MODÈLES MIXTES STRUCTURES de DÉPENDANCE

L'argument distinctif et le plus important du modèle mixte par comparaison du modèle linéaire usuel (effets fixés seulement) est la très grande flexibilité qu'Il offre pour modéliser différentes situations : hétérogénéité des variances, corrélation entre les observations, mesures répétées facteurs aléatoires etc.

Le modèle mixte est défini par l'équation suivante en notation matricielle :

$$Y = X\beta + Zu + \varepsilon \qquad (1)$$

où
- **Y vecteur connu des valeurs de réponses**
- **X matrice connue du design d'effet fixés**
- **β vecteur inconnu d'effets fixés à estimer**
- **Z matrice connue du design d'effets aléatoires**
- **u vecteur inconnu d'effets aléatoires**
- **ε vecteur non observé d'erreurs aléatoires**

On suppose que

$$u \sim N\,(0, G) \qquad (2)$$

~ N : notation pour distribution normale multidimensionnelle

$$\varepsilon \sim N\,(0, R) \qquad (3)$$

$$\mathrm{Cov}\,[u, \varepsilon] = 0 \qquad (4)$$

où

G est la matrice de variance-covariance de u

R matrice variance-covariance de ε

La matrice de variance-covariance de Y, notée V, est

$$\begin{aligned} V &= \mathrm{Var}\,[Y] \\ &= \mathrm{Var}\,[X\beta + Zu + \varepsilon] \\ &= 0 + \mathrm{Var}\,[Zu + \varepsilon] \\ &= ZGZ' + R \qquad (5) \end{aligned}$$

Le but de l'analyse d'un modèle mixte est de tester les paramètres β et d'obtenir une équation de prédiction.

Dans un premier temps, il faut estimer les paramètres inconnus (β, G, and R). L'estimation de G et de R repose sur des modèles de structure matricielle qui seront proposés plus loin dans ce texte. L'estimation des matrices G et R peut se faire par la méthode de vraisemblance maximale (ML) ou par la méthode vraisemblance maximale restreinte (REML).

Formulation du modèle mixte au niveau des unités statistiques

$$Y_i = X_i \beta + Z_i u_i + \varepsilon_i \qquad i = 1, \ldots, N \text{ (nombre de sujets)} \qquad (6)$$

y_i : $n_i \times 1$ vecteur des données du sujet i

X_i : matrice $n_i \times p$ des effets fixés du sujet i (p est le nombre de colonnes de X)

β : vecteur $p \times 1$ des paramètres de régression

Z_i : matrice $n_i \times q$ des effets aléatoires du sujet i

U_i : vecteur $q \times 1$ des effets aléatoires du sujet I ayant une moyenne de zéro et une matrice de variance-covariance Gsub

ε_i : vecteur $n_i \times 1$ des erreurs du sujet i avec une moyenne de zéro et une matrice de covariance R_i avec n_i mesures répétées sur le sujet i.

N : nombre de sujets

$e_i = y_i - X_i\beta$: vecteur des résidus du sujet i

$V_i = \mathrm{Var}(y_i) = Z_i \, G_{sub} \, Z_i^t + R_i$ t : transposition

$$\mathbf{y} = \begin{pmatrix} y_1 \\ y_2 \\ \vdots \\ y_N \end{pmatrix}, \quad \mathbf{X} = \begin{pmatrix} \mathbf{X}_1 \\ \mathbf{X}_2 \\ \vdots \\ \mathbf{X}_N \end{pmatrix}, \quad \mathbf{Z} = \begin{pmatrix} \mathbf{Z}_1 & 0 & 0 \\ 0 & \ddots & 0 \\ 0 & 0 & \mathbf{Z}_N \end{pmatrix}, \quad \mathbf{u} = \begin{pmatrix} \mathbf{u}_1 \\ \mathbf{u}_2 \\ \vdots \\ \mathbf{u}_N \end{pmatrix}, \quad \boldsymbol{\varepsilon} = \begin{pmatrix} \varepsilon_1 \\ \varepsilon_2 \\ \vdots \\ \varepsilon_N \end{pmatrix}$$

Il existe deux cas extrêmes de modèles mixtes : les modèles à effets fixés seulement et le modèle contenant que des effets aléatoires. Le cas général du modèle mixte contient les deux catégories d'effets. Un cas important du modèle mixte est le plan en mesurées. L'effet d'un facteur aléatoire n'est pas testé mais on s'intéresse à l'estimation de sa variance.

Un autre cas important de la nécessité des modèles mixtes est lorsque l'on mesure une réponse sur un sujet à plusieurs reprises en fonction du temps à des intervalles fixés ou aléatoires. On modélise avec deux types de sous -modèles : les modèles à coefficients aléatoires. Les modèles de covariance ayant des formes spécifiques seront proposés plus loin.

Dans les modèles à coefficients aléatoires on s'intéresse à la relation entre la réponse et le temps quand le temps n'est pas fixé à intervalles réguliers. Le temps est alors un facteur aléatoire. On inclut alors le temps comme une covariable et on modélise chaque sujet avec un intercepte spécifique et un terme d'interaction

sujet*temps comme la pente associée à chaque sujet. Il est raisonnable de spécifier ces termes comme des effets aléatoires et on utilise la distribution bi normale. On tient compte alors de la corrélation entre ces effets aléatoires.

$$\begin{pmatrix} subject_k \\ (subject * time)_k \end{pmatrix} \sim N(0, \mathbf{G}),$$

$$\mathbf{G} = \begin{pmatrix} \sigma^2_{subject} & \sigma_{subject,subject*time} \\ \sigma_{subject,subject*time} & \sigma^2_{subject*time} \end{pmatrix}.$$

Ces modèles à coefficients aléatoires sont différents des modèles classiques usuels quand on ajuste des droites car dans ce cas les estimateurs de la pente et de l'intercepte ne sont pas indépendants.

Exemples de structures des matrice G et R

Matrice G

$$\mathbf{G} = \begin{pmatrix} G_{sub} & \mathbf{0} & \mathbf{0} & \cdots & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & G_{sub} & \mathbf{0} & \cdots & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & \mathbf{0} & G_{sub} & \cdots & \mathbf{0} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \mathbf{0} & \mathbf{0} & \mathbf{0} & \cdots & G_{sub} \end{pmatrix}$$

Structures $\mathbf{G}_{sub}$

diagonale

$$\mathbf{G}_{sub} = \begin{pmatrix} \sigma_1^{\,2} & & & \\ & \sigma_2^{\,2} & & \\ & & \sigma_3^{\,2} & \\ & & & \sigma_4^{\,2} \end{pmatrix}$$

générale

$$\mathbf{G}_{sub} = \begin{pmatrix} \sigma_1^2 & \sigma_{12} & \sigma_{13} & \sigma_{14} \\ \sigma_{21} & \sigma_2^2 & \sigma_{23} & \sigma_{24} \\ \sigma_{31} & \sigma_{32} & \sigma_3^2 & \sigma_{34} \\ \sigma_{41} & \sigma_{42} & \sigma_{43} & \sigma_4^2 \end{pmatrix}$$

Matrices R

$$\mathbf{R} = \begin{pmatrix} \mathbf{R}_1 & \mathbf{0} & \mathbf{0} & \cdots & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & \mathbf{R}_2 & \mathbf{0} & \cdots & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & \mathbf{0} & \mathbf{R}_3 & \cdots & \mathbf{0} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \mathbf{0} & \mathbf{0} & \mathbf{0} & \cdots & \mathbf{R}_N \end{pmatrix}$$

$$\mathbf{R}_{Sub} = \begin{pmatrix} \sigma_1^2 & & & & \\ & \sigma_2^2 & & & \\ & & \sigma_3^2 & & \\ & & & \sigma_4^2 & \\ & & & & \sigma_5^2 \end{pmatrix},$$

Diagonal

Homogeneous

$$\begin{pmatrix} \sigma^2 & & & \\ & \sigma^2 & & \\ & & \sigma^2 & \\ & & & \sigma^2 \end{pmatrix}$$

Heterogeneous

$$\begin{pmatrix} \sigma_1^2 & & & \\ & \sigma_2^2 & & \\ & & \sigma_3^2 & \\ & & & \sigma_4^2 \end{pmatrix}$$

Correlation

$$\begin{pmatrix} 1 & & & \\ & 1 & & \\ & & 1 & \\ & & & 1 \end{pmatrix}$$

Compound Symmetry

Homogeneous

$$\begin{pmatrix} \sigma^2 & \rho\sigma^2 & \rho\sigma^2 & \rho\sigma^2 \\ \rho\sigma^2 & \sigma^2 & \rho\sigma^2 & \rho\sigma^2 \\ \rho\sigma^2 & \rho\sigma^2 & \sigma^2 & \rho\sigma^2 \\ \rho\sigma^2 & \rho\sigma^2 & \rho\sigma^2 & \sigma^2 \end{pmatrix}$$

Heterogeneous

$$\begin{pmatrix} \sigma_1^2 & \rho\sigma_1\sigma_2 & \rho\sigma_1\sigma_3 & \rho\sigma_1\sigma_4 \\ \rho\sigma_2\sigma_1 & \sigma_2^2 & \rho\sigma_2\sigma_3 & \rho\sigma_2\sigma_4 \\ \rho\sigma_3\sigma_1 & \rho\sigma_3\sigma_2 & \sigma_3^2 & \rho\sigma_3\sigma_4 \\ \rho\sigma_4\sigma_1 & \rho\sigma_4\sigma_2 & \rho\sigma_4\sigma_3 & \sigma_4^2 \end{pmatrix}$$

Correlation

$$\begin{pmatrix} 1 & \rho & \rho & \rho \\ \rho & 1 & \rho & \rho \\ \rho & \rho & 1 & \rho \\ \rho & \rho & \rho & 1 \end{pmatrix}$$

AR(1)

Homogeneous

$$\begin{pmatrix} \sigma^2 & \rho\sigma^2 & \rho^2\sigma^2 & \rho^3\sigma^2 \\ \rho\sigma^2 & \sigma^2 & \rho\sigma^2 & \rho^2\sigma^2 \\ \rho^2\sigma^2 & \rho\sigma^2 & \sigma^2 & \rho\sigma^2 \\ \rho^3\sigma^2 & \rho^2\sigma^2 & \rho\sigma^2 & \sigma^2 \end{pmatrix}$$

Heterogeneous

$$\begin{pmatrix} \sigma_1^2 & \rho\sigma_1\sigma_2 & \rho^2\sigma_1\sigma_3 & \rho^3\sigma_1\sigma_4 \\ \rho\sigma_2\sigma_1 & \sigma_2^2 & \rho\sigma_2\sigma_3 & \rho^2\sigma_2\sigma_4 \\ \rho^2\sigma_3\sigma_1 & \rho\sigma_3\sigma_2 & \sigma_3^2 & \rho\sigma_3\sigma_4 \\ \rho^3\sigma_4\sigma_1 & \rho^2\sigma_4\sigma_2 & \rho\sigma_4\sigma_3 & \sigma_4^2 \end{pmatrix}$$

Correlation

$$\begin{pmatrix} 1 & \rho & \rho^2 & \rho^3 \\ \rho & 1 & \rho & \rho^2 \\ \rho^2 & \rho & 1 & \rho \\ \rho^3 & \rho^2 & \rho & 1 \end{pmatrix}$$

Toeplitz

Homogeneous

$$\begin{pmatrix} \sigma^2 & \rho_1\sigma^2 & \rho_2\sigma^2 & \rho_3\sigma^2 \\ \rho_1\sigma^2 & \sigma^2 & \rho_1\sigma^2 & \rho_2\sigma^2 \\ \rho_2\sigma^2 & \rho_1\sigma^2 & \sigma^2 & \rho_1\sigma^2 \\ \rho_3\sigma^2 & \rho_2\sigma^2 & \rho_1\sigma^2 & \sigma^2 \end{pmatrix}$$

Heterogeneous

$$\begin{pmatrix} \sigma_1^2 & \rho_1\sigma_1\sigma_2 & \rho_2\sigma_1\sigma_3 & \rho_3\sigma_1\sigma_4 \\ \rho_1\sigma_2\sigma_1 & \sigma_2^2 & \rho_1\sigma_2\sigma_3 & \rho_2\sigma_2\sigma_4 \\ \rho_2\sigma_3\sigma_1 & \rho_1\sigma_3\sigma_2 & \sigma_3^2 & \rho_1\sigma_3\sigma_4 \\ \rho_3\sigma_4\sigma_1 & \rho_2\sigma_4\sigma_2 & \rho_1\sigma_4\sigma_3 & \sigma_4^2 \end{pmatrix}$$

Correlation

$$\begin{pmatrix} 1 & \rho_1 & \rho_2 & \rho_3 \\ \rho_1 & 1 & \rho_1 & \rho_2 \\ \rho_2 & \rho_1 & 1 & \rho_1 \\ \rho_3 & \rho_2 & \rho_1 & 1 \end{pmatrix}$$

Toeplitz(2)

Homogeneous

$$\begin{pmatrix} \sigma^2 & \rho_1\sigma^2 & & \\ \rho_1\sigma^2 & \sigma^2 & \rho_1\sigma^2 & \\ & \rho_1\sigma^2 & \sigma^2 & \rho_1\sigma^2 \\ & & \rho_1\sigma^2 & \sigma^2 \end{pmatrix}$$

Heterogeneous

$$\begin{pmatrix} \sigma_1^2 & \rho_1\sigma_1\sigma_2 & & \\ \rho_1\sigma_2\sigma_1 & \sigma_2^2 & \rho_1\sigma_2\sigma_3 & \\ & \rho_1\sigma_3\sigma_2 & \sigma_3^2 & \rho_1\sigma_3\sigma_4 \\ & & \rho_1\sigma_4\sigma_3 & \sigma_4^2 \end{pmatrix}$$

Correlation

$$\begin{pmatrix} 1 & \rho_1 & & \\ \rho_1 & 1 & \rho_1 & \\ & \rho_1 & 1 & \rho_1 \\ & & \rho_1 & 1 \end{pmatrix}$$

Unstructured

Homogeneous

$$\begin{pmatrix} \sigma^2 & \rho_{12}\sigma^2 & \rho_{13}\sigma^2 & \rho_{14}\sigma^2 \\ \rho_{21}\sigma^2 & \sigma^2 & \rho_{23}\sigma^2 & \rho_{24}\sigma^2 \\ \rho_{31}\sigma^2 & \rho_{32}\sigma^2 & \sigma^2 & \rho_{34}\sigma^2 \\ \rho_{41}\sigma^2 & \rho_{42}\sigma^2 & \rho_{43}\sigma^2 & \sigma^2 \end{pmatrix}$$

Heterogeneous

$$\begin{pmatrix} \sigma_1^2 & \rho_{12}\sigma_1\sigma_2 & \rho_{13}\sigma_1\sigma_3 & \rho_{14}\sigma_1\sigma_4 \\ \rho_{21}\sigma_2\sigma_1 & \sigma_2^2 & \rho_{23}\sigma_2\sigma_3 & \rho_{24}\sigma_2\sigma_4 \\ \rho_{31}\sigma_3\sigma_1 & \rho_{32}\sigma_3\sigma_2 & \sigma_3^2 & \rho_{34}\sigma_3\sigma_4 \\ \rho_{41}\sigma_4\sigma_1 & \rho_{42}\sigma_4\sigma_2 & \rho_{43}\sigma_4\sigma_3 & \sigma_4^2 \end{pmatrix}$$

Correlation

$$\begin{pmatrix} 1 & \rho_{12} & \rho_{13} & \rho_{14} \\ \rho_{21} & 1 & \rho_{23} & \rho_{24} \\ \rho_{31} & \rho_{32} & 1 & \rho_{34} \\ \rho_{41} & \rho_{42} & \rho_{43} & 1 \end{pmatrix}$$