O coeficiente de determinação

Exercício prático da disciplina Ecologia de Populações de Comunidades Vegetais, IB-USP

Contents

Introdução

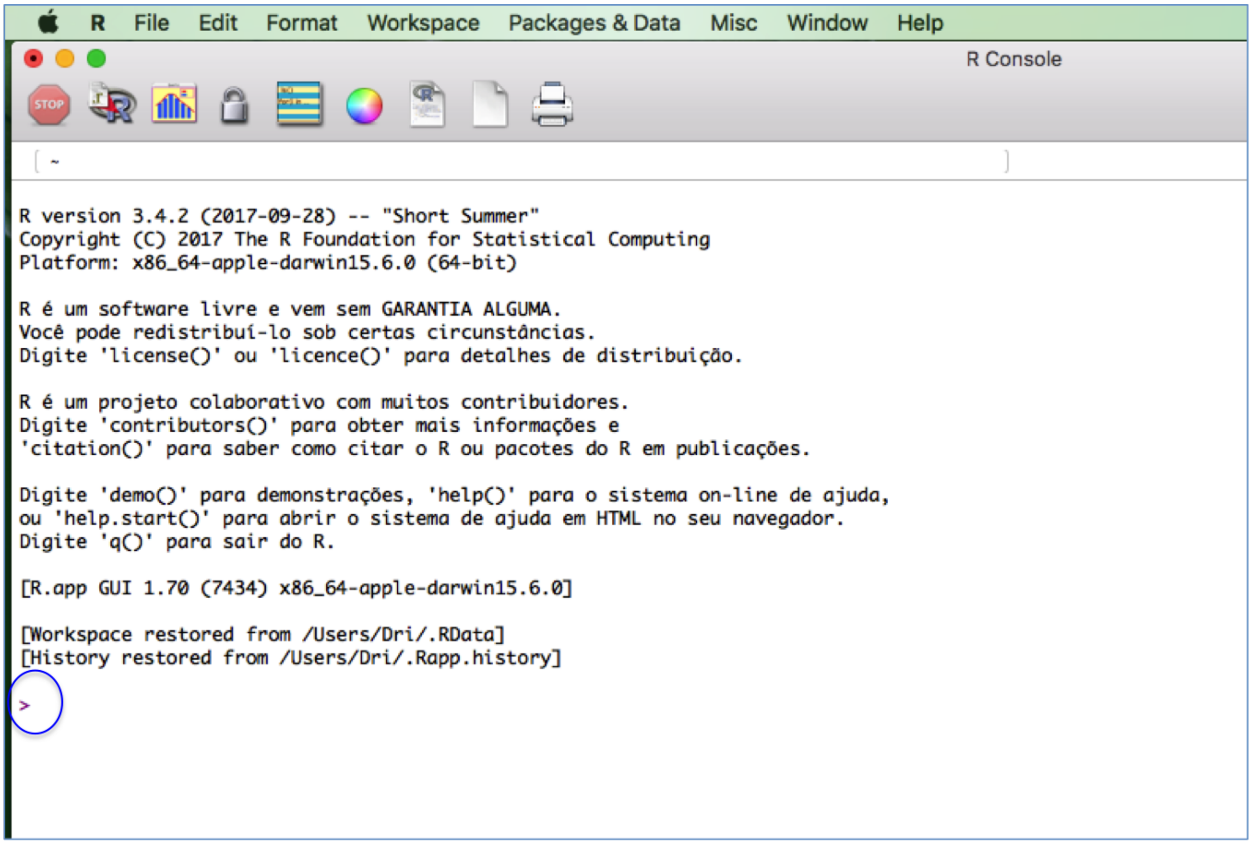
O coeficiente de determinação (R^2) expressa a proporção da variação de uma medida (variável resposta) que é explicada pela variação de outra (variável explanatória). Se supomos que a variação é explicada por uma relação linear, os cálculos são simples e ajudam muito a entender a lógica da partição da variação que está por trás do R^2.

Neste roteiro vamos usar a regressão linear e um conjunto pequeno de dados para entender o coeficiente de determinação.

Preparação para o exercício

Abra o programa R, clicando no ícone que está na área de trabalho do seu computador:

Se tudo deu certo até aqui, abrirá uma janela do R como essa:



O símbolo ">", circundado em azul na imagem, indica o início da linha de comando ou **prompt**, onde você deve escrever comandos para o R.

Copie e cole o comando abaixo na linha de comando do R, para carregar os dados que vamos usar:

```
dadinhos <- read.csv("https://raw.githubusercontent.com/piklprado/BIE-0320/main/data/dadinho.csv")
```

Se não houve nenhuma mensagem de erro agora você tem no R uma tabela com 8 linhas e duas colunas, que explicaremos a seguir. Se quiser verificar se a tabela foi importada, digite o nome dela no R

```
dadinhos
```

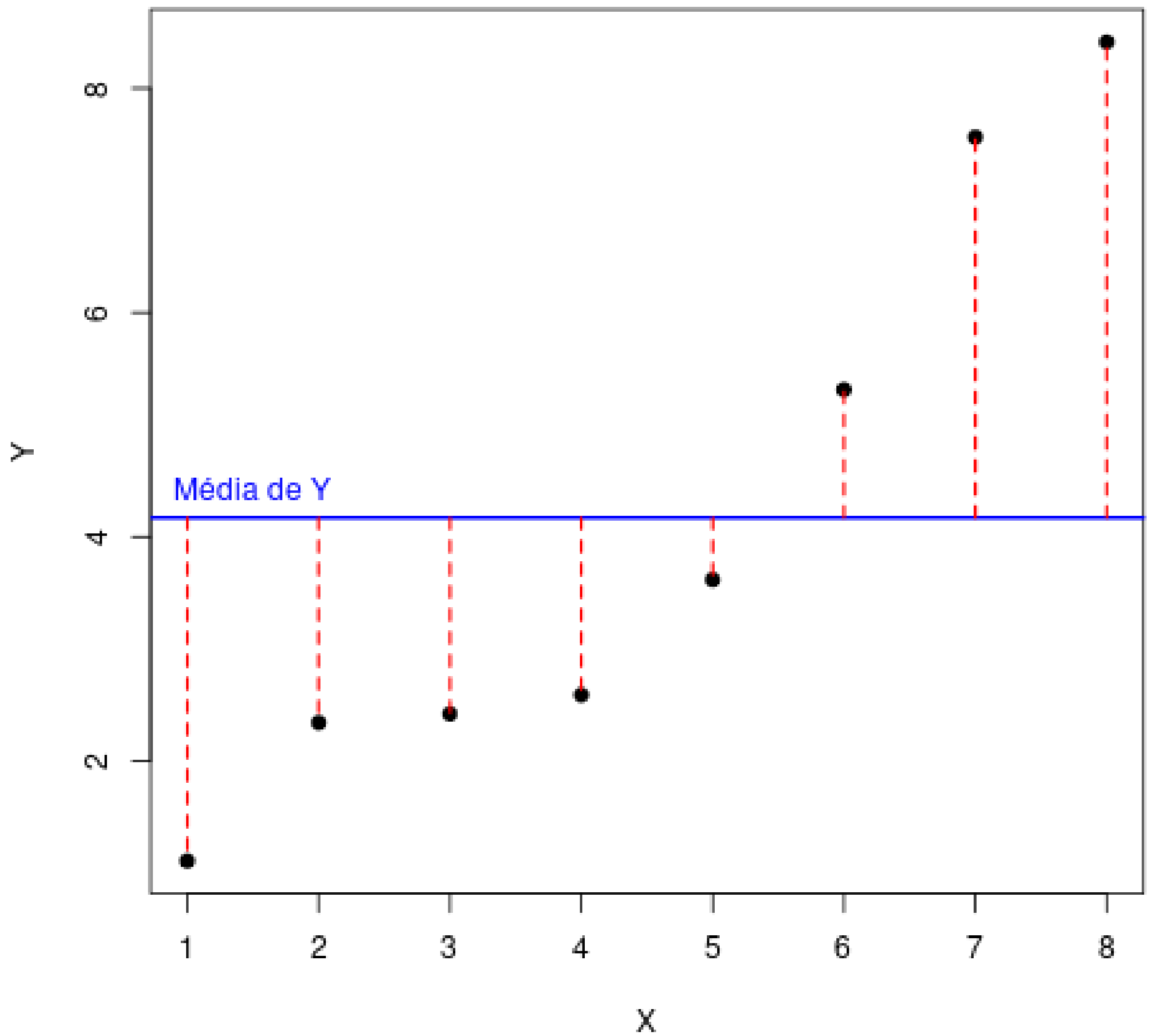
Cálculos passo a passo

A variação total

Nosso ponto de partida é a variação de uma variável, no caso Y. Uma das maneiras mais usadas na estatística para expressar a variação de medidas é sua dispersão em torno da média. Para isso, calculamos a diferença de cada medida à média de todas as medidas. Vamos adicionar isto à nossa tabela de dados:

```
dadinhos$dif <- dadinhos$Y - mean(dadinhos$Y)
dadinhos
```

Visualmente o que fizemos foi calcular a distância de cada ponto à média de todos os pontos, que está representada como uma linha horizontal azul:



Para resumir estas distâncias em um único número, as elevamos ao quadrado e somamos. Isso é chamado "soma dos desvios quadrados" ou simplesmente "soma dos quadrados".

Por que elevar ao quadrado os desvios à média? Bom, primeiro porque a soma dos desvios é sempre zero… Mas também porque a soma dos desvios ao quadrado tem várias propriedades estatísticas úteis, como a aditividade que vamos ver em seguida.

A soma dos quadrados descreve a variação **total** da variável Y. Calcule esta soma no R com o comando a seguir, e guarde em uma objeto chamado ''V.total":

```
V.total <- sum(dadinhos$dif^2)
```

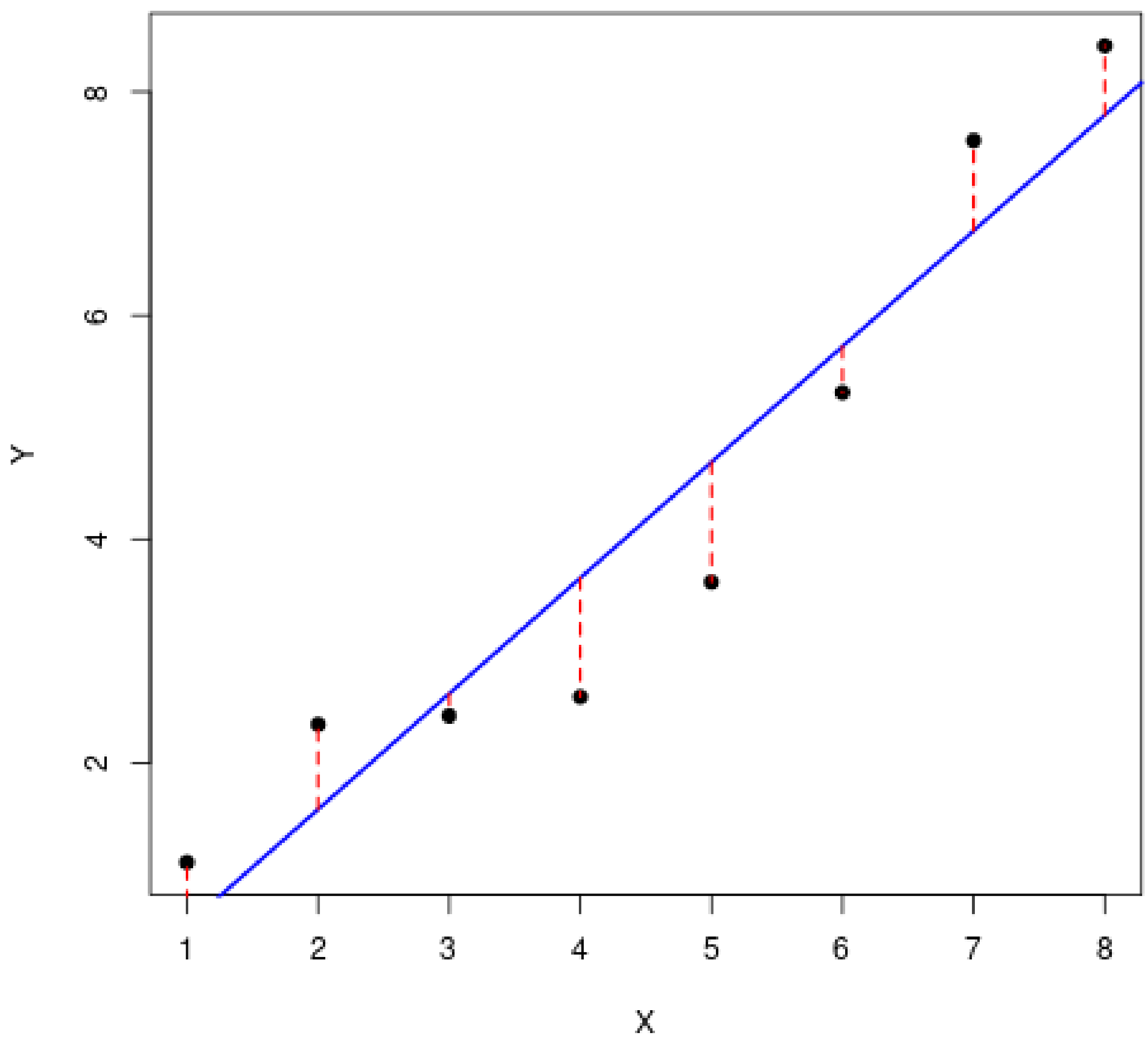
Lembrando que para ver o valor que vc obteve e armazenou neste objeto, basta digitar o nome do objeto na linha de comando:

```
V.total
```

A variação que sobra da regressão

Uma regressão linear busca explicar a variação observada em uma variável pela variação de outra. Se a regressão é bem sucedida, esperamos que reste bem menos variação sem explicação, que chamamos de **variação residual** da regressão. Esta variação residual é a soma dos quadrados dos desvios de cada ponto à linha de regressão.

Na figura a seguir está a linha da regressão linear de Y em função de X, e os desvios de cada observação em relação a esta reta de regressão. Os resíduos da regressão são bem menores que os desvios em relação à média, da figura anterior:



Como chegamos a estes valores na figura? Vamos calcular passo a passo. Primeiro ajustamos a regressão:

```
dadinhos.lm <- lm(Y ~ X, data=dadinhos)
```

Os intercepto e a inclinação da equação da reta ajustada são:

```
(dadinhos.cf <- coef(dadinhos.lm))
```

E agora adicionamos à nossa planilha de dados os valores de Y previstos pela equação da reta para cada valor de X:

```
dadinhos$Y.pred <- predict(dadinhos.lm)
```

e também adicionamos a diferença entre os valores de Y e os previstos, que são os resíduos da regressão:

```
dadinhos$residuo <- dadinhos$Y - dadinhos$Y.pred
```

Nossa tabela de dados agora tem cinco colunas:

X	Y	dif	Y.pred	residuo
1	1.110051	-3.0608617	0.5497765	0.5602747
2	2.343195	-1.8277177	1.5843869	0.7588084
3	2.420523	-1.7503898	2.6189973	-0.1984742
4	2.590459	-1.5804543	3.6536077	-1.0631491
5	3.617083	-0.5538302	4.6882181	-1.0711354
6	5.311097	1.1401837	5.7228285	-0.4117319
7	7.564503	3.3935902	6.7574390	0.8070641
8	8.410393	4.2394798	7.7920494	0.6183433

A soma dos quadrados dos resíduos expressa a variação que restou da regressão. É a variação de Y que não é explicada pela variação de X, em uma regressão linear. Para calculá-la somamos os valores da coluna dos resíduos, elevados ao quadrado:

```
V.resid <- sum(dadinhos$residuo^2)
```

E vemos que de fato esta variação residual é bem menor que a total:

```
V.resid
```

A variação explicada pela regressão

Acima calculamos a variação total de Y e a variação que resta em Y depois de considerarmos um efeito linear de X sobre Y. A soma dos quadrados, medida que escolhemos para expressar estes componentes de variação, tem uma propriedade muito útil. Se consideramos o efeito linear de X como a única fonte de explicação para Y, podemos então dizer que:

$$V_{total} = V_{explic} + V_{resid}$$

ou seja, que a soma dos quadrados total (variação total) é o resultado da adição da soma dos quadrados explicados (pela regressão) e da soma dos quadrados dos resíduos da regressão. Em outras palavras, estamos repartindo, ou **particionando aditivamente** a variação total de Y em dois componentes. Este raciocínio pode ser generalizado para mais componentes de variação, como veremos no roteiro seguinte.

Como já calculamos V_{total} e V_{resid} obtemos a variação explicada pela regressão com:

$$V_{explic} = V_{total} - V_{resid}$$

Que podemos calcular no R usando os valores acima, que armazenamos:

```
(V.expl <-  V.total - V.resid)
```

E finalmente o coeficiente de determinação!

Obtemos o coeficiente de determinação dividindo V_{explic} por V_{total}:

```
V.expl/V.total
```

Neste caso dizemos que 91% da variação de Y é explicada por X. Nada mal. Mas o que você poderia esperar de dados que a gente mesmo criou, né!