Régression linéaire multiple

Frédéric Bertrand et Myriam Maumy[1]

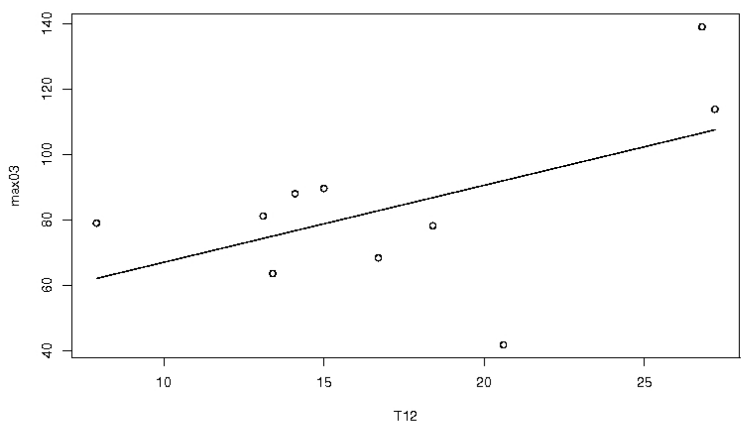
[1]IRMA, Université de Strasbourg
Strasbourg, France

Magistère 2e Année

- **Problème :** Étude de la concentration d'ozone dans l'air.
- **Modèle :** La température (v.a. X) et la concentration d'ozone (v.a. Y) sont liées de manière linéaire :

$$Y = \beta_0 + \beta_1 X + \varepsilon.$$

- **Observations :** $n = 10$ mesures de la température et de la concentration d'ozone.
- **But :** Estimer β_0 et β_1 afin de prédire la concentration d'ozone connaissant la température.



Souvent la régression linéaire est trop simpliste. Il faut alors utiliser d'autres modèles plus réalistes mais parfois plus complexes :

- Utiliser d'autres fonctions que les fonctions affines comme les fonctions polynômiales, exponentielles, logarithmiques. . .
- Considérer plusieurs variables explicatives.
  Exemple : La température **et** la vitesse du vent

Le principe de la régression linéaire multiple est simple :

- Déterminer la variable expliquée Y.
  Exemple : La concentration d'ozone.
- Déterminer $(p-1)$ variables explicatives $X_1, \ldots, X_{p-1}$
  Exemple : X_1 température, X_2 vitesse du vent...
- Il ne reste plus qu'à appliquer un modèle linéaire :

$$Y = \beta_0 + \beta_1 X_1 + \cdots + \beta_{p-1} X_{p-1} + \varepsilon$$

Dans un échantillon de n individus, on mesure y_i, $x_{i,1}, \ldots, x_{i,p-1}$ pour $i = 1 \ldots n$.

Observations	Y	X_1	$\ldots$	X_{p-1}
1	y_1	$x_{1,1}$	$\ldots$	$x_{1,p-1}$
2	y_2	$x_{2,1}$	$\ldots$	$x_{2,p-1}$
$\vdots$	$\vdots$	$\vdots$	$\vdots$	$\vdots$
n	y_n	$x_{n,1}$	$\ldots$	$x_{n,p-1}$

Remarque : Les variables $x_{i,j}$ sont fixes tandis que les variables y_i sont aléatoires.

But :

Estimer les paramètres $\beta_0, \ldots, \beta_{p-1}$ du modèle de régression et ce de manière optimale.

Méthode : La méthode des moindres carrés. Cette méthode revient à minimiser la quantité suivante :

$$\sum_{i=1}^{n} \left(y_i - \left(\hat{\beta}_0 + \hat{\beta}_1 x_{i,1} + \cdots + \hat{\beta}_{p-1} x_{i,p-1} \right) \right)^2 .$$

Le système peut se réécrire :

$$\underbrace{\begin{pmatrix} y_1 \\ \vdots \\ y_n \end{pmatrix}}_{\mathbf{y}} = \underbrace{\begin{pmatrix} 1 & x_{1,1} & \cdots & x_{1,p-1} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ 1 & x_{n,1} & \cdots & x_{n,p-1} \end{pmatrix}}_{\mathbf{X}} \underbrace{\begin{pmatrix} \beta_0 \\ \vdots \\ \beta_{p-1} \end{pmatrix}}_{\beta} + \underbrace{\begin{pmatrix} \varepsilon_1 \\ \vdots \\ \varepsilon_n \end{pmatrix}}_{\varepsilon}$$

Vecteur des résidus : $\varepsilon = \mathbf{y} - \hat{y} = \mathbf{y} - \mathbf{X}\hat{\beta}$.

Remarque : Les variables $\mathbf{y}$ et $\mathbf{X}$ sont mesurées tandis que l'estimateur $\hat{\beta}$ est à déterminer.

La méthode des moindres carrés consiste à trouver le vecteur $\hat{\beta}$ qui minimise $\|\varepsilon\|^2 = {}^t\varepsilon\varepsilon$.

$$\begin{aligned}\|\varepsilon\|^2 &= {}^t(\mathbf{y}-\mathbf{X}\hat\beta)(\mathbf{y}-\mathbf{X}\hat\beta)\\ &= {}^t\mathbf{yy} - {}^t\hat\beta{}^t\mathbf{Xy} - {}^t\mathbf{yX}\hat\beta + {}^t\hat\beta{}^t\mathbf{XX}\hat\beta\\ &= {}^t\mathbf{yy} - 2{}^t\hat\beta{}^t\mathbf{Xy} + {}^t\hat\beta{}^t\mathbf{XX}\hat\beta\end{aligned}$$

car ${}^t\hat\beta{}^t\mathbf{Xy}$ est un scalaire. Donc il est égal à sa transposée.

La dérivée par rapport à $\hat\beta$ est alors égale à :

$$-2{}^t\mathbf{Xy} + 2{}^t\mathbf{XX}\hat\beta.$$

- **Problème :** On cherche $\hat\beta$ qui annule cette dérivée. Donc on doit résoudre l'équation suivante :

$$ {}^t\mathbf{XX}\hat\beta = {}^t\mathbf{Xy}.$$

- **Solution :** On trouve après avoir inversé la matrice ${}^t\mathbf{XX}$ (il faut naturellement vérifier que ${}^t\mathbf{XX}$ est carrée et inversible c'est-à-dire qu'aucune des colonnes qui compose cette matrice ne soit proportionnelle aux autres colonnes)

$$\hat\beta = ({}^t\mathbf{XX})^{-1}{}^t\mathbf{Xy}.$$

Retrouvons les résultats de la régression linéaire simple ($p = 2$)

$${}^t\mathbf{XX} = \begin{pmatrix} n & \sum x_i \\ \sum x_i & \sum x_i^2 \end{pmatrix}; \qquad {}^t\mathbf{Xy} = \begin{pmatrix} \sum y_i \\ \sum x_i y_i \end{pmatrix}.$$

Donc :

$$\begin{aligned}({}^t\mathbf{XX})^{-1} &= \frac{1}{n\sum x_i^2 - (\sum x_i)^2}\begin{pmatrix} \sum x_i^2 & -\sum x_i \\ -\sum x_i & n \end{pmatrix}\\ &= \frac{1}{\sum (x_i-\bar x)^2}\begin{pmatrix} \sum x_i^2/n & -\bar x \\ -\bar x & 1 \end{pmatrix}.\end{aligned}$$

Finalement on retrouve bien :

$$\hat\beta = \begin{pmatrix} \hat\beta_0 \\ \hat\beta_1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \dfrac{\bar y \sum x_i^2 - \bar x \sum x_i y_i}{\sum (x_i - \bar x)^2} \\[2ex] \dfrac{\sum x_i y_i - n\bar x \bar y}{\sum (x_i - \bar x)^2} \end{pmatrix}$$

ce qui correspond aux estimateurs de la régression linéaire simple que nous avons déjà rencontrés dans le cours 1.

```
> a <- lm(max03   T12 + VX)
> summary(a)

Call:
lm(formula = max03   T12 + VX)

Residuals:
Min 1Q Median 3Q Max
-47.860 -10.561 5.119 10.645 26.506

Coefficients:
Estimate Std. Error t value Pr(>|t|)
(Intercept) 36.6520 26.5324 1.381 0.210
T12 2.6623 1.4202 1.875 0.103
VX 0.5431 0.7775 0.699 0.507
Residual standard error: 24.78 on 7 degrees of freedom
Multiple R-Squared: 0.3351, Adjusted R-squared: 0.1452
F-statistic: 1.764 on 2 and 7 DF, p-value: 0.2396
```

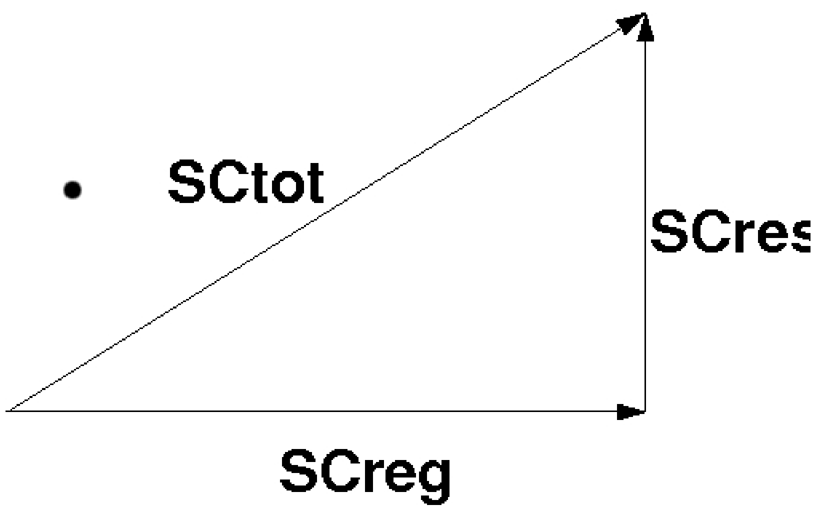

Résultats préliminaires :

- $\sum \hat{y}_i^2 = \sum \hat{y}_i y_i$ ou (forme matricielle) ${}^t\hat{\mathbf{y}}\hat{\mathbf{y}} = {}^t\mathbf{y}\hat{\mathbf{y}}$
- $\sum \hat{y}_i = \sum y_i$

Propriété des moindres carrés :

$$\begin{array}{ccccc} \sum(y_i - \bar{y})^2 & = & \sum(\hat{y}_i - \bar{y})^2 & + & \sum(y_i - \hat{y}_i)^2 \\ SC_{tot} & = & SC_{reg} & + & SC_{res} \end{array}$$

-



Le **coefficient de détermination** est défini par :

$$R^2 = \frac{SC_{reg}}{SC_{tot}}.$$

Intuitivement ce coefficient de détermination quantifie la capacité du modèle à expliquer les variations de Y.

- Si R^2 est proche de 1 alors le modèle est proche de la réalité.
- Si R^2 est proche de 0 alors le modèle explique très mal la réalité. Il faut alors trouver un meilleur modèle.

On fait les hypothèses suivantes :

$$\mathbf{y} = \mathbf{X}\beta + \varepsilon$$

où le vecteur aléatoire ε suit une loi *multinormale* qui vérifie les hypothèses suivantes :

- $\mathbb{E}[\varepsilon] = 0$
- $Var[\varepsilon] = \sigma^2 \mathbf{I}_n$,

où σ^2 est la variance de la population et $\mathbf{I}_n$ est la matrice identité de taille n.

Ceci implique que :

- $\mathbb{E}[\mathbf{y}] = \mathbf{X}\beta$
- $Var[\mathbf{y}] = \sigma^2 \mathbf{I}_n$.

On peut alors démontrer, **sous ces hypothèses** :

- $\mathbb{E}[\hat{\beta}] = \beta$. Ce qui signifie que $\hat{\beta}$ est un estimateur sans biais
- $Var[\hat{\beta}] = \sigma^2({}^t\mathbf{X}\mathbf{X})^{-1}$.

Il reste un **problème :** Estimer la variance σ^2 qui est a priori une quantité inconnue.

Un estimateur sans biais de la variance σ^2 est défini par :

$$s^2 = \frac{\sum (y_i - \hat{y}_i)^2}{n-p} = \frac{SC_{res}}{n-p} = \frac{SC_{tot} - SC_{reg}}{n-p},$$

où

- n est le nombre d'individus/d'observations,
- p est le nombre de variables explicatives.

On appelle la quantité $(n-p)$ **le nombre de degrés de liberté.**

But : Tester l'hypothèse nulle

$$\mathcal{H}_0 : \beta_j = b_j \quad \text{pour } j = 0, \ldots, p-1$$

contre l'hypothèse alternative

$$\mathcal{H}_1 : \beta_j \neq b_j \quad \text{pour } j = 0, \ldots, p-1.$$

Méthode :

- Calculer la statistique

$$t_{obs} = \frac{\hat{\beta}_j - b_j}{s(\hat{\beta}_j)}$$

  où $s^2(\hat{\beta}_j)$ est l'élément diagonal d'indice j de $s^2({}^t\mathbf{XX})^{-1}$.
- Si l'hypothèse nulle $\mathcal{H}_0$ est vraie, alors t_{obs} suit une loi de Student avec $(n-p)$ degrés de liberté.

- Valeur critique : $t_{(\alpha/2,n-p)}$ le $(1-\alpha/2)$-quantile d'une loi de Student avec $(n-p)$ degrés de liberté (cf table de la loi de Student).
- On rejette l'hypothèse nulle $\mathcal{H}_0$ si $|t_{obs}| \geq t_{(\alpha/2,n-p)}$.

Cas particulier : Tester si « $\beta_j = 0$ » pour un certain j.
Si l'hypothèse nulle $\mathcal{H}_0$: « $\beta_j = 0$ » est acceptable alors la variable X_j n'est pas significative au sein du modèle. On peut simplifier le modèle, . . .et recommencer !