Régression linéaire multiple

Frédéric Bertrand et Myriam Maumy[1]

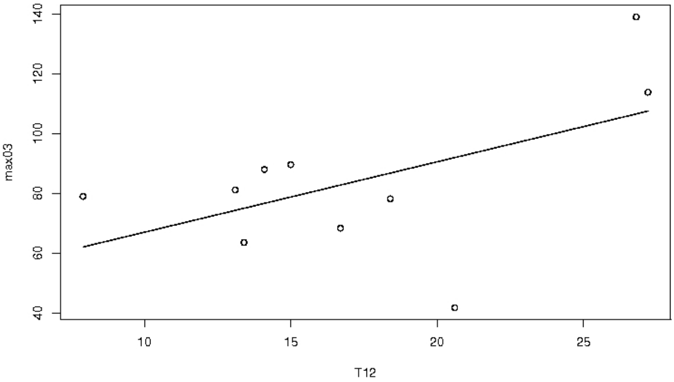
[1]IRMA, Université Louis Pasteur
Strasbourg, France

Master 1ère Année 06-02-2008

- **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.


140
120
100
80
60
40
max03
10
15
20
25
T12

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, $x_{i,1}$, ..., $x_{i,p-1}$ 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 :

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

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 $\|\varepsilon\|^2 = {}^t\varepsilon\varepsilon$.

$$
\begin{aligned}
\|\varepsilon\|^2 &= {}^t\left(\mathbf{y} - \mathbf{X}\hat{\beta}\right)\left(\mathbf{y} - \mathbf{X}\hat{\beta}\right) \\
&= {}^t\mathbf{y}\mathbf{y} - {}^t\hat{\beta}{}^t\mathbf{X}\mathbf{y} - {}^t\mathbf{y}\mathbf{X}\hat{\beta} + {}^t\hat{\beta}{}^t\mathbf{X}\mathbf{X}\hat{\beta} \\
&= {}^t\mathbf{y}\mathbf{y} - 2{}^t\hat{\beta}{}^t\mathbf{X}\mathbf{y} + {}^t\hat{\beta}{}^t\mathbf{X}\mathbf{X}\hat{\beta}
\end{aligned}
$$

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

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

$$
-2{}^t\mathbf{X}\mathbf{y} + 2{}^t\mathbf{X}\mathbf{X}\hat{\beta}.
$$

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

$$^t\mathbf{X}\mathbf{X}\hat{\beta} = {}^t\mathbf{X}\mathbf{y}.$$

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

$$\hat{\beta} = ({}^t\mathbf{X}\mathbf{X})^{-1}\,{}^t\mathbf{X}\mathbf{y}.$$

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

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

Donc :

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

Finalement on retrouve bien :

$$\hat{\beta} = \begin{pmatrix} \hat{\beta}_0 \\ \hat{\beta}_1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \dfrac{\bar{y}\sum x_i^2 - \bar{x}\sum x_i y_i}{\sum (x_i - \bar{x})^2} \\ \\ \dfrac{\sum x_i y_i - n\bar{x}\bar{y}}{\sum (x_i - \bar{x})^2} \end{pmatrix}$$

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

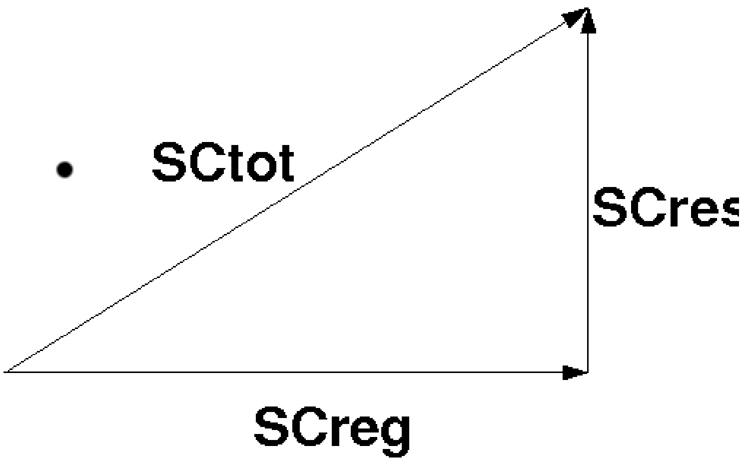
```
> a <- lm(max03   T12 + VX)
> summary(a)

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 :

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


SCtot
SCres
SCreg

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 $s^2({}^t\mathbf{X}\mathbf{X})^{-1}$.
- 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 !