Регрессионный анализ, часть 2

Математические методы в зоологии с использованием R

Марина Варфоломеева

1. **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

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

- `l10area` - Площадь леса, га
- `l10dist` - Расстояние до ближайшего леса, км (логарифм)
- `l10ldist` - Расстояние до ближайшего леса большего размера, км (логарифм)
- `yr.isol` - Год начала изоляции
- abund - Обилие птиц

Читаем данные из файла одним из способов

Чтение из xlsx

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

Чтение из csv

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

Все ли правильно открылось?

```
str(bird)      # Структура данных
```

```
# 'data.frame': 56 obs. of  21 variables:
#  $ abund   : num  5.3 2 1.5 17.1 13.8 14.1 3.8 2.2 3.3 3 ...
#  $ area    : num  0.1 0.5 0.5 1 1 1 1 1 1 1 ...
#  $ yr.isol : int  1968 1920 1900 1966 1918 1965 1955 1920 1965 1900 ...
#  $ dist    : int  39 234 104 66 246 234 467 284 156 311 ...
#  $ ldist   : int  39 234 311 66 246 285 467 1829 156 571 ...
#  $ graze   : int  2 5 5 3 5 3 5 5 4 5 ...
#  $ alt     : int  160 60 140 160 140 130 90 60 130 130 ...
#  $ l10dist : 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 ...
#  $ cgraze  : num  -0.9821 2.0179 2.0179 0.0179 2.0179 ...
#  $ resid1  : num  -4.22 -1.03 -1.86 2.28 7.14 ...
#  $ predict1: num  9.52 3.03 3.36 14.82 6.66 ...
#  $ arearesy: num  -16.49 -3.28 -6.69 -1.78 4.71 ...
#  $ arearesx: num  -1.642 -0.3 -0.647 -0.543 -0.326 ...
#  $ grazresy: num  -1.318 -0.805 -1.425 2.459 6.157 ...
#  $ grazresx: num  -1.741 -0.137 -0.258 -0.108 0.589
```

Знакомимся с данными

Есть ли пропущенные значения?

```
colSums(is.na(bird))
```

```
#    abund     area  yr.isol     dist    ldist    graze      alt
#        0        0        0        0        0        0        0
#  l10dist l10ldist  l10area cyr.isol cl10area   cgraze   resid1
#        0        0        0        0        0        0        0
# predict1 arearesy arearesx grazresy grazresx   yrresy   yrresx
#        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
- `l10area` - 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

```
bird_lm <- lm(abund ~ l10area + l10dist + l10ldist + yr.isol, data = bird)
summary(bird_lm)
```

```
#
# Call:
# lm(formula = abund ~ l10area + l10dist + l10ldist + yr.isol,
#     data = bird)
#
# Residuals:
#      Min       1Q   Median       3Q      Max
# -16.6635  -3.5460   0.0859   2.8838  16.5300
#
# Coefficients:
#               Estimate Std. Error t value     Pr(>|t|)
# (Intercept) -224.42456   74.85040  -2.998      0.00419 **
# l10area        9.23476    1.27597   7.237 0.0000000023 ***
# l10dist       -0.70464    2.70766  -0.260      0.79573
# l10ldist      -1.59350    2.09538  -0.760      0.45047
# yr.isol        0.12358    0.03794   3.257      0.00201 **
# ---
# Signif. codes:  0 '***' 0.001 '**' 0.01 '*' 0.05 '.' 0.1 ' ' 1
#
# Residual standard error: 6.577 on 51 degrees of freedom
# Multiple R-squared:  0.6519,  Adjusted R-squared:  0.6246
# F-statistic: 23.88 on 4 and 51 DF,  p-value: 3.622e-11
```

Можно привести результаты t-теста для коэффициентов в виде таблицы

- Обилие птиц увеличивалось с увеличением площади леса, и с уменьшением продолжительности изоляции
(Табл. 1).

Table 1: Коэффициенты линейной регрессии обилия птиц от различных характеристк леса: l10area - логарифм площади леса, l10dist — логарифм расстояния до ближайшего леса, l10ldist — логарифм расстояния до ближайшего большого леса, yr.isol — год изоляции лесного массива. t — значение t-критерия, P — доверительная вероятность.

	Оценка	Ст.ошибка	t	P
Отрезок	-224.42	74.85	-3.00	$<$0.01
l10area	9.23	1.28	7.24	$<$0.01
l10dist	-0.70	2.71	-0.26	0.80
l10ldist	-1.59	2.10	-0.76	0.45

Задача

Запишите уравнение множественной линейной регрессии

В качестве подсказки:

```
coef(bird_lm)
```

```
#  (Intercept)      l10area      l10dist     l10ldist      yr.isol
# -224.4245557    9.2347571   -0.7046391   -1.5934969    0.1235795
```

```
bird_lm$call
```

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

Решение

Коэффициенты модели:

```
coef(bird_lm)
```

```
#  (Intercept)      l10area      l10dist     l10ldist      yr.isol
# -224.4245557    9.2347571   -0.7046391   -1.5934969    0.1235795
```

Уравнение регрессии:

abund = - 224.42 + 9.23 l10area - 0.70 l10dist - 1.59 l10ldist + 0.12 yr.isol

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
# -224.4245557    9.2347571   -0.7046391   -1.5934969    0.1235795
```

Интерпретация коэффициентов регрессии

```
coef(bird_lm)
```

```
#  (Intercept)      l10area      l10dist     l10ldist      yr.isol
# -224.4245557    9.2347571   -0.7046391   -1.5934969    0.1235795
```

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

```
scaled_bird_lm <- lm(abund ~ scale(l10area) + scale(l10dist) +
                       scale(l10ldist) + scale(yr.isol), data = bird)
coef(scaled_bird_lm)
```

```
#     (Intercept)  scale(l10area)  scale(l10dist) scale(l10ldist)
#      19.5142857       7.5024269      -0.2915814      -0.9160679
#  scale(yr.isol)
#       3.1613396
```

Для сравнения влияния разных факторов — стандартизованные коэффициенты

```
scaled_bird_lm <- lm(abund ~ scale(l10area) + scale(l10dist) +
                       scale(l10ldist) + scale(yr.isol), data = bird)
coef(scaled_bird_lm)
```

```
#     (Intercept)  scale(l10area)  scale(l10dist) scale(l10ldist)
#      19.5142857       7.5024269      -0.2915814      -0.9160679
#  scale(yr.isol)
#       3.1613396
```

Стандартизованные коэффициенты

- 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_p показывают, на сколько изменяется Y, когда предиктор X_p меняется на одно стандартное отклонение, при условии, что остальные предикторы не меняют своих значений. Это относительная оценка влияния фактора.

Задача

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

```
summary(scaled_bird_lm)
```

```
#
# Call:
# lm(formula = abund ~ scale(l10area) + scale(l10dist) + scale(l10ldist) +
#     scale(yr.isol), data = bird)
#
# Residuals:
#      Min       1Q   Median       3Q      Max
# -16.6635  -3.5460   0.0859   2.8838  16.5300
#
# Coefficients:
#                 Estimate Std. Error t value     Pr(>|t|)
# (Intercept)      19.5143     0.8789  22.203      < 2e-16 ***
# scale(l10area)    7.5024     1.0366   7.237 0.0000000023 ***
# scale(l10dist)   -0.2916     1.1204  -0.260      0.79573
# scale(l10ldist)  -0.9161     1.2046  -0.760      0.45047
# scale(yr.isol)    3.1613     0.9707   3.257      0.00201 **
# ---
# Signif. codes:  0 '***' 0.001 '**' 0.01 '*' 0.05 '.' 0.1 ' ' 1
#
# Residual standard error: 6.577 on 51 degrees of freedom
# Multiple R-squared:  0.6519,  Adjusted R-squared:  0.6246
# F-statistic: 23.88 on 4 and 51 DF,  p-value: 3.622e-11
```

Оценка качества подгонки модели

```r
summary(bird_lm)$adj.r.squared
```

```
# [1] 0.6246181
```

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^2_{adj} — скорректированный R^2

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

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^2_{adj} для сравнения моделей с разным числом параметров.

Условия применимости линейной регрессии

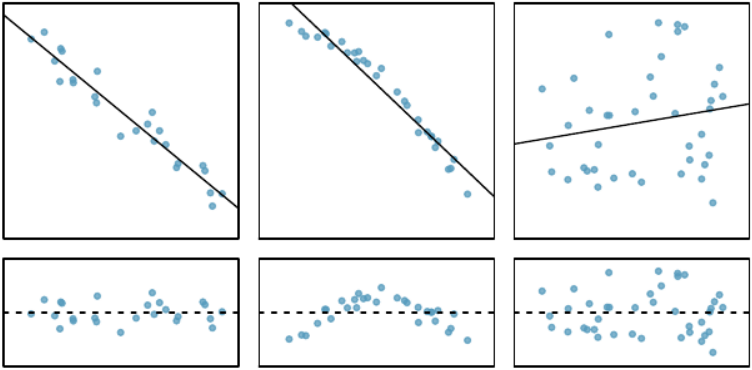
Условия применимости линейной регрессии

Условия применимости линейной регрессии должны выполняться, чтобы тестировать гипотезы

1. Независимость
2. Линейность
3. Нормальное распределение
4. Гомогенность дисперсий
5. Отсутствие колинеарности предикторов (для множественной регрессии)

1. Независимость

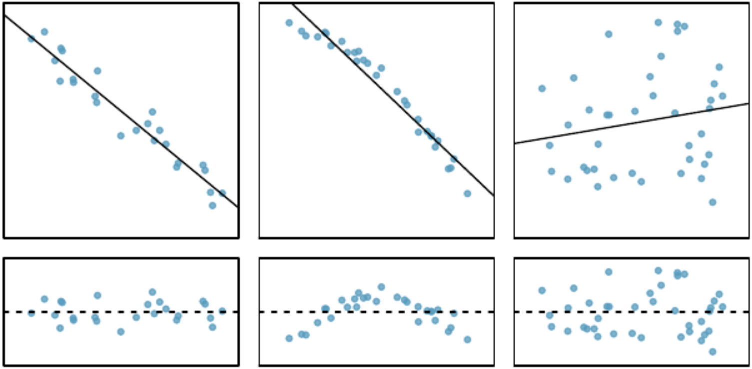
- Значения y_i должны быть независимы друг от друга
- берегитесь псевдоповторностей и автокорреляций (например, временных)
- Контролируется на этапе планирования
- Проверяем на графике остатков



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

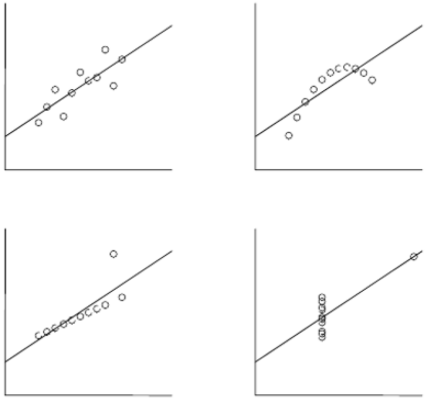
Что бывает, если неглядя применять линейную регрессию

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

$$y_i = 3.0 + 0.5x_i$$

$$r^2 = 0.68$$

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

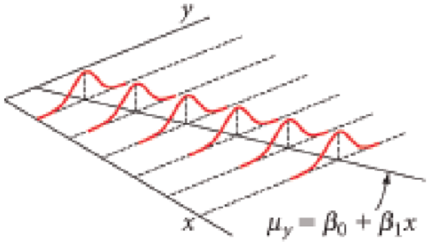


Из кн. Quinn, Keough, 2002, стр. 97, рис. 5.9

3. Нормальное распределение остатков

Нужно, т.к. в модели $Y_i = \beta_0 + \beta x_i + \epsilon_i$ 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

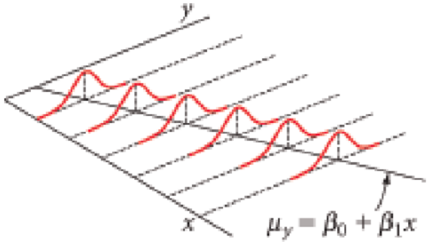


Из кн. Watkins et al., 2008, стр. 743, рис. 11.4

4. Гомогенность дисперсий

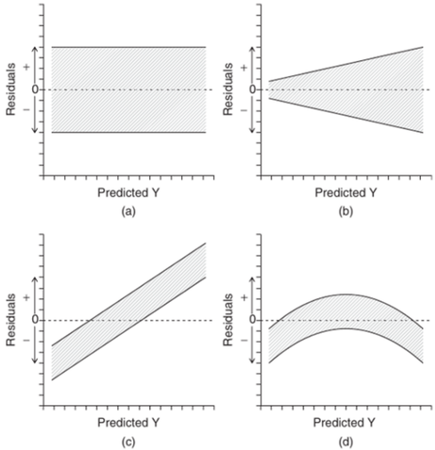
Нужно, т.к. в модели $Y_i = \beta_0 + \beta x_i + \epsilon_i$ зависимая переменная $Y \sim N(0, \sigma^2)$ и дисперсии $\sigma_1^2 = \sigma_2^2 = \ldots = \sigma_i^2$ для каждого Y_i
Но, поскольку $\epsilon_i \sim N(0, \sigma^2)$, можно проверить равенство дисперсий остатков ϵ_i

- Нужно и важно для тестов параметров
- Проверяем на графике остатков по отношению к предсказанным значениям
- Есть формальные тесты, но они очень чувствительны (тест Бройша-Пагана, тест Кокрана)



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

Диагностика регрессии по графикам остатков



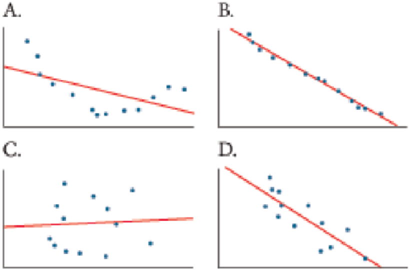
Из кн. Logan, 2010, стр. 174, рис. 8.5 d

\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}

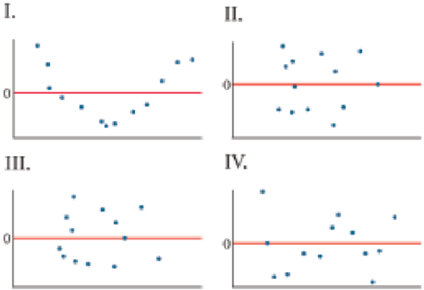
Задача: Проанализируйте графики остатков

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.

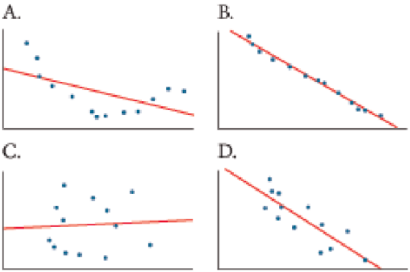


Display 3.85 Four residual plots.

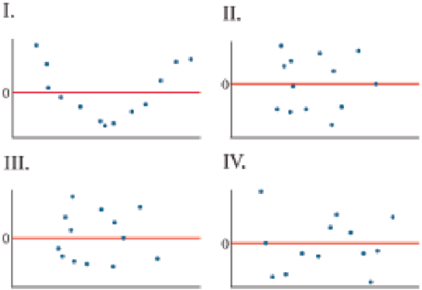
Из кн. Watkins et al. 2008, стр. 177, рис. 3.84-3.85

Решение

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



Display 3.84 Four scatterplots.



Display 3.85 Four residual plots.

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

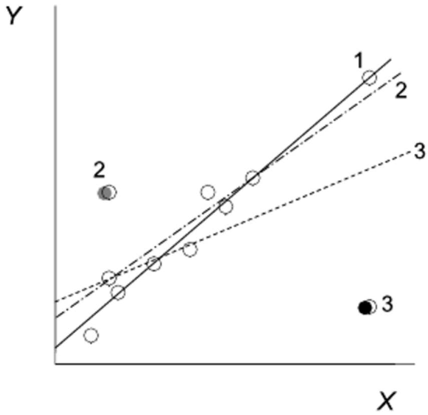
Какие наблюдения влияют на ход регрессии больше других?

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)

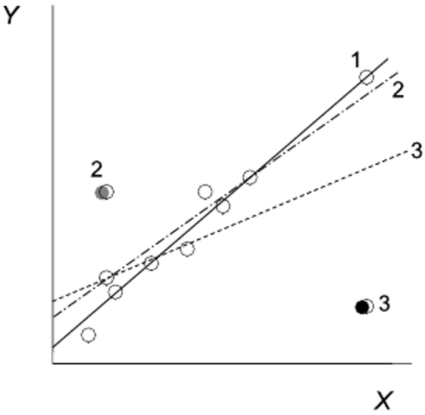


Из кн. Quinn, Keough, 2002, стр. 96, рис. 5.8

Как оценить влиятельность наблюдений?

Расстояние 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.

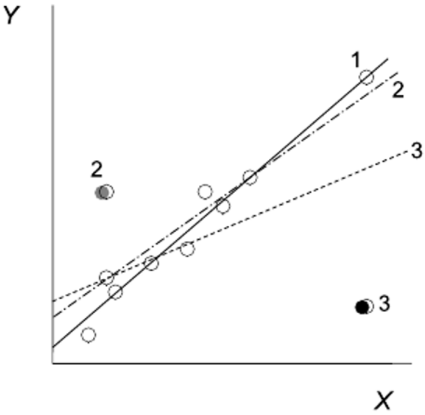


Из кн. Quinn, Keough, 2002, стр. 96, рис. 5.8

Как оценить влиятельность наблюдений?

Расстояние Кука (Cook's d, Cook, 1977)

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

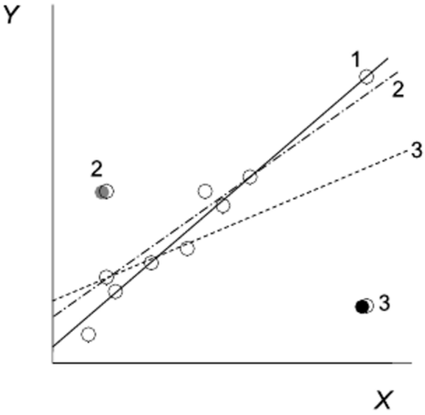


Из кн. Quinn, Keough, 2002, стр. 96, рис. 5.8

- Дж. Фокс советует не обращать внимания на пороговые значения (Fox, 1991)

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

Колинеарные 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

Показатель инфляции для дисперсии

(коэффициент распространения дисперсии, Variance inflation factor, VIF)
$VIF = 1 / (1 - R^2)$, здесь в знаменателе используется R^2 регрессии данного предиктора от всех других
Хорошо, если $VIF > 10$ (по Marquardt, 1970), но лучше $VIF > 3$, а иногда и $VIF > 2$. Если больше — колинеарность

Проверка условий применимости линейной регрессии

Как проверить условия применимости?

1. VIF — колинеарность предикторов (для множественной регрессии)
2. 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
```

```
#  l10area  l10dist l10ldist  yr.isol
# 1.366278 1.596165 1.844939 1.197991
```

1. Проверим, есть ли в этих данных колинеарность предикторов

```
library(car)
vif(bird_lm) # variance inflation factors
```

```
#  l10area  l10dist l10ldist  yr.isol
# 1.366278 1.596165 1.844939 1.197991
```

Все в порядке, предикторы независимы

Для анализа остатков выделим нужные данные в новый датафрейм

```
library(ggplot2) # там есть функция fortify()
bird_diag <- fortify(bird_lm)
# вот, что записано в диагностическом датафрейме
head(bird_diag, 2)
```

```
#   abund  l10area  l10dist l10ldist yr.isol       .hat   .sigma
# 1   5.3 -1.00000 1.591065 1.591065    1968 0.16621067 6.641837
# 2   2.0 -0.30103 2.369216 2.369216    1920 0.08525566 6.631126
#        .cooksd  .fitted     .resid   .stdresid
# 1 0.0003830847 5.888692 -0.5886922 -0.09802371
# 2 0.0032420786 4.623396 -2.6233963 -0.41704702
```

Для анализа остатков выделим нужные данные в новый датафрейм

```
library(ggplot2) # там есть функция fortify()
bird_diag <- fortify(bird_lm)
# вот, что записано в диагностическом датафрейме
head(bird_diag, 2)
```

```
#   abund  l10area  l10dist l10ldist yr.isol        .hat   .sigma
# 1   5.3 -1.00000 1.591065 1.591065    1968 0.16621067 6.641837
# 2   2.0 -0.30103 2.369216 2.369216    1920 0.08525566 6.631126
#        .cooksd  .fitted     .resid   .stdresid
# 1 0.0003830847 5.888692 -0.5886922 -0.09802371
# 2 0.0032420786 4.623396 -2.6233963 -0.41704702
```

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

Задача

Постройте график зависимости стандартизованных остатков от предсказанных значений

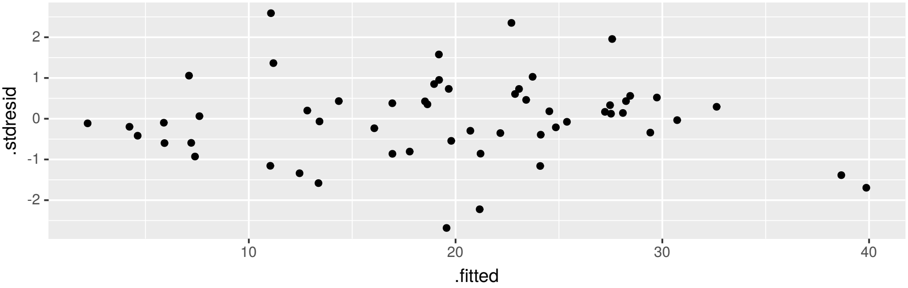
Используйте данные из `bird_diag`

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

Решение

График зависимости стандартизованных остатков от предсказанных значений

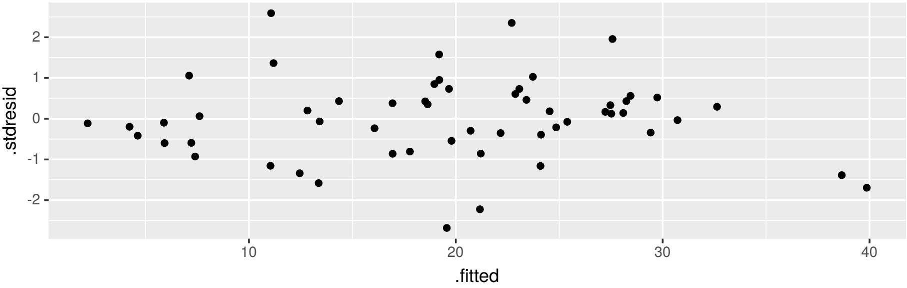
```
gg_resid <- ggplot(data = bird_diag, aes(x = .fitted, y = .stdresid)) +
  geom_point()
gg_resid
```



Решение

График зависимости стандартизованных остатков от предсказанных значений

```
gg_resid <- ggplot(data = bird_diag, aes(x = .fitted, y = .stdresid)) +
  geom_point()
gg_resid
```



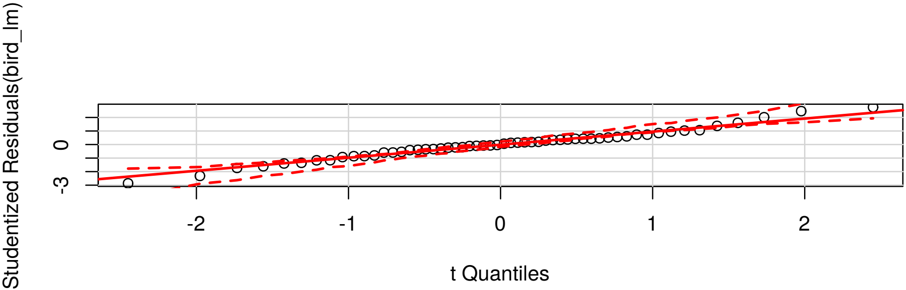
- Большая часть стандартизованных остатков в пределах двух стандартных отклонений. Есть отдельные влиятельные наблюдения, которые нужно проверить
- Разброс остатков не совсем одинаков. Похоже на гетерогенность дисперсий

3. Квантильный график стандартизованных остатков

Используется, чтобы оценить форму распределения. По оси X — квантили теоретического распределения, по оси Y — квантили остатков модели.

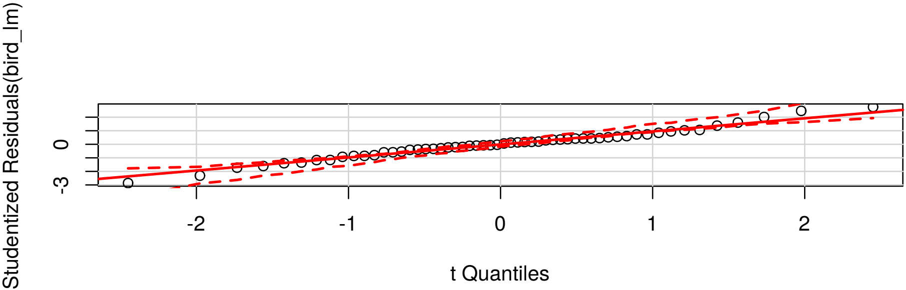
Если точки лежат на одной прямой — все в порядке.

```
library(car)
qqPlot(bird_lm) # из пакета car
```



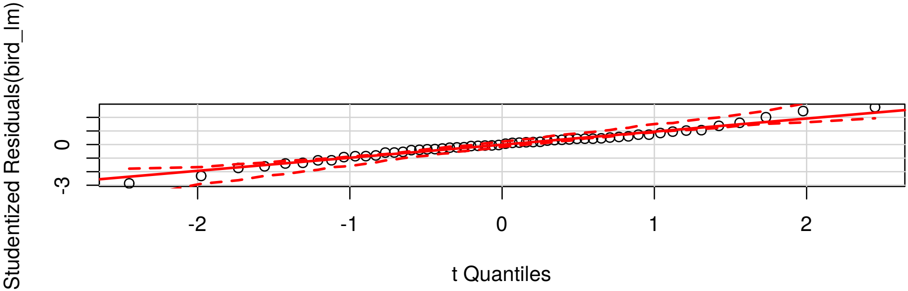
Интерпретируем квантильный график

Какие выводы можно сделать по квантильному графику?



Интерпретируем квантильный график

Какие выводы можно сделать по квантильному графику?



- Отклонений от нормального распределения нет

Внимание!

Только если все условия выполняются, можно приступить к интерпретации результатов.

Take-home messages

- Для сравнения влияния разных предикторов можно использовать бета-коэффициенты
- Условия применимости линейной регрессии должны выполняться, чтобы тестировать гипотезы
  1. Независимость
  2. Линейность
  3. Нормальное распределение
  4. Гомогенность дисперсий
  5. Отсутствие колинеарности предикторов (для множественной регрессии)

Дополнительные ресурсы

- Кабаков Р.И. R в действии. Анализ и визуализация данных на языке R. М.: ДМК Пресс, 2014
- Diez, D.M., Barr, C.D. and Çetinkaya-Rundel, M., 2015. OpenIntro Statistics. OpenIntro.
- Zuur, A., Ieno, E.N. and Smith, G.M., 2007. Analyzing ecological data. Springer Science & Business Media.
- Quinn G.P., Keough M.J. 2002. Experimental design and data analysis for biologists
- Logan M. 2010. Biostatistical Design and Analysis Using R. A Practical Guide