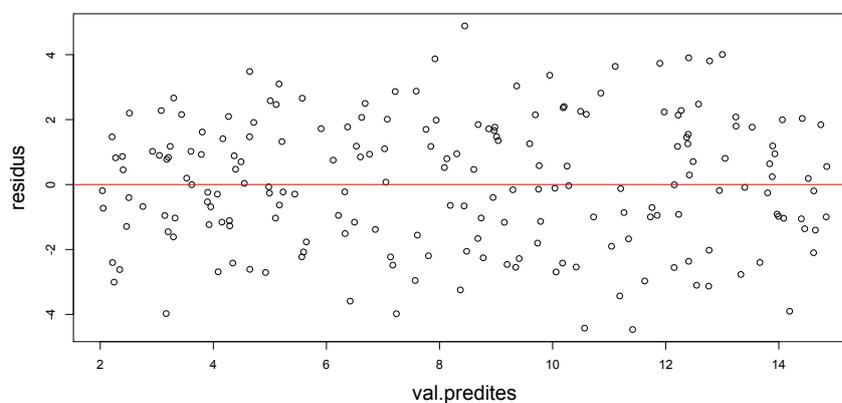
## fit lwr upr
## 1 226 204 248
```



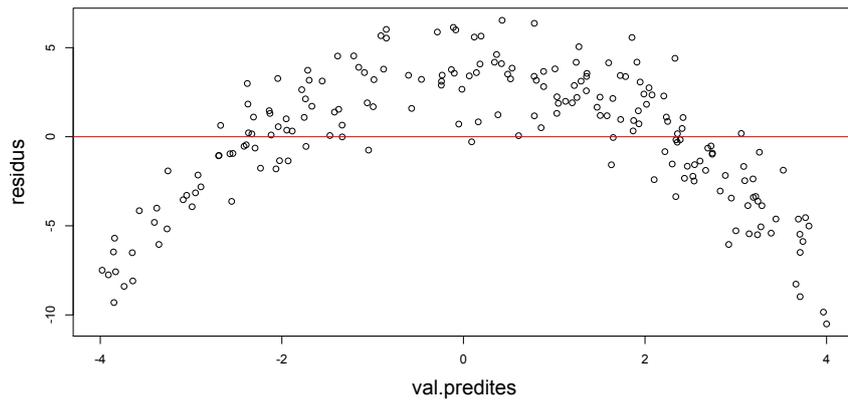
6. Quelques compléments utiles

Quelques graphiques permettant de “vérifier visuellement” des hypothèses sous-jacentes.

- Graphique croisant les valeurs prédites \hat{y}_i et les résidus $\hat{\epsilon}_i = y_i - \hat{y}_i$:



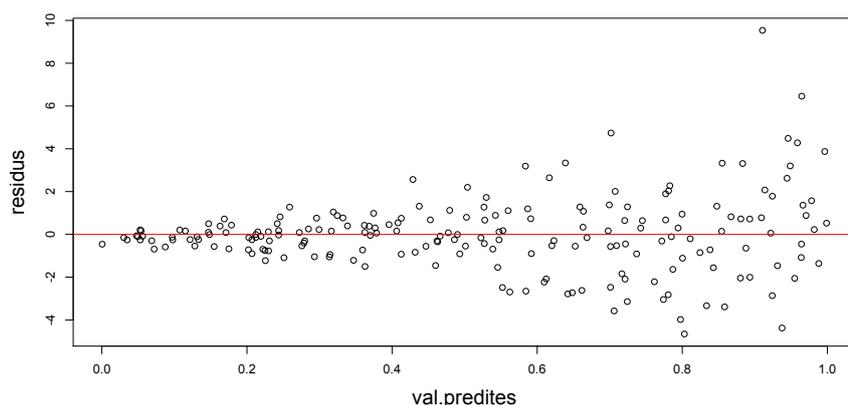
On observe un “comportement aléatoire” et “une variance constante”.



On observe un **“structure évidente”** dans les résidus (qui ne sont plus vraiment aléatoires).

↔ Il faut **“changer”** de modèle pour essayer de prendre en compte cette structure.

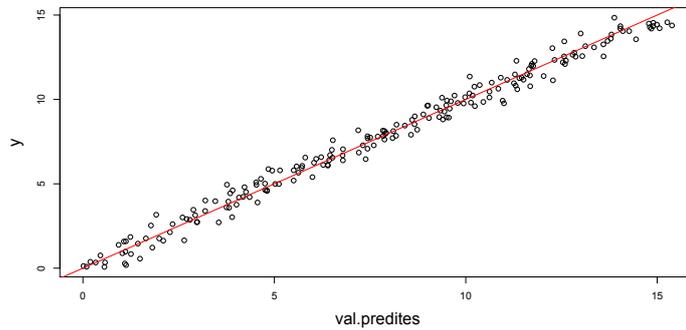
(Par exemple rajouter un terme quadratique x^2 dans la partie explicative du modèle).



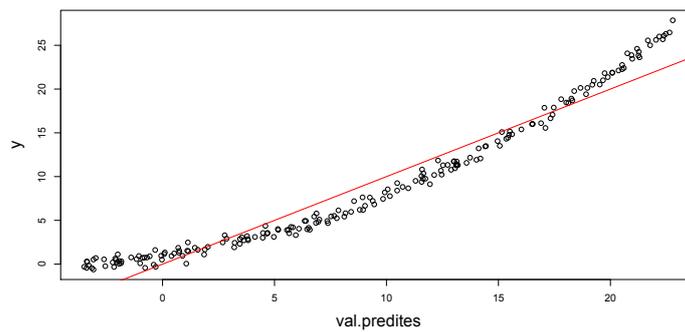
On observe que **“la variance des résidus n’est pas constante”**, elle augmente clairement en fonction de \hat{y}_i (elle dépend donc des x_i). Il n’y a donc **pas** **homoscédasticité**.

↔ Il faut **“changer”** de modèle pour prendre en compte cette hétéroscédasticité.

- Graphique croisant les valeurs prédites \hat{y}_i et les valeurs observées y_i :



Les points s'alignent sur la première bissectrice :
l'adéquation du modèle aux données est correcte.



On voit ici clairement apparaître une structure non linéaire :
il y a une mauvaise adéquation du modèle.

↔ Il faut changer de modèle.

