Регрессионный анализ, часть 2

Математические методы в зоологии - на R

Марина Варфоломеева

осень 2014

1. **Множественная линейная регрессия**
2. **Условия применимости линейной регрессии**
3. **Проверка условий применимости линейной регрессии**

Вы сможете

- Подобрать модель множественной линейной регрессии, проверить ее валидность и интерпретировать коэффициенты при разных предикторах.
- Проверить условия применимости 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` - Продолжительности изоляции, лет
- `abund` - Обилие птиц

Открываем данные

```
# установите рабочую директорию
# birds <- read.delim(file = "./data/loyn.csv") # из .csv
library(XLConnect)
birds <- readWorksheetFromFile(file='./data/loyn.xls', sheet = 1)
str(birds)
```

```
# '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 : num  1968 1920 1900 1966 1918 ...
#  $ dist    : num  39 234 104 66 246 234 467 284 156 311 ...
#  $ ldist   : num  39 234 311 66 246 ...
#  $ graze   : num  2 5 5 3 5 3 5 5 4 5 ...
#  $ alt     : num  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 ...
```

Задача: запишите формулу модели регрессии

Как зависит обилие птиц от характеристик леса? Запишите в обозначениях R модель множественной линейной регрессии

$$Y_i = b_0 + b_1 x_{1i} + b_2 x_{2i} + b_3 x_{3i} + b_4 x_{4i}$$

Используйте названия переменных вместо $x_{1i} - x_{4i}$

- `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` - Продолжительности изоляции, лет

Решение

В обозначениях R модель множественной линейной регрессии

$$abund \sim l10area + l10dist + l10ldist + yr.isol$$

Названия переменных:

- `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` - Продолжительности изоляции, лет

Подбираем параметры модели и проверяем валидность с помощью t-критерия

$H_0 : \beta_i = 0$

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

```
#
# Call:
# lm(formula = abund ~ l10area + l10dist + l10ldist + yr.isol,
#     data = birds)
#
# Residuals:
#     Min      1Q  Median      3Q     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 **
# l10area        9.2348     1.2760    7.24 0.0000000023 ***
# l10dist       -0.7046     2.7077   -0.26       0.7957
# l10ldist      -1.5935     2.0954   -0.76       0.4505
# yr.isol        0.1236     0.0379    3.26       0.0020 **
# ---
# Signif. codes:  0 ’***’ 0.001 ’**’ 0.01 ’*’ 0.05 ’.’ 0.1 ’ ’ 1
#
```

Задача: Запишите уравнение множественной линейной регрессии

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 ~ l10area + l10dist + l10ldist + yr.isol,
#     data = birds)
```

Уравнение множественной линейной регрессии

```
coef(bird_lm)
```

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

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
#    -224.425       9.235      -0.705      -1.593       0.124
```

Обычные коэффициенты

- величина зависит от единиц измерения

Сравнение влияния разных факторов

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

```
#     (Intercept)  scale(l10area)  scale(l10dist) scale(l10ldist)
#          19.514           7.502          -0.292          -0.916
#  scale(yr.isol)
#           3.161
```

Бета-коэффициенты

- измерены в стандартных отклонениях
- относительная оценка влияния фактора
- можно сравнивать

Задача: Сравните влияние разных факторов

Определите по значениям beta-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 = birds)
#
# Residuals:
#     Min      1Q  Median      3Q     Max
# -16.663  -3.546   0.086   2.884  16.530
#
# Coefficients:
#                 Estimate Std. Error t value     Pr(>|t|)
# (Intercept)       19.514      0.879   22.20      < 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 '**' 0.01 '*' 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
```

Оценка качества подгонки модели

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

```
# [1] 0.625
```

Скорректированный R^2

- Учитывает число переменных в модели

Условия применимости линейной регрессии

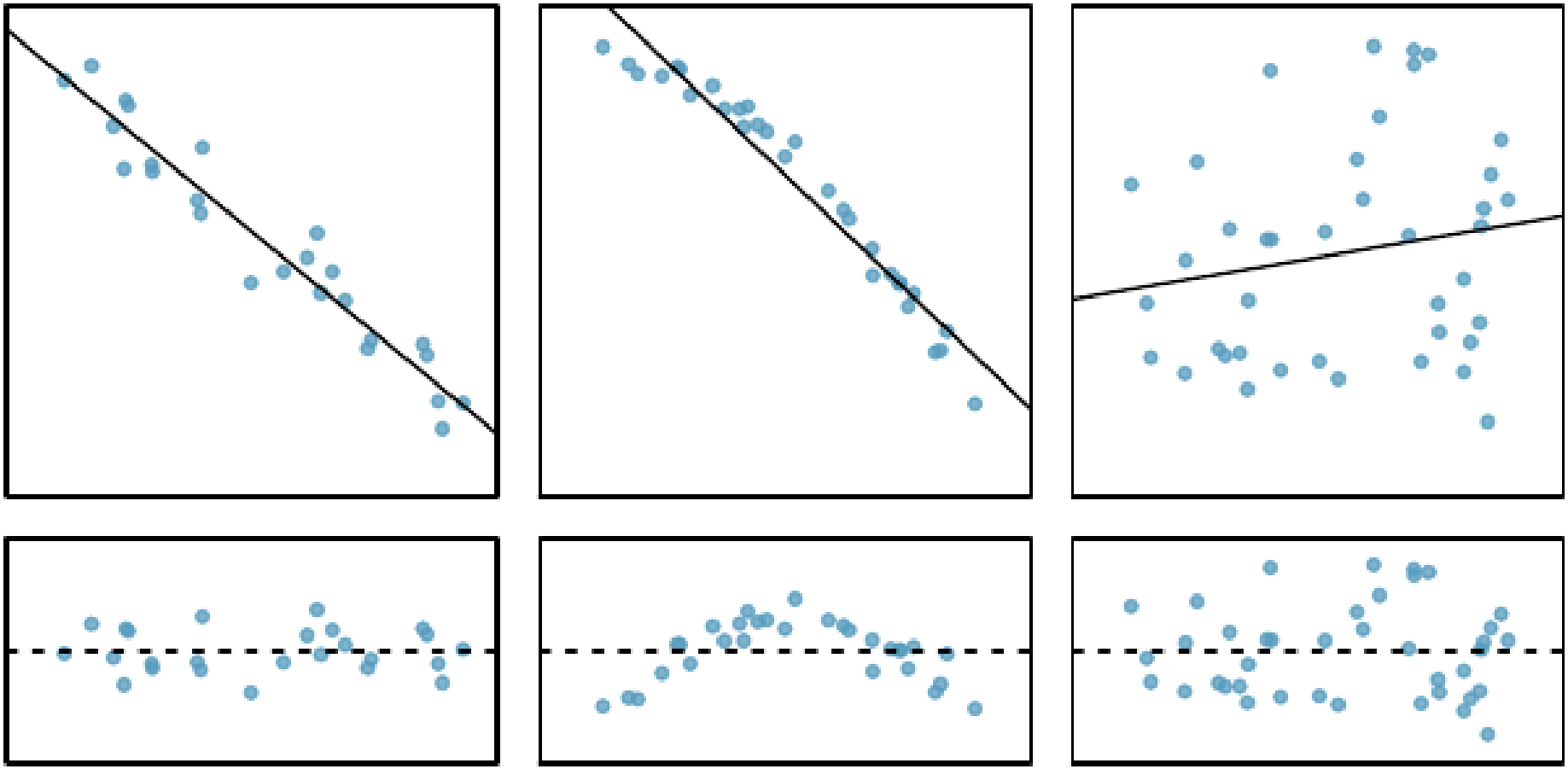
Условия применимости линейной регрессии

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

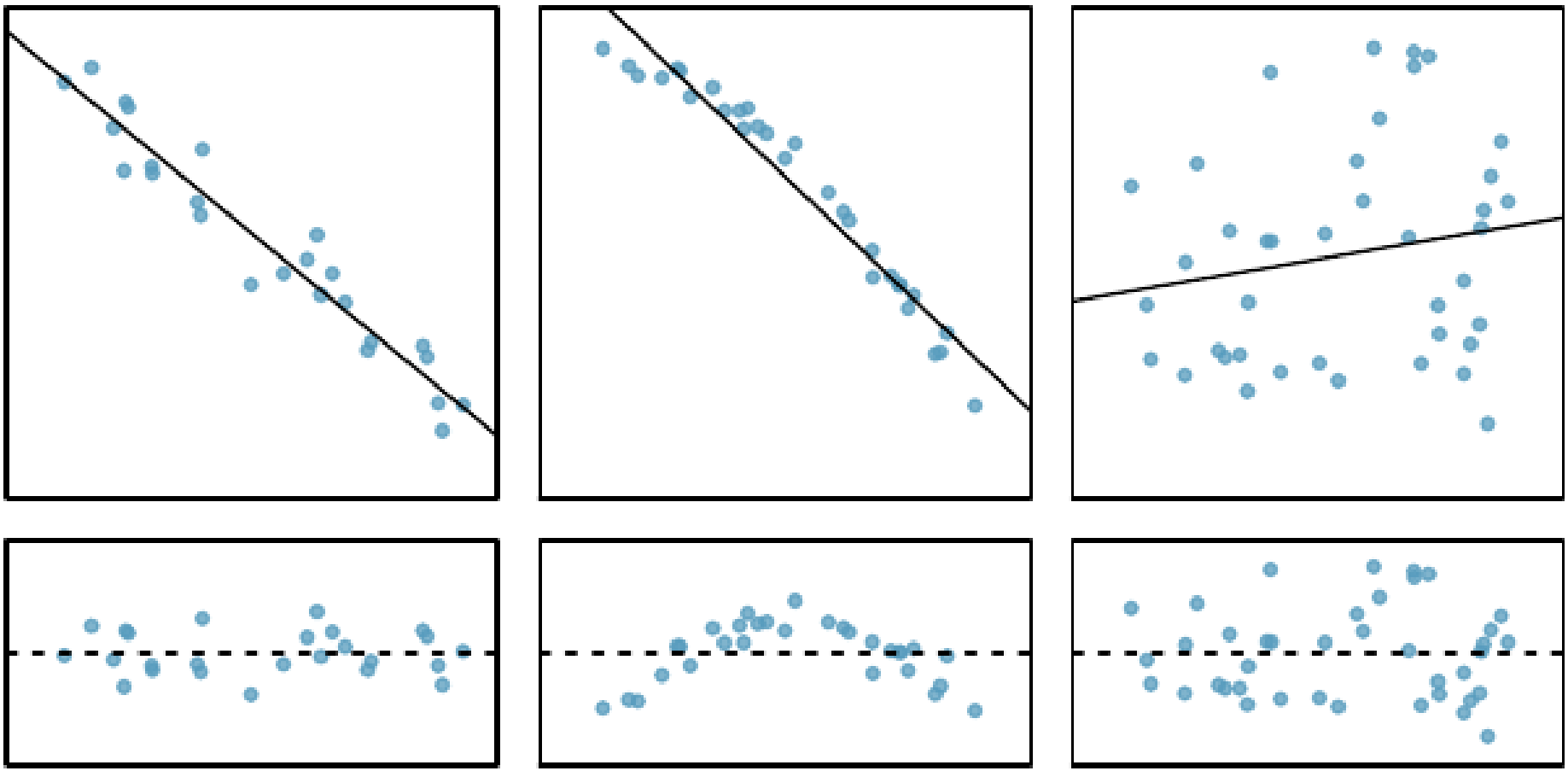
- Значения y_i должны быть независимы друг от друга
  - берегитесь псевдоповторностей и автокорреляций (например, временных)
- Контролируется на этапе планирования
- Проверяем на графике остатков



Остаточная изменчивость (Рис. из кн. Diez et al., 2010, стр. 332, рис. 7.8)

2. Линейность связи

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



Остаточная изменчивость (Рис. из кн. Diez et al., 2010, стр. 332, рис. 7.8)

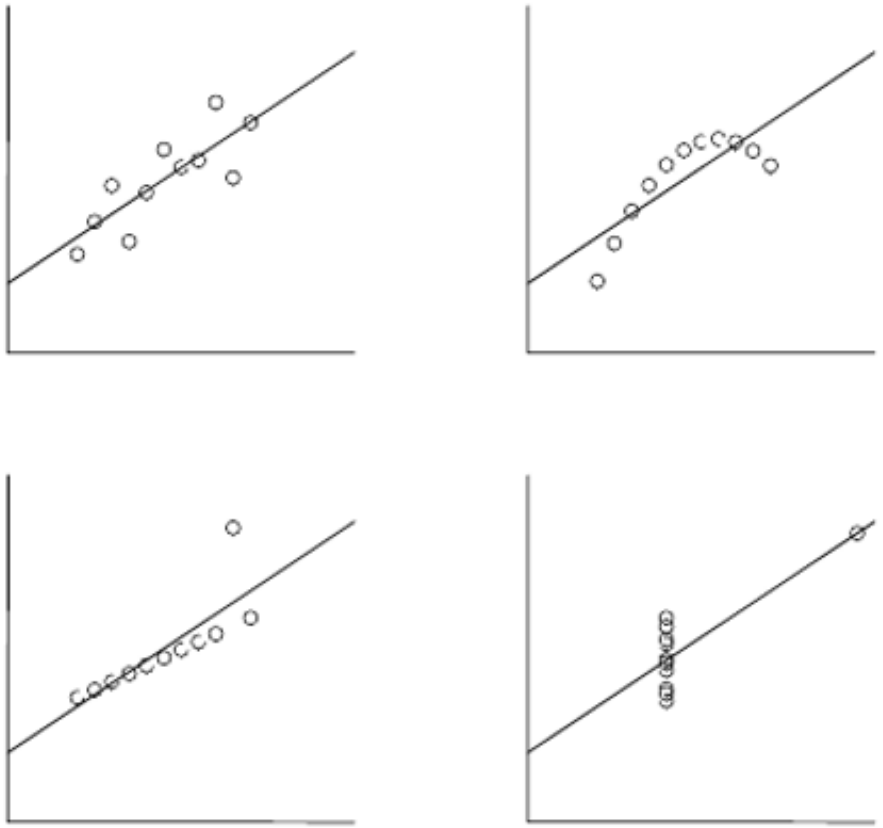
Что бывает, если неглядя применять линейную регрессию

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

$$y_i = 3.0 + 0.5x_i$$

$$r^2 = 0.68$$

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

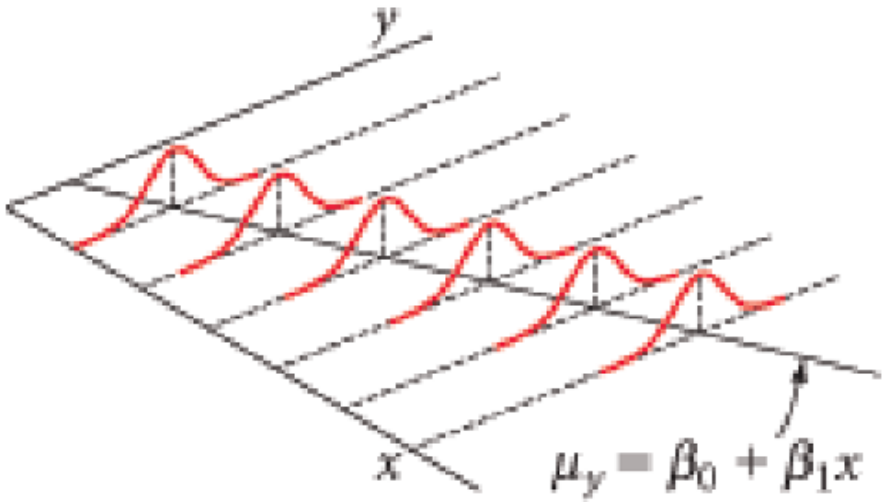


Квартет Энскомба (рис. из кн. Quinn, Keough, 2002, стр. 97, рис. 5.9

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



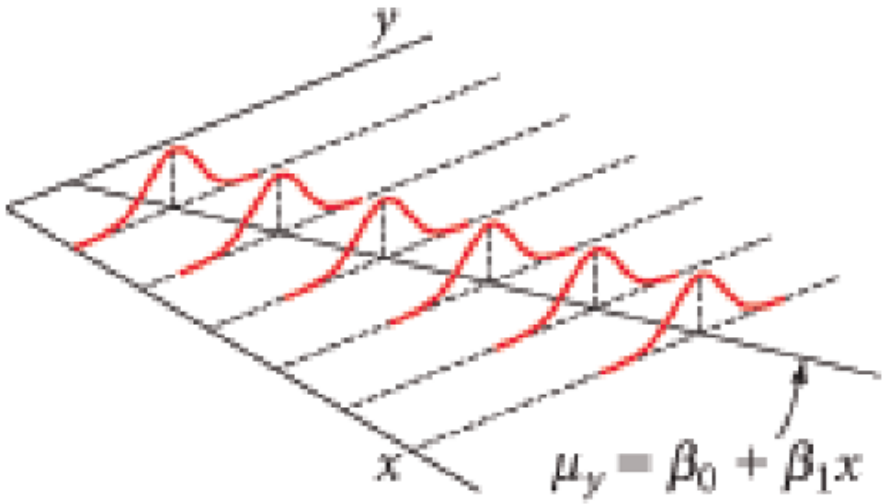
Условие нормальности и гомогенность дисперсий (рис. 11.4 из кн. Watkins et al., 2008, стр. 743)

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

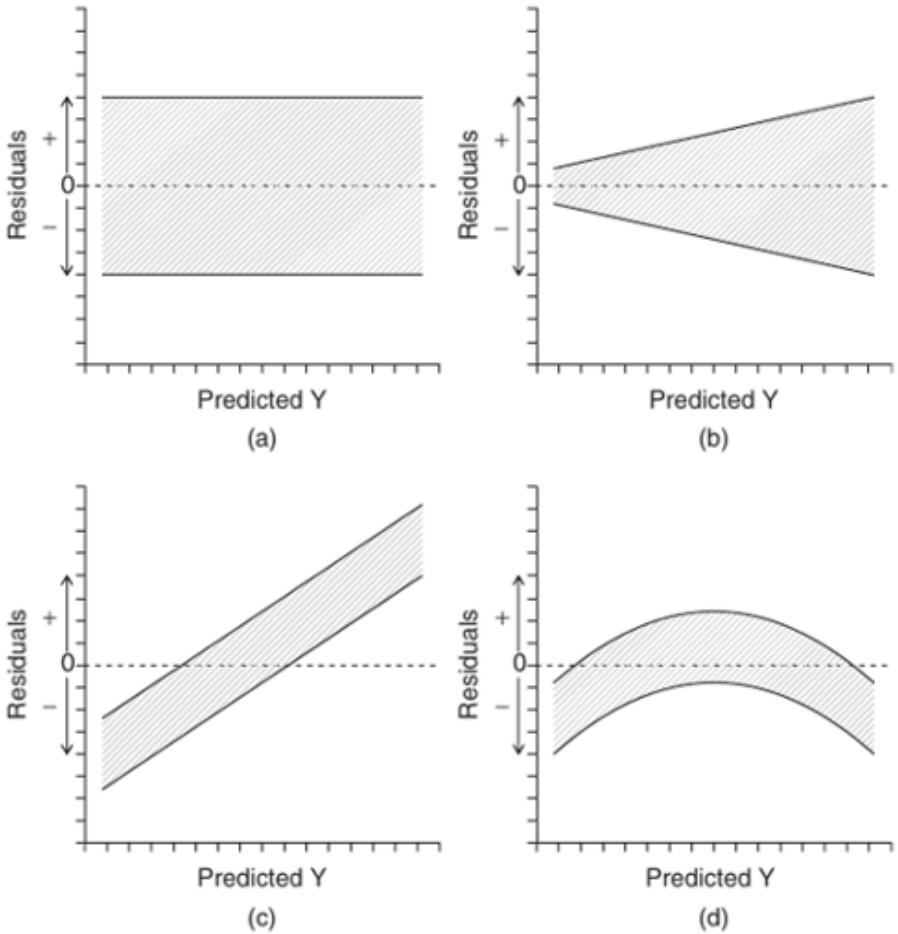
Но, поскольку $\epsilon_i \sim N(0, \sigma^2)$, можно проверить равенство дисперсий остатков ϵ_i

- Нужно и важно для тестов параметров
- Проверяем на графике остатков по отношению к предсказанным значениям
- Можно сделать тест С Кокрана (Cochran's C), но только если несколько значений y для каждого x



Условие нормальности и гомогенность дисперсий (рис. 11.4 из кн. Watkins et al., 2008, стр. 743)

Диагностика регрессии по графикам остатков



(a) все условия выполнены

(b) разброс остатков разный (wedge-shaped pattern)

(c) разброс остатков одинаковый, но нужны дополнительные предикторы

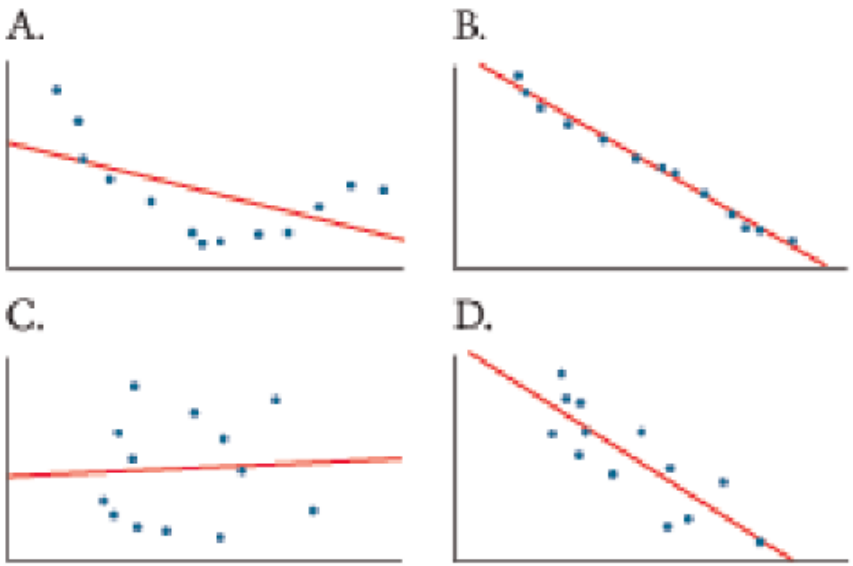
(d) к нелинейной зависимости применили линейную регрессию

Диагностика регрессии по графикам остатков (рис. 8.5 d из кн. Logan, 2010, стр. 174)

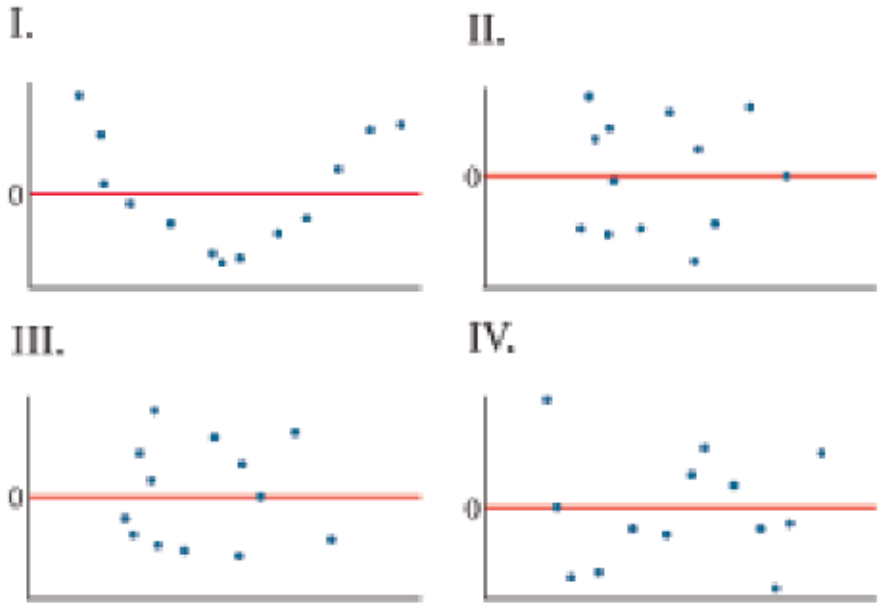
Задача: Проанализируйте графики остатков

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.

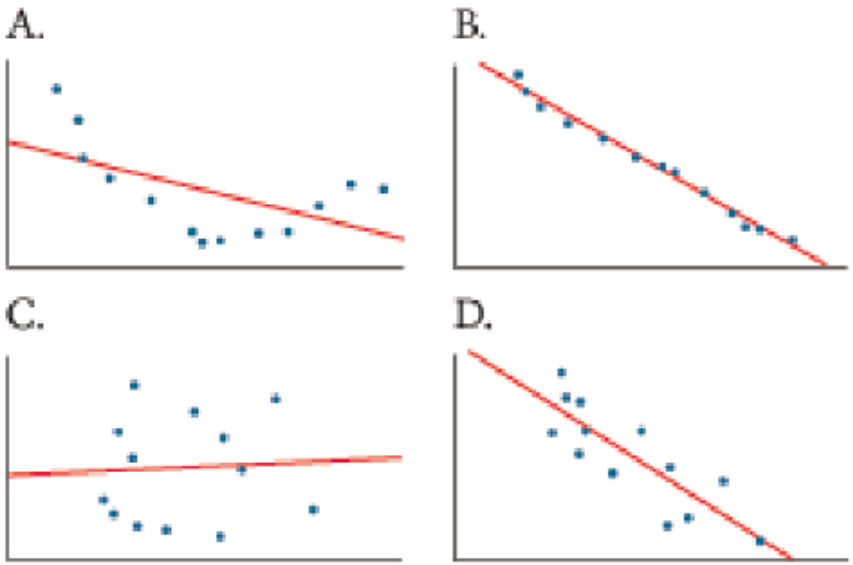


Display 3.85 Four residual plots.

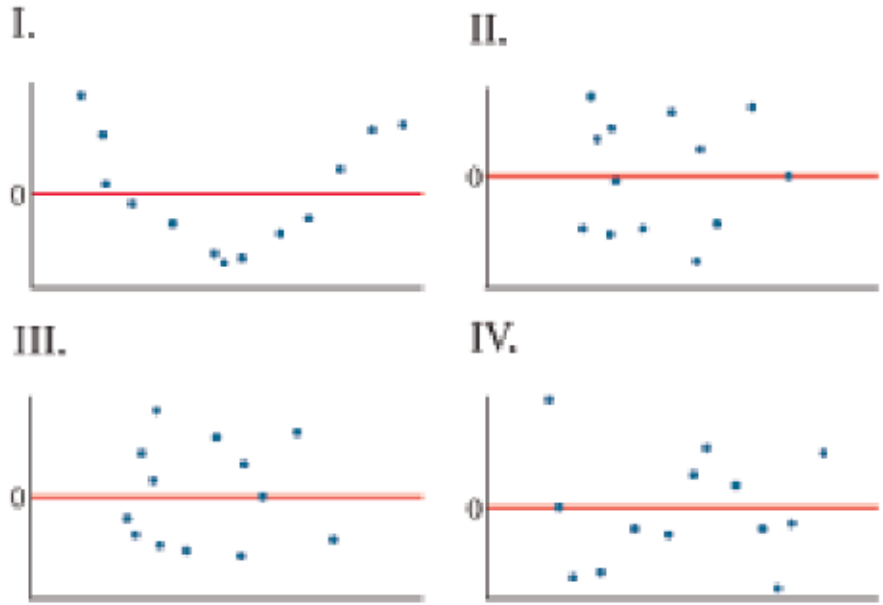
Графики регрессий и остатков (рис. 3.84-3.85 из кн. Watkins et al. 2008, стр. 177)

Решение

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



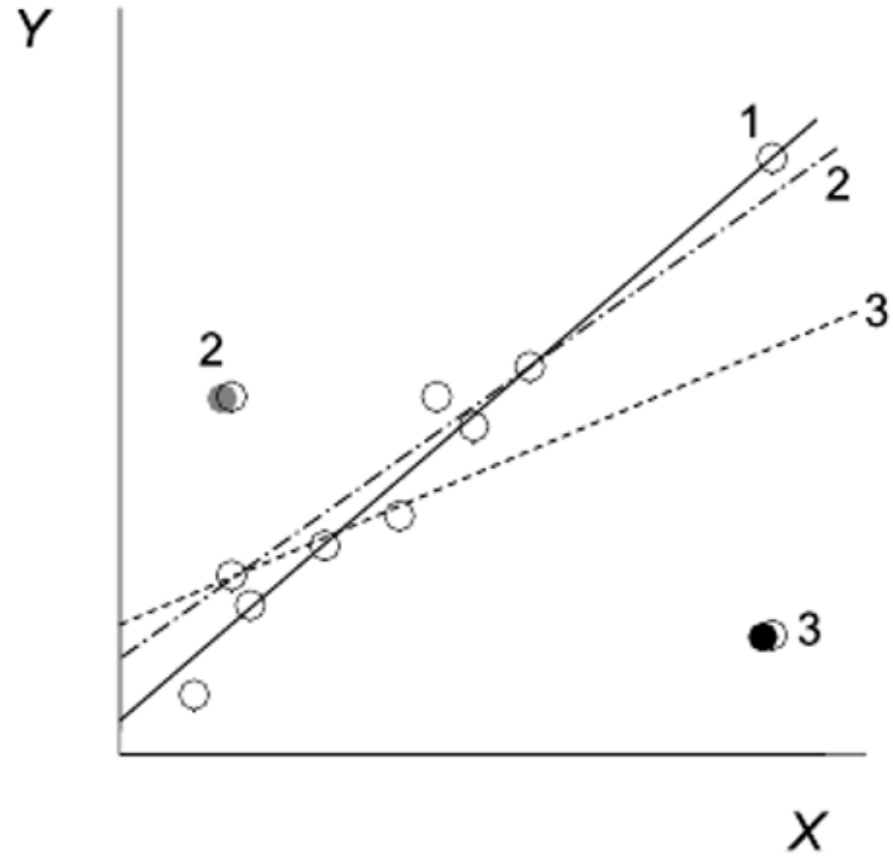
Display 3.84 Four scatterplots.



Display 3.85 Four residual plots.

Графики регрессий и остатков (рис. 3.84-3.85 из кн. Watkins et al. 2008, стр. 177)

Какие наблюдения влияют на ход регрессии больше других?

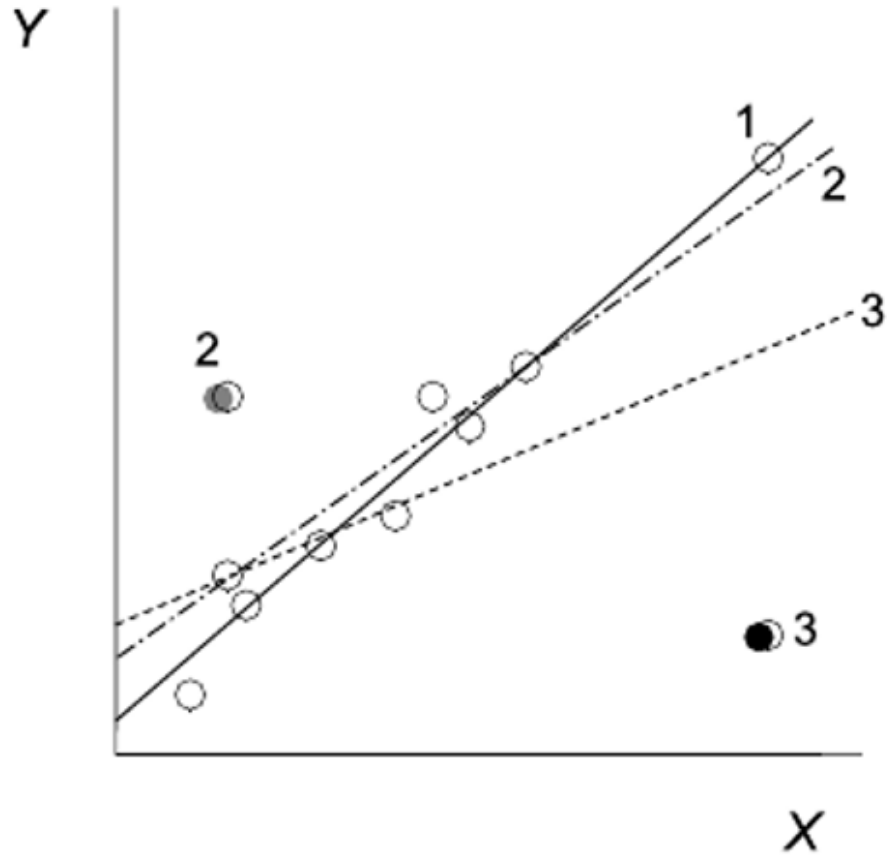


Влиятельные наблюдения (рис. 5.8 из кн. Quinn, Keough, 2002, стр. 96)

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)



Влиятельные наблюдения (рис. 5.8 из кн. Quinn, Keough, 2002, стр. 96)

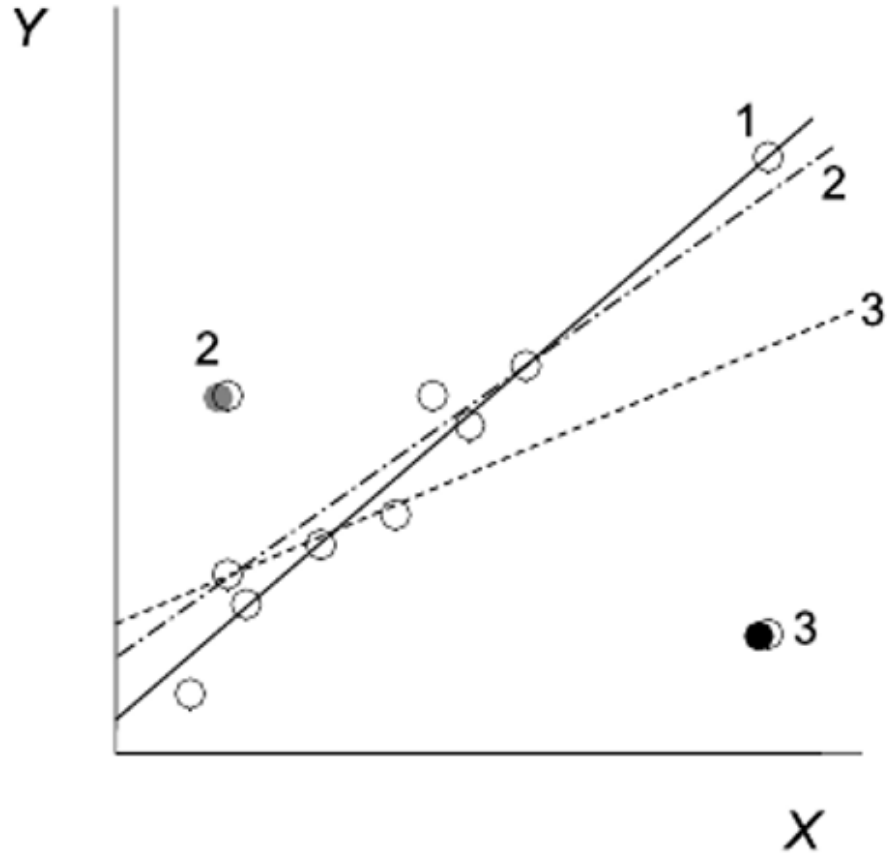
Какие наблюдения влияют на ход регрессии больше других?

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
- 2 - умеренно влияет (большой остаток, малая сила влияния)
- 3 - очень сильно влияет (большой остаток, большая сила влияния)

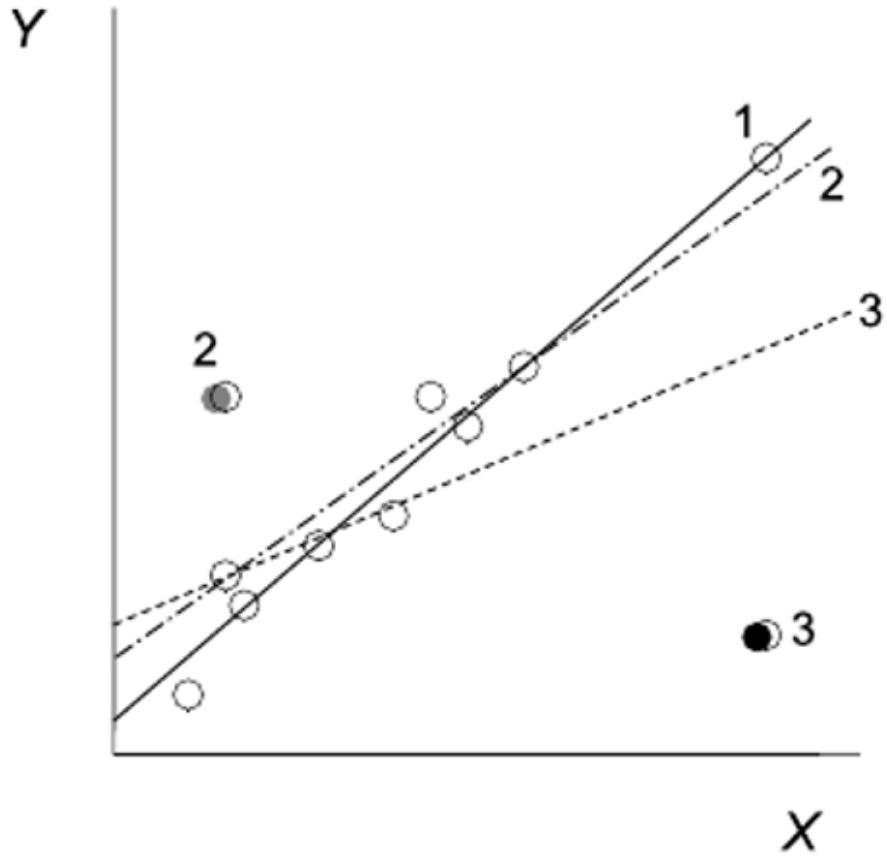


Влиятельные наблюдения (рис. 5.8 из кн. Quinn, Keough, 2002, стр. 96)

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.



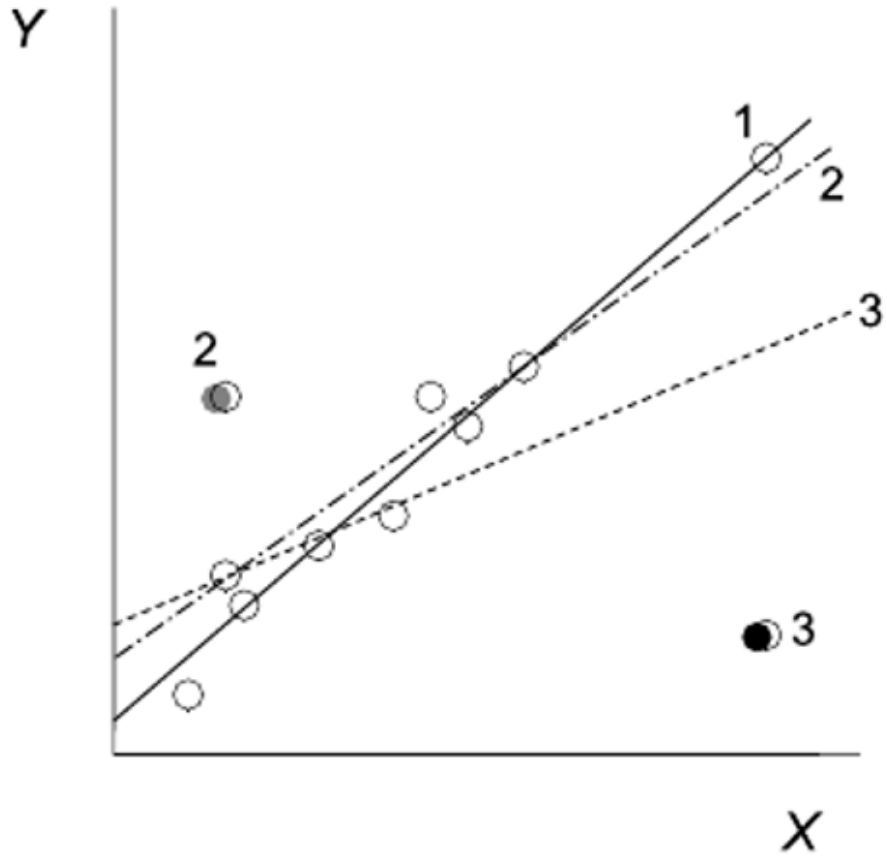
Влиятельные наблюдения (рис. 5.8 из кн. Quinn, Keough, 2002, стр. 96)

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.

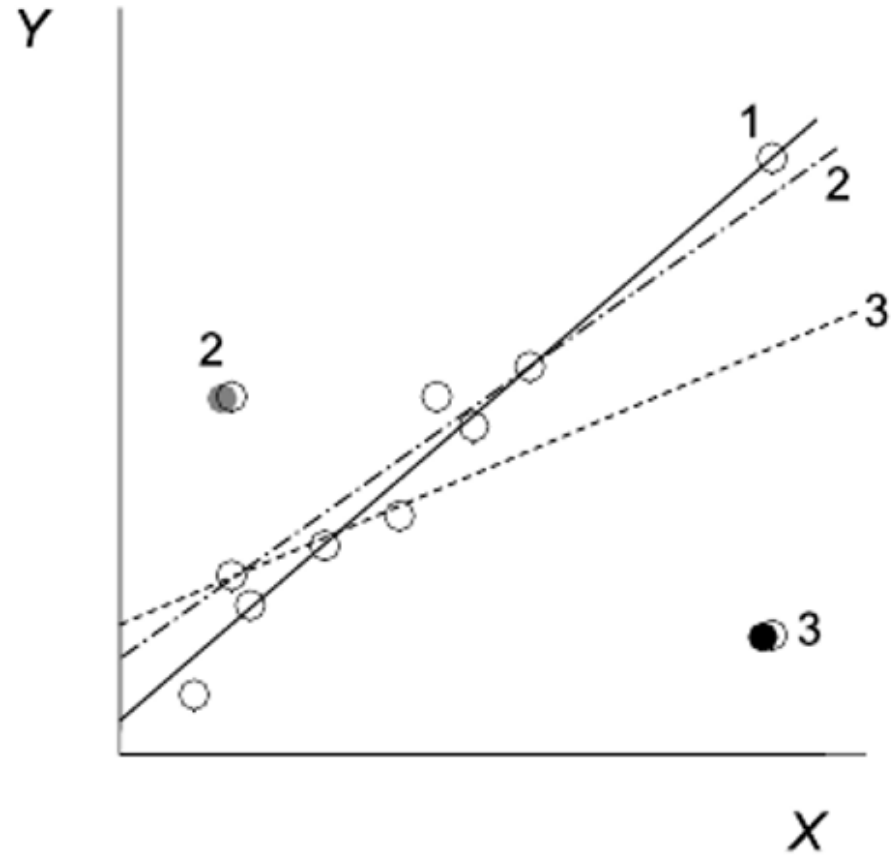
Дж. Фокс советует не обращать внимания на пороговые значения (Fox, 1991)



Влиятельные наблюдения (рис. 5.8 из кн. Quinn, Keough, 2002, стр. 96)

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



Влиятельные наблюдения (рис. 5.8 из кн. Quinn, Keough, 2002, стр. 96)

Колинеарность предикторов

Колинеарность

Когда 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)

$1 - R^2$ регрессии данного предиктора от всех других
$T \leq 0.25$ - колинеарность

Показатель инфляции для дисперсии

(коэффициент распространения дисперсии, Variance inflation factor, VIF)
$VIF = 1/T$
$\sqrt{VIF} > 2$ - коллинеарность

Проверка условий применимости линейной регрессии

Как проверить условия применимости?

- Величина остатков, влиятельность наблюдений, тренды - на графике остатков от предсказанных значений
- Форма распределения остатков - нормальновероятностный график
- Колинеарность предикторов - толерантность и показатель инфляции для дисперсии

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 l10area l10dist l10ldist 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
```

Кроме `abund`, `l10area`, `l10dist`, `l10ldist` и `yr.isol` нам понадобятся

- `.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
  - $\leq 2SD$ - обычные
  - $> 3SD$ - редкие

Решение:

График зависимости стандартизованных остатков от предсказанных значений

```
theme_set(theme_bw(base_size = 8) + theme(legend.key = element_blank()))
ggplot(data = bird_diag, aes(x = .fitted, y = .stdresid)) + geom_point()
```

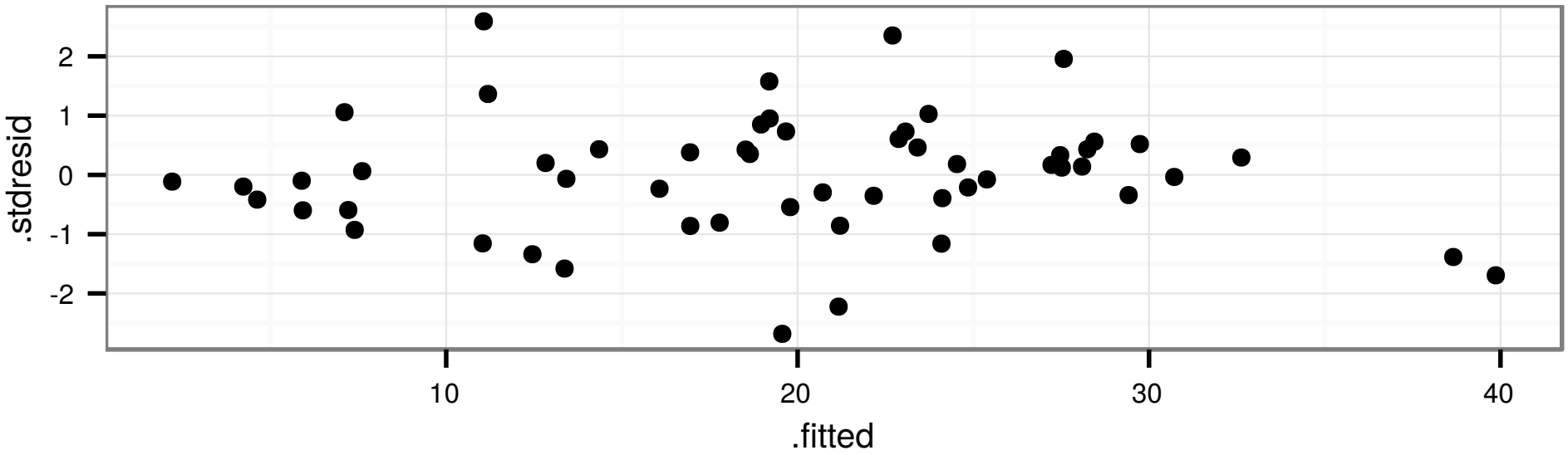
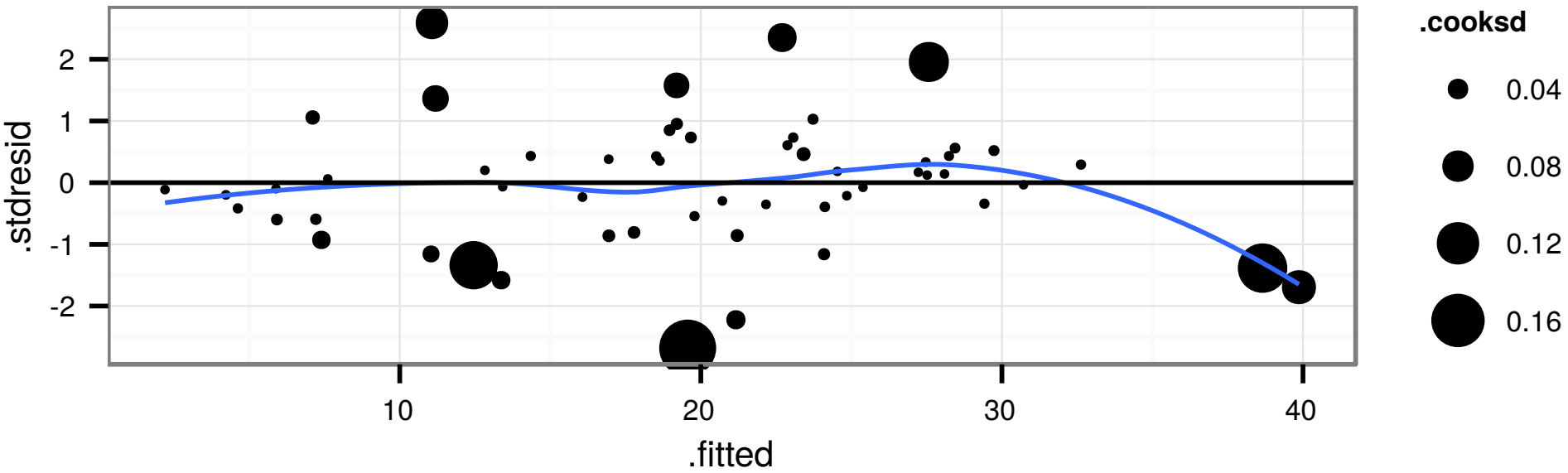


График стандартизованных остатков от предсказанных значений

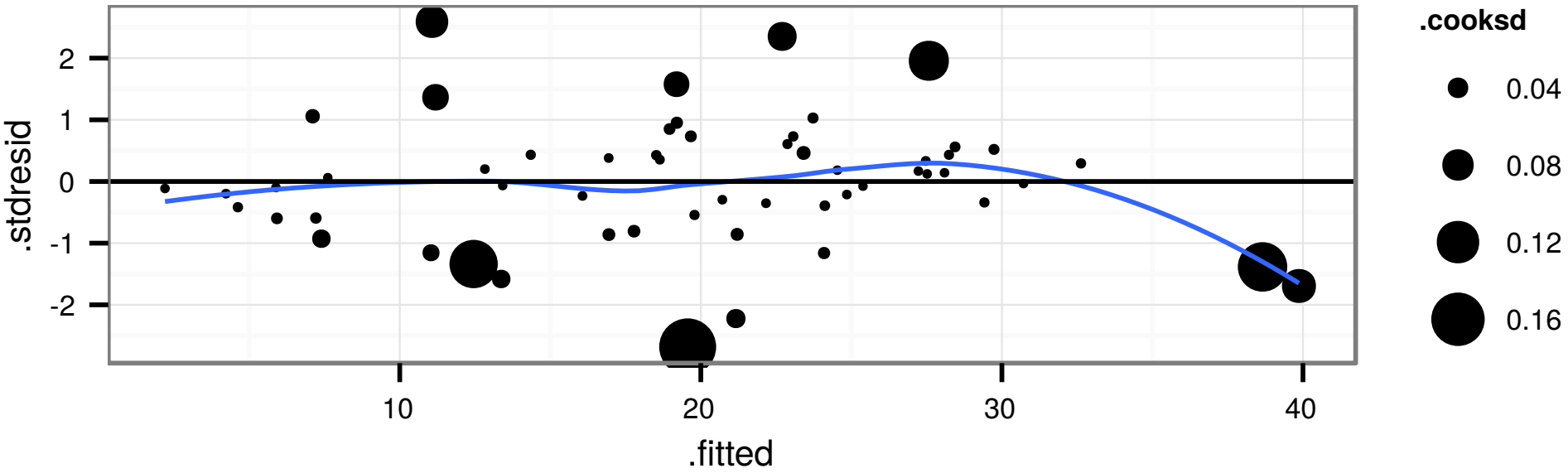
График станет информативнее, если кое-что добавить

```
ggplot(data = bird_diag, aes(x = .fitted, y = .stdresid)) +
  geom_point(aes(size = .cooksd)) +          # расстояние Кука
  geom_smooth(method="loess", se = FALSE) +  # линия тренда
  geom_hline(yintercept = 0)                 # горизонтальная линия y = 0
```



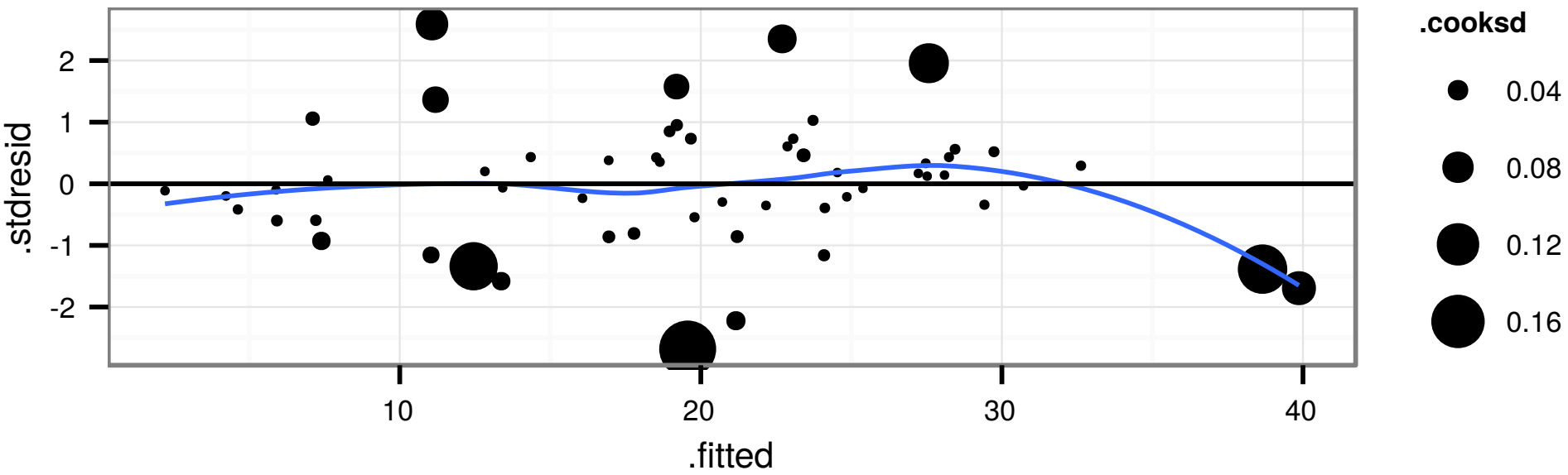
Интерпретируем график стандартизованных остатков от предсказанных значений

Какие выводы можно сделать по графику остатков?



Интерпретируем график стандартизованных остатков от предсказанных значений

Какие выводы можно сделать по графику остатков?

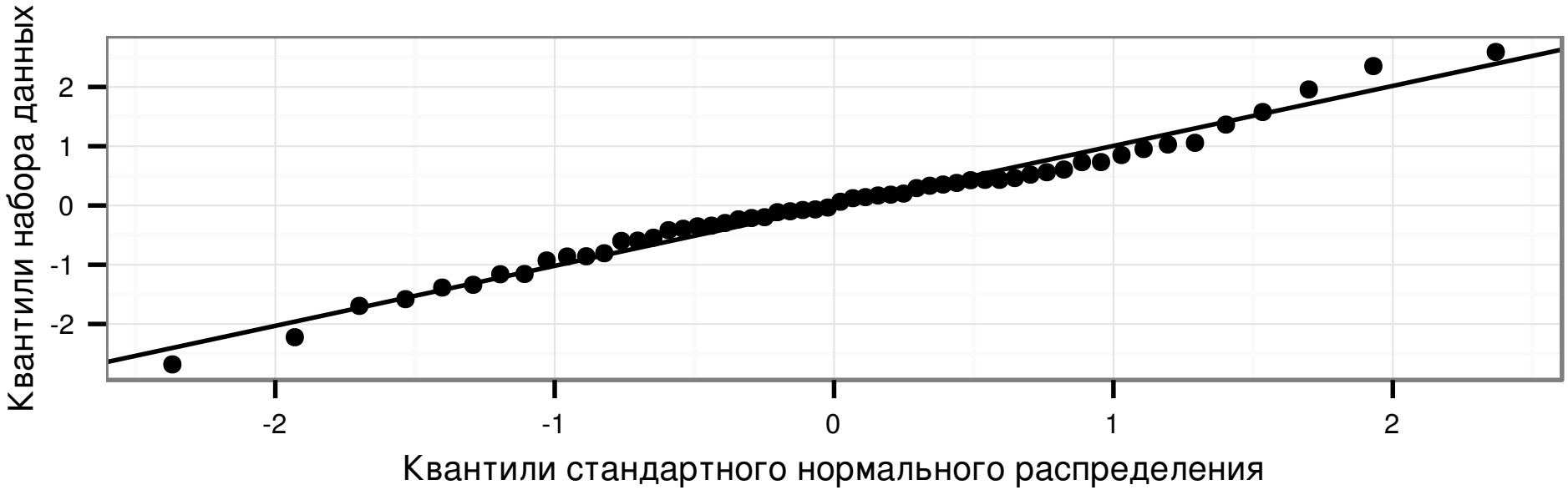


- Большая часть стандартизованных остатков в пределах двух стандартных отклонений. Есть отдельные влиятельные наблюдения, которые нужно проверить
- Разброс остатков не совсем одинаков. Похоже на гетерогенность дисперсий
- Тренда среди остатков нет

Нормальновероятностный график стандартизованных остатков

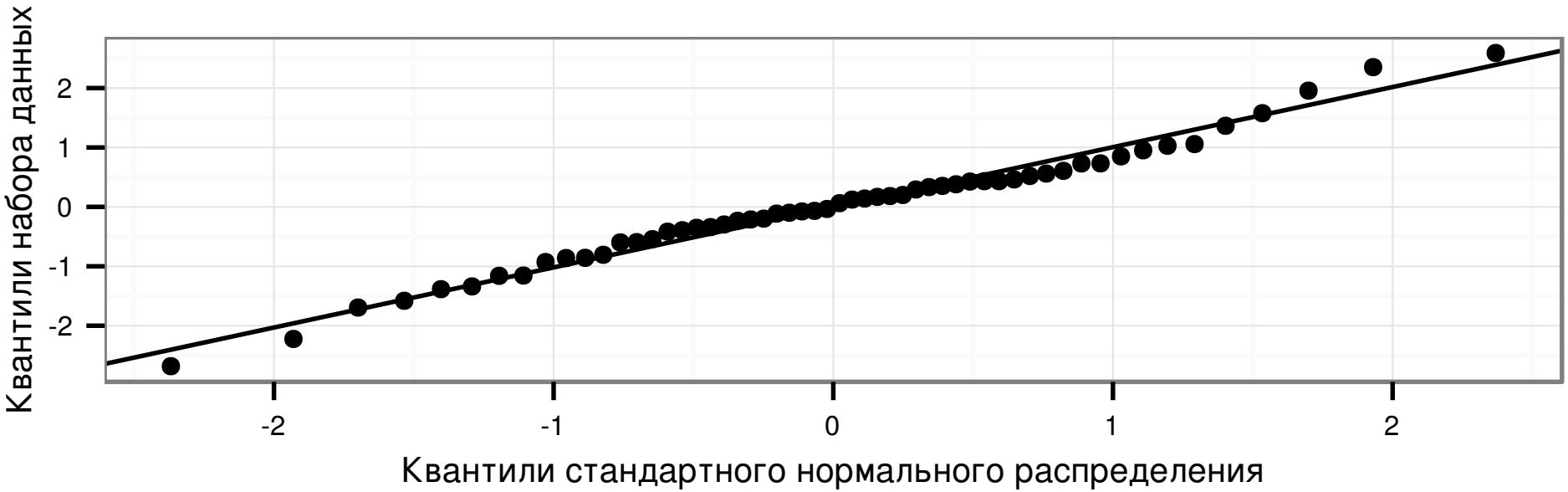
Используется, чтобы оценить форму распределения. Если точки лежат на одной прямой - нормальное распределение.

```
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 набора
```



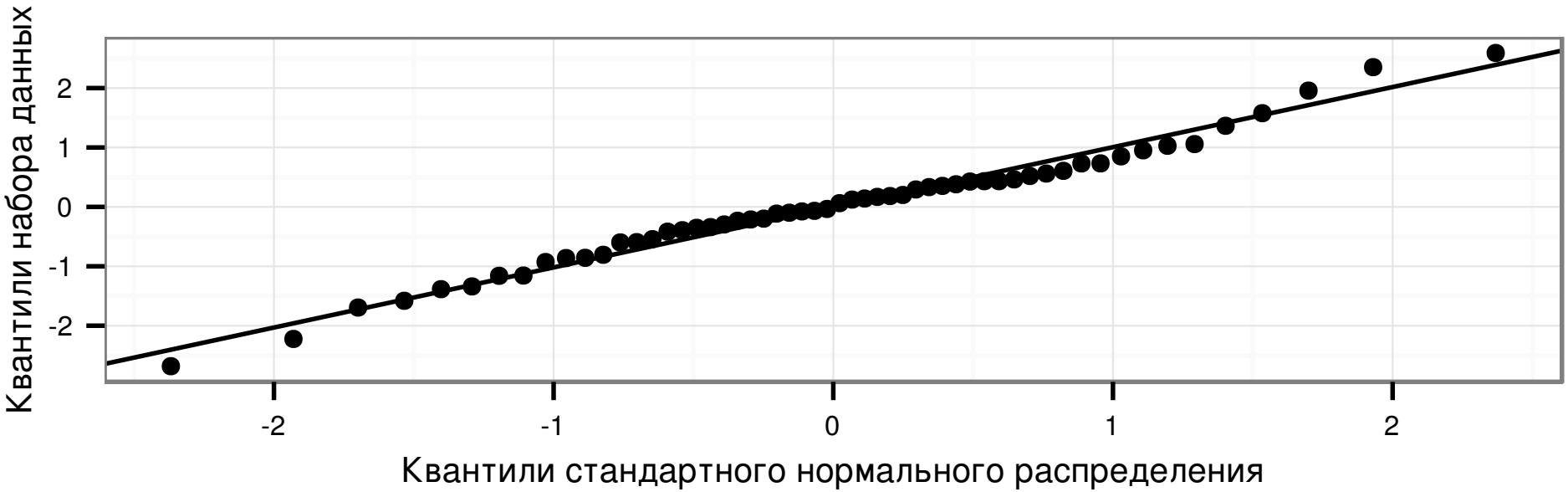
Интерпретируем нормальновероятностный график

Какие выводы можно сделать по нормальновероятностному графику?



Интерпретируем нормальновероятностный график

Какие выводы можно сделать по нормальновероятностному графику?



- Отклонений от нормального распределения нет

Проверим, есть ли в этих данных колинеарность предикторов

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

```
#  l10area  l10dist l10ldist  yr.isol
#     1.37     1.60     1.84     1.20
```

```
sqrt(vif(bird_lm)) > 2 # есть ли проблемы?
```

```
#  l10area  l10dist l10ldist  yr.isol
#    FALSE    FALSE    FALSE    FALSE
```

```
1/vif(bird_lm) # tolerance
```

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

Проверим, есть ли в этих данных колинеарность предикторов

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

```
#  l10area  l10dist l10ldist  yr.isol
#     1.37     1.60     1.84     1.20
```

```
sqrt(vif(bird_lm)) > 2 # есть ли проблемы?
```

```
#  l10area  l10dist l10ldist  yr.isol
#    FALSE    FALSE    FALSE    FALSE
```

```
1/vif(bird_lm) # tolerance
```

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

Все в порядке, предикторы независимы

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

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