

Обобщенные линейные модели с нормальным распределением остатков

Линейные модели...

Марина Варфоломеева, Вадим Хайтов

Кафедра Зоологии беспозвоночных, Биологический факультет, СПбГУ

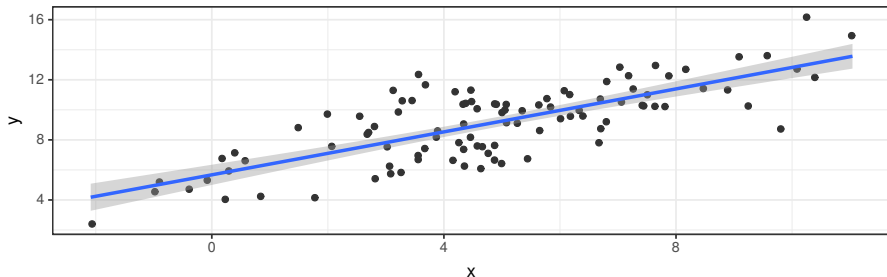


Общая линейная модель — удобный инструмент описания связей

$$y_i = \beta_0 + \beta_1 x_{1i} + \dots + \beta_{p-1} x_{p-1i} + \varepsilon_i,$$

где $\varepsilon_i \sim N(0, \sigma)$.

Предикторы в такой модели могут быть дискретными и непрерывными.



Применимость общих линейных моделей ограничена

$$y_i = \beta_0 + \beta_1 x_{1i} + \dots + \beta_{p-1} x_{p-1i} + \varepsilon_i,$$

где $\varepsilon_i \sim N(0, \sigma)$.

Т.е. на самом деле мы имеем ввиду, что переменная-отклик подчиняется нормальному распределению:

$$y_i \sim N(\mu_i, \sigma)$$

$$E(y_i) = \mu_i = \beta_0 + \beta_1 x_{1i} + \dots + \beta_{p-1} x_{p-1i}$$

Если отклик подчиняется другому распределению, такие модели не годятся.

Последний из двух вариантов записи модели (распределение отклика и линейный предиктор) мы будем использовать дальше.

Обобщенные линейные модели

Обобщенные линейные модели (Generalized Linear Models, GLM, GLZ, GLIM) позволяют моделировать зависимости не только для нормально-распределенных величин, но и для других распределений.

Не путайте обобщенные линейные модели с общими (General Linear Models, тоже сокращаются как GLM).

Важнейшие распределения из семейства экспоненциальных

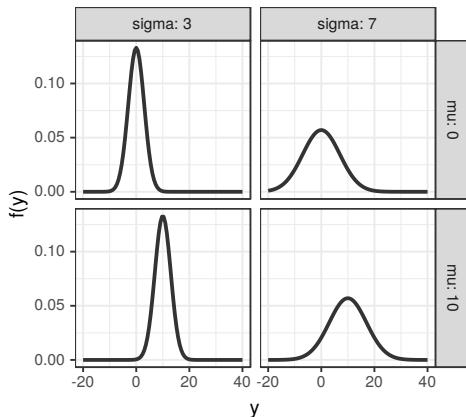
Для непрерывных величин

- ▶ Нормальное распределение
- ▶ Гамма распределение

Для дискретных величин

- ▶ Биномиальное распределение
- ▶ Распределение Пуассона
- ▶ Отрицательное биномиальное распределение

Нормальное распределение



$$f(y) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma^2}} \cdot e^{-\frac{1}{2\sigma^2}(y-\mu)^2}$$

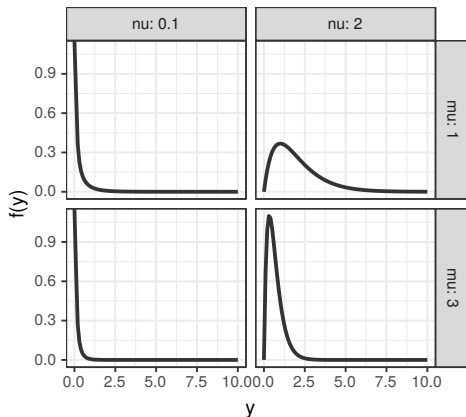
Параметры:

- ▶ μ – среднее
- ▶ σ – стандартное отклонение

Свойства:

- ▶ $E(y) = \mu$ – мат.ожидание
- ▶ $var(y) = \sigma^2$ – функция дисперсии (variance function)
- ▶ $-\infty \leq y \leq +\infty, y \in \mathbb{R}$ – диапазон значений

Гамма-распределение



$$f(y) = \frac{1}{\Gamma(\nu)} \cdot \left(\frac{\nu}{\mu}\right)^\nu \cdot y^{\nu-1} \cdot e^{-\frac{y \cdot \nu}{\mu}}$$

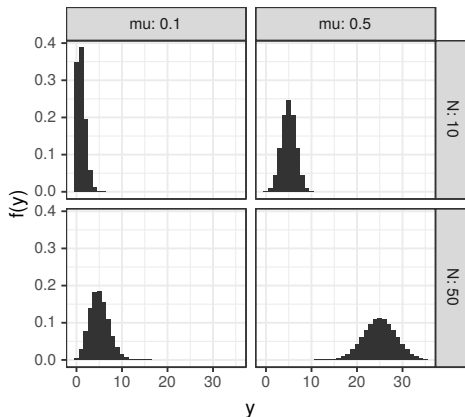
Параметры:

- ▶ μ – среднее
- ▶ ν – определяет степень избыточности дисперсии

Свойства:

- ▶ $E(y) = \mu$ – мат.ожидание
- ▶ $var(y) = \frac{\mu^2}{\nu}$ – функция дисперсии
- ▶ $0 < y \leq +\infty$, $y \in \mathbb{R}$ – диапазон значений

Биномиальное распределение



$$f(y) = \frac{n!}{y! \cdot (n - y)!} \cdot \pi^y \cdot (1 - \pi)^{n-y}$$

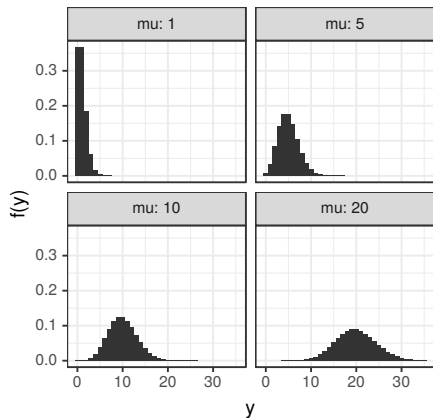
Параметры:

- ▶ n – число объектов в испытании
- ▶ π – вероятность того, что $y = 1$

Свойства:

- ▶ $E(y) = n \cdot \pi$ – мат.ожидание
- ▶ $var(y) = n \cdot \pi \cdot (1 - \pi)$ – функция дисперсии
- ▶ $0 \leq y \leq +\infty, y \in \mathbb{N}$ – диапазон значений

Распределение Пуассона



$$f(y) = \frac{\mu^y \cdot e^{-\mu}}{y!}$$

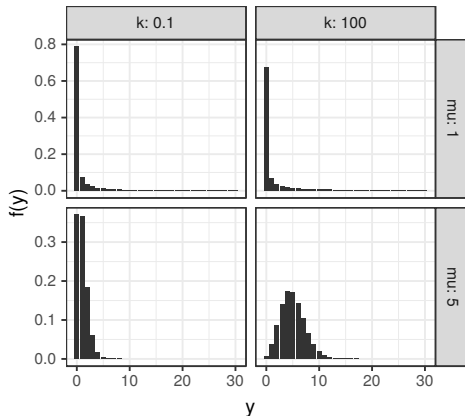
Параметр:

- ▶ μ – задает среднее и дисперсию

Свойства:

- ▶ $E(y) = \mu$ — мат.ожидание
- ▶ $var(y) = \mu$ — функция дисперсии
- ▶ $0 \leq y \leq +\infty, y \in \mathbb{N}$ — диапазон значений

Отрицательное биномиальное распределение



$$f(y) = \frac{\Gamma(y + k)}{\Gamma(k) \cdot \Gamma(y + 1)} \cdot \left(\frac{k}{\mu + k}\right)^k \cdot \left(1 - \frac{k}{\mu + k}\right)^y$$

Параметры:

- ▶ μ – среднее
- ▶ k – определяет степень избыточности дисперсии

Свойства:

- ▶ $E(y) = \mu$ – мат.ожидание
- ▶ $var(y) = \mu + \frac{\mu^2}{k}$ – функция дисперсии
- ▶ $0 \leq y \leq +\infty, y \in \mathbb{N}$ – диапазон значений

Обобщенные линейные модели (Generalized Linear Models)

Обобщенные линейные модели (Nelder, Wedderburn, 1972)

- ▶ Позволяют моделировать не только величины, подчиняющиеся нормальному распределению, но и другим распределениям из семейства экспоненциальных.
- ▶ Подбор коэффициентов делается методом максимального правдоподобия.

Чем отличается обобщенная линейная модель от общей?

На примере нормального распределения $f(y_i|\theta) = N(\mu_i, \sigma)$

Общая линейная модель состоит из двух компонентов

$$y_i \sim f(y_i|\theta)$$

$$E(y_i) = \mu_i = \beta_0 + \beta_1 x_{1i} + \dots + \beta_{p-1} x_{p-1i}$$

Чем отличается обобщенная линейная модель от общей?

На примере нормального распределения $f(y_i|\theta) = N(\mu_i, \sigma)$

Общая линейная модель состоит из двух компонентов

$$y_i \sim f(y_i|\theta)$$

$$E(y_i) = \mu_i = \beta_0 + \beta_1 x_{1i} + \dots + \beta_{p-1} x_{p-1i}$$

Обобщенная линейная модель состоит из трех компонентов

$$y_i \sim f(y_i|\theta)$$

$$E(y_i) = \mu_i = g^{-1}(\beta_0 + \beta_1 x_{1i} + \dots + \beta_{p-1} x_{p-1i})$$

$$g(\mu_i) = \eta_i$$

$$\eta_i = \beta_0 + \beta_1 x_{1i} + \dots + \beta_{p-1} x_{p-1i}$$

- ▶ Случайная часть — $y_i \sim f(y_i|\theta)$ — распределение из семейства экспоненциальных с параметрами θ .
- ▶ Фиксированная часть.

Компонент, который появляется в GLM:

- ▶ $g()$ — функция связи, которая трансформирует мат. ожидание отклика в линейный предиктор (обратная функция обозначается $g^{-1}()$).

Функция связи

$$y_i \sim f(y_i|\theta)$$

$$E(y_i) = \mu_i = g^{-1}(\beta_0 + \beta_1 x_{1i} + \dots + \beta_{p-1} x_{p-1i})$$

$$g(\mu_i) = \eta_i$$

$$\eta_i = \beta_0 + \beta_1 x_{1i} + \dots + \beta_{p-1} x_{p-1i}$$

Функция связи $g(\mu)$ используется разная в зависимости от распределения $f(y_i|\theta)$.

Функция связи

$$y_i \sim f(y_i|\theta)$$

$$E(y_i) = \mu_i = g^{-1}(\beta_0 + \beta_1 x_{1i} + \dots + \beta_{p-1} x_{p-1i})$$

$$g(\mu_i) = \eta_i$$

$$\eta_i = \beta_0 + \beta_1 x_{1i} + \dots + \beta_{p-1} x_{p-1i}$$

Функция связи $g(\mu)$ используется разная в зависимости от распределения $f(y_i|\theta)$.

Например:

Идентичность:

$$E(y_i) = \mu_i$$

$$\mu_i = \eta_i$$

$$\eta_i = \beta_0 + \beta_1 x_{1i} + \dots + \beta_{p-1} x_{p-1i}$$

Функция связи

$$y_i \sim f(y_i|\theta)$$

$$E(y_i) = \mu_i = g^{-1}(\beta_0 + \beta_1 x_{1i} + \dots + \beta_{p-1} x_{p-1i})$$

$$g(\mu_i) = \eta_i$$

$$\eta_i = \beta_0 + \beta_1 x_{1i} + \dots + \beta_{p-1} x_{p-1i}$$

Функция связи $g(\mu)$ используется разная в зависимости от распределения $f(y_i|\theta)$.

Например:

Идентичность:

$$E(y_i) = \mu_i$$

$$\mu_i = \eta_i$$

$$\eta_i = \beta_0 + \beta_1 x_{1i} + \dots + \beta_{p-1} x_{p-1i}$$

Логарифм:

$$E(y_i) = e^{\beta_0 + \beta_1 x_{1i} + \dots + \beta_{p-1} x_{p-1i}}$$

$$\ln(\mu_i) = \eta_i$$

$$\eta_i = \beta_0 + \beta_1 x_{1i} + \dots + \beta_{p-1} x_{p-1i}$$

Функция связи

$$y_i \sim f(y_i|\theta)$$

$$E(y_i) = \mu_i = g^{-1}(\beta_0 + \beta_1 x_{1i} + \dots + \beta_{p-1} x_{p-1i})$$

$$g(\mu_i) = \eta_i$$

$$\eta_i = \beta_0 + \beta_1 x_{1i} + \dots + \beta_{p-1} x_{p-1i}$$

Функция связи $g(\mu)$ используется разная в зависимости от распределения $f(y_i|\theta)$.

Например:

Идентичность:

$$E(y_i) = \mu_i$$

$$\mu_i = \eta_i$$

$$\eta_i = \beta_0 + \beta_1 x_{1i} + \dots + \beta_{p-1} x_{p-1i}$$

Логарифм:

$$E(y_i) = e^{\beta_0 + \beta_1 x_{1i} + \dots + \beta_{p-1} x_{p-1i}}$$

$$\ln(\mu_i) = \eta_i$$

$$\eta_i = \beta_0 + \beta_1 x_{1i} + \dots + \beta_{p-1} x_{p-1i}$$

Логит:

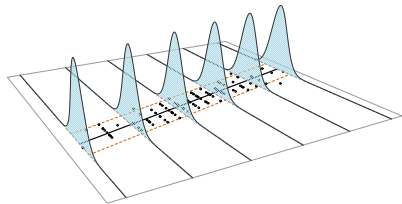
$$E(y_i) = \frac{e^{\beta_0 + \beta_1 x_{1i} + \dots + \beta_{p-1} x_{p-1i}}}{1 + e^{\beta_0 + \beta_1 x_{1i} + \dots + \beta_{p-1} x_{p-1i}}}$$

$$\ln\left(\frac{\mu_i}{1 - \mu_i}\right) = \eta_i$$

$$\eta_i = \beta_0 + \beta_1 x_{1i} + \dots + \beta_{p-1} x_{p-1i}$$

Параметры обобщенных линейных моделей подбирают методом максимального правдоподобия

Правдоподобие (likelihood) — измеряет соответствие реально наблюдаемых данных тем, что можно получить из модели при определенных значениях параметров.



Это произведение вероятностей получения каждой из точек данных:

$$L(\theta|\text{data}) = \prod_{i=1}^n f(\text{data}|\theta)$$

► $f(\text{data}|\theta)$ — функция распределения с параметрами θ

Нужно найти параметры θ , которые максимизируют правдоподобие:

$$L(\theta|\text{data}) \rightarrow \max$$

Вычислительно проще работать с логарифмами правдоподобий (loglikelihood):

$$\ln L(\theta|\text{data}) \rightarrow \max$$

Редко можно решить аналитически, обычно используются численные решения.



Пример – энергетическая ценность икры

Один из показателей, связанных с жизнеспособностью икры – доля сухого вещества. Она пропорциональна количеству запасенной энергии.

Отличается ли энергетическая ценность икры большой озерной форели в сентябре и ноябре?

Данные: Lantry et al., 2008

Источник: пакет Stat2Data

Открываем данные

```
library(Stat2Data)
data(FishEggs)
```

Все ли правильно открылось?

```
str(FishEggs)
```

```
# 'data.frame': 35 obs. of  4 variables:
# $ Age   : int  7 8 8 9 9 9 9 10 10 11 ...
# $ PctDM: num  37.4 38 37.5 39 37.9 ...
# $ Month: Factor w/ 2 levels "Nov","Sep": 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 ...
# $ Sept  : int  0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 ...
```

Нет ли пропущенных значений?

```
colSums(is.na(FishEggs))
```

```
#   Age PctDM Month  Sept
#    0     0     0     0
```

Меняем порядок уровней факторов

Уровни факторов в исходных данных:

```
levels(FishEggs$Month)
```

```
# [1] "Nov" "Sep"
```

Делаем базовым уровнем сентябрь.

```
FishEggs$Month <- relevel(FishEggs$Month, ref = 'Sep')
```

Теперь уровни в хронологическом порядке:

```
levels(FishEggs$Month)
```

```
# [1] "Sep" "Nov"
```

Объемы выборки

```
table(FishEggs$Month)
```

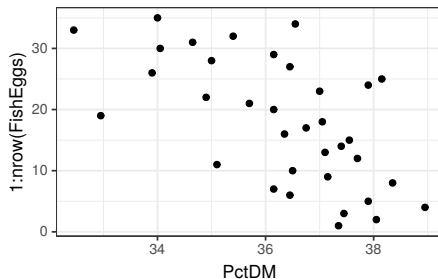
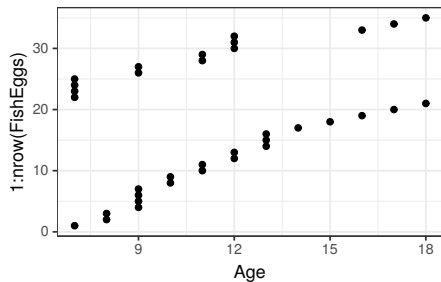
```
#
```

```
# Sep Nov
```

```
# 14 21
```

Ищем выбросы

```
library(cowplot)
library(ggplot2)
theme_set(theme_bw())
gg_dot <- ggplot(FishEggs, aes(y = 1:nrow(FishEggs))) + geom_point()
plot_grid(gg_dot + aes(x = Age),
          gg_dot + aes(x = PctDM), nrow = 1)
```



Модель для описания питательной ценности икры

GLM с нормальным распределением отклика

$$y_i \sim N(\mu_i, \sigma)$$

$$E(y_i) = \mu_i$$

$\mu_i = \eta_i$ — функция связи “идентичность” (identity)

$$\eta_i = \beta_0 + \beta_1 x_{1i} + \dots + \beta_{p-1} x_{p-1i}$$

Модель зависимости в примере

Как зависит питательная ценность икры от месяца вылова рыбы (сентябрь или ноябрь) с учетом ковариаты (возраста рыбы) и их взаимодействия.

$$PctDM_i \sim N(\mu_i, \sigma)$$

$$E(PctDM_i) = \mu_i$$

$$\mu_i = \eta_i$$

$$\eta_i = \beta_0 + \beta_1 Age_i + \beta_2 Month_{Nov\ i} + \beta_3 Age_i Month_{Nov\ i}$$

- ▶ $PctDM_i$ – содержание сухого вещества в икре
- ▶ Age_i – возраст рыбы
- ▶ $Month_{Nov\ i}$ – переменная-индикатор для уровня $Month_{Nov\ i} = 1$

Подбираем модель

```
mod <- glm(PctDM ~ Age * Month, data = FishEggs)
mod
```

```
#
# Call:  glm(formula = PctDM ~ Age * Month, data = FishEggs)
#
# Coefficients:
# (Intercept)          Age      MonthNov  Age:MonthNov
#   38.121109    -0.239649    1.276226    0.021435
#
# Degrees of Freedom: 34 Total (i.e. Null);  31 Residual
# Null Deviance:      83.962
# Residual Deviance: 47.829    AIC: 120.26
```

Чтобы записать модель, нужна еще сигма.

```
sigma(mod)
```

```
# [1] 1.242124
```

$$PctDM_i \sim N(\mu_i, 1.24)$$

$$E(PctDM_i) = \mu_i$$

$$\mu_i = \eta_i$$

$$\eta_i = 38.12 - 0.24Age_i + 1.28Month_{Nov\ i} + 0.02Age_iMonth_{Nov\ i}$$

Диагностика модели

Разновидности остатков в GLM

Остатки в масштабе отклика (response residuals)

$$e_i = y_i - E(y_i)$$

- Это разница между наблюдаемым и предсказанным значениями.

► Аналог “сырых” остатков в простой линейной регрессии.

```
resid(mod, type = 'response')[1:5]
```

#	1	2	3	4	5
#	-0.51984205	0.39837117	-0.20162883	1.51658440	0.46658440

Разновидности остатков в GLM

Остатки в масштабе отклика (response residuals)

$$e_i = y_i - E(y_i)$$

- Это разница между наблюдаемым и предсказанным значениями.

► Аналог “сырых” остатков в простой линейной регрессии.

```
resid(mod, type = 'response')[1:5]
```

#	1	2	3	4	5
#	-0.51984205	0.39837117	-0.20162883	1.51658440	0.46658440

Пирсоновские остатки (Pearson's residuals)

$$r_{pi} = \frac{y_i - E(y_i)}{\sqrt{var(y_i)}}$$

► Это обычные остатки, деленные на стандартную ошибку предсказанного значения.

► Аналог стандартизованных остатков в простой линейной регрессии.

```
resid(mod, type = 'pearson')[1:5]
```

#	1	2	3	4	5
#	-0.51984205	0.39837117	-0.20162883	1.51658440	0.46658440

Для GLM с нормальным распределением отклика оба типа остатков одинаковы.

Условия применимости GLM с нормальным распределением отклика

- ▶ Случайность и независимость наблюдений внутри групп.
- ▶ Нормальное распределение остатков.
- ▶ Гомогенность дисперсий остатков.
- ▶ Отсутствие коллинеарности предикторов.

Проверка на коллинеарность

```
library(car)  
vif(update(mod, . ~ . - Age:Month))
```

```
#      Age      Month  
# 1.0066662 1.0066662
```

Коллинеарности нет.

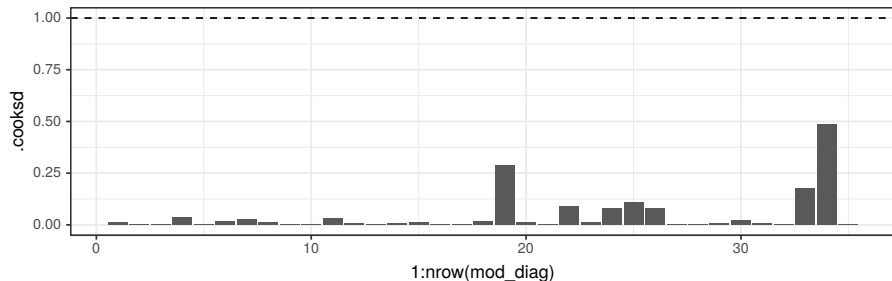
Данные для анализа остатков

```
mod_diag <- fortify(mod) # функция из пакета ggplot2
head(mod_diag)
```

```
#   PctDM Age Month      .hat      .sigma      .cooks      .fitted      .resid
# 1 37.35   7   Nov 0.158193485 1.2584119 0.0097750037 37.869842 -0.51984205
# 2 38.05   8   Nov 0.115498519 1.2602858 0.0037963407 37.651629  0.39837117
# 3 37.45   8   Nov 0.115498519 1.2620496 0.0009725112 37.651629 -0.20162883
# 4 38.95   9   Nov 0.083168806 1.2290967 0.0368743995 37.433416  1.51658440
# 5 37.90   9   Nov 0.083168806 1.2595182 0.0034902153 37.433416  0.46658440
# 6 36.45   9   Nov 0.083168806 1.2486553 0.0155047929 37.433416 -0.98341560
#      .stdresid
# 1 -0.45614226
# 2  0.34101514
# 3 -0.17259904
# 4  1.27513725
# 5  0.39230204
# 6 -0.82685135
```

График расстояния Кука

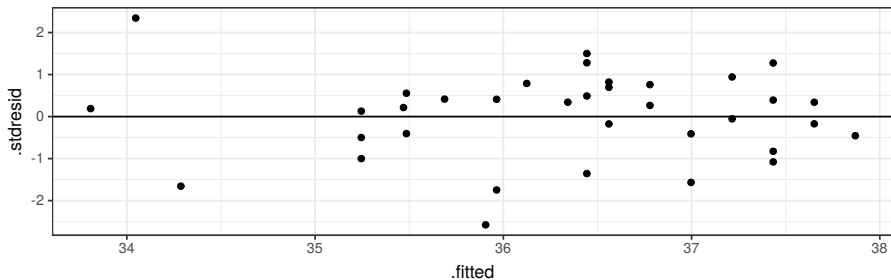
```
ggplot(mod_diag, aes(x = 1:nrow(mod_diag), y = .cooks)) +  
  geom_bar(stat = 'identity') +  
  geom_hline(yintercept = 1, linetype = 2)
```



Влиятельных наблюдений нет.

График остатков от предсказанных значений

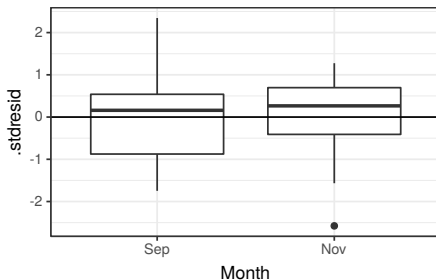
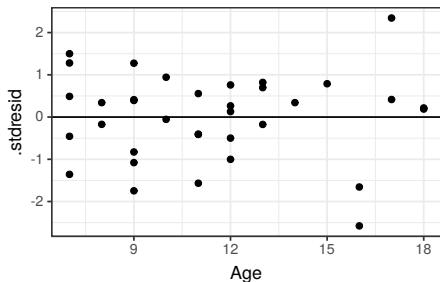
```
gg_resid <- ggplot(data = mod_diag, aes(x = .fitted, y = .stdresid)) +  
  geom_point() + geom_hline(yintercept = 0)  
gg_resid
```



Влиятельных наблюдений нет

График зависимости остатков от предикторов в модели

```
ggplot(data = mod_diag, aes(x = Age, y = .stdresid)) +  
  geom_point() + geom_hline(yintercept = 0)  
ggplot(data = mod_diag, aes(x = Month, y = .stdresid)) +  
  geom_boxplot() + geom_hline(yintercept = 0)
```



Гетерогенности дисперсий нет.

Тестирование значимости коэффициентов



Тест Вальда для коэффициентов GLM

$$H_0 : \beta_k = 0$$

$$H_A : \beta_k \neq 0$$

$$\frac{b_k - \beta_k}{SE_{b_k}} = \frac{b_k}{SE_{b_k}} \sim N(0, 1)$$

► b_k — оценка коэффициента GLM.

Хорошо работает только на больших выборках.

Если приходится оценивать σ , то $\frac{b_k}{SE_{b_k}} \sim t_{(df=n-p)}$

► n — объем выборки.

► p — число параметров модели.

В summary() записаны результаты теста Вальда

```
summary(mod)
```

```
#
# Call:
# glm(formula = PctDM ~ Age * Month, data = FishEggs)
#
# Deviance Residuals:
#      Min       1Q   Median       3Q      Max
# -2.95592  -0.55758   0.23050   0.75223   2.50292
#
# Coefficients:
#              Estimate Std. Error t value Pr(>|t|)
# (Intercept)  38.121109   1.064364  35.8159 < 2e-16 ***
# Age         -0.239649   0.091340  -2.6237  0.01338 *
# MonthNov     1.276226   1.511898   0.8441  0.40507
# Age:MonthNov  0.021435   0.127825   0.1677  0.86791
# ---
# Signif. codes:  0 '***' 0.001 '**' 0.01 '*' 0.05 '.' 0.1 ' ' 1
#
# (Dispersion parameter for gaussian family taken to be 1.5428721)
#
#      Null deviance: 83.9619  on 34  degrees of freedom
# Residual deviance: 47.8290  on 31  degrees of freedom
# AIC: 120.256
#
# Number of Fisher Scoring iterations: 2
```

В summary() записаны результаты теста Вальда

```
summary(mod)

#
# Call:
# glm(formula = PctDM ~ Age * Month, data = FishEggs)
#
# Deviance Residuals:
#      Min       1Q   Median       3Q      Max
# -2.95592  -0.55758   0.23050   0.75223   2.50292
#
# Coefficients:
#              Estimate Std. Error t value Pr(>|t|)
# (Intercept)  38.121109   1.064364  35.8159 < 2e-16 ***
# Age          -0.239649   0.091340  -2.6237  0.01338 *
# MonthNov     1.276226   1.511898   0.8441  0.40507
# Age:MonthNov  0.021435   0.127825   0.1677  0.86791
# ---
# Signif. codes:  0 '***' 0.001 '**' 0.01 '*' 0.05 '.' 0.1 ' ' 1
#
# (Dispersion parameter for gaussian family taken to be 1.5428721)
#
#      Null deviance: 83.9619  on 34  degrees of freedom
# Residual deviance: 47.8290  on 31  degrees of freedom
# AIC: 120.256
#
# Number of Fisher Scoring iterations: 2
```

С увеличением возраста рыбы на год процент сухого вещества в икре снижается на 0.24 % (тест Вальда, $t_{df=31} = -2.62$, $p = 0.013$). Это происходит одинаково в сентябре и ноябре. Энергетическая ценность икры в сентябре и ноябре не различается.

Насыщенная и нулевая модели задают шкалу для сравнений с предложенной

Насыщенная модель – каждое уникальное наблюдение (сочетание значений предикторов) описывается одним из n параметров.

$$\ln L_{saturated} = 0$$

$$df_{saturated} = n - p_{saturated} = n - n = 0$$

Предложенная модель – модель, подобранная в данном анализе

$$\hat{y}_i = \beta_0 + \beta_1 x_{1i} + \dots + \beta_{p-1} x_{p-1i}$$

$$\ln L_{model} \neq 0$$

$$df_{model} = n - p_{model}$$

Нулевая модель – все наблюдения описываются одним параметром (средним)

$$\hat{y}_i = \beta_0$$

$$\ln L_{null} \neq 0$$

$$df_{null} = n - p_{null} = n - 1$$

Девianza

Это мера различия правдоподобий двух моделей (оценка разницы логарифмов правдоподобий).

Остаточная девианса

$$d_{residual} = 2(\ln L_{saturated} - \ln L_{model}) = -2\ln L_{model}$$

Нулевая девианса

$$d_{null} = 2(\ln L_{saturated} - \ln L_{null}) = -2\ln L_{null}$$

Сравнение нулевой и остаточной девианс позволяет судить о статистической значимости модели в целом (при помощи теста отношения правдоподобий).

$$d_{null} - d_{residual} = -2(\ln L_{null} - \ln L_{model}) = 2(\ln L_{model} - \ln L_{null})$$

Тест отношения правдоподобий (Likelihood Ratio Test)

Используется для сравнения правдоподобий

$$LRT = 2\ln\left(\frac{L_{M_1}}{L_{M_2}}\right) = 2(\ln L_{M_1} - \ln L_{M_2})$$

- ▶ M_1 и M_2 — вложенные модели (M_1 — более полная, M_2 — уменьшенная),
- ▶ L_{M_1}, L_{M_2} - правдоподобия,
- ▶ $\ln L_{M_1}, \ln L_{M_2}$ - логарифмы правдоподобий.

Сравниваются **вложенные модели, подобранные методом максимального правдоподобия**.

Разница логарифмов правдоподобий имеет распределение, которое можно аппроксимировать распределением χ^2 с числом степеней свободы $df = df_{M_2} - df_{M_1}$.

LRT используется для сравнения моделей

Для тестирования значимости модели целиком:

$$LRT = 2\ln\left(\frac{L_{model}}{L_{null}}\right) = 2(\ln L_{model} - \ln L_{null}) = d_{null} - d_{residual}$$

$$df = df_{null} - df_{model} = (n - 1) - (n - p_{model}) = p_{model} - 1$$

Для тестирования значимости предикторов:

$$LRT = 2\ln\left(\frac{L_{model}}{L_{reduced}}\right) = 2(\ln L_{model} - \ln L_{reduced})$$

$$df = df_{reduced} - df_{model} = (n - p_{reduced}) - (n - p_{model}) = p_{model} - p_{reduced}$$

Тестируем значимость модели целиком при помощи LRT

```
null_model <- glm(PctDM ~ 1, data = FishEggs)
anova(null_model, mod, test = 'Chi')
```

```
# Analysis of Deviance Table
```

```
#
```

```
# Model 1: PctDM ~ 1
```

```
# Model 2: PctDM ~ Age * Month
```

```
#   Resid. Df Resid. Dev Df Deviance    Pr(>Chi)
```

```
# 1          34      83.9619
```

```
# 2          31      47.8290  3  36.1328 0.000033021 ***
```

```
# ---
```

```
# Signif. codes:  0 '***' 0.001 '**' 0.01 '*' 0.05 '.' 0.1 ' ' 1
```

Тестируем значимость предикторов при помощи LRT

Используем II тип тестов ("II тип сумм квадратов"):

1. Тестируем значимость взаимодействия

```
drop1(mod, test = 'Chi')

# Single term deletions
#
# Model:
# PctDM ~ Age * Month
#           Df Deviance      AIC scaled dev. Pr(>Chi)
# <none>          47.8290 120.256
# Age:Month    1  47.8724 118.287   0.0317349   0.85861
```

2. Тестируем значимость предикторов, когда взаимодействие удалено

```
mod_no_int <- update(mod, . ~ . -Age:Month)
drop1(mod_no_int, test = 'Chi')

# Single term deletions
#
# Model:
# PctDM ~ Age + Month
#           Df Deviance      AIC scaled dev.   Pr(>Chi)
# <none>          47.8724 118.287
# Age           1  67.6376 128.384      12.0968 0.00050507 ***
# Month         1  67.1333 128.122      11.8349 0.00058131 ***
# ---
# Signif. codes:  0 '***' 0.001 '**' 0.01 '*' 0.05 '.' 0.1 ' ' 1
```

Запись результатов LRT-тестов значимости предикторов

Содержание сухого вещества в икре зависит от возраста рыбы и месяца ($p < 0.01$, тест отношения правдоподобий, табл. 1). Характер зависимости энергетической ценности икры от возраста одинаков в сентябре и ноябре.

Table 1: Анализ девиансы для модели зависимости энергетической ценности икры от возраста рыбы, месяца и их взаимодействия. Тесты II типа. df — число степеней свободы, D — девианса, p — уровень значимости.

Предиктор	df	D	p
-		47.829	
Возраст:Месяц	1	47.872	0.86
Возраст	1	67.638	<0.01
Месяц	1	67.133	<0.01

Доля объясненной девиансы

Аналог R^2 , одна из характеристик качества подгонки модели.

Остаточная девианса

$$d_{residual} = 2(\ln L_{saturated} - \ln L_{model}) = -2\ln L_{model}$$

Нулевая девианса

$$d_{null} = 2(\ln L_{saturated} - \ln L_{null}) = -2\ln L_{null}$$

Доля объясненной девиансы

$$\frac{d_{null} - d_{residual}}{d_{null}}$$

Долю объясненной девиансы легко вычислить

```
(mod$null.deviance - mod$deviance) / mod$null.deviance
```

```
# [1] 0.43034806
```

Модель объясняет 43% девиансы.

Данные для графика предсказаний

```
library(dplyr)
New_Data <- FishEggs %>% group_by(Month) %>%
  do(data.frame(Age = seq(min(.$Age), max(.$Age), length.out = 100)))
head(New_Data)
```

```
# # A tibble: 6 x 2
# # Groups:   Month [1]
#   Month    Age
#   <fct> <dbl>
# 1 Sep     7
# 2 Sep    7.11
# 3 Sep    7.22
# 4 Sep    7.33
# 5 Sep    7.44
# 6 Sep    7.56
```

Предсказания при помощи predict()

```
Predictions <- predict(mod, newdata = New_Data, se.fit = TRUE)
New_Data$fit <- Predictions$fit # Предсказанные значения
New_Data$se <- Predictions$se.fit # Стандартные ошибки
t_crit <- qt(0.975, df = nrow(FishEggs) - length(coef(mod))) # t для дов. инт.
New_Data$lwr <- New_Data$fit - t_crit * New_Data$se
New_Data$upr <- New_Data$fit + t_crit * New_Data$se

head(New_Data)
```

```
# # A tibble: 6 x 6
# # Groups:   Month [1]
#   Month   Age   fit   se   lwr   upr
#   <fct> <dbl> <dbl> <dbl> <dbl> <dbl>
# 1 Sep     7     36.4 0.499  35.4  37.5
# 2 Sep    7.11  36.4 0.491  35.4  37.4
# 3 Sep    7.22  36.4 0.484  35.4  37.4
# 4 Sep    7.33  36.4 0.476  35.4  37.3
# 5 Sep    7.44  36.3 0.469  35.4  37.3
# 6 Sep    7.56  36.3 0.462  35.4  37.3
```

Данные для графика вручную

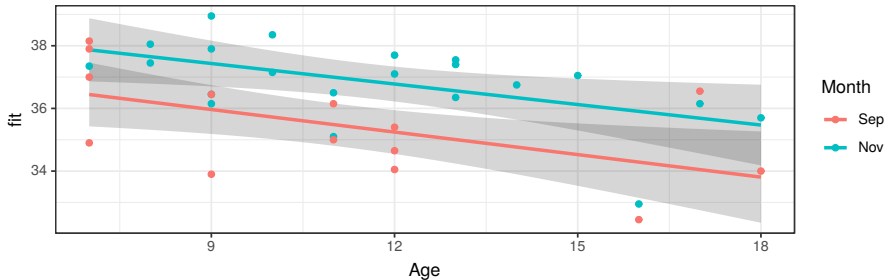
```
X <- model.matrix(~ Age * Month, data = New_Data) # Модельная матрица
betas <- coef(mod) # Коэффициенты
New_Data$fit <- X %*% betas # Предсказанные значения
New_Data$se <- sqrt(diag(X %*% vcov(mod) %*% t(X))) # Стандартные ошибки
t_crit <- qt(0.975, df = nrow(FishEggs) - length(coef(mod))) # t для дов. инт.
New_Data$lwr <- New_Data$fit - t_crit * New_Data$se
New_Data$upr <- New_Data$fit + t_crit * New_Data$se
```

```
head(New_Data)
```

```
# # A tibble: 6 x 6
# # Groups:   Month [1]
#   Month   Age   fit   se   lwr   upr
#   <fct> <dbl> <dbl> <dbl> <dbl> <dbl>
# 1 Sep     7    36.4 0.499  35.4  37.5
# 2 Sep    7.11  36.4 0.491  35.4  37.4
# 3 Sep    7.22  36.4 0.484  35.4  37.4
# 4 Sep    7.33  36.4 0.476  35.4  37.3
# 5 Sep    7.44  36.3 0.469  35.4  37.3
# 6 Sep    7.56  36.3 0.462  35.4  37.3
```

График предсказаний модели

```
Plot_egg <- ggplot(New_Data, aes(x = Age, y = fit)) +  
  geom_ribbon(alpha = 0.2, aes(ymin = lwr, ymax = upr, group = Month)) +  
  geom_line(aes(colour = Month), size = 1) +  
  geom_point(data = FishEggs, aes(x = Age, y = PctDM, colour = Month))  
Plot_egg
```



Подбор “оптимальной” модели

В подобранной можно протестировать значимость влияния предикторов и на этом остановиться.

Или можно упростить модель, аналогично тому, как мы это делали со множественной линейной регрессией, но используя LRT вместо F-теста.

Пытаемся сократить модель

```
mod_no_int <- update(mod, . ~ . -Age:Month)
drop1(mod_no_int, test = 'Chi')
```

```
# Single term deletions
#
# Model:
# PctDM ~ Age + Month
#           Df Deviance      AIC scaled dev.    Pr(>Chi)
# <none>         47.8724 118.287
# Age           1  67.6376 128.384      12.0968 0.00050507 ***
# Month         1  67.1333 128.122      11.8349 0.00058131 ***
# ---
# Signif. codes:  0 '***' 0.001 '**' 0.01 '*' 0.05 '.' 0.1 ' ' 1
```

Если мы решили “сократить” модель, то теперь придется описать модель mod_no_int

Уравнение сокращенной модели

Как зависит питательная ценность икры от месяца вылова рыбы (сентябрь или ноябрь) с учетом ковариаты (возраста рыбы) и их взаимодействия.

```
mod_no_int
```

```
#  
# Call:  glm(formula = PctDM ~ Age + Month, data = FishEggs)  
#  
# Coefficients:  
# (Intercept)          Age      MonthNov  
#    37.9999      -0.2287       1.5193  
#  
# Degrees of Freedom: 34 Total (i.e. Null);  32 Residual  
# Null Deviance:      83.962  
# Residual Deviance: 47.872    AIC: 118.29  
  
# Чтобы записать модель, нужна сигма.  
sigma(mod_no_int)
```

```
# [1] 1.2231162
```

$$PctDM_i \sim N(\mu_i, 1.22)$$

$$E(PctDM_i) = \mu_i$$

$$\mu_i = \eta_i$$

$$\eta_i = 38.0 - 0.23Age_i + 1.52Month_{Nov\ i}$$

Информационные критерии — еще один способ сравнения или упрощения моделей

Информационный критерий Акаике (Akaike Information Criterion, AIC)

$$AIC = -2\log Lik + 2p$$

- ▶ $\log Lik$ - логарифм правдоподобия для модели
- ▶ $2p$ - штраф за введение в модель p параметров, т.е. за “сложность” модели

AIC — это мера потери информации, которая происходит, если реальность описывать этой моделью (Akaike 1974)

AIC — относительная мера качества модели. Т.е. не бывает какого-то “хорошего” AIC. Значения AIC можно интерпретировать только в сравнении с AIC для других моделей: чем меньше AIC — тем лучше модель.

Важно! Информационные критерии можно использовать для сравнения **даже для невложенных моделей**. Но модели должны быть **подобраны с помощью ML и на одинаковых данных!**

Некоторые другие информационные критерии

Критерий	Название	Формула
AIC	Информационный критерий Акаике	$AIC = -2\log Lik + 2p$
BIC	Баесовский информационный критерий	$BIC = -2\log Lik + p \cdot \ln(n)$
AICc	Информационный критерий Акаике с коррекцией для малых выборок (малых относительно числа параметров: $n/p < 40$, Burnham, Anderson, 2004)	$AIC_c = -2\log Lik + 2p + \frac{2p(p+1)}{n-p-1}$

- ▶ $\log Lik$ - логарифм правдоподобия для модели
- ▶ p - число параметров
- ▶ n - число наблюдений

Как рассчитать AIC в GLM?

$$AIC = -2\log Lik + 2p$$

В GLM с нормальным распределением отклика число параметров — это число коэффициентов + 1, т.к. появился дополнительный параметр σ

$$PctDM_i \sim N(\mu_i, 1.22)$$

$$E(PctDM_i) = \mu_i$$

$$\mu_i = \eta_i$$

$$\eta_i = 38.0 - 0.23Age_i + 1.52Month_{Nov\ i}$$

```
(p <- length(coef(mod_no_int)) + 1) # число параметров
```

```
# [1] 4
```

```
logLik(mod_no_int) # Логарифм правдоподобия
```

```
# 'log Lik.' -55.1437 (df=4)
```

```
as.numeric(-2 * logLik(mod_no_int) + 2 * p)
```

```
# [1] 118.2874
```

```
# Есть готовая функция
```

```
AIC(mod_no_int)
```

```
# [1] 118.2874
```

АІС удобно использовать для сравнения моделей, даже невложенных

Пусть у нас есть несколько моделей:

```
mod <-      glm(formula = PctDM ~ Age * Month, data = FishEggs)
mod_no_int <- glm(formula = PctDM ~ Age + Month, data = FishEggs)
mod_age <-   glm(formula = PctDM ~ Age,          data = FishEggs)
mod_month <- glm(formula = PctDM ~ Month,        data = FishEggs)
```

```
AIC(mod, mod_no_int, mod_age, mod_month)
```

#	df	AIC
# mod	5	120.25567
# mod_no_int	4	118.28740
# mod_age	3	128.12230
# mod_month	3	128.38424

Судя по AIC, лучшая модель `mod_no_int`. Если значения AIC различаются всего на 1-2 единицу — такими различиями можно пренебречь и выбрать более простую модель (`mod_no_int`).

Take-home messages

- ▶ Обобщенные линейные модели (Generalized Linear Models, GLM) позволяют моделировать зависимости для откликов с распределением из семейства экспоненциальных
- ▶ Для тестирования предикторов в GLM используются:
 - ▶ Тесты Вальда для коэффициентов (плохо на малых выборках).
 - ▶ Тесты отношения правдоподобий вложенных моделей (более точно).
- ▶ Доля объясненной девиансы оценивает качество подгонки GLM
- ▶ Сравнивая модели можно отбраковать переменные, включение которых в модель не улучшает ее
- ▶ **Метод сравнения моделей нужно выбрать заранее, еще до анализа**

Что почитать

- ▶ Zuur, A.F. and Ieno, E.N., 2016. A protocol for conducting and presenting results of regression-type analyses. *Methods in Ecology and Evolution*, 7(6), pp.636-645.
- ▶ Кабаков Р.И. R в действии. Анализ и визуализация данных на языке R. М.: ДМК Пресс, 2014
- ▶ Zuur, A., Ieno, E.N. and Smith, G.M., 2007. *Analyzing ecological data*. Springer Science & Business Media.
- ▶ Quinn G.P., Keough M.J. 2002. *Experimental design and data analysis for biologists*
- ▶ Logan M. 2010. *Biostatistical Design and Analysis Using R. A Practical Guide*