Регрессионный анализ, часть 1

Математические методы в зоологии - на R, осень 2013

Марина Варфоломеева
Каф. Зоологии беспозвоночных, СПбГУ

Знакомимся с линейными моделями

- Модель простой линейной регрессии
- Проверка валидности модели
- Оценка качества подгонки модели

Вы сможете

- подобрать модель линейной регрессии и записать ее в виде уравнения
- проверить валидность модели при помощи t- или F-теста
- оценить долю изменчивости, которую объясняет модель, при помощи $R2$

Модель простой линейной регрессии

Линейная регрессия

- простая

$$Y_i = \beta_0 + \beta x_i + \epsilon_i$$

- множественная

$$Y_i = \beta_0 + \beta x_{1i} + + \beta x_{2i} + \ldots + \epsilon_i$$

Запись моделей в R

```
зависимая_переменная ~ модель
```

$\hat{y}_i = b_0 + bx_i$ (простая линейная регрессия со свободным членом (intercept))

- Y ~ X
- Y ~ 1 + X
- Y ~ X + 1

$\hat{y}_i = bx_i$ (простая линейная регрессия без свободного члена)

- Y ~ X - 1
- Y ~ -1 + X

$\hat{y}_i = b_0$ (уменьшенная модель, линейная регрессия y от свободного члена)

- Y ~ 1
- Y ~ 1 - X

Запишите в нотации R

эти модели линейных регрессий

- $\hat{y}_i = b_0 + bx_{1i} + bx_{2i} + bx_{3i}$ (множественная линейная регрессия со свободным членом)
- $\hat{y}_i = b_0 + bx_{1i} + bx_{3i}$ (уменьшенная модель множественной линейной регрессии, без $X2$)

Минимизируем остаточную изменчивость

$Y_i = \beta_0 + \beta x_i + \epsilon_i$ - модель регрессии

$\hat{y}_i = b_0 + b_1 x_i$ - оценка модели

нужно оценить β_0, β_1 и $σ2$

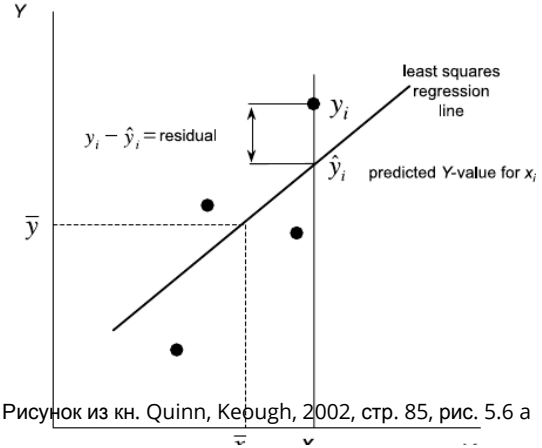


Рисунок из кн. Quinn, Keough, 2002, стр. 85, рис. 5.6 a

- Метод наименьших квадратов (Ordinary Least Squares, см. рис.)

Еще есть методы максимального правдоподобия (Maximum Likelihood, REstricted Maximum Likelihood)

Оценки параметров линейной регрессии

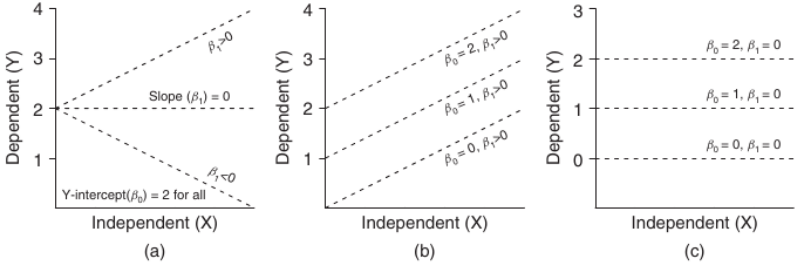
минимизируют $\sum{(y _i - \hat y _i)2}$, т.е. остатки.

ПАРАМЕТРЫ	ОЦЕНКИ ПАРАМЕТРОВ	СТАНДАРТНЫЕ ОШИБКИ ОЦЕНОК
β_1	$$b _1 = \frac {\sum _{i=1}{n} {[(x _i - \bar x)(y _i - \bar y)]}}{\sum _{i=1}{n} {(x _i - \bar x)2}}$$	$$SE _{b _1} = \sqrt{\frac{MS _e}{\sum _{i=1}{n} {(x _i - \bar x)2}}}$$
β_0	$b_0 = \bar{y} - b_1 \bar{x}$	$$SE _{b _0} = \sqrt{MS _e [\frac{1}{n} + \frac{\bar x}{\sum _{i=1}{n} {(x _i - \bar x)2}}]}$$
ϵ_i	$e_i = y_i - \hat{y}_i$	$\approx \sqrt{MS_e}$

- Стандартные ошибки коэффициентов нужны
  - для построения доверительных интервалов
  - для статистических тестов

Таблица из кн. Quinn, Keough, 2002, стр. 86, табл. 5.2

Коэффициенты регрессии



- Если нужно сравнивать - лучше стандартизованные (= "бета коэффициенты") коэффициенты (на след.лекции про сравнение моделей)
  - $b\ast _1 = {b _1 {\sigma _x} \over {\sigma _y}}$
  - не зависят от масштаба

Рисунок из кн. Logan, 2010, стр. 170, рис. 8.2

Пример: усыхающие личинки мучных хрущаков

Как зависит потеря влаги личинками малого мучного хрущака *Tribolium confusum* от влажности воздуха? (Nelson, 1964)

9 экспериментов, продолжительность 6 дней

- разная относительная влажность воздуха, % (`humidity`)
- измерена потеря влаги, мг (`weightloss`)

Данные в файлах `nelson.xlsx` и `nelson.csv`

Данные из Sokal, Rohlf, 1997, табл. 14.1 по Logan, 2010. глава 8, пример 8c

Читаем данные из файла и знакомимся с ними

Внимание, установите рабочую директорию, или используйте полный путь к файлу

```
setwd("C:\\mathmethr\week2")
## из .xlsx
library(XLConnect)
wb <- loadWorkbook(".\data\nelson.xlsx")
nelson <- readWorksheet(wb, sheet = 1)
## или из .csv
# nelson <- read.table(file=".\data\nelson.xlsx", header = TRUE, sep = "\t", dec = ".")
```

```
str(nelson)
```

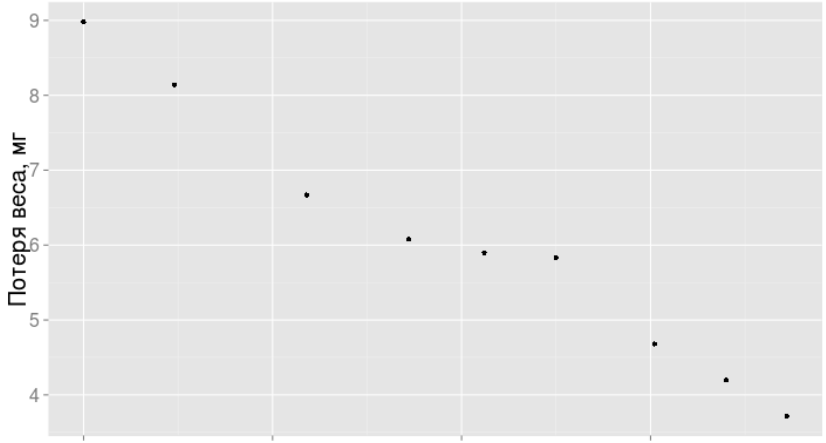
```
## 'data.frame':    9 obs. of  2 variables:
##  $ humidity  : num  0 12 29.5 43 53 62.5 75.5 85 93
##  $ weightloss: num  8.98 8.14 6.67 6.08 5.9 5.83 4.68 4.2 3.72
```

```
head(nelson)
```

```
##   humidity weightloss
## 1      0.0       8.98
## 2     12.0       8.14
```

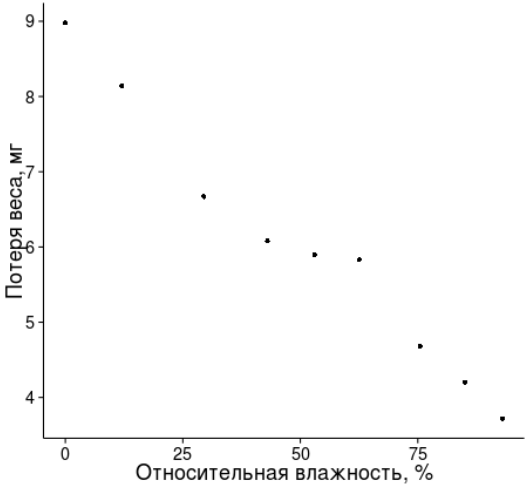
Как зависит потеря веса от влажности? График рассеяния.

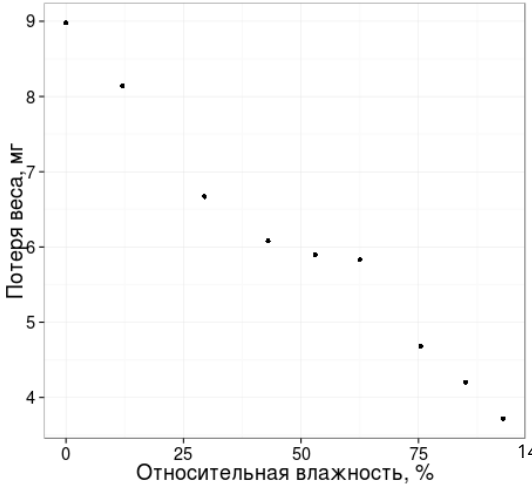
```
library(ggplot2)
p_nelson <- ggplot(data=nelson, aes(x = humidity, y = weightloss)) +
  geom_point() +
  labs(x = "Относительная влажность, %", y = "Потеря веса, мг")
p_nelson
```



Внешний вид графиков можно менять при помощи тем

```
p_nelson + theme_classic()
p_nelson + theme_bw()
theme_set(theme_classic()) # устанавливаем понравившуюся тему до конца сессии
```





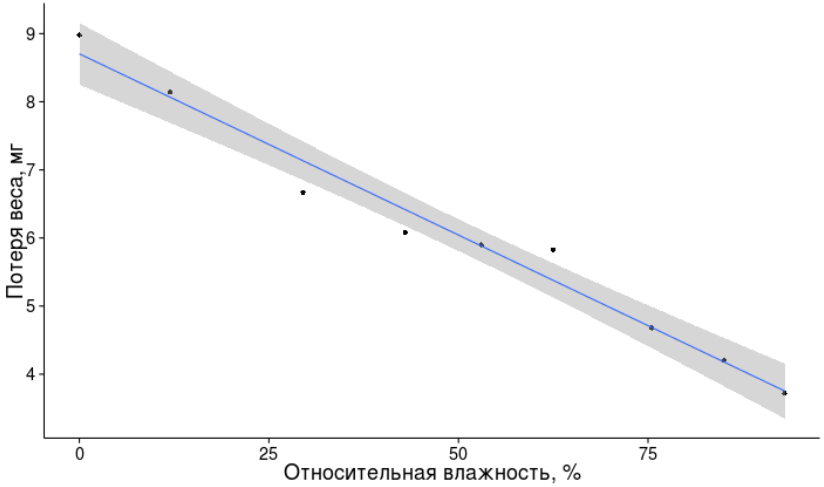
Подбираем параметры линейной модели

```
nelson_lm <- lm(weightloss ~ humidity, nelson)
summary(nelson_lm)
```

```
##
## Call:
## lm(formula = weightloss ~ humidity, data = nelson)
##
## Residuals:
##     Min      1Q  Median      3Q     Max
## -0.4640 -0.0344  0.0167  0.0746  0.4524
##
## Coefficients:
##             Estimate Std. Error t value      Pr(>|t|)
## (Intercept)  8.70403    0.19156    45.4 0.00000000065 ***
## humidity    -0.05322    0.00326   -16.4 0.00000078161 ***
## ---
## Signif. codes:  0 '***' 0.001 '**' 0.01 '*' 0.05 '.' 0.1 ' ' 1
##
## Residual standard error: 0.297 on 7 degrees of freedom
## Multiple R-squared:  0.974,  Adjusted R-squared:  0.971
## F-statistic:  267 on 1 and 7 DF,  p-value: 0.000000782
```

Добавим линию регрессии на график

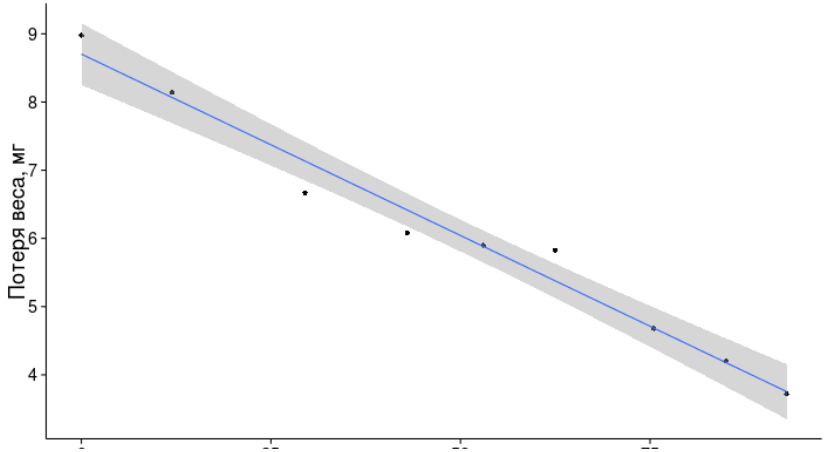
```
p_nelson + geom_smooth(method = "lm")
```



Как вы думаете,

что это за серая область вокруг линии регрессии?

```
p_nelson + geom_smooth(method = "lm")
```



Неопределенность оценок коэффициентов и предсказанных значений

Неопределенность оценок коэффициентов

- **Доверительный интервал коэффициента**
  - зона, в которой с $(1-\alpha)\cdot 100\%$ вероятностью содержится среднее значение коэффициента
  - $b_1 \pm t_{\alpha, df=n-2} SE_{b_1}$
  - $\alpha = 0.05$ => $(1-0.05)\cdot 100\% = 95\%$ интервал

- **Доверительная зона регрессии**
  - зона, в которой с $(1-\alpha)\cdot 100\%$ вероятностью лежит регрессионная прямая

Находим доверительные интервалы коэффициентов

```
# Вспомните, в выдаче summary(nelson_lm) были только оценки коэффициентов
# и стандартные ошибки

# оценки коэффициентов отдельно
coef(nelson_lm)
```

```
## (Intercept)    humidity
##      8.7040     -0.0532
```

```
# доверительные интервалы коэффициентов
confint(nelson_lm)
```

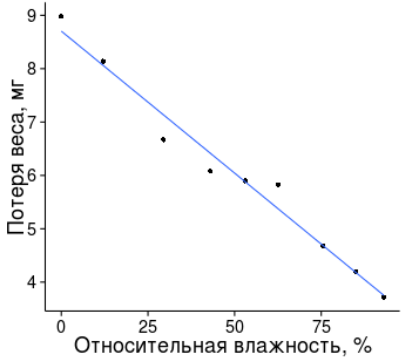
```
##                2.5 %  97.5 %
## (Intercept)  8.2510  9.1570
## humidity    -0.0609 -0.0455
```

Оценим, какова средняя потеря веса при заданной влажности

Нельзя давать оценки вне интервала значений X!

```
# новые данные для предсказания значений
newdata <- data.frame(humidity = c(50, 100))
predict(nelson_lm, newdata,
        interval = "confidence", se = TRUE)
```

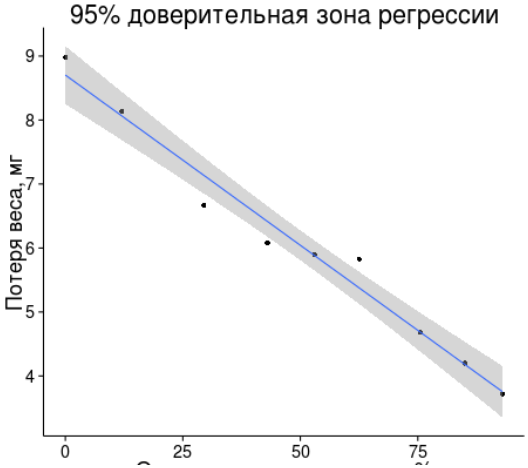
```
## $fit
##    fit  lwr  upr
## 1 6.04 5.81 6.28
## 2 3.38 2.93 3.83
##
## $se.fit
##      1      2
## 0.0989 0.1894
##
## $df
## [1] 7
##
## $residual.scale
## [1] 0.297
```

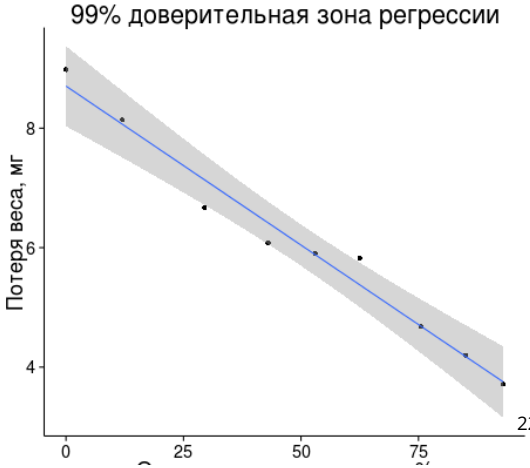


- При 50 и 100% относительной влажности ожидаемая средняя потеря веса жуков будет 6 $\pm$ 0.2 и 3.4 $\pm$ 0.4, соответственно.

Строим доверительную зону регрессии

```
p_nelson + geom_smooth(method = "lm") +
  ggtitle ("95% доверительная зона регрессии")
p_nelson + geom_smooth(method = "lm", level = 0.99) +
  ggtitle ("99% доверительная зона регрессии")
```





Неопределенность оценок предсказанных значений

- **Доверительный интервал к предсказанному значению**
  - зона в которую попадают $(1-\alpha)\cdot 100\%$ значений $\hat{y}_i$ при данном x_i
  - $\hat{y}_i \pm t_{0.05,n-2} SE_{\hat{y}_i}$
  - $SE _{\hat y} = \sqrt{MS _{e} [1 + \frac{1}{n} + \frac{(x _{prediction} - \bar x)2} {\sum _{i=1}{n} {(x _{i} - \bar x)2}}]}$

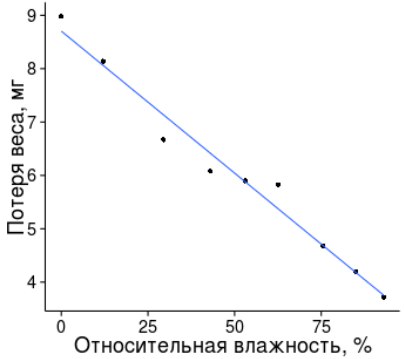
- **Доверительная область значений регрессии**
  - зона, в которую попадает $(1-\alpha)\cdot 100\%$ всех предсказанных значений

Предсказываем для новых значений

Нельзя использовать для предсказаний вне интервала значений X!

```
# новые данные для предсказания значений
newdata <- data.frame(humidity = c(50, 100))
predict(nelson_lm, newdata,
        interval = "prediction", se = TRUE)
```

```
## $fit
##    fit  lwr  upr
## 1 6.04 5.30 6.78
## 2 3.38 2.55 4.21
##
## $se.fit
##      1      2
## 0.0989 0.1894
##
## $df
## [1] 7
##
## $residual.scale
## [1] 0.297
```



- У 95% жуков при 50 и 100% относительной влажности будет потеря веса будет в пределах 6 ± 0.7 и 3.4 ± 0.8, соответственно.

Данные для доверительной области значений

```
# предсказанные значения для исходных данных
predict(nelson_lm, interval = "prediction")
```

```
## Warning: predictions on current data refer to _future_ responses
```

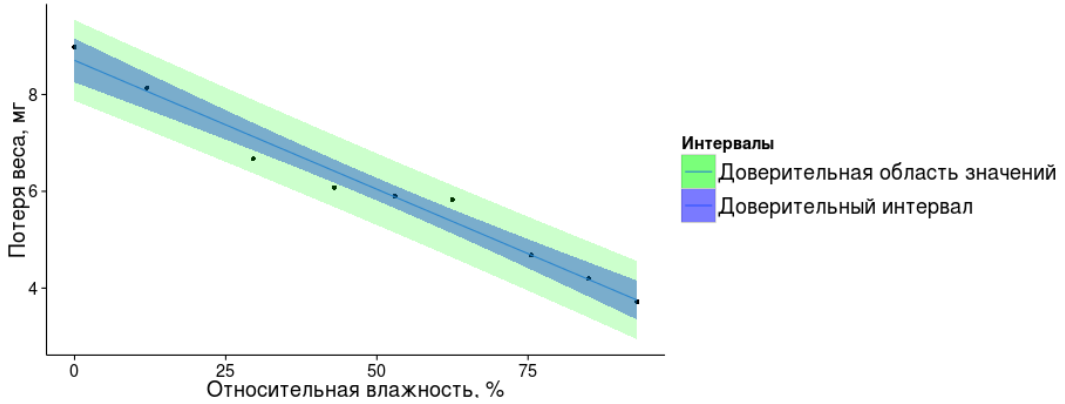
```
##    fit  lwr  upr
## 1 8.70 7.87 9.54
## 2 8.07 7.27 8.86
## 3 7.13 6.38 7.89
## 4 6.42 5.67 7.16
## 5 5.88 5.14 6.62
## 6 5.38 4.63 6.12
## 7 4.69 3.92 5.45
## 8 4.18 3.39 4.97
## 9 3.75 2.95 4.56
```

```
# объединим с исходными данными в новом датафрейме - для графиков
nelson_with_pred <- data.frame(nelson, predict(nelson_lm, interval = "prediction"))
```

```
## Warning: predictions on current data refer to _future_ responses
```

Строим доверительную область значений и доверительный интервал

```
p_nelson + geom_smooth(method = "lm", aes(fill = "Доверительный интервал"), alpha = 0.4) +
  geom_ribbon(data = nelson_with_pred,
              aes(y = fit, ymin = lwr, ymax = upr, fill = "Доверительная область значений"),
              alpha = 0.2) +
  scale_fill_manual('Интервалы', values = c('green', 'blue'))
```



$H_0 : \beta_1 = 0$

или t-, или F-тест

Проверка валидности модели

Проверка при помощи t-критерия

$H_0 : b_1 = \theta, \theta = 0$

$$t = \frac{b_1 - \theta}{SE_{b_1}}$$

$df = n - 2$

Проверка коэффициентов с помощью t-критерия есть в сводке модели

```
summary(nelson_lm)
```

```
##
## Call:
## lm(formula = weightloss ~ humidity, data = nelson)
##
## Residuals:
##     Min      1Q  Median      3Q     Max
## -0.4640 -0.0344  0.0167  0.0746  0.4524
##
## Coefficients:
##             Estimate Std. Error t value      Pr(>|t|)
## (Intercept)  8.70403    0.19156    45.4 0.00000000065 ***
## humidity    -0.05322    0.00326   -16.4 0.00000078161 ***
## ---
## Signif. codes:  0 '***' 0.001 '**' 0.01 '*' 0.05 '.' 0.1 ' ' 1
##
## Residual standard error: 0.297 on 7 degrees of freedom
## Multiple R-squared:  0.974,  Adjusted R-squared:  0.971
## F-statistic:  267 on 1 and 7 DF,  p-value: 0.000000782
```

Проверка при помощи F-критерия

$H_0 : \beta_1 = 0$

- Та же самая нулевая гипотеза. Как так получается?

Общая изменчивость - отклонения от общего среднего значения

SS_{total}

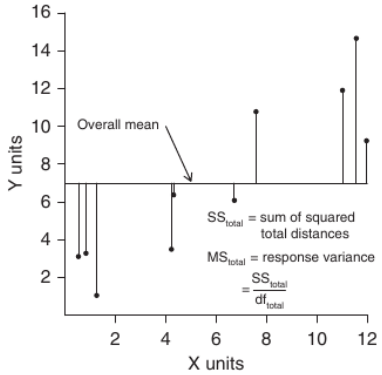
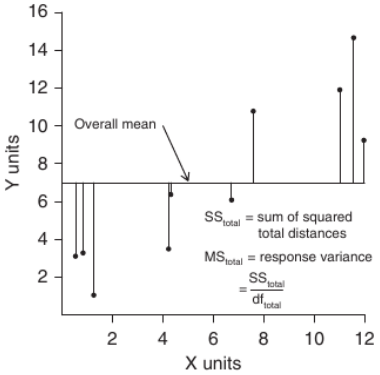
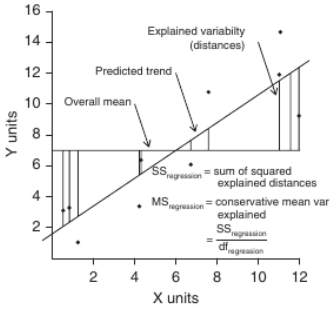


Рисунок из кн. Logan, 2010, стр. 172, рис. 8.3 a

$$SS_{total} = SS_{regression} + SS_{error}$$





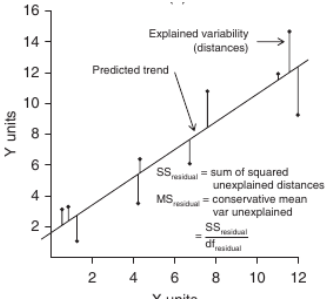
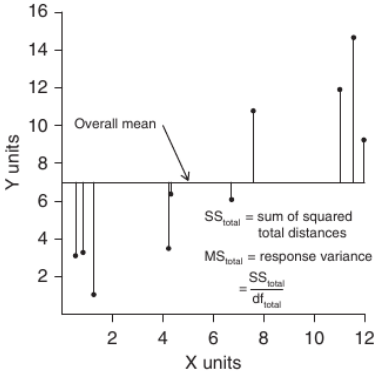


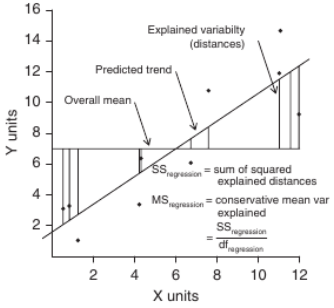
Рисунок из кн. Logan, 2010, стр. 172, рис. 8.3 a-c

Если зависимости нет, $b_1 = 0$

Тогда $\hat{y}_i = \bar{y}_i$

и $MS_{regression} \approx MS_{error}$





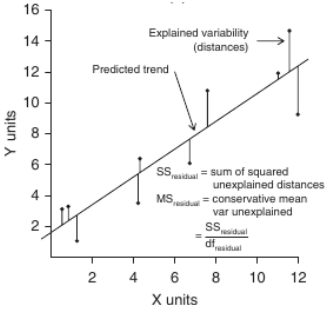
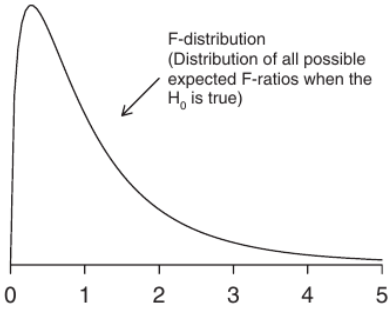


Рисунок из кн. Logan, 2010, стр. 172, рис. 8.3 a-c

F-критерий и распределение F-статистики

$$F = \frac{\text{Объясненная изменчивость}}{\text{Необъясненная изменчивость}} = \frac{MS_{regression}}{MS_{error}}$$



Зависит от

- α
- $df_{regression}$
- df_{error}

F-распределение при $H_0 : b_1 = 0$

Рисунок с изменениями из кн. Logan, 2010, стр. 172, рис. 8.3 d

Таблица результатов дисперсионного анализа

ИСТОЧНИК ИЗМЕНЧИВОСТИ	СУММЫ КВАДРАТОВ ОТКЛОНЕНИЙ, SS	ЧИСЛО СТЕПЕНЕЙ СВОБОДЫ, DF	СРЕДНИЙ КВАДРАТ ОТКЛОНЕНИЙ, MS	F
Регрессия	$$SS _r = \sum{(\bar y - \hat y _i)2}$$	$df_r = 1$	$MS_r = \frac{SS_r}{df_r}$	$F_{df_r,df_e} = \frac{MS_r}{MS_e}$
Остаточная	$$SS _e = \sum{(y _i - \hat y _i)2}$$	$df_e = n - 2$	$MS_e = \frac{SS_e}{df_e}$	
Общая	$$SS _t = \sum {(\bar y - y _i)2}$$	$df_t = n - 1$		

- Минимальное упоминание в тексте - F_{df_r,df_e}, p

Проверяем валидность модели при помощи F-критерия

```
nelson_aov <- aov(nelson_lm)
summary(nelson_aov)
```

```
##             Df Sum Sq Mean Sq F value     Pr(>F)
## humidity     1  23.51   23.51     267 0.00000078 ***
## Residuals    7   0.62    0.09
## ---
## Signif. codes:  0 '***' 0.001 '**' 0.01 '*' 0.05 '.' 0.1 ' ' 1
```

- Количество влаги, потерянной жуками в период эксперимента, достоверно зависело от уровня относительной влажности ($F_{1,7} = 267$, $p < 0.01$).

Оценка качества подгонки модели

Коэффициент детерминации

доля общей изменчивости, объясненная линейной связью x и y

$R2 = \frac {SS _r} {SS _t}$

$0 \le R2 \le 1$

Иначе рассчитывается как $R2 = r2$

Коэффициент детерминации

можно найти в сводке модели

- Осторожно, не сравнивайте $R2$ моделей с разным числом параметров, для этого есть $R2 _{adjusted}$

```
summary(nelson_lm)
```

```
##
## Call:
## lm(formula = weightloss ~ humidity, data = nelson)
##
## Residuals:
##     Min      1Q  Median      3Q     Max
## -0.4640 -0.0344  0.0167  0.0746  0.4524
##
## Coefficients:
##             Estimate Std. Error t value      Pr(>|t|)
## (Intercept)  8.70403    0.19156    45.4 0.00000000065 ***
## humidity    -0.05322    0.00326   -16.4 0.00000078161 ***
## ---
## Signif. codes:  0 '***' 0.001 '**' 0.01 '*' 0.05 '.' 0.1 ' ' 1
##
```

Take home messages

- Модель простой линейной регрессии $y_i = \beta_0 + \beta_1 \dot{x}_i + \epsilon_i$
- В оценке коэффициентов регрессии и предсказанных значений существует неопределенность. Доверительные интервалы можно расчитать, зная стандартные ошибки.
- Валидность модели линейной регрессии можно проверить при помощи t- или F-теста. $H_0 : \beta_1 = 0$
- Качество подгонки модели можно оценить при помощи коэффициента детерминации $R2$

Дополнительные ресурсы

- Гланц, 1999, стр. 221-244
- Logan, 2010, pp. 170-207
- Quinn, Keough, 2002, pp. 78-110
- Open Intro to Statistics: Chapter 7. Introduction to linear regression, pp. 315-353.
- Sokal, Rohlf, 1995, pp. 451-491
- Zar, 1999, pp. 328-355