## Линейные модели с дискретными предикторами

Линейные модели...

Марина Варфоломеева, Вадим Хайтов

Кафедра Зоологии беспозвоночных, Биологический факультет, СПбГУ



# Линейные модели с дискретными предикторами (дисперсионный анализ)

#### Вы сможете

- Объяснить, в чем опасность множественных сравнений, и как с ними можно бороться
- Рассказать, как в дисперсионном анализе моделируются значения зависимой переменной
- Перечислить и проверить условия применимости дисперсионного анализа
- Интерпретировать и описать результаты, записанные в таблице дисперсионного анализа
- Провести множественные попарные сравнения при помощи post hoc теста Тьюки, представить и описать их результаты
- ▶ Построить график результатов дисперсионного анализа



## Множественные сравнения



#### Пример: яйца кукушек

- ▶ species вид птиц-хозяев (фактор)
- ▶ length длина яиц кукушек в гнездах хозяев (зависимая переменная)

```
library(DAAG)
data("cuckoos")
# Положим данные в переменную с коротким названием, чтобы меньше печатать
cu <- cuckoos
head(cu, 3)</pre>
```

```
# length breadth species id
# 1 21.7 16.1 meadow.pipit 21
# 2 22.6 17.0 meadow.pipit 22
# 3 20.9 16.2 meadow.pipit 23
```



## Исследуем данные

```
# Пропущенных значений нет
sum(is.na(cu))
# [1] 0
# Данные не сбалансированы (размеры групп разные)
table(cu$species)
#
  hedge.sparrow
                 meadow.pipit pied.wagtail
                                                     robin
                                                               tree.pipit
             14
                            45
                                                         16
                                          15
                                                                       15
           wren
             15
```



## Изменим названия уровней фактора, чтобы было легче понять о каких птицах речь

```
levels(cu$species)
```



#### Задание: Постройте график

Постройте график зависимости размера яиц кукушек от вида птиц-хозяев, в гнездах которых были обнаружены яйца (используйте geom\_boxplot).

Раскрасьте график в зависимости от вида птиц-хозяев (используйте эстетики fill или colour)

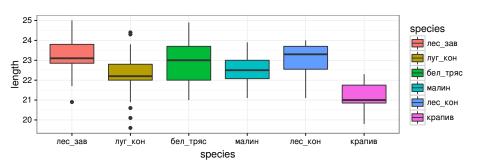
#### Дополнительное задание:

Попробуйте сменить палитру раскраски, используя scale\_colour\_brewer (варианты можно посмотреть в справке в подразделе примеров или в интернете Colors (ggplot2): раздел RColorBrewer palette chart



#### Решение

```
library(ggplot2)
theme_set(theme_bw())
ggplot(data = cu, aes(x = species, y = length)) +
  geom_boxplot(aes(fill = species))
```



 Сейчас боксы расположены в беспорядке. Хорошо бы поменять порядок уровней



## Меняем порядок уровней

Упорядочим уровни по убыванию средней длины яиц.

- 1. при помощи функции reorder() упорядочиваем по возрастанию средней длины яиц
- меняем порядок уровней на противоположный при помощи функции rev().

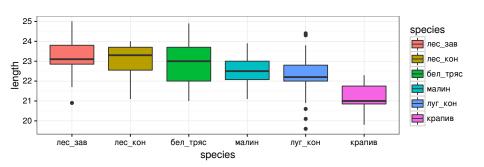
```
cu$species <- reorder(cu$species, cu$length, FUN = mean)
cu$species <- factor(cu$species, levels = rev(levels(cu$species)))</pre>
```



## График с новым порядком уровней

Поскольку изменив порядок уровней мы внесли изменения в исходные данные, придется полностью обновить график (т.к.ggplot() хранит данные внутри графика).

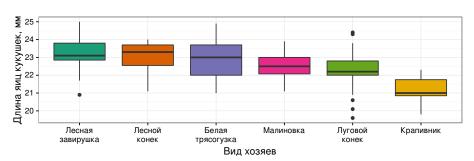
```
ggplot(data = cu, aes(x = species, y = length)) +
  geom_boxplot(aes(fill = species))
```





## Понравившийся график, если понадобится, можно в любой момент довести до ума, а остальные удалить

```
ggplot(data = cu, aes(x = species, y = length)) +
  geom_boxplot(aes(fill = species)) +
  labs(x = "Вид хозяев", y = "Длина яиц кукушек, мм") +
  scale_fill_brewer(name = "Вид \nxозяев", palette = "Dark2") +
  scale_x_discrete(labels = c("Лесная\nзавирушка", "Лесной\nконек",
  "Белая\nтрясогузка", "Малиновка", "Луговой\nконек", "Крапивник")) +
  theme(legend.position = "none")
```





#### Множественные сравнения

Мы могли бы сравнить длину яиц в гнездах резных хозяев при помощи t-критерия.

- 6 групп
- 15 сравнений

Если для каждого сравнения вероятность ошибки первого рода будет  $lpha_{\it per\ comparison}=$  0.05, то для группы — ?



## Множественные сравнения

Мы могли бы сравнить длину яиц в гнездах резных хозяев при помощи t-критерия.

- 6 групп
- 15 сравнений

Если для каждого сравнения вероятность ошибки первого рода будет  $lpha_{\it per\ comparison}=$  0.05, то для группы — ?

$$\alpha_{\it family wise} = 0.05*15 = 0.75$$

Мы рискуем найти различия там где их нет с 75% вероятностью!!!



## Поправка Бонферрони

Если нужно много сравнений, можно снизить  $lpha_{\it per\ comparison}$ 

$$\alpha_{\textit{per comparison}} = \frac{\alpha_{\textit{family wise}}}{\textit{n}}$$



## Поправка Бонферрони

Если нужно много сравнений, можно снизить  $lpha_{\it per\ comparison}$ 

$$\alpha_{\textit{per comparison}} = \frac{\alpha_{\textit{family wise}}}{\textit{n}}$$

Например, если хотим зафиксировать  $lpha_{\mathit{family wise}} = 0.05$ 

С поправкой Бонферрони  $lpha_{\it per comparison} = 0.05/15 = 0.003$ 

Очень жесткий критерий!



Модель однофакторного дисперсионного анализа



## Модель фиктивных переменных, contr.treatment

Модель  $\mathbf{y}_{ij}=\mu+lpha_i+arepsilon_{ij}$ , если  $lpha_1=\mathbf{0}$  примет уже знакомую нам форму

$$y_{ij} = \beta_0 + \beta_1 x_1 + \dots + \beta_i x_i + \varepsilon_{ij}$$

Коэффициенты линейной модели обозначают отклонения от базового уровня

| Группа | Среднее на базовом<br>уровне | Эффект для данного<br>уровня | Случайная<br>изменчивость |
|--------|------------------------------|------------------------------|---------------------------|
| A1     | $eta_{	extsf{0}}$            |                              | $arepsilon_{1j}$          |
| A2     | $eta_{	extsf{o}}$            | $eta_{\mathtt{1}}$           | $arepsilon_{2j}$          |
|        |                              | ***                          |                           |
| Ai     | $eta_{f 0}$                  | $eta_{i}$                    | $arepsilon_{ij}$          |



#### Задание:

Сколько переменных-болванок нужно, чтобы записать модель зависимости длины яиц кукушек от вида птиц-хозяев?



#### Решение:

Сколько переменных-болванок нужно, чтобы записать модель зависимости длины яиц кукушек от вида птиц-хозяев?

▶ 5 переменных-болванок, т.к. 6 уровней у фактора species

#### levels(cu\$species)

```
# [1] "лес_зав" "лес_кон" "бел_тряс" "малин" "луг_кон" "крапив"
```

Уровень лес\_зав будет базовым, и для его кодирования не нужна отдельная переменная).



## Дисперсионный анализ в матричном виде

Уравнение линейной модели для этого примера (в параметризации фиктивных переменных, contr.treatment):

$$y_i = \beta_0 + \beta_1 x_{1i} + \dots + \beta_5 x_{5i} + \varepsilon_i$$

- ightharpoonup Здесь i=1,...,n, т.е. порядковый номер наблюдения,
- $ightharpoonup x_{1i},...,x_{5i}$  переменные-болванки для фактора species

Если расписать эту формулу, получится по отдельному уравнению для каждого из наблюдений:

$$y_{1} = \beta_{0} + \beta_{1}x_{11} + \dots + \beta_{5}x_{51} + \varepsilon_{i}$$

$$y_{2} = \beta_{0} + \beta_{1}x_{12} + \dots + \beta_{5}x_{52} + \varepsilon_{i}$$

$$\vdots$$

$$y_{n} = \beta_{0} + \beta_{1}x_{1n} + \dots + \beta_{5}x_{5n} + \varepsilon_{n}$$



#### Эту систему уравнений

$$y_{1} = \beta_{0} + \beta_{1}x_{11} + \dots + \beta_{5}x_{51} + \varepsilon_{i}$$

$$y_{2} = \beta_{0} + \beta_{1}x_{12} + \dots + \beta_{5}x_{52} + \varepsilon_{i}$$

$$\vdots$$

$$y_{n} = \beta_{0} + \beta_{1}x_{1n} + \dots + \beta_{5}x_{5n} + \varepsilon_{n}$$

#### можно переписать в виде матриц:

$$\begin{bmatrix} y_1 \\ y_2 \\ \vdots \\ y_n \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & x_{11} & \cdots & x_{51} \\ 1 & x_{12} & \cdots & x_{52} \\ \vdots & & & \\ 1 & x_{1n} & \cdots & x_{5n} \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} \beta_0 \\ \beta_1 \\ \beta_3 \\ \beta_4 \\ \beta_5 \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} \varepsilon_1 \\ \varepsilon_2 \\ \vdots \\ \varepsilon_n \end{bmatrix}$$



Для такой длинной формы записи матриц

$$\begin{bmatrix} y_1 \\ y_2 \\ \vdots \\ y_n \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & x_{11} & \cdots & x_{51} \\ 1 & x_{12} & \cdots & x_{52} \\ \vdots & & & & \\ 1 & x_{1n} & \cdots & x_{5n} \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} \beta_0 \\ \beta_1 \\ \beta_3 \\ \beta_4 \\ \beta_5 \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} \varepsilon_1 \\ \varepsilon_2 \\ \vdots \\ \varepsilon_n \end{bmatrix}$$

есть сокращенная форма записи:

$$\mathbf{Y} = \mathbf{X}\boldsymbol{\beta} + \boldsymbol{\varepsilon}$$

- **Y** матрица предсказанных значений, 1 столбец в *n* строк (*n* число наблюдений)
- X матрица независимых переменных с п строк, ее первый столбец содержит единицы, далее по столбцу для каждой из переменных в модели
- lacktriangleright eta матрица коэффициентов линейной модели, столбец
- $\triangleright$   $\varepsilon$  матрица остатков, 1 столбец в n строк



## Модельная матрица **X** в дисперсионном анализе

Посмотреть своими глазами на эти переменные-болванки можно так:

```
X <- model.matrix(~ species, data = cu)
head(X)</pre>
```

```
(Intercept) speciesлес кон speciesбел тряс speciesмалин
#
    speciesлуг кон speciesкрапив
```



Условия примененимости дисперсионного анализа



#### Условия применимости дисперсионного анализа:

- ▶ Случайность и независимость наблюдений внутри групп
- Нормальное распределение остатков
- ▶ Гомогенность дисперсий остатков
- ▶ Отсутствие колинеарности факторов (независимость групп)

#### Другие ограничения:

- Лучше работает, если размеры групп примерно одинаковы (т.наз. сбалансированный дисперсионный комплекс)
- Устойчив к отклонениям от нормального распределения (при равных объемах групп или при больших выборках)



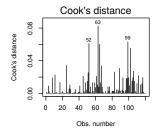
#### Задание:

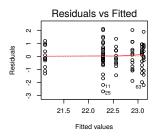
- Подберите линейную модель зависимости длины яиц кукушек в гнездах от вида птиц-хозяев
- ▶ Проверьте условия применимости

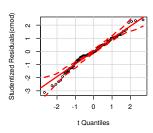


#### Решение:

```
cmod <- lm(length ~ species, data = cu)
library(car)
op <- par(mfrow = c(1, 3))
plot(cmod, which = 4)
plot(cmod, which = 1)
qqPlot(cmod)
par(op)</pre>
```



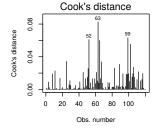


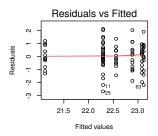


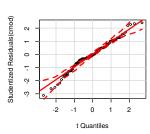


#### Решение:

```
cmod <- lm(length ~ species, data = cu)
library(car)
op <- par(mfrow = c(1, 3))
plot(cmod, which = 4)
plot(cmod, which = 1)
qqPlot(cmod)
par(op)</pre>
```







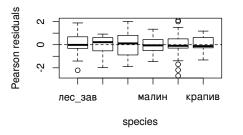
- Выбросов нет
- Дисперсии почти одинаковые. Может быть, в одной из групп чуть меньше
- Распределение остатков отличается от нормального

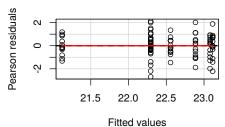


#### Полезно стоить графики остатков от переменных в модели

...и не в модели, если такие есть

#### residualPlots(cmod)

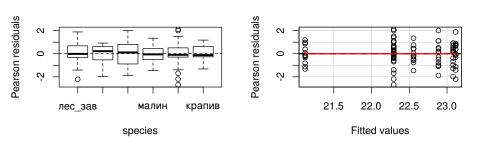




#### Полезно стоить графики остатков от переменных в модели

...и не в модели, если такие есть

#### residualPlots(cmod)



Разброс остатков практически одинаков для разных видов птиц-хозяев



#### Коэффициенты линейной модели

Влияет ли вид птиц-хозяев на длину яиц кукушек?

```
coef(summary(cmod))
```

```
Estimate Std. Error t value
                                            Pr(>|t|)
                  23.1143
                              0.242 95.543 1.17e-110
  (Intercept)
# speciesлес кон
                  -0.0343
                              0.336 -0.102 9.19e-01
# speciesбел тряс
                  -0.2276
                              0.336 -0.677 5.00e-01
# speciesмалин
                  -0.5580
                              0.331 -1.685 9.48e-02
# speciesлуг_кон
                  -0.8210
                              0.277 -2.964 3.70e-03
                              0.336 -5.929 3.33e-08
# speciesкрапив
                  -1.9943
```



#### Коэффициенты линейной модели

Влияет ли вид птиц-хозяев на длину яиц кукушек?

```
coef(summary(cmod))
```

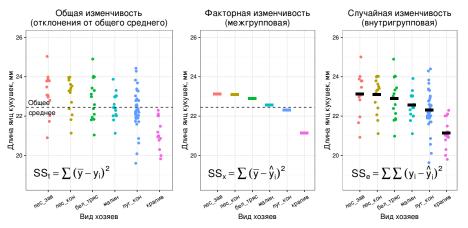
```
Estimate Std. Error t value
                                           Pr(>|t|)
                 23.1143
                             0.242 95.543 1.17e-110
 (Intercept)
# speciesлес кон
                 -0.0343
                             0.336 -0.102 9.19e-01
# speciesбел тряс
                 -0.2276
                             0.336 -0.677 5.00e-01
# speciesмалин
                 -0.5580 0.331 -1.685 9.48e-02
# speciesлуг_кон
                 -0.8210
                             0.277 -2.964 3.70e-03
# speciesкрапив
                 -1.9943
                             0.336 -5.929 3.33e-08
```

По коэффициентам это сложно сказать. Было бы удобнее, если бы ответ был из одного числа, вместо пачки коэффициентов. Дисперсионный анализ позволит оценить влияние каждого из факторов.



## Структура общей изменчивости

Общая изменчивость (SSt) = Факторная (SSx) + Случайная (SSe)



Если выборки из одной совокупности, то Факторная изменчивость = Случайная изменчивость



## Таблица дисперсионного анализа

| Источник<br>изменчивости | SS                                    | df               | MS                         | F                                   |
|--------------------------|---------------------------------------|------------------|----------------------------|-------------------------------------|
| Название<br>фактора      | $SS_x = \sum (\bar{y} - \hat{y}_i)^2$ | $df_x = a - 1$   | $MS_X = \frac{SS_X}{df_X}$ | $F_{df_x df_e} = \frac{MS_x}{MS_e}$ |
| Случайная                | $SS_e = \sum (y_i - \hat{y}_i)^2$     | $df_{\rm e}=N-a$ | $MS_e = rac{SS_e}{df_e}$  |                                     |
| Общая                    | $SS_t = \sum (\bar{y} - y_i)^2$       | $df_t = N - 1$   |                            |                                     |

Гипотезы:  $H_0: \mathit{MS}_x = \mathit{MS}_e$ ,  $H_A: \mathit{MS}_x \mathit{MS}_e$ 

Минимальное упоминание результатов в тексте должно содержать  $F_{df_{\mathbf{x}},df_{\mathbf{e}}}$  и p.



## Делаем дисперсионный анализ в R

В R есть много функций для дисперсионного анализа. Мы рекомендуем Anova() из пакета car. Зачем? Когда факторов будет больше одного, эта функция сможет правильно оценить достоверность каждого из них независимо от других.

```
cu_anova <- Anova(cmod)
cu_anova</pre>
```

```
# Anova Table (Type II tests)
#
# Response: length
# Sum Sq Df F value Pr(>F)
# species 42.8 5 10.4 0.0000000029 ***
# Residuals 93.4 114
# ---
# Signif. codes: 0 '***' 0.001 '**' 0.01 '*' 0.05 '.' 0.1 ' ' 1
```



#### Результаты дисперсионного анализа

Результаты дисперсионного анализа можно описать в тексте:

**Р** Длина яиц кукушек в гнездах разных птиц-хозяев достоверно различается ( $F_{5,114}=10.45,\,p<0.01$ ).



#### Результаты дисперсионного анализа

Результаты дисперсионного анализа можно представить в виде таблицы

 Длина яиц кукушек достоверно различалась в гнездах разных птиц-хозяев (Табл. 1).

Таблица 1: Результаты дисперсионного анализа длины яиц кукушек в гнездах разных птиц-хозяев. SS — суммы квадратов отклонений, df — число степеней свободы, F — значение F-критерия, P — доверительная вероятность.

|            | SS   | df  | F    | Р      |
|------------|------|-----|------|--------|
| Влажность  | 42.8 | 5   | 10.4 | < 0.01 |
| Остаточная | 93.4 | 114 |      |        |



## Как понять, какие именно группы различаются

Дисперсионный анализ говорит нам только, есть ли влияние фактора, но не говорит, какие именно группы различаются.

Коэффициенты линейной модели в summary(cmod) содержат лишь часть ответа — сравнение средних значених всех групп со средним на базовом уровне.

Если нас интересуют другие возможные попарные сравнения, нужно сделать пост хок тест.



# Пост хок тесты



#### Post hoc тесты

Пост хок тесты — попарные сравнения средних **после того, как дисперсионный анализ показал, что влияние фактора достоверно** 

#### Свойства post hoc тестов:

- Применяются, только если влияние фактора значимо
- Делают поправку для снижения вероятности ошибки I рода  $\alpha$ , (но не слишком большую, чтобы не снизилась мощность, и чтобы не возросла вероятность ошибки II рода  $\beta$ )
- Учитывают величину различий между средними
- Учитывают количество сравниваемых пар
- Различаются по степени консервативности (тест Тьюки разумный компромисс)
- Работают лучше при равных объемах групп, при гомогенности дисперсий



#### Пост хок тест Тьюки в R

- ▶ glht() "general linear hypotheses testing"
- ▶ linfct аргумент, задающий гипотезу для тестирования
- mcp() функция, чтобы задавать множественные сравнения (обычные пост хоки)
- ▶ species = "Tukey" тест Тьюки по фактору species

```
library(multcomp)
cu_ph <- glht(cmod, linfct = mcp(species = "Tukey"))</pre>
```



# Результаты попарных сравнений (тест Тьюки)

Таблица результатов пост хок теста практически нечитабельна.

```
summary(cu_ph)
```

```
#
#
    Simultaneous Tests for General Linear Hypotheses
#
# Multiple Comparisons of Means: Tukey Contrasts
# Fit: lm(formula = length ~ species, data = cu)
# Linear Hypotheses:
                         Estimate Std. Error t value Pr(>|t|)
                         -0.0343
                                             -0.10
# лес кон - лес зав == 0
                                     0.3364
                                                      1.000
# бел_тряс - лес_зав == 0 -0.2276
                                     0.3364 -0.68 0.984
# малин - лес зав == 0
                      -0.5580
                                     0.3313 -1.68 0.538
# луг кон - лес зав == 0 -0.8210
                                     0.2770 -2.96
                                                      0.041 *
# крапив - лес_зав == 0
                                     0.3364 -5.93
                          -1.9943
                                                     <0.001 ***
# бел тряс - лес кон == 0
                         -0.1933
                                     0.3305
                                             -0.58
                                                      0.992
# малин - лес кон == 0
                         -0.5237
                                     0.3253
                                             -1.61
                                                      0.587
# луг_кон - лес_кон == 0
                         -0.7867
                                     0.2699 -2.91
                                                      0.047 *
# крапив - лес_кон == 0
                          -1.9600
                                     0.3305
                                             -5.93
                                                     <0.001 ***
# малин - бел_тряс == 0
                         -0.3304
                                     0.3253
                                             -1.02
                                                      0.909
# луг_кон - бел_тряс == 0 -0.5933
                                     0.2699
                                             -2.20
                                                      0.241
# крапив - бел тряс == 0
                          -1.7667
                                     0.3305
                                             -5.34
                                                     <0.001 ***
# луг кон - малин == 0
                          -0.2629
                                     0.2635
                                              -1.00
                                                      0.915
```

## Результаты пост хок теста

Результаты пост хок теста можно привести в виде текста...

Размер яиц кукушек в гнездах крапивника достоверно меньше, чем в гнездах лугового конька (тест Тьюки, p < 0.01). Размер яиц кукушек в гнездах лесной завирушки, белой трясогузки, малиновки и лесного конька не различается, но яйца в гнездах этих видов крупнее, чем у лугового конька или крапивника (тест Тьюки, от p < 0.01 до 0.05).

...или построить график



# Данные для графика при помощи predict()

```
# species fit lwr upr
# 1 лес_зав 23.1 22.6 23.6
# 2 лес_кон 23.1 22.6 23.5
# 3 бел_тряс 22.9 22.4 23.3
# 4 малин 22.6 22.1 23.0
# 5 луг_кон 22.3 22.0 22.6
# 6 крапив 21.1 20.7 21.6
```



#### Задание:

#### Создайте MyData вручную:

- предсказанные значения
- стандартные ошибки
- верхнюю и нижнюю границы доверительных интервалов

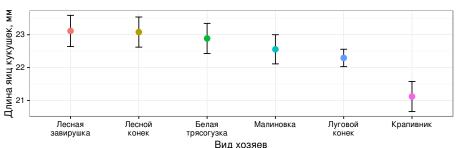


#### Решение:

```
# species fit se lwr upr
# 1 лес_зав 23.1 0.242 22.6 "encoding"
# 2 лес_кон 23.1 0.234 22.6 23.5
# 3 бел_тряс 22.9 0.234 22.4 23.3
# 4 малин 22.6 0.226 22.1 23.0
# 5 луг_кон 22.3 0.135 22.0 22.6
# 6 крапив 21.1 0.234 20.7 21.6
```

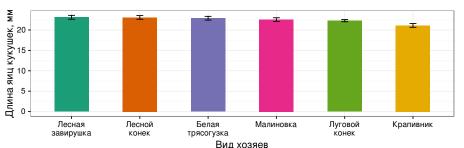


## Точечный график





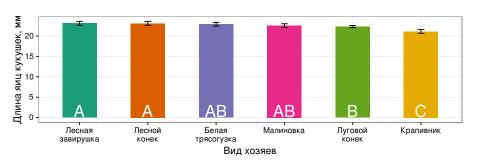
## Столбчатый график





# Можно привести результаты пост хок теста на столбчатом графике

Достоверно различающиеся группы обозначим разными буквами





#### Take home messages

- Дисперсионный анализ линейная модель с дискретными предикторами, существует в нескольких параметризациях, которые отличаются трактовками коэффициентов
- При помощи дисперсионного анализа можно проверить гипотезу о равенстве средних значений в группах
- Условия применимости дисперсионного анализа
  - ▶ Случайность и независимость групп и наблюдений внутри групп
  - ▶ Нормальное распределение в группах
  - Гомогенность дисперсий в группах
- При множественных попарных сравнениях увеличивается вероятность ошибки первого рода, поэтому нужно вносить поправку для уровня значимости
- Post hoc тесты это попарные сравнения после дисперсионного анализа, которые позволяют сказать, какие именно средние различаются



## Дополнительные ресурсы

- Quinn, Keough, 2002, pp. 173–207
- Logan, 2010, pp. 254–282
- Open Intro to Statistics, pp.236–246
- Sokal, Rohlf, 1995, pp. 179–260
- Zar, 2010, pp. 189-207

