Régression linéaire simple dans R

Nadia Aubin-Horth

Frédéric Maps

Philippe Massicotte

Matériel accompagnateur

Charger les données pour l'analyse

Info! Tapez "Puromycin" dans l'aide de R pour en savoir plus (voir capsule #1).

Il s'agit d'un jeu de données fourni avec R et qui comprend des valeurs d'activité enzymatique mesurées pour différentes concentrations de substrat dans deux groupes de cellules, le premier traité avec un antibiotique inhibiteur de synthèse protéique (la puromycine), et le second un groupe contrôle non traité.

On va d'abord charger le jeu de données, puis le rendre accessible en premier plan dans la mémoire de R :

```
data("Puromycin")

Puromycin
```

conc	rate	state
0.02	76	treated
0.02	47	treated
0.06	97	treated
0.06	107	treated
0.11	123	treated
0.11	139	treated
0.22	159	treated
0.22	152	treated
0.56	191	treated
0.56	201	treated
1.10	207	treated

conc	rate	state
1.10	200	treated
0.02	67	untreated
0.02	51	untreated
0.06	84	untreated
0.06	86	untreated
0.11	98	untreated
0.11	115	untreated
0.22	131	untreated
0.22	124	untreated
0.56	144	untreated
0.56	158	untreated
1.10	160	untreated

La **démarche** de la régression linéaire

Une analyse de régression linéaire simple est utile lorsqu'il existe un **lien de causalité entre deux variables quantitatives** (numériques et mesurables) et que l'on veut **prédire** la valeur de la variable **réponse** (dépendante) selon la valeur de la variable **explicative** (indépendante).

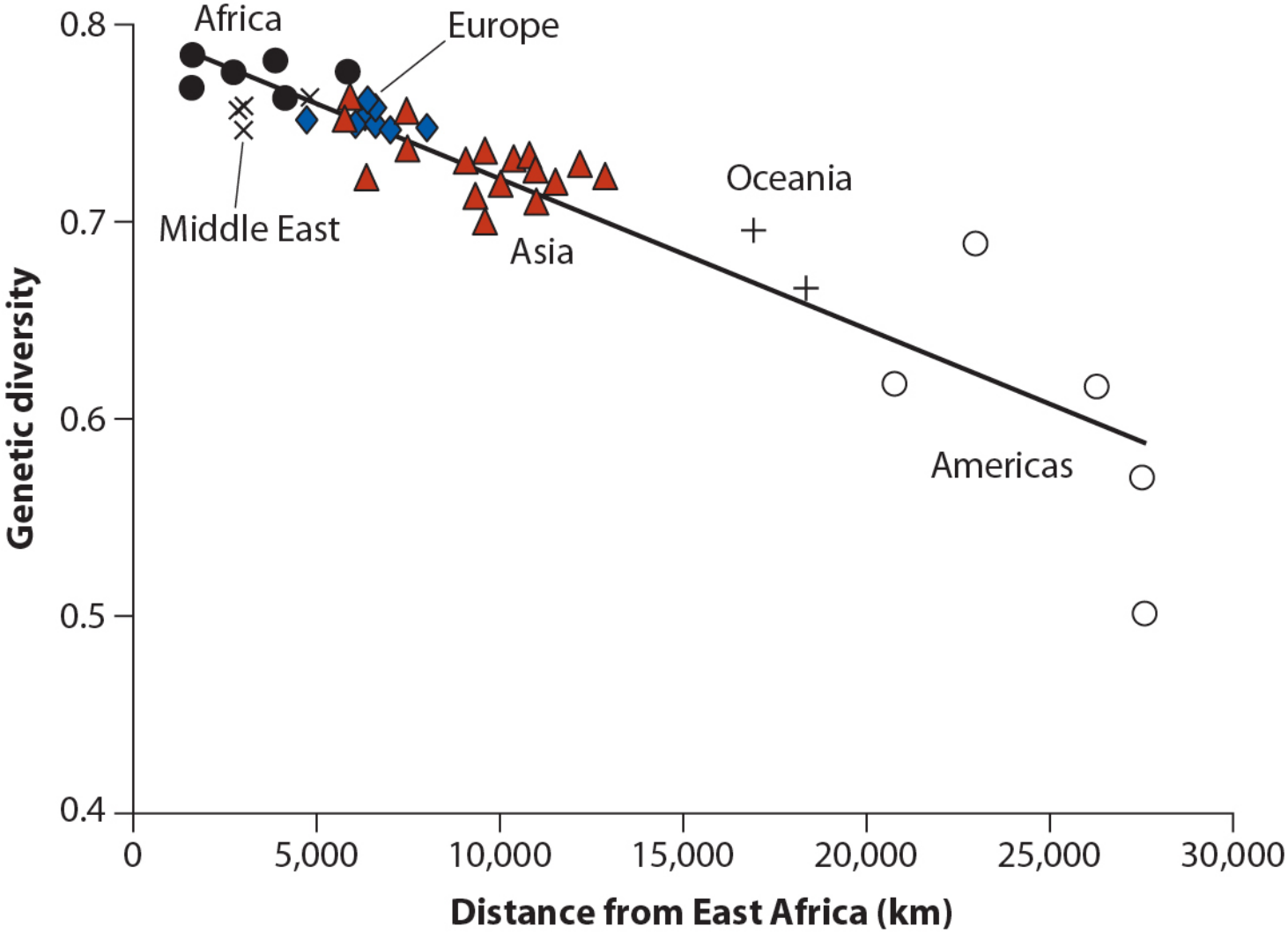


Fig. 1. Relation entre la diversité génétique des populations humaines et leur distance par rapport à l'Afrique

L'analyse de régression linéaire simple fait partie des méthodes statistiques (classiques) qui utilisent les propriétés mathématiques des distributions des variables, comme les tests paramétriques (voir capsule #8).

À ce titre, les données à analyser doivent respecter plusieurs conditions d'application :

1. La première est évidemment celle que l'on doit respecter (presque) toujours dans les analyses statistiques de base : les **échantillons doivent être aléatoires et indépendants**,
2. La deuxième est incluse dans le titre de la méthode : il doit exister une **relation linéaire entre les variables indépendante et dépendante**, ce qui peut se vérifier graphiquement. Cette condition est par ailleurs vérifiée si les conditions suivantes sont aussi vérifiées,

3. **L'homoscédasticité (homogénéité des variances) des résidus** de l'analyse. Les résidus sont simplement la différence entre la valeur observée et la valeur prédite par le modèle de régression linéaire. Ces résidus doivent être répartis de façon aléatoire et homogène de part et d'autre de la droite de régression et…
4. …la distribution de ceux-ci doit respecter une distribution Normale de moyenne nulle, centrée sur la droite de régression. Il s'agit de la condition de **la normalité des résidus** de l'analyse.

La condition 2 peut bien sûr se vérifier *a priori* graphiquement, alors que les conditions 3 et 4 se vérifient *a posteriori* par des graphiques diagnostiques (voir capsule #9), mais aussi par des tests formels dont on verra un exemple ici.

Info! L'analyse de régression linéaire utilise les propriétés mathématiques des données qui respectent ces conditions d'application pour déterminer les coefficients de la droite qui **minimise l'erreur** entre les valeurs observées de la variable réponse et les prédictions basées sur les valeurs de la variable explicative.

Nous pouvons illustrer ce principe avec le graphique ci-dessous :

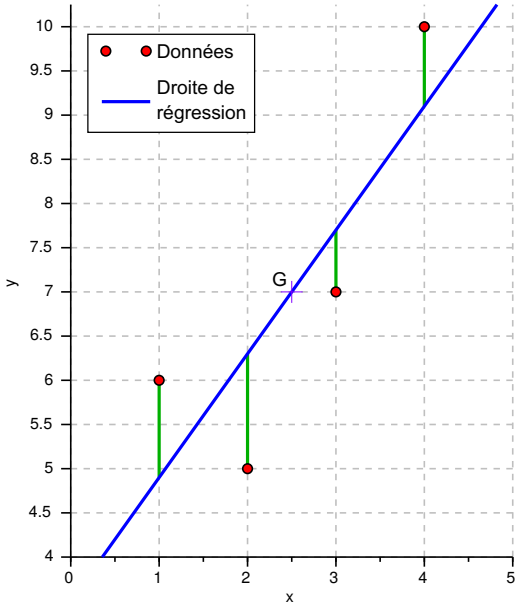


Fig. 2. Illustration de la droite des moindres carrés dont les coordonnées correspondent aux coefficients de la régression linéaire entre les variables explicative (x) et réponse (y)

Ici la **droite des moindres carrés** (en bleu) est celle qui **minimise les résidus** (en vert), c'est-à-dire la différence entre les observations (en rouge) et la valeur prédite par la droite de régression (en bleu). La méthode mathématique minimise la **somme des carrés des écarts (résidus)**, qu'on appelle aussi **l'erreur**.

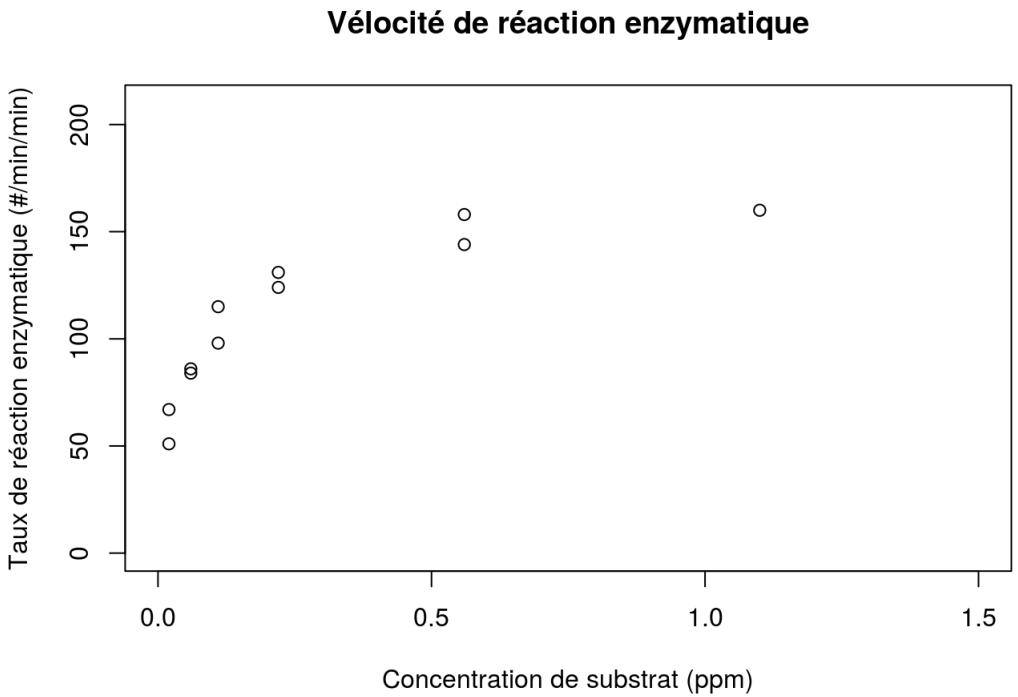
Analyse de régression linéaire simple

Le but de cet exemple est de calculer et tester la significativité de la relation entre un taux de réaction enzymatique et la concentration de substrat.

- Vérification de la relation linéaire

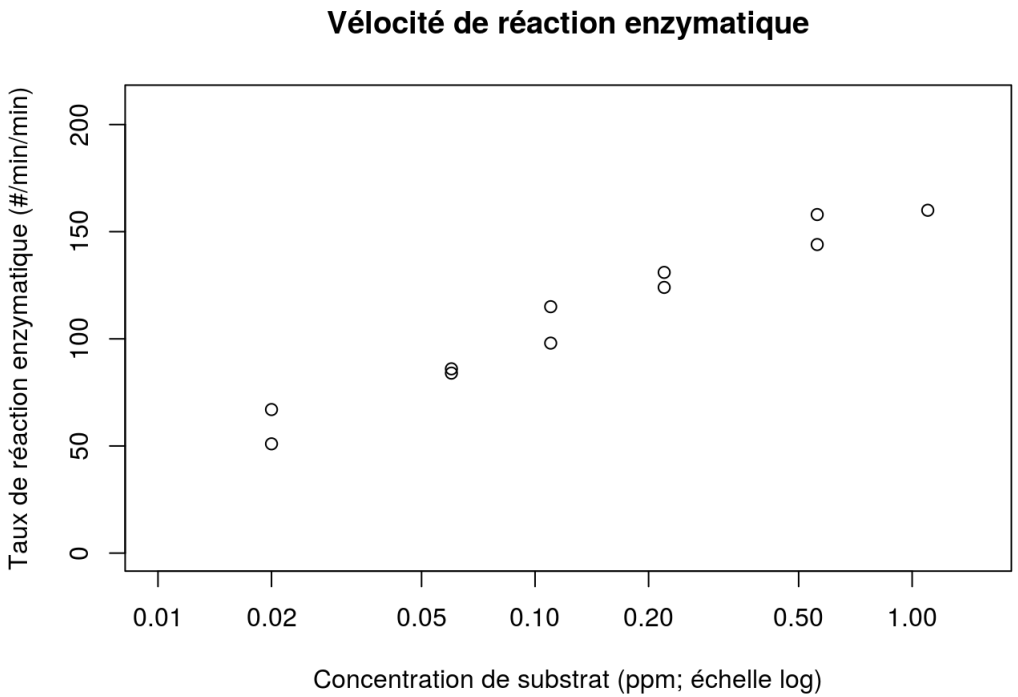
On va d'abord vérifier l'allure de la relation entre les variables réponse (l'activité enzymatique) et explicative la concentration de substrat) :

```
#Indices pour les deux groupes de traitement
un <- Puromycin$state == "untreated"
tr <- Puromycin$state == "treated"

rate1 <- Puromycin$rate[un]
conc1 <- Puromycin$conc[un]

#Graphique en nuage de point pour le groupe témoin (pas de puromycine)
plot(
  rate1 ~ conc1,
  xlim = c(0, 1.5)
,
  ylim = c(0, 210)
,
  xlab = "Concentration de substrat (ppm)"
,
  ylab = "Taux de réaction enzymatique (#/min/min)"
,
  main = "Vélocité de réaction enzymatique"
)
```



Il apparaît évident que la relation entre lesvariables n'est pas linéaire, mais notre connaissance de la cinétique enzymatique nous permet de comprendre qu'on pourrait obtenir une relation linéaire en transformant les valeurs de concentration en `log()` !

```
#Graphique en nuage de point pour le groupe témoin (pas de puromycine)
plot(
  rate1 ~ conc1,
  xlim = c(0.01, 1.5)
,
  ylim = c(0, 210)
,
  xlab = "Concentration de substrat (ppm; échelle log)"
,
  ylab = "Taux de réaction enzymatique (#/min/min)"
,
  main = "Vélocité de réaction enzymatique"
,
  log = 'x
'
)
```



Ici l'utilisation de l'argument (option) `log = 'x'` permet de représenter automatiquement nos données selon une **échelle logarithmique sur l'axe des abscisses**.

On constate qu'on semble bien avoir une relation linéaire entre les concentrations de substrat transformées par un logarithme et les taux de réaction enzymatique.

ATTENTION! Pour la suite de nos analyses, nous allons créer une variable transformée pour les valeurs de concentration avec laquelle nous pourrons travailler.

- Utilisation de la fonction `lm()`

L'analyse de régression linéaire fait partie de la grande famille des **"modèles linéaires"** en statistiques, d'où le nom de la fonction utilisée dans R : `lm()`

```r
#Procéder à l'analyse de régression linéaire simple (une seule variable explicative)
#ATTENTION à bien utiliser les valeurs transformées pour les concentrations de substrat
logc1 <- log10(conc1)

reg1 <- lm(rate1 ~ logc1)

#Visualisation des résultats de l'analyse
summary(reg1)
```

```
##
## Call:
## lm(formula = rate1 ~ logc1)
##
## Residuals:
##    Min     1Q Median     3Q    Max
## -8.034 -5.988 -2.677  7.616  9.969
##
## Coefficients:
##             Estimate Std. Error t value Pr(>|t|)
## (Intercept)  164.588      4.266   38.59 2.62e-11 ***
## logc1         62.129      4.156   14.95 1.16e-07 ***
## ---
## Signif. codes:  0 '***' 0.001 '**' 0.01 '*' 0.05 '.' 0.1 ' ' 1
##
## Residual standard error: 7.575 on 9 degrees of freedom
## Multiple R-squared:  0.9613, Adjusted R-squared:  0.957
## F-statistic: 223.5 on 1 and 9 DF,  p-value: 1.161e-07
```

Les résultats de cette analyse sont très riches en informations :

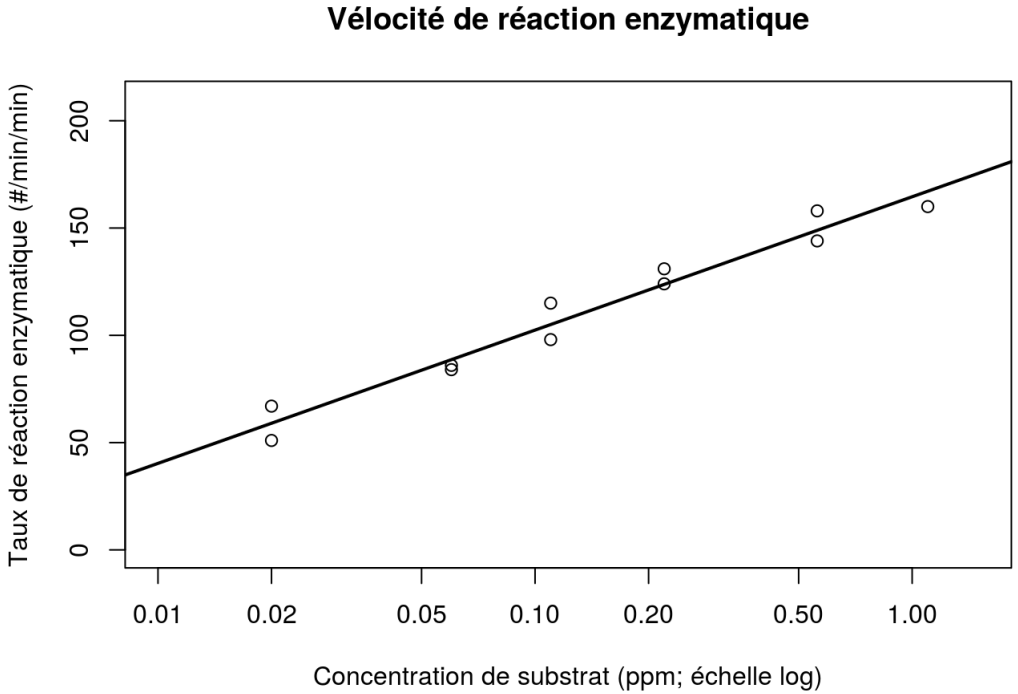
1. Tout d'abord, comme pour tous les tests semblables dans R, on vous rappelle le modèle linéaire testé, c'est à dire ici le taux de réaction enzymatique en fonction du log de la concentration de substrat : `lm(formula = rate1~ logc[un])`
2. Ensuite on vous présente un résumé de la distribution des valeurs des résidus : `Residuals`
3. Puis viennent les informations relatives aux coefficients de la régression linéaire : `Coefficients`
    - La première colonne `Estimate` donne les valeurs estimées de l'ordonnée à l'origine `(Intercept)` et la pente `logc[un]` (toujours le nom de la variable explicative) de la droite de régression
    - La deuxième colonne `Std. Error` donne l'erreur standard associée à l'estimation de ces valeurs,
    - La troisième colonne `t value` donne la valeur de *t* utilisée pour tester les hypothèses nulles que ces valeurs ne sont pas significativement différentes de 0 à un seuil de confiance de 95%,
    - Finalement la dernière colonne `Pr(>|t|)` donne la valeur de la *p*-value permettant de tirer une conclusion de ces tests. On rappelle que si la *p*-value est < au seuil alpha = 0.05, alors on peut rejeter l'hypothèse nulle et conclure que les valeurs sont

significativement différentes de 0. La ligne immédiatement sous ce tableau n'est qu'une sorte de "légende" pour aider à interpréter la force de la significativité.

4. Deux valeurs sont principalement d'intérêt dans la dernière section : `Adjusted R-squared` et `F-statistic`
    - `Adjusted R-squared` est appelé le **coefficient de régression R^2** (*à ne pas confondres avec les coefficients de l'équation linéaire !*) et indique ici la proportion de variance expliquée par la variable... explicative. Ce n'est pas rare de voir une valeur de $R^2 > 0.9$ en biochimie, lorsqu'on produit des courbes d'étalonnage par exemple; C'est beaucoup plus rare en écologie !
    - `F-statistic` est le résultat d'un test qui permet d'évaluer la significativité de la régression linéaire dans son ensemble, et pas seulement des paramètres de l'équation de la droite. Dans une régression linéaire simple, si la pente est significativement différente de 0, alors la *p*-value du test de F de la régression est < 0.05 et la régression est significative, comme dans ce cas-ci.

On peut visualiser très simplement notre droite de régression sur le graphique de nos données avec la fonction `abline()` :

```
## #Ajout de la droite de régression suite à l'analyse
## abline(regl, lwd = 2)
```

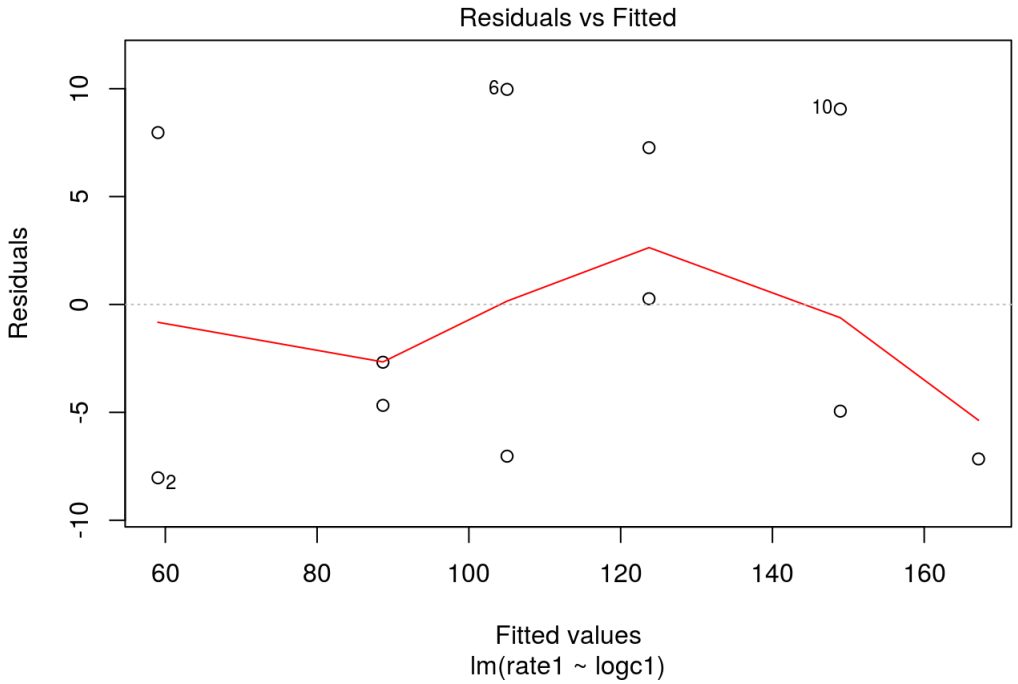


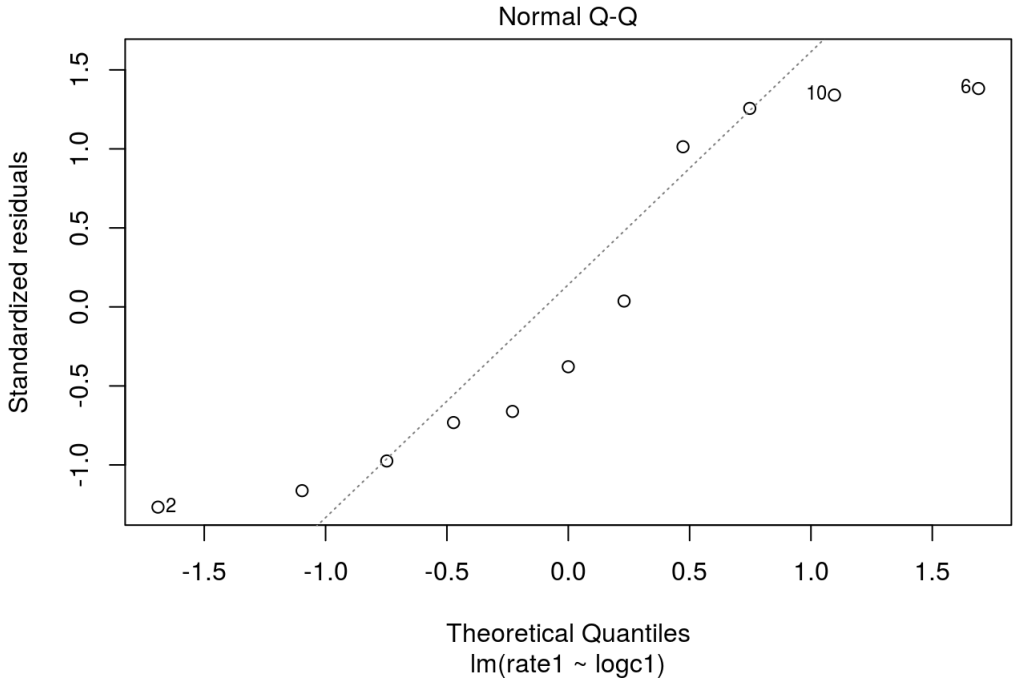
Vérifier *a posteriori* les conditions d'application de l'analyse de régression linéaire

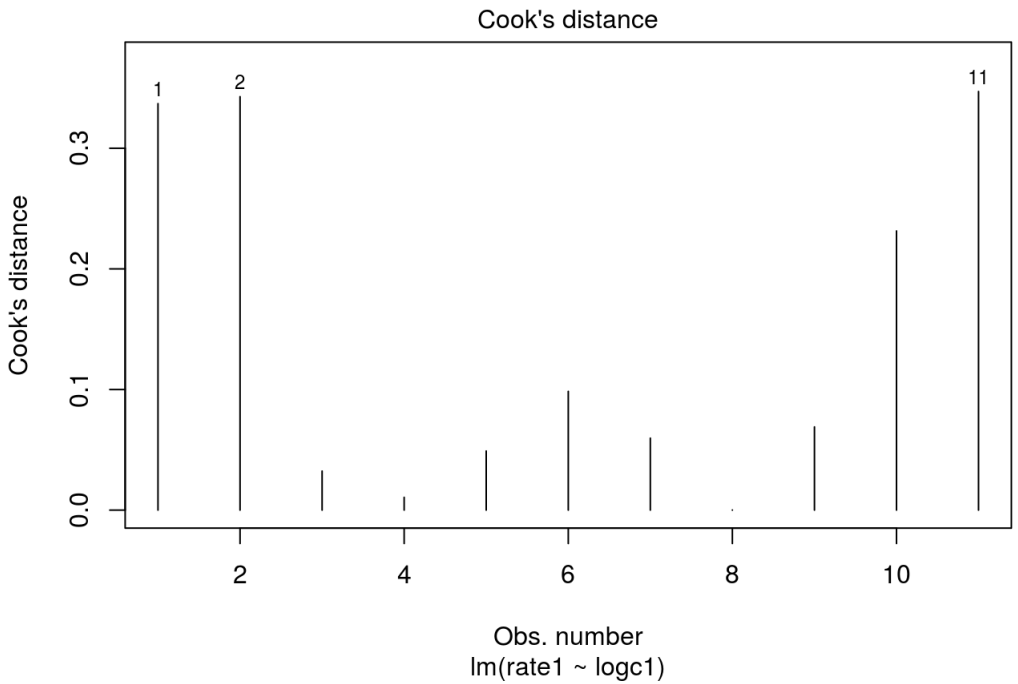
On peut faire deux types de vérification (voir capsule #9) : visuelle et statistique

- Vérification **visuelle** des conditions d'application

```
plot(regl, which = c(1, 2, 4)
)
```




Normal Q-Q
Standardized residuals
-1.0
-0.5
0.0
0.5
1.0
1.5
2
10
6
-1.5
-1.0
-0.5
0.0
0.5
1.0
1.5
Theoretical Quantiles
lm(rate1 ~ logc1)



Nous utilisons les 3 graphiques diagnostiques produits automatiquement par la fonction `plot()`, comme on l'a vu dans la capsule #9.

1. Le premier nous montre que les résidus de la régression présentés en fonction de la valeur "prédite" par le modèle linéaire de régression sont apparemment **répartis symétriquement et aléatoirement de part et d'autre de l'horizon 0** .
2. Le deuxième semble montrer par contre que certaines valeurs de résidus **ne suivent pas tout à fait une distribution Normale** (pas alignés sur la droite).
3. Le troisième montre finalement qu'aucune observation ne produit une valeur de distance de Cook > 0.5, ce qui confirme que notre analyse **n'est pas biaisée par une ou quelques valeurs extrêmes** . Une valeur > 0.5 est problématique.

Il apparaît donc de nos graphiques diagnostiques qu'en général nos données semblent respecter les conditions d'application, même si les conclusions ne sont pas toutes claires !

ATTENTION! Le nombre de valeurs analysées est faible (11), donc les conclusions des graphiques diagnostiques sont nécessairement moins claires que pour des analyses avec de grands nombres de points.

- Vérification **statistique** des conditions d'application

La fonction `gvlma()` permet de vérifier en une fois si l'ensemble des conditions d'applications mathématiques sont remplies, grâce à

plusieurs tests statistiques. Exemple :

```
library(gvlma)
gvlma(regl)
```

```
##
## Call:
## lm(formula = rate1 ~ logc1)
##
## Coefficients:
## (Intercept)        logc1
##      164.59        62.13
##
##
## ASSESSMENT OF THE LINEAR MODEL ASSUMPTIONS
## USING THE GLOBAL TEST ON 4 DEGREES-OF-FREEDOM:
## Level of Significance =  0.05
##
## Call:
##  gvlma(x = regl)
##
##                       Value p-value                Decision
## Global Stat        1.925e+00  0.7495 Assumptions acceptable.
## Skewness           1.926e-01  0.6608 Assumptions acceptable.
## Kurtosis           1.183e+00  0.2767 Assumptions acceptable.
## Link Function      5.494e-01  0.4586 Assumptions acceptable.
## Heteroscedasticity 6.932e-05  0.9934 Assumptions acceptable.
```

Info! N'oubliez pas d'installer la librarie `gvlma` à l'aide de la fonction `install.packages()`.

Encore une fois, les résultats de cette analyse sont riches en informations :

1. D'abord on vous rappelle le modèle linéaire testé : `Call`
2. Ensuite les valeurs estimées des coefficients de la régression : `Coefficients`
3. Puis on clairement ce que cette fonction fait : `ASSESSMENT OF THE LINEAR MODEL ASSUMPTIONS`
4. Finalement, on détaille les résultats des différents tests sur les résidus. Chacun doit être interprété de la même façon : une statistique de test calculée `Value`, suivie de la *p*-value associée `p-value` et de la décision suggérée (`Assumptions acceptable.` ou `Assumptions NOT satisfied!`)
    - `Global Stat` est un test sur la **conformité globale** de notre analyse aux conditions d'application, au cas où un des tests

spécifiques ci-dessous ne serait pas concluant,

- `Skewness` vérifie la **symétrie** de la distribution des résidus par rapport à 0,
- `Kurtosis` vérifie la **normalité** de la distribution des résidus ainsi que la présence de **valeurs extrêmes**,
- `Link Function` vérifie la **linéarité** de la relation entre les variables réponse et explicative,
- `Heteroscedasticity` vérifie **l'homogénéité de la variance** des résidus.

ATTENTION! Tous ces tests graphiques et statistiques restent des **aides à la décision**. Vous devez **exercer votre jugement en tout temps** pour décider si vous pouvez vous fier aux résultats de vos analyses.

Prédictions grâce à la régression linéaire

Comme on l'a indiqué dès le début de cette capsule, la régression linéaire permet de faire des prédictions, c'est-à-dire d'estimer la valeur moyenne que devrait avoir une variable réponse pour toute valeur de la variable explicative.

Toutefois cela est vrai dans les limites observées de la variable explicative, autrement dit la régression permet de faire avec confiance de **l'interpolation**, et elle ne devrait être utilisée qu'avec grande prudence pour faire de **l'extrapolation**.

- Prédiction de la valeur moyenne

Il est très facile de faire une telle prédiction. En fait, il s'agit simplement d'utiliser l'équation de la droite de régression `y = a + bx`, avec `a` l'ordonnée à l'origine et `b` la pente.

On peut toutefois utiliser la fonction `predict()` si on veut faire plusieurs prédictions facilement, par exemple.

```
# Predire les taux de réaction enzymatique moyens pour des concentrations de
# substrat de 0.3, 0.35 et 0.4 ppm.
conx <- log10(c(0.3, 0.35, 0.4)) # Il ne faut pas oublier la transformation !
predict(regl, newdata = data.frame(logc1 = conx), interval = "confidence"
)
```

```
##        fit      lwr      upr
## 1 132.1027 126.0071 138.1983
## 2 136.2620 129.8104 142.7136
## 3 139.8650 133.0728 146.6571
```

Les résultats de la fonction `predict()` donnent:

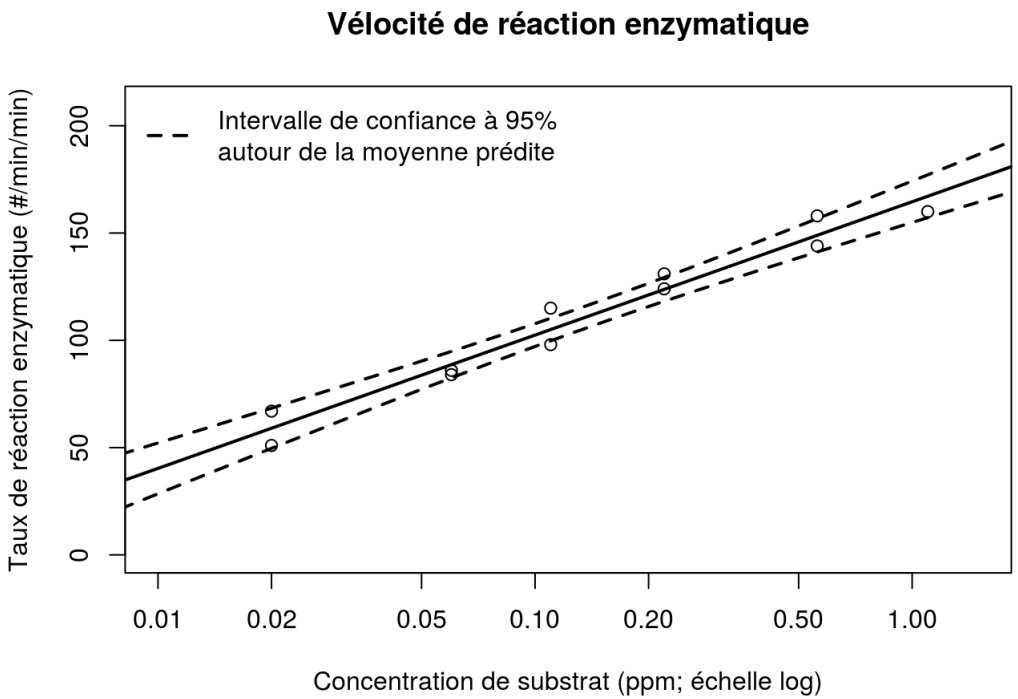
1. `fit` : la **valeur moyenne** prédite en x par la régression linéaire,
2. `lwr` : la **limite inférieure** de **l'intervalle de confiance à 95%** en x, selon la valeur de l'argument `interval =`
3. `upr` : la **limite supérieure** de l'intervalle de confiance à 95% en x, selon la valeur de cet argument.

L'ordre des lignes suit l'ordre des valeurs dans le vecteur x fourni à la fonction.

On remarque ici que la valeur de l'argument `interval = "confidence"`. Ceci permet de calculer **l'intervalle de confiance à 95% autour**

de la moyenne prédite. Ça se traduit par ce genre de courbes :

```
## # Ajout des intervalles de confiance
## xint  <- seq(-2.1, 1.1, 0.1)
## pred1 <-  predict(reg1, newdata = data.frame(logc1 = xint), interval = "confidence")
## lines(10 ^ xint, pred1[, 2], lty = 2, lwd = 2)
## lines(10 ^ xint, pred1[, 3], lty = 2, lwd = 2)
## legend(
##   'topleft',
##   legend = 'Intervalle de confiance à 95%\nautour de la moyenne prédite',
##   lty = 2,
##   lwd = 2,
##   bty = 'n'
## )
```



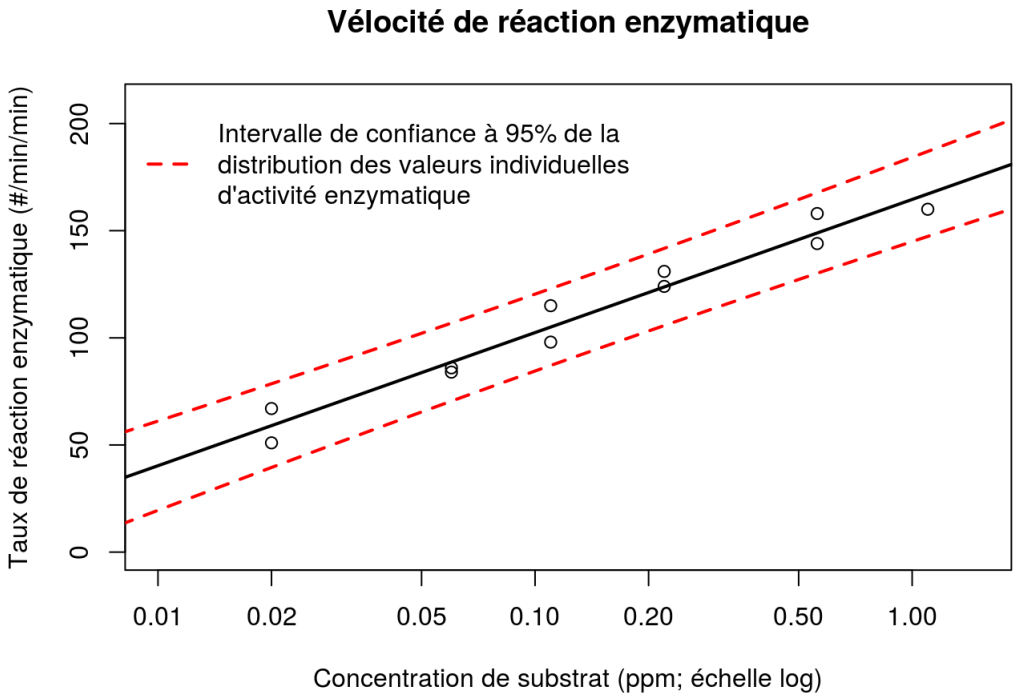
- Prédiction de l'étendue des valeurs individuelles

Il est de plus possible d'estimer l'intervalle à l'intérieur duquel 95% des valeurs individuelles de la variable réponse observée **devraient se retrouver** d'après l'analyse de régression.

Ceci peut être utile pour **détecter des valeurs individuelles extrêmes**, ou **prédire une plage de valeurs possibles de la variable réponse pour une valeur encore jamais observée de la variable explicative**, par exemple.

Il faut alors spécifier une autre valeur à l'argument `interval` : `interval = "prediction"`. Ceci donne :

```
## #Ajout des intervalles de confiance
## pred1 <- predict( reg1, newdata = data.frame( logc1=xint ), interval = "prediction" )
## lines( 10^xint, pred1[,2], lty = 2, lwd = 2, col = "red" )
## lines( 10^xint, pred1[,3], lty = 2, lwd = 2, col = "red" )
## legend( 'topleft', legend = "Intervalle de confiance à 95% de la\ndistribution des valeurs individuelles
```



Téléchargement

Le matériel pédagogique utilisé dans cette capsule est disponible pour le téléchargement sous deux formats différents:

1. Format PDF standard que vous pouvez consulter et commenter avec Adobe Reader par exemple.
2. Format HTML dynamique qui se comporte comme une page web et doit être lu avec votre navigateur préféré (Chrome, Firefox, Edge, Safari, etc.).

Pour télécharger le fichier localement sur votre ordinateur, tablette ou téléphone portable, il suffit de cliquer sur le lien désiré avec le bouton droit de votre souris et choisir “sauvegarder sous…”.

Télécharger la documentation sous format PDF

- Télécharger la documentation sous format PDF
- Télécharger la documentation sous format HTML