# 《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

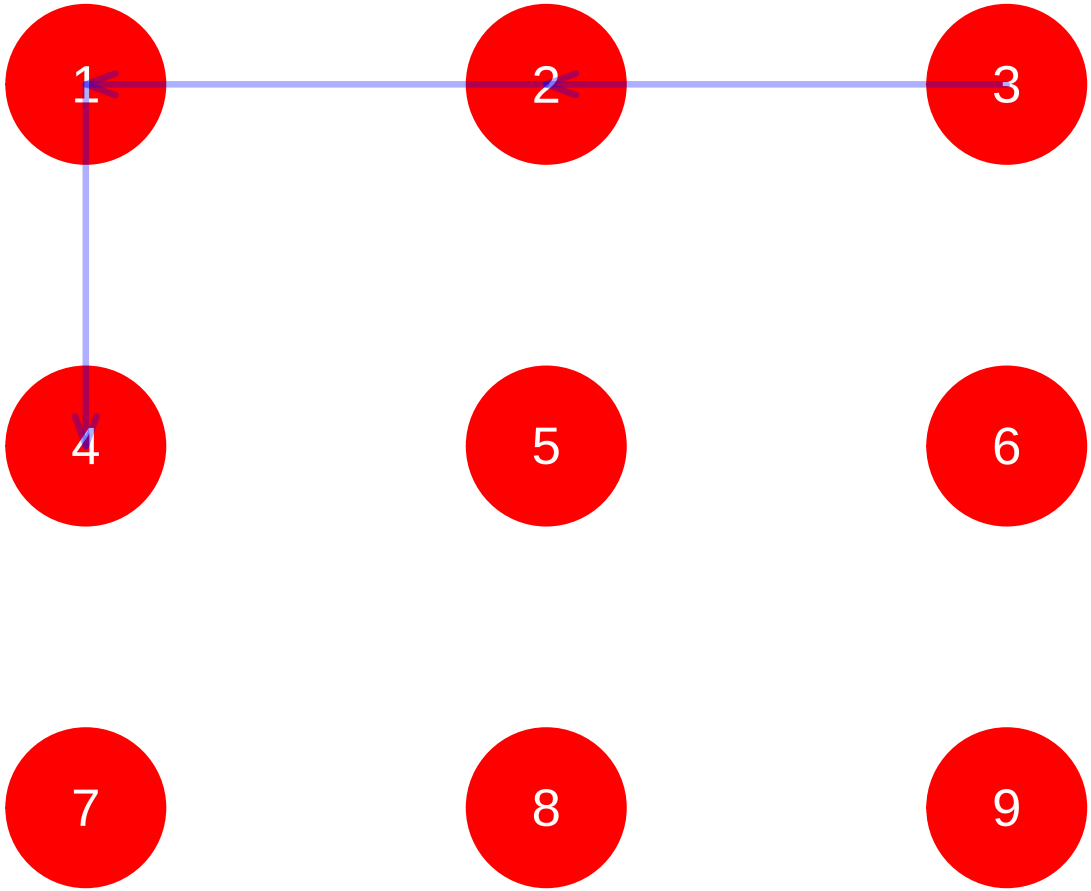
Email: wangchao@gdpu.edu.cn

2022-11-01

# 第十二章　逐步回归与通径分析

# Check In App Release version_0.87

Check In Code: 3214



# 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", tuneGrid = data.frame(nvmax = 1:4))
> lbw_model$results
```

```
##   nvmax     RMSE  Rsquared      MAE    RMSESD RsquaredSD     MAESD
## 1     1 2.224365 0.7512531 1.863551 0.6248037  0.2262719 0.4770010
## 2     2 2.105714 0.8236745 1.692687 0.6665640  0.1892417 0.5022828
## 3     3 1.910562 0.8089699 1.621763 0.5834347  0.1690839 0.4953838
## 4     4 1.897482 0.8136497 1.635269 0.4483928  0.1484996 0.3959711
```

## R DEMO

```
> lbw_model$bestTune
```

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

**（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

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

## （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

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

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

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

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

- 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", tuneGrid = data.frame(nvmax = 1:4))
> lfw_model$results
```

```
##   nvmax     RMSE  Rsquared      MAE    RMSESD RsquaredSD     MAESD
## 1     1 2.038862 0.7433236 1.760008 0.7938765  0.1727777 0.7184546
## 2     2 2.088212 0.6857074 1.726711 0.6734270  0.2486680 0.5445970
## 3     3 1.976460 0.7500282 1.668846 0.7859289  0.2207394 0.6252910
## 4     4 2.042285 0.7464750 1.746742 0.6881088  0.2031370 0.5623641
```

```
> lfw_model$bestTune
```

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

# 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

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

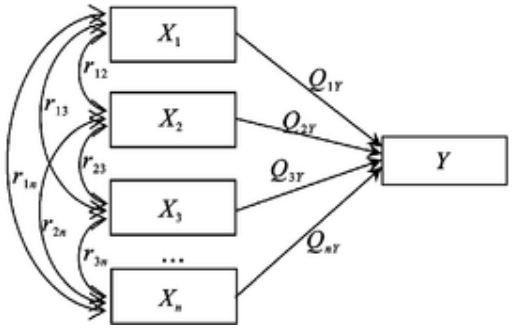
$$\hat{y} = a + b_1 x_1 + b_2 x_2 + \cdots + b_m x_m$$

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

- 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

- 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

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

- 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

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

- 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

```
> library(sem) # 结构方程模型 structural equation modeling
> fc_sem <- fc[, -4]
> cor_fc <- cor(fc_sem) # 计算相关矩阵
> model <- specifyModel(
+   text = '
+   x1 -> y, x1_y, NA
+   x2 -> y, x2_y, NA
+   x3 -> y, x3_y, NA
+   x1 <-> x1, x1, NA
+   x2 <-> x2, x2, NA
+   x3 <-> x3, x3, NA
+   x1 -> x2, x1_x2, NA
+   x2 -> x3, x2_x3, NA
+   x1 -> x3, x1_x3, NA
+   '
+ )
> out_sem <- sem(model, cor_fc, nrow(fc_sem))
> out_sem$coeff
```

```
##        x1_y        x2_y        x3_y          x1          x2          x3
##  0.75342138  0.19929119  0.34139040  1.00000000  0.98157416  0.74259858
##       x1_x2       x2_x3       x1_x3        V[y]
## -0.13574182 -0.08243569  0.48954049  0.07952793
```

## R DEMO

```
> summary(out_sem)
```

```
##
##  Model Chisquare =  1.24345e-14   Df =  0 Pr(>Chisq) = NA
##  AIC =  20
##  BIC =  1.24345e-14
##
##  Normalized Residuals
##       Min.    1st Qu.     Median       Mean    3rd Qu.       Max.
## -6.184e-16  0.000e+00  0.000e+00 -1.510e-17  1.439e-16  3.714e-16
##
##  R-square for Endogenous Variables
##      y     x2     x3
## 0.9205 0.0184 0.2574
##
##  Parameter Estimates
##       Estimate    Std Error  z value    Pr(>|z|)
## x1_y   0.75342138 0.08729503  8.6307481 6.095198e-18 y <--- x1
## x2_y   0.19929119 0.07641456  2.6080265 9.106591e-03 y <--- x2
## x3_y   0.34139040 0.08746187  3.9033054 9.488786e-05 y <--- x3
## x1     1.00000000 0.37796447  2.6457513 8.150972e-03 x1 <--> x1
## x2     0.98157416 0.37100016  2.6457513 8.150972e-03 x2 <--> x2
## x3     0.74259858 0.28067588  2.6457513 8.150972e-03 x3 <--> x3
## x1_x2 -0.13574182 0.26478754 -0.5126443 6.082002e-01 x2 <--- x1
## x2_x3 -0.08243569 0.23246174 -0.3546205 7.228739e-01 x3 <--- x2
## x1_x3  0.48954049 0.23246174  2.1058971 3.521330e-02 x3 <--- x1
## V[y]   0.07952793 0.03005873  2.6457513 8.150972e-03 y <--> y
##
##  Iterations =  0
```

# 第二节　通径分析

R DEMO