《生物实验设计》
第十二章　逐步回归与通径分析

王超

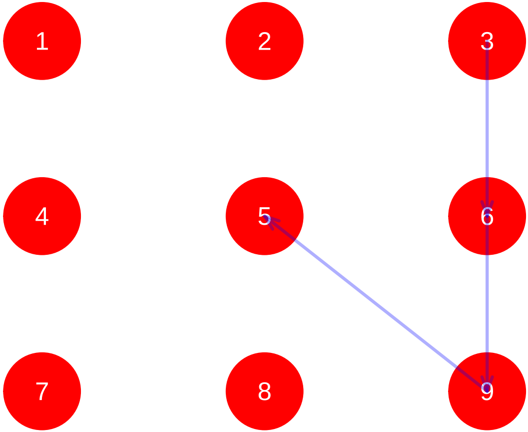
广东药科大学

Email: wangchao@gdpu.edu.cn

2022-11-02

第十二章　逐步回归与通径分析

Check In Code: 3695



一元与多元回归

- 对于多变量资料，既包含对因变量 y 具有显著线性效应的自变量，又包含对 y 不具有显著线性效应的自变量
- 分析中必须将不具有显著效应的自变量予以舍去，使所得到的多元线性回归方程中的自变量对因变量 y 均具有显著效应，这就是最优多元线性回归方程
- 可通过逐步回归方法建立最优回归方程，来简洁准确地分析和预测因变量 y 的反应
- 通径分析是另一种研究多个相关变量间线性关系的统计方法

- 逐步回归分析的两种基本途径：
  - 向前逐步回归
    - 从一元回归分析开始，按各自变量对 y 作用的秩次，依次每步仅选入一个对 y 作用显著的自变量
    - 每引入一个自变量后，对在此之前已引入的自变量进行重新检验，有不显著者即舍弃
    - 直到选入的自变量都显著，未被选入的自变量都不显著为止
  - 向后逐步回归
    - 从 m 元回归分析开始，每步舍去一个不显著且偏回归平方和为最小的自变量
    - 每次舍去一个偏回归不显著且平方和最小的自变量之后，需对回归方程和各自变量重新进行假设检验
    - 直到回归方程所包含的自变量全部显著
    - 自变量个数较少，且大多都显著时，这种方法就比较实用
  - 从多元回归模型种取消一个自变量 x_i 后，总回归平方和减少的部分，称为自变量 x_i 对 y 的偏回归平方和，也就是 x_i 对 y 的回归贡献

- m 元回归分析
  - 若各自变量的偏回归皆显著，分析结束
  - 若有一个或一个以上自变量的偏回归不显著，则舍弃偏回归平方和最小的自变量，进入下一步
- $m-1$ 元回归分析
  - 将舍弃的自变量所在的行、列及其 K 列划去，重新计算 $m-1$ 阶系数矩阵的逆矩阵元素
  - 如果仍有自变量偏回归不显著，则再将偏回归平方和最小的自变量舍去，进入下一步
- 重复进行，直至留下所有自变量的偏回归系数皆显著，即得到最优回归方程

在进行 m 元回归分析的基础上，余下自变量的偏回归系数和逆矩阵 A^{-1} 中 c_{ij} 的计算，可根据舍弃前的偏回归系数和 c_{ij}，通过公式直接求出

设 x_k 为舍弃的自变量，则

$$b_i^* = b_i - \frac{c_{ik} b_k}{c_{kk}} (i \neq k)$$
$$c_{ij}^* = c_{ij} - \frac{c_{ik} c_{kj}}{c_{kk}} (i, j \neq k)$$

R DEMO

```
> library(caret)
> fc <- data.frame(
+   x1 = c(10, 9, 10, 13, 10, 10, 8, 10, 10, 10, 10, 8, 6, 8, 9),
+   x2 = c(23, 20, 22, 21, 22, 23, 23, 24, 20, 21, 23, 21, 23, 21, 22),
+   x3 = c(3.6, 3.6, 3.7, 3.7, 3.6, 3.5, 3.3, 3.4, 3.4, 3.4, 3.9, 3.5, 3.2, 3.7, 3.6),
+   x4 = c(113, 106, 111, 109, 110, 103, 100, 114, 104, 110, 104, 109, 114, 113, 105),
+   y = c(15.7, 14.5, 17.5, 22.5, 15.5, 16.9, 8.6, 17.0, 13.7, 13.4, 20.3, 10.2, 7.4, 11.6, 12.3)
+ )
> lbw_model <- train(y ~., data = fc, method = "leapBackward")
> lbw_model$results
```

```
##   nvmax     RMSE  Rsquared      MAE    RMSESD RsquaredSD     MAESD
## 1     2 2.262428 0.7395186 1.858196 0.7736741  0.2533721 0.6123143
## 2     3 2.164712 0.7800400 1.822116 0.8337602  0.2078986 0.6544742
## 3     4 2.106200 0.7850457 1.817083 0.6566608  0.1997672 0.5464913
```

R DEMO

```
> lbw_model$bestTune
```

```
##   nvmax
## 3     4
```

```
> summary(lbw_model$finalModel)
```

```
## Subset selection object
## 4 Variables  (and intercept)
##    Forced in Forced out
## x1     FALSE      FALSE
## x2     FALSE      FALSE
## x3     FALSE      FALSE
## x4     FALSE      FALSE
## 1 subsets of each size up to 4
## Selection Algorithm: backward
##          x1  x2  x3  x4
## 1  ( 1 ) "*" " " " " " "
## 2  ( 1 ) "*" " " "*" " "
## 3  ( 1 ) "*" "*" "*" " "
## 4  ( 1 ) "*" "*" "*" "*"
```

```
> coef(lbw_model$finalModel, 3)
```

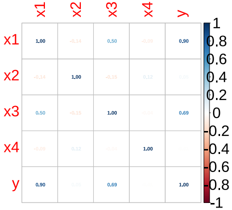
```
## (Intercept)          x1          x2          x3
## -46.9663591   2.0131390   0.6746435   7.8302270
```

第一节　逐步回归分析　二、逐个选入显著自变量的回归方法

（一）计算各变量的简单相关系数，得到 $m+1$ 阶相关矩阵 $R^{(0)}$

$$R^{(0)} = \begin{bmatrix} r_{11}^{(0)} & r_{12}^{(0)} & \cdots & r_{1m}^{(0)} & r_{1y}^{(0)} \\ r_{21}^{(0)} & r_{22}^{(0)} & \cdots & r_{2m}^{(0)} & r_{2y}^{(0)} \\ \vdots & & & & \\ r_{m1}^{(0)} & r_{m2}^{(0)} & \cdots & r_{mm}^{(0)} & r_{my}^{(0)} \\ r_{y1}^{(0)} & r_{y2}^{(0)} & \cdots & r_{ym}^{(0)} & r_{yy}^{(0)} \end{bmatrix}$$

- 简记为 $R^{(0)} = (r_{ij}^{(0)}), (i, j = 1, 2, 3, \ldots, m, y)$



（二）选入自变量逐步回归

- 选入自变量逐步回归
  - 以 $R^{(0)}$ 为基础，每进行一步回归选入一个显著的自变量，并对相关矩阵做一次变换
  - 在第一步，将 $R^{(0)} = (r_{ij}^{(0)})$ 变为 $R^{(1)} = (r_{ij}^{(1)})$
  - 在第二步，将 $R^{(1)} = (r_{ij}^{(1)})$ 变为 $R^{(2)} = (r_{ij}^{(2)})$
  - 在第 k 步，将 $R^{(k-1)} = (r_{ij}^{(k-1)})$ 变为 $R^{(k)} = (r_{ij}^{(k)})$

（二）选入自变量逐步回归

- 在第 k 步（$k=1,2,\ldots,m+1$），由下式算得任一尚未入选自变量 x_i 的标准偏回归平方和

$$U_i^{(k)}=\frac{(r_{iy}^{(k-1)})^2}{r_{ii}^{(k-1)}}$$

- 设最大 $U_i^{(k)}$ 的自变量 $x_i(i=l)$，则 x_l 在第 k 步是否入选由下式决定

$$F=\frac{U_l^{(k)}}{\frac{r_{yy}^{(k-1)}-U_l^{(k)}}{n-m-1}}$$

（二）选入自变量逐步回归

- 若 $F > F_\alpha$，则引入自变量 x_l，并将 $R^{(k-1)}$ 变换成 R^k。变换时由元素 $r_{ij}^{(k-1)}$ 计算元素 $r_{ij}^{(k)}$ 的通式为

$$
\begin{cases}
r_{ll}^{(k)} = \frac{1}{r_{ll}^{(k-1)}} \\
r_{lj}^{(k)} = \frac{r_{lj}^{(k-1)}}{r_{ll}^{(k-1)}} \\
r_{il}^{(k)} = -\frac{r_{il}^{(k-1)}}{r_{ll}^{(k-1)}} \\
r_{ij}^{(k)} = r_{ij}^{(k-1)} - (\frac{r_{il}^{(k-1)} r_{lj}^{(k-1)}}{r_{ll}^{(k-1)}})
\end{cases}
$$

（二）选入自变量逐步回归

- 由 R^k 可以得到入选自变量 x_i 的标准偏回归系数、偏回归平方和、离回归平方和及 F 值

$$b_i^{(k)} = r_{iy}^{(k)}$$

$$U_l^{(k)} = \frac{b_i^{(k)}}{r_{ii}^{(k)}}$$

$$Q^{(k)} = r_{yy}^{(k)}$$

$$F = \frac{U_l^{(k)}}{\frac{Q^{(k)}}{n-m-1}}$$

- 根据 F 值决定是否需要剔除 x_l 前的自变量

（三）计算偏回归系数，建立最优回归方程

- 自变量挑选结束结束即可建立最优回归方程
- 将各种标准化统计数还原为原来单位的统计数
- 在第 k 步，原来单位的统计数和标准化统计数的关系为

$$U = U_i^{(k)} SS_y$$
$$Q = Q^{(k)} SS_y$$

- 偏回归系数和标准化偏回归系数的关系为

$$b_i = b_i^{(k)} \sqrt{\frac{SS_y}{SS_i}}$$

R DEMO

```
> lfw_model <- train(y ~., data = fc, method = "leapForward")
> lfw_model$results
```

```
##   nvmax     RMSE  Rsquared      MAE    RMSESD RsquaredSD     MAESD
## 1     2 2.264172 0.7233322 1.884324 0.6443480  0.2580605 0.5575657
## 2     3 2.064650 0.7402910 1.762563 0.6768206  0.2531321 0.5384779
## 3     4 2.071407 0.7428006 1.785119 0.5620763  0.2309901 0.4770901
```

```
> lfw_model$bestTune
```

```
##   nvmax
## 2     3
```

R DEMO

```
> summary(lbw_model$finalModel)
```

```
## Subset selection object
## 4 Variables  (and intercept)
##    Forced in Forced out
## x1     FALSE      FALSE
## x2     FALSE      FALSE
## x3     FALSE      FALSE
## x4     FALSE      FALSE
## 1 subsets of each size up to 4
## Selection Algorithm: backward
##          x1  x2  x3  x4
## 1  ( 1 ) "*" " " " " " "
## 2  ( 1 ) "*" " " "*" " "
## 3  ( 1 ) "*" "*" "*" " "
## 4  ( 1 ) "*" "*" "*" "*"
```

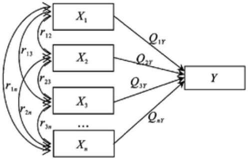
```
> coef(lbw_model$finalModel, 3)
```

```
## (Intercept)          x1          x2          x3
## -46.9663591   2.0131390   0.6746435   7.8302270
```

- 自变量的选择，主要应根据专业知识和前人已经开展的研究，从专业角度选择有关自变量
- 在认真搜集可靠数据的基础上，再做多元线性回归分析，用数学方法得到最优回归方程

- 多元回归中，由于各个 x_i 单位不同和 x_i 变异度不同，各个 x_i 对 y 的贡献大小就不能直接进行比较
- 相关分析
  - 变量之间是一种平等关系，x_i 与 y 仅表示两个变量之间的密切程度，但无法解释这种关系的构成和来源
- 通径分析
  - 将相关系数 r_{ij} 剖分为 x_i 对 y 的直接作用和 x_i 通过与其相关的各个 x_i 对 y 的间接作用
- 通径分析是分析相关变量间因果关系的一种统计方法

- 通径图
  - 用来表示相关变量间的因果关系与平行关系的图形称为通径图



- 通径图存在两种路径
  - 一种是表示 X_i 到 y 之间的单向路径，从因到果，称为通径
  - 一种是自变量间平行关系的双向路径，即互为因果的路径，称为相关线
  - 直接通径/间接通径
- 将 X_i 对 y 直接作用的统计量称为通径系数，用 P_{iy} 表示，从数量关系上表示通径的相对重要程度与性质

假设变量 y 与自变量 $x_1, x_2, x_3, \ldots, x_m$ 之间存在线性关系，且 $x_1, x_2, x_3, \ldots, x_m$ 彼此相关，则有

$$\hat{y} = a + b_1 x_1 + b_2 x_2 + \cdots + b_m x_m$$

或

$$y = a + b_1 x_1 + b_2 x_2 + \cdots + b_m x_m + e$$

e 为 y 和 $\hat{y}$ 之间的误差

- 已知

$$y = a + b_1x_1 + b_2x_2 + \cdots + b_mx_m + e$$
$$\bar{y} = a + b_1\bar{x}_1 + b_2\bar{x}_2 + \cdots + b_m\bar{x}_m$$

- 两式相减，可得

$$y - \bar{y} = b_1(x_1 - \bar{x}_1) + b_2(x_2 - \bar{x}_2) + \cdots + b_m(x_m - \bar{x}_m) + e$$

- 以上等式两端各除以 s_y，并作恒等变形，有

$$\frac{(y - \bar{y})}{s_y} = b_1\frac{s_1}{s_y}\frac{x_1 - \bar{x}_1}{s_1} + b_2\frac{s_2}{s_y}\frac{x_2 - \bar{x}_2}{s_2} + \cdots + b_m\frac{s_m}{s_y}\frac{x_m - \bar{x}_m}{s_m} + \frac{s_e}{s_y}\frac{e}{s_e}$$

  - $s_1, s_2, \ldots, s_m, s_e$ 分别为 $x_1, x_2, \ldots, x_m, e$ 的标准差
  - $b_1\frac{s_1}{s_y}, b_2\frac{s_2}{s_y}, b_m\frac{s_m}{s_y}$ 为 $x_1, x_2, \ldots, x_m$ 的通径系数 P_i
  - 通径系数代表自变量 $x_1, x_2, \ldots, x_m$ 对 y 的影响的相对重要程度和性质

- 因为通径系数 $P_i = b_i \frac{s_i}{s_y}$，即 $P_i = b_i \sqrt{\frac{SS_i}{SS_y}}$
- 所以

$$b_i = P_i \sqrt{\frac{SS_y}{SS_i}}$$

- 由以上可知，P_i 就是标准化后的偏回归系数

- 将 $b_i = P_i\sqrt{\frac{SS_y}{SS_i}}$ 代入多元线性回归方程组

$$\begin{cases} b_1SS_1 + b_2SP_{12} + \cdots + b_mSP_{1m} = SP_{1y} \\ b_1SP_{12} + b_2SS_2 + \cdots + b_mSP_{2m} = SP_{2y} \\ \vdots \\ b_1SP_{1m} + b_2SP_{2m} + \cdots + b_mSS_m = SP_{my} \end{cases}$$

- 得到

$$\begin{cases} P_1\sqrt{\frac{SS_y}{SS_1}} \times SS_1 + b_2SP_{12} + \cdots + b_mSP_{1m} = SP_{1y} \\ b_1SP_{12} + P_2\sqrt{\frac{SS_y}{SS_2}} \times SS_2 + \cdots + b_mSP_{2m} = SP_{2y} \\ \vdots \\ b_1SP_{1i} + b_2SP_{2i} + \ldots P_i\sqrt{\frac{SS_y}{SS_i}} \times SS_i \cdots + b_mSP_{im} = SP_{iy} \\ \vdots \\ b_1SP_{1m} + b_2SP_{2m} + \cdots + b_mSS_m = SP_{my} \end{cases}$$

- 方程组的一般形式

$$b_1 SP_{1i} + b_2 SP_{2i} + \dots P_i \sqrt{SS_y SS_i} \cdots + b_m SP_{im} = SP_{iy}$$

- 因为相关系数 $r = \frac{SP_{iy}}{\sqrt{SS_i \times SS_y}}$
- 方程组等式两边除以 $\sqrt{SS_y SS_i}$，多元线性方程组可以变形为

$$\begin{cases} P_{1y} + r_{12}P_{2y} + \cdots + r_{1m}P_{my} = r_{1y} \\ r_{12}P_{1y} + P_{2y} + \cdots + r_{2m}P_{my} = r_{2y} \\ \vdots \\ r_{1m}P_{1y} + r_{2m}P_{2y} + \cdots + P_{my} = r_{my} \end{cases}$$

- 方程组说明每个自变量与因变量的相关系数都可以分解为 x_i 对 y 的直接作用与间接作用的和

$$r_{i1}P_{1y} + r_{i2}P_{2y} + \ldots P_{iy} \cdots + r_{im}P_{my} = r_{iy}$$

  - x_i 与 y 的相关系数 r_{iy} 等于 x_i 到 y 的直接通径系数 P_{iy}，和其他相关的各个 x_j （$j \neq i$）对 y 的所有间接通径系数 $\sum r_{ij}Pjy$ 之和。
- 矩阵表示形式

$$\begin{bmatrix} r_{11} & r_{12} & \ldots & r_{1m} \\ r_{21} & r_{22} & \ldots & r_{2m} \\ \vdots & & & \\ r_{m1} & r_{m2} & \ldots & r_{mm} \end{bmatrix} \times \begin{bmatrix} P_{1y} \\ P_{2y} \\ \vdots \\ P_{my} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} r_{1y} \\ r_{2y} \\ \vdots \\ r_{my} \end{bmatrix}$$

- 如果将各相关系数计算出来，可根据方程组和求解矩阵来求出通径系数
- 也可以通过对偏回归系数 b_i 进行标准化得出
- 间接通径系数可以通过 $r_{ij}P_{iy}$ 算出
- 根据以上，可以进行原因对结果的直接或间接作用的分析

R DEMO


x1 x2 x3 x4 y
x1 1.00 -0.14 0.50 -0.09 0.90
x2 -0.14 1.00 -0.15 0.12 0.05
x3 0.50 -0.15 1.00 -0.04 0.69
x4 -0.09 0.12 -0.04 1.00
y 0.90 0.05 0.69 1.00
1
0.8
0.6
0.4
0.2
0
-0.2
-0.4
-0.6
-0.8
-1

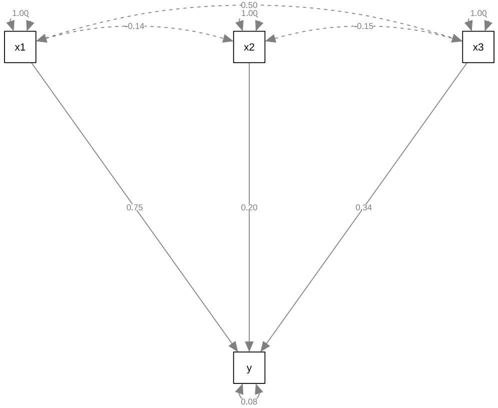
R DEMO

```
> library(lavaan)
> model = 'y ~ x1 + x2 + x3'
> fit <- cfa(model, data = fc[, -4])
> summary(fit, fit.measures = TRUE, standardized = TRUE)$pe
```

```
##    lhs op rhs exo         est        se        z       pvalue      std.lv
## 1    y  ~  x1   0  2.01313904 0.2253428 8.933673 0.000000e+00  2.01313904
## 2    y  ~  x2   0  0.67464355 0.2499083 2.699564 6.943043e-03  0.67464355
## 3    y  ~  x3   0  7.83022699 1.9380287 4.040305 5.338176e-05  7.83022699
## 4    y ~~   y   0  1.27186020 0.4644177 2.738613 6.169899e-03  1.27186020
## 5   x1 ~~  x1   1  2.24000000 0.0000000       NA           NA  2.24000000
## 6   x1 ~~  x2   1 -0.24000000 0.0000000       NA           NA -0.24000000
## 7   x1 ~~  x3   1  0.13066667 0.0000000       NA           NA  0.13066667
## 8   x2 ~~  x2   1  1.39555556 0.0000000       NA           NA  1.39555556
## 9   x2 ~~  x3   1 -0.03066667 0.0000000       NA           NA -0.03066667
## 10  x3 ~~  x3   1  0.03040000 0.0000000       NA           NA  0.03040000
##        std.all     std.nox
## 1   0.75342138  0.50340084
## 2   0.19929119  0.16869979
## 3   0.34139040  1.95800823
## 4   0.07952793  0.07952793
## 5   1.00000000  2.24000000
## 6  -0.13574182 -0.24000000
## 7   0.50073046  0.13066667
## 8   1.00000000  1.39555556
## 9  -0.14888681 -0.03066667
## 10  1.00000000  0.03040000
```

R DEMO

```
> library(semPlot)
> semPaths(fit, layout = "tree", whatLabels = 'std')
```



R DEMO

```
> library(agricolae)
> y <- fc[, 5] # 调出因变量
> x <- fc[, -5] # 调出自变量
> cor.y<- correlation(y, x)$correlation # 计算自变量和因变量之间的相关系数
> cor.y
```

```
##    x1   x2   x3    x4
## y 0.9 0.05 0.69 -0.01
```

```
> cor.x <- correlation(x)$correlation # 计算自变量之间的相关系数
> cor.x
```

```
##       x1    x2    x3    x4
## x1  1.00 -0.14  0.50 -0.09
## x2 -0.14  1.00 -0.15  0.12
## x3  0.50 -0.15  1.00 -0.04
## x4 -0.09  0.12 -0.04  1.00
```

```
> path.analysis(cor.x, cor.y)
```

```
## Direct(Diagonal) and indirect effect path coefficients
## ======================================================
##             x1          x2          x3           x4
## x1  0.76199377 -0.02829509  0.17061916 -0.004317844
## x2 -0.10667913  0.20210775 -0.05118575  0.005757125
## x3  0.38099688 -0.03031616  0.34123832 -0.001919042
## x4 -0.06857944  0.02425293 -0.01364953  0.047976042
##
## Residual Effect^2 =  0.06912554
```