Univerzita Palackého v Olomouci

Lineární regrese I

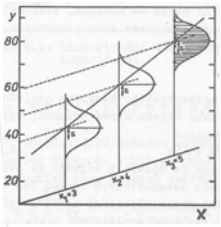
Chemometrie I (ACH/CHEX1)

1

Univerzita Palackého v Olomouci

Úvod

- **DRUHY ZÁVISLOSTÍ DVOU PROMĚNNÝCH:**
  - **FUNKČNÍ VZTAH:** dvě závisle proměnné, tj. určité hodnotě *x* odpovídá jediná hodnota *y*.
  - **KORELACE:** dvě nezávislé proměnné. Hodnotí se síla vzájemného vztahu popisovaná např. korelačním koeficientem R.
  - **REGRESE:** vztah nezávislé (náhodné) proměnné *x* a závisle proměnné *y*, které má určité rozdělení pravděpodobnosti.
- Statistickou analýzou pomocí lineární regrese objasňujeme vztah mezi závisle proměnnou *y* a nezávisle proměnnou (nezávisle proměnnými) *x*.
- Výsledkem je regresní model (LRM):
  - $y_i = f(\boldsymbol{x_i}, \boldsymbol{b}) + \varepsilon_i$
  - b_i – regresní koeficienty, ε – náhodná chyba



Lineární regrese

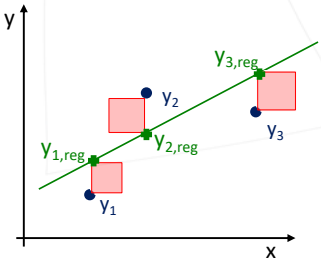
$$\begin{bmatrix} y_1 \\ y_2 \\ \vdots \\ y_n \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} x_{11} & x_{21} & \cdots & x_{1m} \\ x_{21} & x_{22} & \cdots & x_{2m} \\ \vdots & \vdots & \cdots & \vdots \\ x_{n1} & x_{n2} & \ldots & x_{nm} \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} b_1 \\ b_2 \\ \vdots \\ b_n \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} \varepsilon_1 \\ \varepsilon_2 \\ \vdots \\ \varepsilon_n \end{bmatrix}$$

2

Univerzita Palackého v Olomouci

Metoda nejmenších čtverců (MNČ)

- MNČ je v regresní analýze nejpoužívanější pro výpočet odhadů koeficientů b_i do regresního modelu. Např. pro přímku: $y = b_0 + b_1x$.
- *Legendre a Gauss navrhli, aby se od každého bodu vedla ve svislém směru úsečka až k uvažované přímce. Tato úsečka se bere jako strana čtverce. Řekne se, že přímka je tím lepší, čím menší součet čtverců vytváří.*
- Máme-li proložit přímku více než 2 body, řešíme tzv. přeurčený systém – více rovnic než neznámých.



RSC: Σ ▢ = min.

Tento součet čtverců je účelová funkce U:

$$U(b_i) = \sum_{i=1}^{n}(y_i - b_o - b_1x_i)^2 = \text{min}$$

$$\sum_{i=1}^{n}(y_i - y_{i,reg})^2 = \text{min}$$

reziduum: $e_i = y_i - y_{i,reg}$

RSC – reziduální součet čtverců

$$y_{1,reg} = b_0 + b_1x_1$$
$$y_{2,reg} = b_0 + b_1x_2$$
$$y_{3,reg} = b_0 + b_1x_3$$

Tuto soustavu rovnic lze řešit pouze pro určitou podmínku a tou je požadavek na nejmenší čtverce.

3

Univerzita Palackého v Olomouci

MNČ – výpočet regresních koeficientů b_i

- Pro určení regresních koeficientů z účelové funkce použijeme podmínku nejmenších čtverců. V případě přímky:

$$\sum_{i=1}^{n}(y_i - b_o - b_1x_i)^2 = \text{minimum}$$

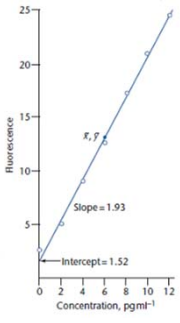
- Rovnici derivujeme podle obou koeficientů (b_0 a b_1). Získáme soustavu dvou tzv. normálních rovnic a jejím řešením koeficienty b_0 a b_1.

$$nb_0 + (\sum_{i=1}^{n} x_i)b_1 = \sum_{i=1}^{n} y_i$$
$$(\sum_{i=1}^{n} x_i)b_0 + (\sum_{i=1}^{n} x_i^2)\, b_1 = \sum_{i=1}^{n} x_i y_i$$

- b_0 nazýváme úsek (aj. intercept) a b_1 je směrnice (aj. slope)

$$b_1 = \frac{n\sum_{i=1}^{n}(x_iy_i) - \sum_{i=1}^{n}x_i \sum_{i=1}^{n}y_i}{n(\sum_{i=1}^{n}x_i^2) - (\sum_{i=1}^{n}x_i)^2}$$

$$b_0 = \frac{\sum_{i=1}^{n}y_i - b_1\sum_{i=1}^{n}x_i}{n}$$



4

Univerzita Palackého v Olomouci

MNČ – intervaly spolehlivosti

Výběrové odhady směrodatných odchylek:

$$s_y = \sqrt{\frac{\sum_{i=1}^{n}(y_i - y_{i,reg})^2}{n-2}}$$

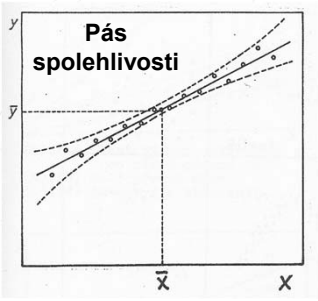
$$s_{b0} = \sqrt{s_y \frac{\sum_{i=1}^{n} x_i^2}{n \sum_{i=1}^{n}(x_i - \bar{x})^2}}, \qquad s_{b1} = \sqrt{\frac{s_y^2}{\sum_{i=1}^{n}(x_i - \bar{x})^2}}$$

- IS regresních koeficientů b_i:

$$L_{1,2} = b_i \pm s_{bi} \cdot t_{(1-\frac{\alpha}{2}, n-m)}$$

n je počet hodnot a *m* je počet koeficientů b_i

- IS pro regresní hodnoty $y_{i,reg}$: vyjadřuje se graficky pomocí pásu spolehlivosti, který je nejužší v místě $x_i = \bar{x}$ a oběma směry od tohoto bodu se rozšiřuje.



5

Univerzita Palackého v Olomouci

Testování hypotéz v lineární regresi

6

Univerzita Palackého v Olomouci

Testování významnosti v regresi

- **Test významnosti regresních koeficientů b_i:**
  - Je-li koeficient nevýznamný, znamená to, že je roven 0. Pokud $b_0 = 0$ v rovnici $y = b_0 + b_1x$, přímka prochází počátkem a regresní model se zjednoduší na $y = b_1x$.

$$H_0: b_i = 0;\ H_1: b_i \neq 0 \qquad t_i = \frac{b_i}{s_{bi}}$$

  - t_i v absolutní hodnotě porovnáváme s kritickou hodnotou Studentova rozdělení $t_{krit(1-\alpha/2;\ n-m)}$, kde n je počet hodnot a m je počet koeficientů b_i. Je-li $|t_i| < t_{krit}$, přijímáme H_0.
- **F test významnosti regrese:**
  - Test významnosti všech regresních koeficientů b_i kromě úseku (b_0), *označován jako test významnosti* R^2

$$H_0: R^2 = 0;\ H_1: R^2 \neq 0 \qquad F_R = \frac{R^2 \cdot (n-m)}{(1-R^2)\cdot(m-1)}$$

  - F_R porovnáváme s kritickou hodnotou F-rozdělení $F_{krit(m-1,\ n-m)}$. Je-li $F_R < F_{krit}$, přijímáme H_0.

7

Univerzita Palackého v Olomouci

F testy v LR

- **Test linearity:**
  - Např.: test linearity (tj. vhodnosti přímkového regresního modelu), který je založený na volbě mezi přímkou ($y = b_0 + b_1x$) a parabolou ($y = b_0 + b_1x + b_2x^2$).

$$H_0: b_2 = 0,\ H_1: b_2 \neq 0 \qquad F_L = \frac{(RSC_L - RSC_K)\cdot(n-3)}{RSC_K}$$

  - *RSC_L a RSC_K je reziduální součet čtverců pro lineární a kvadratickou závislost.*
  - F_L porovnáváme s $F_{krit(1,\ n-3)}$. Pokud je $F_L < F_{krit}$, přijmeme H_0, je závislost lineární. Pokud zamítneme H_0 a přijmeme H_1, je závislost kvadratická.
- **Chowův test shody 2 lineárních modelů:**
  - Testuje shodu koeficientů b_i pro regresní model A a model B:
  - $y_A = b_{0A} + b_{1A}x + \varepsilon_A$, který má RSC_A; $y_B = b_{0B} + b_{1B}x + \varepsilon_A$, který má RSC_B

$$H_0: b_A = b_B;\ H_1: b_A \neq b_B \qquad F_C = \frac{(RSC - RSC_A - RSC_B)\cdot(n-2m)}{(RSC_A + RSC_B)\cdot m}$$

  - Za předpokladu homoskedasticity obou výběrů se statistika F_C porovnává s $F_{krit(m,\ n-2m)}$. V případě heteroskedasticity je nutné použít jiný způsob určení stupňů volnosti, který zde není uveden. H_0 přijmeme, pokud $F_C < F_{krit}$.

8

Univerzita Palackého v Olomouci

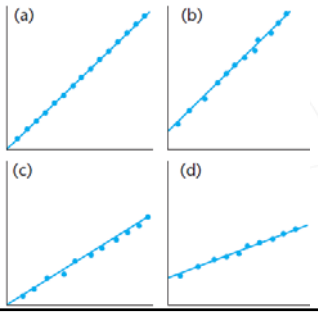
Aplikace lineární regrese

9

Univerzita Palackého v Olomouci

Porovnání dvou metod pomocí LR

- Rozšíření párového testu, někdy nepřesně nazývané validace pomocí LR.
- Výsledky 1. metody se vynesou na osu *x*, výsledky 2. metody na osu *y* a body se proloží přímka pomocí MNČ.
- V případě shody výsledků obou metod získáme regresní model $y = x$. Jestli $b_0 = 0$ a $b_1 = 1$ ověřujeme pomocí IS obou regresních koeficientů.



(a) shoda metod, $b_0 = 0$, $b_1 = 1$, $R = 1$
(b) vyšší/nižší výsledky jedné metody, $b_0 \neq 0$, $b_1 = 1$
(c) systematická chyba jedné metody, $b_0 = 0$, $b_1 \neq 1$
(d) kombinace (b) a (c)

10

Univerzita Palackého v Olomouci

Další aplikace LR

- Kalibrace
- Polynomická regrese
  - $y = b_0 + b_1x + b_2x^2 + \ldots + b_nx^n$
- Vícerozměrná lineární regrese
  - $y = b_0 + b_1 x_1 + b_2 x_2 + \ldots + b_k x_k$

11

Univerzita Palackého v Olomouci

Rozlišení lineární a nelineární regrese

- Pro lineární regresi platí následující podmínka:

$$g_j = \frac{\delta f(\mathbf{x}, b)}{\delta b_i} = \text{konst.}$$

- Pokud alespoň pro jeden b_i je parciální derivace g_j funkcí, tak jde o nelineární regresi!
- Př. lineárních regresních modelů:
  - $y = b_0 + b_1x - b_2x^2$ tj. polynom; $y = b_0 + (b_1/x)$ tj. hyperbola
- Př. nelineárních regresních modelů:
  - $y = b_0 \cdot x^{b1}$; $y = b_0 + b_1 \cdot \exp(b_2x)$
- Nelineární regrese je náplní ACH/CHE2.

12

Univerzita Palackého v Olomouci

Předpoklady pro použití MNČ, postupy odhadu b_i při porušení předpokladů MNČ

13

Univerzita Palackého v Olomouci

Předpoklady pro použití MNČ

1. Regresní koeficienty (b_i) mohou nabývat libovolných hodnot. (V praxi existují omezení fyzikálního smyslu.)
2. Regresní model je lineární v parametrech. (Pomocí LR lze řešit např. i polynomické závislosti.)
3. Žádné dva sloupce matice **X** nejsou kolineární (rovnoběžné) vektory. V datech matice **X** se nevyskytuje multikolinearita, matice $\mathbf{X}^T\mathbf{X}$ je dobře podmíněná.
4. Náhodné chyby ε_i mají nulovou střední hodnotu.
5. Náhodné chyby ε_i mají konstantní rozptyl (homoskedasticita).
6. Hodnoty závisle proměnné jsou získány nezávislým měřením (nekorelované chyby ε_i).
7. Nezávisle proměnné veličiny nejsou zatíženy systematickými či náhodnými chybami nebo jsou náhodné chyby na ose x zanedbatelné vůči náhodným chybám na ose y.

14

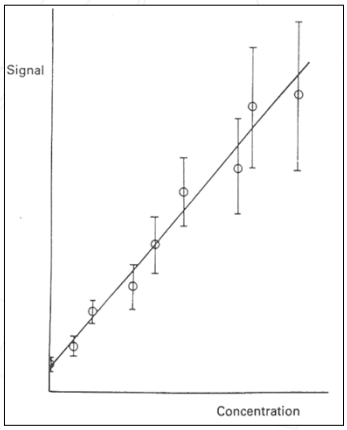
Univerzita Palackého v Olomouci

Metody při porušení předpokladů MNČ

- **METODA VÁŽENÝCH NEJMENŠÍCH ČTVERCŮ:**
  - Aplikujeme ji v případě, kdy náhodné chyby nemají konstantní rozptyl, tedy byla-li prokázána heteroskedasticita v datech (porušení předpokladu 5).
  - Heteroskedasticita se často vyskytuje u kalibračních modelů, které se používají přes více koncentračních řádů.
  - Do rovnice pro výpočet účelové funkce se vkládá váhový koeficient w_i.

$$U(b) = \sum_i \left(w_i y_i - \sum_j w_i x_{ij} b_j \right)^2, \quad w_i \text{ je např. } \frac{1}{y} \text{ či } \frac{1}{y^2}$$

  - Posouzení homoskedasticity či heteroskedasticity dat – viz prezentace CHEX1-07-LR-II.

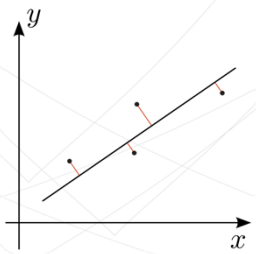


15

Univerzita Palackého v Olomouci

Metody při porušení předpokladů MNČ

- **ORTOGONÁLNÍ REGRESE:**
  - Používá se, kdy je zatížena chybami i nezávisle proměnná x (porušení předpokladu 7).
  - Obdoba MNČ, zde se však minimalizuje suma čtverců kolmých vzdáleností experimentálních bodů od přímky.



- **METODA KOREKCE HODNOSTI:**
  - Používá se v případě prokázané multikolinearity v datech (porušení předpokladu 3). Obvykle se aplikuje při řešení polynomické regrese u vyšších stupňů polynomu.
  - Detaily v prezentaci CHEX1-07-LR-II.

16

Univerzita Palackého v Olomouci

Metody při porušení předpokladů MNČ

- **ROBUSTNÍ REGRESE:**
  - V případě porušení předpokladu 6, který vede k odchylkám od normality chyb závisle proměnné nebo v případě přítomnosti OB, které nechceme vyloučit je vhodným řešením robustní regrese.
  - Místo kritéria „MNČ“ použijeme robustního kritéria, které je jak na porušení předpokladu normality, tak na OB málo citlivé.
  - Z velké skupiny metod robustní regrese zmíníme pouze **L_p regresi: $U = \Sigma|e_i|^p$**
    - ***p* = 1: robustní mediánová regrese, tedy metodu nejmenších absolutních odchylek vhodnou pro data s často se vyskytujícími odlehlými hodnotami na obou stranách nebo s rozdělením podobným Lapaceovu,** $U = \sum_{i=1}^{n} |y_i - b_0 - b_1 x_i|$
    - ***p* = 2: odpovídá metodě nejmenších čtverců,**
    - ***p* ≈ 5–10 odpovídá metodě nejmenší maximální chyby (minimax),**
    - **1 ≤ p <2: vykazují robustnost vůči odlehlým hodnotám.**

17

Univerzita Palackého v Olomouci

Metody při porušení předpokladů MNČ

- **METODA STEPWISE ALL:**
  - Slouží jako pomůcka k sestavení dobrého modelu na základě dat i bez předběžné informace o možných vztazích mezi proměnnými.
  - Vypočítá se regrese se všemi možnými kombinacemi vybraných nezávisle proměnných v regresním modelu. Pro každou regresi vypočítá tři kritéria kvality regrese: F-kritérium (FIS), Akaikeho informační kritérium (AIC) a střední kvadratickou chybu predikce (MEP).
  - Výstup metody se ukládá do protokolu a rovněž do zvláštního datového listu s názvem StepAll, který se při výpočtu vytvoří. Tento datový list slouží ke snadné identifikaci nejlepších modelů.
  - K výpočtu jednotlivých regresí je použita vždy klasická metoda nejmenších čtverců.
  - *Budeme používat u složitých polynomických regresních modelů.*

18