## Регрессионный анализ, часть 2

#### Математические методы в зоологии с использованием R

Марина Варфоломеева

- Множественная линейная регрессия
- 2 Условия применимости линейной регрессии
- ③ Проверка условий применимости линейной регрессии

#### Вы сможете

- Подобрать модель множественной линейной регрессии
- Протестировать значимость модели и ее коэффициентов
- Интерпретировать коэффициенты множественной регрессии при разных предикторах
- Проверить условия применимости простой и множественной линейной регрессии при помощи анализа остатков

Множественная линейная регрессия

## Множественная линейная регрессия

## Пример: птицы Австралии

Зависит ли обилие птиц в лесах Австралии от характеристик леса? (Loyn, 1987, пример из кн. Quinn, Keough, 2002)

56 лесных участков в юго-восточной Виктории, Австралия

- 110area Площадь леса, га
- 110dist Расстояние до ближайшего леса, км (логарифм)
- l10ldist Расстояние до ближайшего леса большего размера, км (логарифм)
- yr.isol Год начала изоляции
- abund Обилие птиц

## Скачиваем данные с сайта

Не забудьте войти в вашу директорию для матметодов при помощи setwd()

```
library(downloader)
# в рабочем каталоге создаем суб-директорию для данных
if(!dir.exists("data")) dir.create("data")
# скачиваем файл в xlsx, либо в текстовом формате
if (!file.exists("data/loyn.xlsx")) {
  download(
    url = "https://varmara.github.io/mathmethr/data/loyn.xlsx",
    destfile = "data/loyn.xlsx")
}
if (!file.exists("data/loyn.csv")) {
  download(
    url = "https://varmara.github.io/mathmethr/data/loyn.xls",
    destfile = "data/loyn.csv")
```

## Читаем данные из файла одним из способов

#### Чтение из xlsx

```
library(readxl)
bird <- read_excel(path = "data/loyn.xlsx", sheet = 1)</pre>
```

#### Чтение из csv

```
bird <- read.table("data/loyn.csv", header = TRUE, sep = "\t")</pre>
```

## Все ли правильно открылось?

str(bird) # Структура данных

```
'data.frame': 56 obs. of 21 variables:
                   5.3 2 1.5 17.1 13.8 14.1 3.8 2.2 3.3 3 ...
   $ abund
             : num
                   0.1 0.5 0.5 1 1 1 1 1 1 1 ...
   $ area : num
   $ yr.isol : int 1968 1920 1900 1966 1918 1965 1955 1920 1965 1900 ...
             : int 39 234 104 66 246 234 467 284 156 311 ...
   $ dist
  $ ldist : int 39 234 311 66 246 285 467 1829 156 571 ...
   $ graze : int 2553535545...
#
   $ alt
            : int 160 60 140 160 140 130 90 60 130 130 ...
#
   $ 110dist : num 1.59 2.37 2.02 1.82 2.39 ...
   $ l10ldist: num
                   1.59 2.37 2.49 1.82 2.39 ...
   $ l10area : num -1 -0.301 -0.301 0 0 ...
   $ cyr.isol: num 18.2 -29.8 -49.8 16.2 -31.8 ...
   $ cl10area: num
                   -1.932 -1.233 -1.233 -0.932 -0.932 ...
                   -0.9821 2.0179 2.0179 0.0179 2.0179 ...
   $ caraze : num
#
   $ resid1 : num
                   -4.22 -1.03 -1.86 2.28 7.14 ...
   $ predict1: num
                    9.52 3.03 3.36 14.82 6.66 ...
#
   $ arearesv: num
                    -16.49 -3.28 -6.69 -1.78 4.71 ...
                   -1.642 -0.3 -0.647 -0.543 -0.326 ...
#
   $ arearesx: num
   $ grazresv: num
                   -1.318 -0.805 -1.425 2.459 6.157 ...
                    -1 7/11 -0 137 -0 258 -0 108 0 580
   ¢ arazrecvi num
     Марина Варфоломеева
                             Регрессионный анализ, часть 2
```

#### Знакомимся с данными

Есть ли пропущенные значения?

```
sapply(bird, function(x)sum(is.na(x)))
```

```
# abund area yr.isol dist ldist graze alt
# 0 0 0 0 0 0 0 0 0
# ll0dist ll0ldist ll0area cyr.isol cl10area cgraze resid1
# 0 0 0 0 0 0 0 0
# predict1 arearesy arearesx grazresy grazresx yrresy yrresx
# 0 0 0 0 0 0 0 0
```

Каков объем выборки?

```
nrow(bird)
```

```
# [1] 56
```

#### Задача

- Подберите модель множественной линейной регрессии, чтобы описать, как зависит обилие птиц от характеристик леса
- Проверьте значимость ее коэффициентов при помощи t-критерия

- abund Обилие птиц
- 110area Площадь леса, га
- l10dist Расстояние до ближайшего леса, км (логарифм)
- l10ldist Расстояние до ближайшего леса большего размера, км (логарифм)
- yr.isol Год изоляции лесного массива

#### Решение

```
summarv(bird lm)
# Call:
 lm(formula = abund \sim l10area + l10dist + l10ldist + yr.isol,
     data = bird)
 Residuals:
     Min
             10 Median
                           30
                                  Max
# -16.663 -3.546 0.086
                         2.884
                                16.530
# Coefficients:
             Estimate Std. Error t value
                                           Pr(>|t|)
# (Intercept) -224,4246 74,8504 -3.00
                                             0.0042 **
               9.2348 1.2760 7.24 0.00000000023 ***
# l10area
# l10dist -0.7046 2.7077 -0.26
                                             0.7957
                         2.0954 -0.76
# l10ldist -1.5935
                                            0.4505
             0.1236
                         0.0379 3.26
# vr.isol
                                             0.0020 **
# Signif. codes: 0 '***' 0.001 '**' 0.01 '*' 0.05 '.' 0.1 ' ' 1
# Residual standard error: 6.58 on 51 degrees of freedom
# Multiple R-squared: 0.652, Adjusted R-squared: 0.625
# F-statistic: 23.9 on 4 and 51 DF, p-value: 3.62e-11
```

bird  $lm < -lm(abund \sim l10area + l10dist + l10ldist + yr.isol, data = bird)$ 

### Задача

Запишите уравнение множественной линейной регрессии

В качестве подсказки:

```
coef(bird_lm)
```

```
# (Intercept) l10area l10dist l10ldist yr.isol
# -224.425 9.235 -0.705 -1.593 0.124
```

bird\_lm\$call

```
# lm(formula = abund \sim l10area + l10dist + l10ldist + yr.isol, # data = bird)
```

#### Решение

#### Коэффициенты модели:

coef(bird\_lm)

Уравнение регрессии:

Более формальная запись:

$$Y = -224.42 + 9.23 X1 - 0.70 X2 - 1.59 X3 + 0.12 X4$$

## Интерпретация коэффициентов регрессии

```
coef(bird_lm)
```

```
# (Intercept) l10area l10dist l10ldist yr.isol
# -224.425 9.235 -0.705 -1.593 0.124
```

## Интерпретация коэффициентов регрессии

```
coef(bird_lm)
```

```
# (Intercept) l10area l10dist l10ldist yr.isol
# -224.425 9.235 -0.705 -1.593 0.124
```

#### Обычные коэффициенты

- Величина обычных коэффициентов зависит от единиц измерения
- $b_0$  Отрезок (Intercept), отсекаемый регрессионной прямой на оси y. Значение зависимой переменной Y, если предикторы  $X_1 = \cdots = X_p = 0$ .
- Коэффициенты при  $X_p$  показывают, на сколько изменяется Y, когда предиктор  $X_p$  меняется на единицу, при условии, что остальные предикторы не меняют своих значений.

## Для сравнения влияния разных факторов стандартизованные коэффициенты

scale(yr.isol)

## Для сравнения влияния разных факторов стандартизованные коэффициенты

#### Стандартизованные коэффициенты

3.161

- Стандартизованные коэффициенты измерены в стандартных отклонениях. Их можно сравнивать друг с другом, поскольку они дают относительную оценку влияния фактора.
- $b_0$  Отрезок (Intercept), отсекаемый регрессионной прямой на оси y. Значение зависимой переменной Y, если предикторы  $X_1 = \cdots = X_p = 0$ . Для стандартизованных величин среднее значение равно нулю, поэтому  $b_0$  это значение зависимой переменной при средних значениях всех предикторов.
- Коэффициенты при  $X_{\rho}$  показывают, на сколько изменяется Y, когда предиктор  $X_{\rho}$  меняется на одно стандартное отклонение, при условии, что остальные предикторы не меняют своих значений. Это относительная оценка влияния фактора.

# F-statistic: 23.9 on 4 and 51 DF, p-value: 3.62e-11

#### Задача

summary(scaled bird lm)

Определите по значениям стандартизованных коэффициентов, какие факторы сильнее всего влияют на обилие птиц

```
# Call:
 lm(formula = abund \sim scale(l10area) + scale(l10dist) + scale(l10ldist) +
     scale(vr.isol), data = bird)
 Residuals:
     Min
             10 Median
                            30
                                  Max
 -16.663 -3.546 0.086
                         2.884 16.530
# Coefficients:
                Estimate Std. Error t value
                                             Pr(>|t|)
                 19.514
                            0.879 22.20
# (Intercept)
                                              < 2e-16 ***
# scale(l10area) 7.502
                            1.037 7.24 0.0000000023 ***
# scale(l10dist) -0.292
                            1.120 -0.26
                                               0.796
# scale(l10ldist) -0.916 1.205 -0.76
                                               0.450
# scale(yr.isol) 3.161
                            0.971
                                  3.26
                                               0.002 **
# Signif, codes: 0 '***' 0.001 '**' 0.05 '.' 0.1 ' ' 1
#
# Residual standard error: 6.58 on 51 degrees of freedom
# Multiple R-squared: 0.652, Adjusted R-squared: 0.625
```

## Оценка качества подгонки модели

summary(bird\_lm)\$adj.r.squared

# [1] 0.625

## Обычный $R^2$ — доля объясненной изменчивости

$$R^2 = \frac{SS_{model}}{SS_{total}} = 1 - \frac{SS_{error}}{SS_{total}}$$

Не используйте обычный  $R^2$  для множественной регрессии!

$$R_{adi}^2$$
 — скорректированный  $R^2$ 

$$R_{adj}^2 = 1 - \frac{SS_{error}/df_{error}}{SS_{total}/df_{total}}$$

где  $df_{error}=n-p-1$ ,  $df_{total}=n-1$   $R^2_{adj}$  учитывает число переменных в модели, вводится штраф за каждый новый параметр.

Используйте  $R_{adj}^2$  для сравнения моделей с разным числом параметров.

Условия применимости линейной регрессии

Условия применимости линейной регрессии

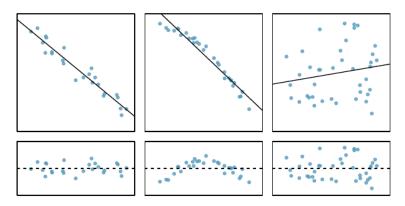
## Условия применимости линейной регрессии

Условия применимости линейной регрессии должны выполняться, чтобы тестировать гипотезы

- Независимость
- Пинейность
- В Нормальное распределение
- Томогенность дисперсий
- Отсутствие колинеарности предикторов (для множественной регрессии)

#### 1. Независимость

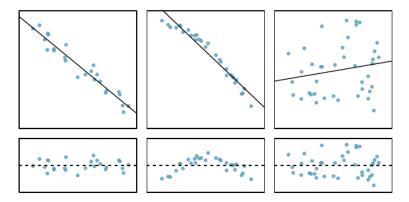
- Значения у; должны быть независимы друг от друга
- берегитесь псевдоповторностей и автокорреляций (например, временных)
- Контролируется на этапе планирования
- Проверяем на графике остатков



Из кн. Diez et al., 2010, стр. 332, рис. 7.8

#### 2. Линейность связи

- проверяем на графике рассеяния исходных данных
- проверяем на графике остатков



Из кн. Diez et al., 2010, стр. 332, рис. 7.8

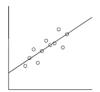
# **Что бывает, если неглядя применять линейную** регрессию

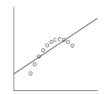
Квартет Энскомба - примеры данных, где регрессии одинаковы во всех случаях (Anscombe, 1973)

$$y_i = 3.0 + 0.5x_i$$

$$r^2 = 0.68$$

$$H_0: \beta_1 = 0, t = 4.24, p = 0.002$$







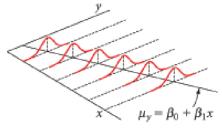


Из кн. Quinn, Keough, 2002, стр. 97, рис. 5.9

## 3. Нормальное распределение остатков

Нужно, т.к. в модели  $Y_i=eta_0+eta x_i+\epsilon_i$  зависимая переменная  $Y\sim N(0,\sigma^2)$ , а значит  $\epsilon_i\sim N(0,\sigma^2)$ 

- Нужно для тестов параметров, а не для подбора методом наименьших квадратов
- Нарушение не страшно тесты устойчивы к небольшим отклонениям от нормального распределения
- Проверяем распределение остатков на нормально-вероятностном графике

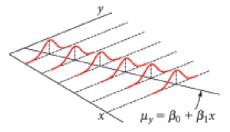


Из кн. Watkins et al., 2008, стр. 743, рис. 11.4

## 4. Гомогенность дисперсий

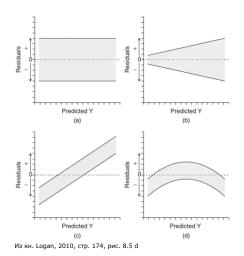
Нужно, т.к. в модели  $Y_i=\beta_0+\beta x_i+\epsilon_i$  зависимая переменная  $Y\sim N(0,\sigma^2)$  и дисперсии  $\sigma_1^2=\sigma_2^2=...=\sigma_i^2$  для каждого  $Y_i$  Но, поскольку  $\epsilon_i\sim N(0,\sigma^2)$ , можно проверить равенство дисперсий остатков  $\epsilon_i$ 

- Нужно и важно для тестов параметров
- Проверяем на графике остатков по отношению к предсказанным значениям
- Есть формальные тесты (Cochran's C), но только если несколько значений у для каждого х



Из кн. Watkins et al., 2008, стр. 743, рис. 11.4

## Диагностика регрессии по графикам остатков

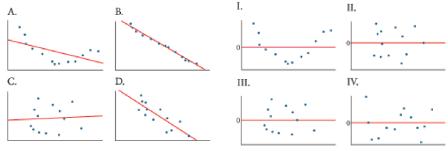


\begin{enumerate}[(a)] - все условия выполнены - разброс остатков разный (wedge-shaped pattern) - разброс остатков одинаковый, но нужны дополнительные предикторы - к нелинейной зависимости применили линейную регрессию \end{enumerate}

## Задача: Проанализируйте графики остатков

#### Скажите пожалуйста

- какой регрессии соответствует какой график остатков?
- все ли условия применимости регрессии здесь выполняются?
- назовите случаи, в которых можно и нельзя применить линейную регрессию?



Display 3.84 Four scatterplots.

Display 3.85 Four residual plots.

Из кн. Watkins et al. 2008, стр. 177, рис. 3.84-3.85

#### Решение

- А-І нелинейная связь нельзя;
- B-II все в порядке, можно;
- С-III все в порядке, можно;
- D-IV синусоидальный паттерн в остатках, нарушено условие независимости или зависимость нелинейная - нельзя.

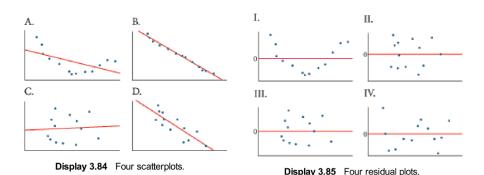


Рис. из кн. Watkins et al. 2008, стр. 177, рис. 3.84-3.85

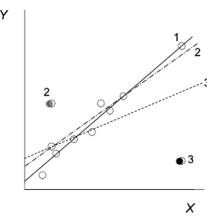
# **Какие** наблюдения влияют на ход регрессии больше других?

Влиятельные наблюдения, выбросы, outliers

- большая абсолютная величина остатка
- близость к краям области определения (leverage - рычаг, сила; иногда называют hat)

На графике точки и линии регрессии построенные с их включением:

- 1 не влияет на ход регрессии, т.к. лежит на прямой
- 2 умеренно влияет (большой остаток, малая сила влияния)
- 3 очень сильно влияет (большой остаток, большая сила влияния)



Из кн. Quinn, Keough, 2002, стр. 96, рис. 5.8

## Как оценить влиятельность наблюдений?

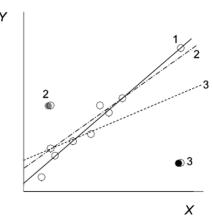
## Paccтояние Кука (Cook's d, Cook, 1977)

- Учитывает одновременно величину остатка и близость к краям области определения (leverage)
- Условное пороговое значение: выброс, если  $d \geq 4/(N-k-1)$ , где N объем выборки, k число предикторов.

### Как оценить влиятельность наблюдений?

## Paccтояние Кука (Cook's d, Cook, 1977)

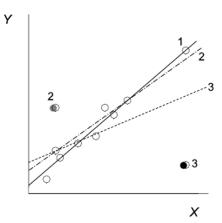
- Учитывает одновременно величину остатка и близость к краям области определения (leverage)
- Условное пороговое значение: выброс, если  $d \geq 4/(N-k-1)$ , где N объем выборки, k число предикторов.
- Дж. Фокс советует не обращать внимания на пороговые значения (Fox, 1991)



Из кн. Quinn, Keough, 2002, стр. 96, рис. 5.8

## Что делать с влиятельными точками и с выбросами?

- Проверить, не ошибка ли это.
   Если нет, не удалять обсуждать!
- Проверить, что будет, если их исключить из модели



Из кн. Quinn, Keough, 2002, стр. 96, рис. 5.8

## Колинеарность предикторов

#### Колинеарность

Коллинеарные предикторы коррелируют друг с другом, т.е. не являются взаимно независимыми

#### Последствия

- Модель неустойчива к изменению данных
- При добавлении или исключении наблюдений может меняться оценка и знак коэффициентов

#### Что делать с колинеарностью?

- Удалить из модели избыточные предикторы
- Получить вместо скоррелированных предикторов один новый комбинированный при помощи метода главных компонент

## Проверка на колинеарность

#### Толерантность (tolerance)

 $1-\mathit{R}^2$  регрессии данного предиктора от всех других

 $T \leq 0.25$  — колинеарность

#### Показатель инфляции для дисперсии

(коэффициент распространения дисперсии, Variance inflation factor, VIF)

$$VIF = 1/T$$

$$\sqrt{\mathit{VIF}} >$$
 5, но лучше  $\sqrt{\mathit{VIF}} >$  3, а иногда и  $\sqrt{\mathit{VIF}} >$  2  $-$  коллинеарность

## Проверка условий применимости линейной регрессии

### Как проверить условия применимости?

- VIF колинеарность предикторов (для множественной регрессии)
- График остатков от предсказанных значений величина остатков, влиятельность наблюдений, отсутствие паттернов, гомогенность дисперсий.
- 3 График квантилей остатков распределение остатков

# 1. Проверим, есть ли в этих данных колинеарность предикторов

```
library(car)
vif(bird lm) # variance inflation factors
  llOarea llOdist llOldist yr.isol
     1.37
             1.60
                     1.84
                             1.20
sqrt(vif(bird lm)) > 2 # есть ли проблемы?
  l10area l10dist l10ldist vr.isol
    FALSE FALSE FALSE
1/vif(bird lm) # tolerance
```

```
# l10area l10dist l10ldist yr.isol
# 0.732 0.627 0.542 0.835
```

## 1. Проверим, есть ли в этих данных колинеарность предикторов

```
library(car)
vif(bird lm) # variance inflation factors
  llOarea llOdist llOldist yr.isol
     1.37
             1.60
                     1.84
                             1.20
sqrt(vif(bird lm)) > 2 # есть ли проблемы?
  l10area l10dist l10ldist vr.isol
    FALSE FALSE FALSE
1/vif(bird lm) # tolerance
```

```
0.627
Все в порядке, предикторы независимы
```

l10area l10dist l10ldist yr.isol

0.542

0.732

0.835

# Для анализа остатков выделим нужные данные в новый датафрейм

```
library(ggplot2) # там есть функция fortify()
bird_diag <- fortify(bird_lm)

head(bird_diag, 2)

# abund ll0area ll0dist ll0ldist yr.isol .hat .sigma .cooksd
# 1 5.3 -1.000 1.59 1.59 1968 0.1662 6.64 0.000383
# 2 2.0 -0.301 2.37 2.37 1920 0.0853 6.63 0.003242
# .fitted .resid .stdresid
# 1 5.89 -0.589 -0.098
# 2 4.62 -2.623 -0.417
```

# Для анализа остатков выделим нужные данные в новый датафрейм

```
library(ggplot2) # там есть функция fortify()
bird_diag <- fortify(bird_lm)

head(bird_diag, 2)

# abund ll0area ll0dist ll0ldist yr.isol .hat .sigma .cooksd
# 1 5.3 -1.000 1.59 1.59 1968 0.1662 6.64 0.000383
# 2 2.0 -0.301 2.37 2.37 1920 0.0853 6.63 0.003242
# .fitted .resid .stdresid
# 1 5.89 -0.589 -0.098
# 2 4.62 -2.623 -0.417
```

- .cooksd расстояние Кука
- fitted предсказанные значения
- resid остатки
- stdresid стандартизованные остатки

### Задача

Постройте график зависимости стандартизованных остатков от предсказанных значений

Используйте данные из bird\_diag

```
ggplot()
aes()
geom_point()
```

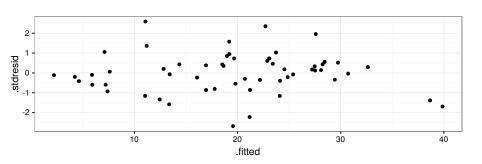
#### Стандартизованные остатки

$$\frac{y_i - \hat{y}_i}{\sqrt{MS_e}}$$

- можно сравнивать между регрессиями
- можно сказать, какие остатки большие, какие нет
  - < 2SD обычные</li>
  - $\circ$  > 3*SD* редкие

#### Решение

График зависимости стандартизованных остатков от предсказанных значений

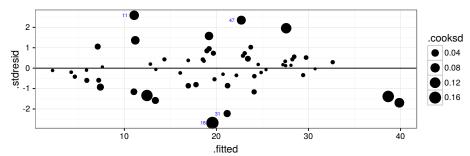


# График станет информативнее, если кое-что добавить

```
# Создаем логический вектор, где TRUE,
# если стандартизованный остаток больше 2
f outlier <- abs(bird diag$.stdresid) > 2
# Создаем будущие ярлыки
labs <- ifelse(test = f outlier,</pre>
               yes = row(bird diag), # Если test == TRUE
               no = "") # Если test == FALSE
gg resid <- ggplot(data = bird diag,</pre>
                   aes(x = .fitted, y = .stdresid)) +
  geom point(aes(size = .cooksd)) + # расстояние Кука
  geom hline(yintercept = 0) + # горизонтальная линия y = 0
  geom text(aes(label = labs), hjust = 2, colour = "blue",
            size = 2) # номера наблюдений с остатками больше 2SD
```

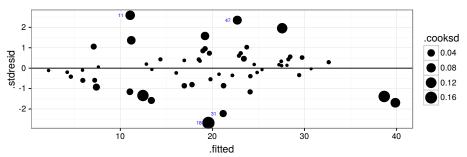
# **Интерпретируем график стандартизованных остатков** от предсказанных значений

Какие выводы можно сделать по графику остатков?



## Интерпретируем график стандартизованных остатков от предсказанных значений

Какие выводы можно сделать по графику остатков?

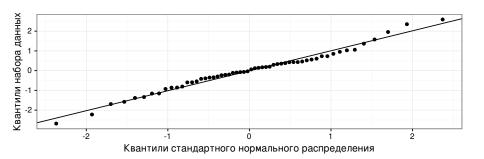


- Большая часть стандартизованных остатков в пределах двух стандартных отклонений. Есть отдельные влиятельные наблюдения, которые нужно проверить
- Разброс остатков не совсем одинаков. Похоже на гетерогенность дисперсий
- Тренда среди остатков нет

### 3. Квантильный график стандартизованных остатков

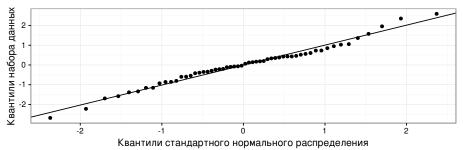
Используется, чтобы оценить форму распределения. Если точки лежат на одной прямой — все в порядке.

```
mean_val <- mean(bird_diag$.stdresid)
sd_val <- sd(bird_diag$.stdresid)
ggplot(bird_diag, aes(sample = .stdresid)) + geom_point(stat = "qq") +
geom_abline(intercept = mean_val, slope = sd_val) + # точки должны быть здесь
labs(x = "Квантили стандартного нормального распределения", y = "Квантили н
```



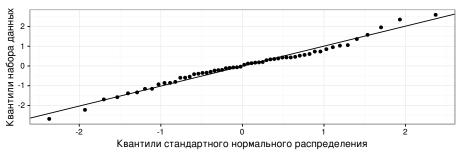
# Интерпретируем квантильный график

Какие выводы можно сделать по квантильному графику?



### Интерпретируем квантильный график

Какие выводы можно сделать по квантильному графику?



• Отклонений от нормального распределения нет

## Take home messages

- Для сравнения влияния разных предикторов можно использовать бета-коэффициенты
- Условия применимости линейной регрессии должны выполняться, чтобы тестировать гипотезы
  - Пезависимость
  - Пинейность
  - В Нормальное распределение
  - Ф Гомогенность дисперсий
  - Отсутствие колинеарности предикторов (для множественной регрессии)

# Дополнительные ресурсы

#### Учебники

- Quinn, Keough, 2002, pp. 92-98, 111-130
- Open Intro to Statistics: Chapter 8. Multiple and logistic regression, pp. 354-367.
- Logan, 2010, pp. 170-173, 208-211
- Sokal, Rohlf, 1995, pp. 451-491, 609-653
- Zar, 2010, pp. 328-355, 419-439

#### Упражнения для тренировки

- OpenIntro Labs, Lab 7: Introduction to linear regression (Осторожно, они используют базовую графику а не ggplot)
  - Обычный вариант, после упражнения 4
  - Интерактивный вариант на Data Camp, после вопроса 4
- OpenIntro Labs, Lab 8: Multiple linear regression
  - Обычный вариант, до упражнения 11
  - Интерактивный вариант на Data Camp, до вопроса 8