

《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

2023-10-02



廣東藥科學
GUANGDONG PHARMACEUTICAL UNIVERSITY

第十二章 逐步回归与通径分析

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

第一节 逐步回归分析

- 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
- 从多元回归模型中取消一个自变量 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

第一节 逐步回归分析 回归方法

一、逐个淘汰不显著自变量的

- 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

第一节 逐步回归分析 一、逐个淘汰不显著自变量的回归方法

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

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

第一节 逐步回归分析 回归方法

一、逐个淘汰不显著自变量的

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	2.183208	0.8087596	1.783025	0.5054571	0.1477230	0.3970755
## 2	3	1.889283	0.8531627	1.585947	0.6171938	0.1376701	0.4951834
## 3	4	1.929459	0.8374728	1.650656	0.5344115	0.1542622	0.4380448

第一节 逐步回归分析 回归方法

一、逐个淘汰不显著自变量的

R DEMO

```
> lbw_model$bestTune
```

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

```
> 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 3  
## Selection Algorithm: backward  
##           x1  x2  x3  x4  
## 1 ( 1 ) "*" " " " " " "  
## 2 ( 1 ) "*" " " "*" " "  
## 3 ( 1 ) "*" "*" "*" " "
```

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

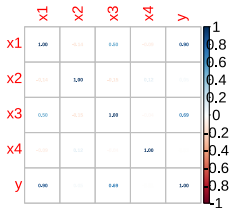
```
## (Intercept)          x1          x2          x3  
## -46.9663591    2.0131390    0.6746435    7.8302270
```


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 $R^{(0)}$

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

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



第一节 逐步回归分析

二、逐个选入显著自变量的回归方法

(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 $R^{(k)} = (r_{ij}^{(k)})$

第一节 逐步回归分析

二、逐个选入显著自变量的回归方法

(二) 选入自变量逐步回归

- 在第 k 步 ($k = 1, 2, \dots, m + 1$), 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

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

第一节 逐步回归分析

二、逐个选入显著自变量的回归方法

(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

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

(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

$$\begin{aligned}b_i^{(k)} &= r_{iy}^{(k)} \\U_l^{(k)} &= \frac{b_i^{(k)}}{r_{ii}^{(k)}} \\Q^{(k)} &= r_{yy}^{(k)} \\F &= \frac{U_l^{(k)}}{\frac{Q^{(k)}}{n-m-1}}\end{aligned}$$

- 根据 F 值决定是否需要剔除 x_l 前的自变量

第一节 逐步回归分析 二、逐个选入显著自变量的回归方法

(三) 计算偏回归系数，建立最优回归方程

- 自变量挑选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

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

第一节 逐步回归分析

二、逐个选入显著自变量的回归方法

R DEMO

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

##	nvmax	RMSE	Rsquared	MAE	RMSESD	RsquaredSD	MAESD
## 1	2	2.122124	0.8003679	1.762595	0.4959395	0.1619022	0.3855368
## 2	3	1.949574	0.8282614	1.667682	0.6908914	0.1462394	0.5322085
## 3	4	2.126154	0.7649352	1.829046	0.7850138	0.2281814	0.6676360

```
> lfw_model$bestTune
```

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

第一节 逐步回归分析 归方法

二、逐个选入显著自变量的回

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 3
## Selection Algorithm: backward
##      x1 x2 x3 x4
## 1 ( 1 ) "*" " " " " "
## 2 ( 1 ) "*" " " "*" " "
## 3 ( 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

- 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

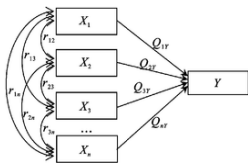
第二节 通径分析

- 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

第二节 通径分析 一、通径与通径系数的概念

● 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

第二节 通径分析

一、通径与通径系数的概念

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

$$\hat{y} = a + b_1x_1 + b_2x_2 + \dots + b_mx_m$$

或

$$y = a + b_1x_1 + b_2x_2 + \dots + b_mx_m + e$$

e 为 y 和 \hat{y} 之间的误差

通径图中表示自变量间的双向路径称为 _____（单选题）

- A、双径
- B、通径
- C、相关线
- D、间接通径

第二节 通径分析 二、通径系数的求解方法

- 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

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

- $s_1, s_2, \dots, s_m, s_e$ 分别为 x_1, x_2, \dots, 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, \dots, x_m 的通径系数 P_i
- 通径系数代表自变量 x_1, x_2, \dots, x_m 对 y 的影响的相对重要程度和性质

第二节 通径分析 二、通径系数的求解方法

- 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

第二节 通径分析 二、通径系数的求解方法

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

$$\begin{cases} b_1 SS_1 + b_2 SP_{12} + \cdots + b_m SP_{1m} = SP_{1y} \\ b_1 SP_{12} + b_2 SS_2 + \cdots + b_m SP_{2m} = SP_{2y} \\ \vdots \\ b_1 SP_{1m} + b_2 SP_{2m} + \cdots + b_m SS_m = SP_{my} \end{cases}$$

- 得到

$$\begin{cases} P_1 \sqrt{\frac{SS_y}{SS_1}} \times SS_1 + b_2 SP_{12} + \cdots + b_m SP_{1m} = SP_{1y} \\ b_1 SP_{12} + P_2 \sqrt{\frac{SS_y}{SS_2}} \times SS_2 + \cdots + b_m SP_{2m} = SP_{2y} \\ \vdots \\ b_1 SP_{1i} + b_2 SP_{2i} + \cdots + P_i \sqrt{\frac{SS_y}{SS_i}} \times SS_i \cdots + b_m SP_{im} = SP_{iy} \\ \vdots \\ b_1 SP_{1m} + b_2 SP_{2m} + \cdots + b_m SS_m = SP_{my} \end{cases}$$

第二节 通径分析 二、通径系数的求解方法

- 方程组的一般形式

$$b_1SP_{1i} + b_2SP_{2i} + \dots P_i\sqrt{SS_ySS_i} \dots + b_mSP_{im} = SP_{iy}$$

- 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 $\sqrt{SS_ySS_i}$, 多元线性方程组可以变形为

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

第二节 通径分析 二、通径系数的求解方法

- 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

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

- 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 $\sum r_{ij}P_{jy}$ 之和。
- 矩阵表示形式

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

第二节 通径分析 二、通径系数的求解方法

- 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

第二节 通径分析

R DEMO



第二节 通径分析

R DEMO

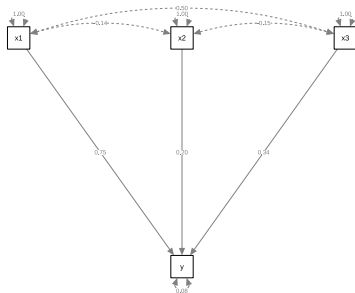
```
> library(lavaan)
> model = 'y ~ x1 + x2 + x3'
> fit <- cfa(model, data = fc[, -4])
> summary(fit, fit.measures = TRUE, standardized = TRUE)$pe
```

##	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.no						
## 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						

第二节 通径分析

R DEMO

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



第二节 通径分析

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
```