Харківський національний університет імені В. Н. Каразіна

“ІНФОРМАТИКА І ІНФОРМАЦІЙНІ ТЕХНОЛОГІЇ для хіміків”

Лекція №3
Регресійний аналіз

В. В. Іванов

Кафедра хімічного матеріалознавства

Питання теми

- *Кореляції в хімії;*
- *Уявлення про лінійну регресію*;
- *Метод найменших квадратів;*
- *Дисперсія і коефіцієнт кореляції;*
- *Методики перехресного оцінювання;*
- *Уявлення про робастне оцінювання і*

Метод найменших модулів.

В хімії відомо багато різноманітних кореляцій

Властивість 1	Властивість 2	Аналітична форма кореляції
Атомний радіус r_A	Іонний радіус r_I	$r_A = a_0 + a_1 r_I$
Атомний радіус r_A	Енергія іонізації атомів I	$\lg r_A = a_0 + a_1 \lg I$
Енергія дисоціації E_{diss}	Енергія іонізації молекул, I	$\lg E_{diss} = a_0 + a_1 \lg I$
Температура плавлення $T_{melt.}$	Температура кипіння T_{bp}	$T_{melt.} = a_0 + a_1 T_{bp}$
Світлопоглинання розчину, оптична густина, D	концентрації поглинаючих частинок [c]	$D = a_1 [c]$
Біоефект C - концентрація речовини $\lg(1/C)$	Ліпофільность $\lg P$	$\lg(1/C) = a_0 + a_1 \lg P + a_1 (\lg P)^2$

№	X	Y
1	X_1	Y_1
2	X_2	Y_2
3	…	…
…	…	…
N	X_N	Y_N

Залежна змінна

Незалежна змінна

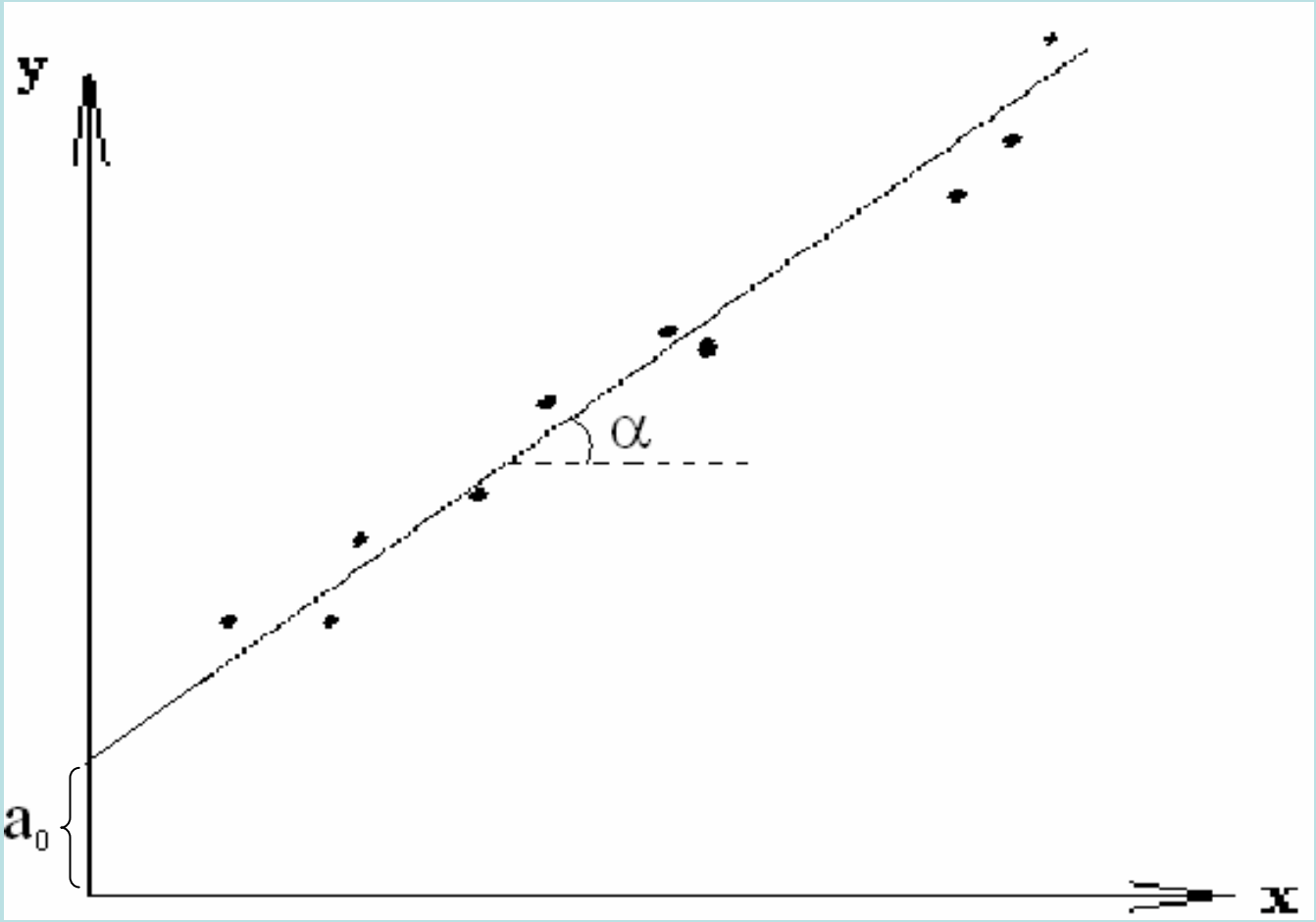
$$y = a_0 + a_1 x$$

Коефіцієнти регресії

Approximation **(*англ.*)** - наближення

Геометричний сенс коефіцієнтів регресії

$$y = a_0 + a_1 x$$

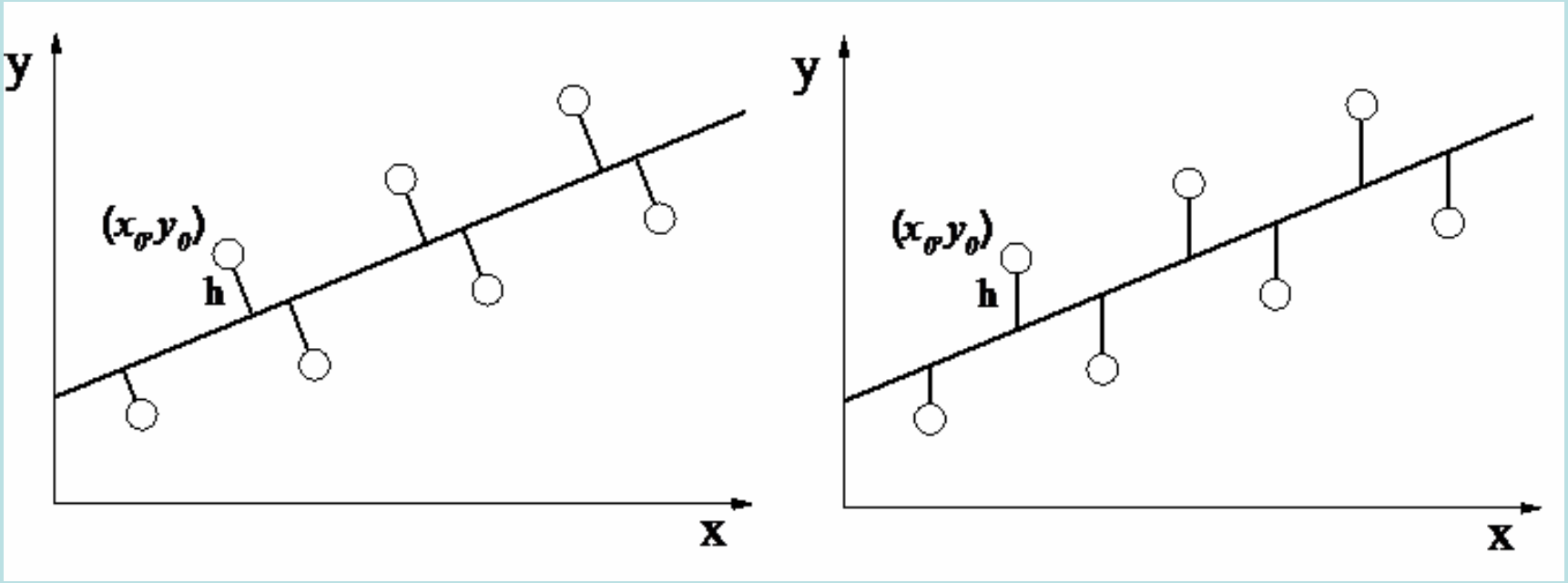


$$a_1 = tg\alpha$$

Полілінійна регресія
(multiple linear regression, MLR)

№	X_1	X_2	…	X_k	Y
1	X_{11}	X_{12}	…	X_{1k}	Y_1
2	X_{21}	X_{22}	…	X_{2k}	Y_2
…	…	…	…	…	…
…	…	…	…	…	…
N	X_{N1}	X_{N2}	…	X_{Nk}	Y_N

$$y = a_0 + a_1 x_1 + a_2 x_2 + \ldots + a_k x_k$$



- Метод ортогональних відстаней;
- Метод найменших модулів; $\Phi = \sum_i \left| y_i - \hat{y}_i \right|$
- Метод найменших квадратів (МНК) $F = \sum_i \left(y_i - \hat{y}_i \right)^2$

$\hat{y}_i$ - Теоретичне значення

Творці МНК

Карл Фридрих Гаусс (1794)

Адрієн Марі Лежандр (1805)

В багатьох підручниках наводиться такий портрет

Але насправді єдиний портрет що залишився - шарж

Розповсюджений випадок $y = a_0 + a_1 x$

№	x	y
1	x_1	y_1
2	x_2	y_2
3	…	…
…	…	…
N	x_N	y_N

$$F = F(a_0, a_1) = \sum_i (\hat{y}_i - y_i)^2$$

$$F = F(a_0, a_1) = \sum_i (a_0 + a_1 x_i - y_i)^2$$

$$\begin{cases} \dfrac{\partial F}{\partial a_0} = 2\sum_i (a_0 + a_1 x_i - y_i) = 0 \\ \dfrac{\partial F}{\partial a_1} = 2\sum_i (a_0 + a_1 x_i - y_i)\, x_i = 0 \end{cases}$$

$$\begin{cases} \dfrac{\partial F}{\partial a_0} = 2\sum_i (a_0 + a_1 x_i - y_i) = 0 \\ \dfrac{\partial F}{\partial a_1} = 2\sum_i (a_0 + a_1 x_i - y_i)\, x_i = 0 \end{cases}$$

$$\begin{cases} \sum_i (a_0 + a_1 x_i - y_i) = 0 \\ \sum_i (a_0 + a_1 x_i - y_i)\, x_i = 0 \end{cases}$$

$$\begin{cases} a_0 N + a_1 \sum_i x_i - \sum_i y_i = 0 \\ a_0 \sum_i x_i + a_1 \sum_i x_i^2 - \sum_i y_i x_i = 0 \end{cases}$$

$$\begin{cases} a_0 N + a_1 \sum_i x_i - \sum_i y_i = 0 \\ a_0 \sum_i x_i + a_1 \sum_i x_i^2 - \sum_i y_i x_i = 0 \end{cases}$$

$$\begin{cases} a_0 N + a_1 \sum_i x_i = \sum_i y_i \\ a_0 \sum_i x_i + a_1 \sum_i x_i^2 = \sum_i y_i x_i \end{cases}$$

$$\begin{pmatrix} N & \sum_i x_i \\ \sum_i x_i & \sum_i x_i^2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a_0 \\ a_1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \sum_i y_i \\ \sum_i y_i x_i \end{pmatrix}$$

$$y = a_0 + a_1 x$$

$$\begin{pmatrix} N & \sum_i x_i \\ \sum_i x_i & \sum_i x_i^2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a_0 \\ a_1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \sum_i y_i \\ \sum_i y_i x_i \end{pmatrix}$$

$$a_0 = \frac{\begin{vmatrix} \sum_i y_i & \sum_i x_i \\ \sum_i y_i x_i & \sum_i x_i^2 \end{vmatrix}}{D} = \frac{\sum_i y_i \sum_i x_i^2 - \sum_i y_i x_i \sum_i x_i}{D}$$

$$a_1 = \frac{\begin{vmatrix} N & \sum_i y_i \\ \sum_i x_i & \sum_i y_i x_i \end{vmatrix}}{D} = \frac{N\sum_i y_i x_i - \sum_i y_i \sum_i x_i}{D}$$

$$D = \det\begin{pmatrix} N & \sum_i x_i \\ \sum_i x_i & \sum_i x_i^2 \end{pmatrix} = N\sum_i x_i^2 - \left(\sum_i x_i\right)^2$$

Приклад №1

x	y
1	0
2	1

$$a_0 = \frac{\sum_i y_i \sum_i x_i^2 - \sum_i y_i x_i \sum_i x_i}{N\sum_i x_i^2 - \left(\sum_i x_i\right)^2} \qquad a_1 = \frac{N\sum_i y_i x_i - \sum_i y_i \sum_i x_i}{N\sum_i x_i^2 - \left(\sum_i x_i\right)^2}$$

$$\sum_i y_i = 1, \quad \sum_i x_i = 3, \quad \sum_i x_i^2 = 5, \quad \sum_i y_i x_i = 2,$$

$$a_0 = \frac{1\cdot 5 - 2\cdot 3}{1} = -1 \qquad a_1 = \frac{2\cdot 2 - 1\cdot 3}{1} = 1$$

$$y = -1 + x$$

По двох точках - пряма

Приклад № 2 **набір з N вимірів ($x_1, x_2, x_3, \ldots, x_N$,)**

Знайти методом МНК таку величину a_0, щоб функція $F(a_0)$

$$F = F(a_0) = \sum_i (x_i - a_0)^2$$

була мінімальна
(сума квадратів відстаней від точки a_0 до точок x_i):

$$\frac{\partial F}{\partial a_0} = 2\sum_i (x_i - a_0) = 0$$

$$\sum_i x_i - N a_0 = 0$$

$$a_0 = \frac{\sum_i x_i}{N} = \bar{x}$$

Середнє значення !

Приклад № 3

Світло поглинання розчину залежить від концентрації поглинаючих світло частинок

(закон Бугера-Ламберта-Бера.)

$$y = a_1 \cdot x$$

$$F(a_1) = \sum_i (y_i - a_1 x_i)^2 \quad \Longrightarrow \quad \frac{\partial F}{\partial a_1} = -2\sum_i (y_i - a_1 x_i) x_i = 0$$

$$\sum_i y_i x_i - a_1 \sum_i x_i^2 = 0$$

$$a_1 = \frac{\sum_i y_i x_i}{\sum_i x_i^2}$$

X(10^{-3} моль/л)	Y(поглинання)
0.01	0
1	1
2	3

$$a_1 = \frac{\sum_i y_i x_i}{\sum_i x_i^2}$$

$$\sum_i x_i^2 \approx 5, \quad \sum_i y_i x_i = 7$$

$$a_1 = \frac{7}{5} = 1.4$$

$$y = 1.4 \cdot x$$

Метод найменших квадратів

$$\mathrm{F} = \mathrm{F}(\mathrm{a}_0, \mathrm{a}_1, \mathrm{a}_2, \ldots \mathrm{a}_\mathrm{k}) = \sum_\mathrm{i} (\hat{\mathrm{y}}_\mathrm{i} - \mathrm{y}_\mathrm{i})^2$$

$$F = F(a_0, a_1, a_2, \ldots a_k) = \sum_i (a_0 + a_1 x_{i1} + a_2 x_{i2} + 5 \; + a_k x_{ik} - y_i)^2$$

$$\begin{cases} \dfrac{\partial \mathrm{F}}{\partial \mathrm{a}_0} = 0 \\ \dfrac{\partial \mathrm{F}}{\partial \mathrm{a}_1} = 0 \\ 5 \\ \dfrac{\partial \mathrm{F}}{\partial \mathrm{a}_\mathrm{k}} = 0 \end{cases} \qquad \begin{cases} \dfrac{\partial \mathrm{F}}{\partial \mathrm{a}_0} = 2\sum_\mathrm{i} (\mathrm{a}_0 + \mathrm{a}_1 \mathrm{x}_{\mathrm{i}1} + \mathrm{a}_2 \mathrm{x}_{\mathrm{i}2} + 5 \; + \mathrm{a}_\mathrm{k} \mathrm{x}_{\mathrm{ik}} - \mathrm{y}_\mathrm{i}) = 0 \\ \dfrac{\partial \mathrm{F}}{\partial \mathrm{a}_1} = 2\sum_\mathrm{i} (\mathrm{a}_0 + \mathrm{a}_1 \mathrm{x}_{\mathrm{i}1} + \mathrm{a}_2 \mathrm{x}_{\mathrm{i}2} + 5 \; + \mathrm{a}_\mathrm{k} \mathrm{x}_{\mathrm{ik}} - \mathrm{y}_\mathrm{i})\, \mathrm{x}_{\mathrm{i}1} = 0 \\ 5 \\ \dfrac{\partial \mathrm{F}}{\partial \mathrm{a}_\mathrm{k}} = 2\sum_\mathrm{i} (\mathrm{a}_0 + \mathrm{a}_1 \mathrm{x}_{\mathrm{i}1} + \mathrm{a}_2 \mathrm{x}_{\mathrm{i}2} + 5 \; + \mathrm{a}_\mathrm{k} \mathrm{x}_{\mathrm{ik}} - \mathrm{y}_\mathrm{i})\, \mathrm{x}_{\mathrm{ik}} = 0 \end{cases}$$

Метод найменших квадратів

$$\begin{cases} a_0 N + a_1 \sum_i x_{i1} + a_2 \sum_i x_{i2} + 5 + a_k \sum_i x_{ik} = \sum_i y_i \\ a_0 \sum_i x_{i1} + a_1 \sum_i x_{i1} x_{i1} + a_2 \sum_i x_{i2} x_{i1} + 5 + a_k \sum_i x_{ik} x_{i1} = \sum_i y_i x_{i1} \\ 5 \\ a_0 \sum_i x_{ik} + a_1 \sum_i x_{ik} x_{i1} + a_2 \sum_i x_{i2} x_{ik} + 5 + a_k \sum_i x_{ik} x_{ik} = \sum_i y_i \; x_{ik} \end{cases}$$

$$\begin{pmatrix} N & \sum_i x_{i1} & 5 & \sum_i x_{ik} \\ \sum_i x_{i1} & \sum_i x_{i1}^2 & 5 & \sum_i x_{ik} x_{i1} \\ 5 & 5 & 5 & 5 \\ \sum_i x_{ik} & \sum_i x_{i1} x_{ik} & 5 & \sum_i x_{ik}^2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a_0 \\ a_1 \\ 5 \\ a_k \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \sum_i y_i \\ \sum_i y_i x_{i1} \\ 5 \\ \sum_i y_i x_{ik} \end{pmatrix}$$

$$Aa = B$$

Метод найменших квадратів

$$\begin{pmatrix} N & \sum_i x_{i1} & 5 & \sum_i x_{ik} \\ \sum_i x_{i1} & \sum_i x_{i1}^2 & 5 & \sum_i x_{ik} x_{i1} \\ 5 & 5 & 5 & 5 \\ \sum_i x_{ik} & \sum_i x_{i1} x_{ik} & 5 & \sum_i x_{ik}^2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a_0 \\ a_1 \\ 5 \\ a_k \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \sum_i y_i \\ \sum_i y_i x_{i1} \\ 5 \\ \sum_i y_i x_{ik} \end{pmatrix}$$

Предполагаем, что матрица невырождена

$$\begin{pmatrix} a_0 \\ a_1 \\ 5 \\ a_k \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} N & \sum_i x_{i1} & 5 & \sum_i x_{ik} \\ \sum_i x_{i1} & \sum_i x_{i1}^2 & 5 & \sum_i x_{ik} x_{i1} \\ 5 & 5 & 5 & 5 \\ \sum_i x_{ik} & \sum_i x_{i1} x_{ik} & 5 & \sum_i x_{ik}^2 \end{pmatrix}^{-1} \begin{pmatrix} \sum_i y_i \\ \sum_i y_i x_{i1} \\ 5 \\ \sum_i y_i x_{ik} \end{pmatrix}$$

Нелінійні залежності (лінеаризуємі)

$$y_i = a_0 + a_1 x_i + a_2 x_i^2 + 5 + a_k x_i^k$$

$$x_1 = x,\ x_2 = x^2, 5\ , x_k = x^k$$

$$y_i = a_0 + a_1 x_{i1} + a_2 x_{i2} + 5 + a_k x_{ik}$$

$$y_i = a_0 \cdot e^{a_1 x_i}$$

$$\ln y_i = \ln a_0 + a_1 x_i$$

Задача лінійна в координатах

$$\ln y_i,\ x_i$$

$$y_i = a_0 \cdot x_i^{a_1}$$

$$\ln y_i = \ln a_0 + a_1 \ln x_i$$

Задача лінейна в координатах

$$\ln y_i,\ \ln x_i$$

Особливість задачі МНК

$$F = \sum_i (y_i - \hat{y}_i)^2$$

$$y = a_0 + a_1 x$$

$$x = (y - a_0) / a_1$$

Повернемось до прикладу №3 (слайд 15)

$$x = b_1 y$$

$$b_1 = \frac{\sum_i y_i x_i}{\sum_i y_i^2}$$

Знаходимо b_1

$$\sum_i y_i^2 = 1 \cdot 1 + 3 \cdot 3 = 10 \quad b_1 = \frac{7}{10} = 0.7$$

З першого рівняння регресії (див. слайд 16)

$$y = 1.4 \cdot x \qquad b_1 \approx 1/a_1 = 1/1.4 = 0.7143$$

розрізняються !

Міри адекватності отриманих рівнянь

$$\sigma^2 = \frac{\sum_i (y_i - \hat{y}_i)^2}{N - p}$$

$p = k + 1$ – кількість параметрів

$$SD = \sigma = \sqrt{\sigma^2}$$ Standard Deviation

У випадку: $N = 2 \quad p = 2$

$\sigma^2 = \frac{0}{0}$ дисперсія не визначена

До прикладу № 3

$$y = 1.4 \cdot x$$

x (10^{-3} моль/л)	y (погл.) експ	$\hat{y}$ (погл.) теор.
0.01	0	0.014
1	1	1.4
2	3	2.8

$$\sigma^2 = \frac{1}{3-1}\sum_i (y_i - \hat{y}_i)^2 = \frac{1}{2}\left((1-1.4)^2 + (3-2.8)^2\right) =$$

$$= \frac{1}{2}\left(0.4^2 + 0.2^2\right) = \frac{1}{2}\left(0.16 + 0.04\right) = 0.1$$

$$SD = \sigma \approx 0.32 \qquad \text{Точність} = \pm\, 0.32$$

коефіцієнт кореляції
(множинний коефіцієнт кореляції)

Наскільки узгоджуються зміни величин x і y ?

$$y = \{y_1, y_2, \ldots\ldots y_N\} \qquad x = \{x_1, x_2, \ldots\ldots x_N\}$$

$$\bar{y} = \frac{\sum_i y_i}{N} \qquad \bar{x} = \frac{\sum_i x_i}{N}$$

Центрування: $y_i - \bar{y}$ $\qquad$ $x_i - \bar{x}$

Нормування: $y_i = \dfrac{y_i - \bar{y}}{\sqrt{\sum_i (y_i - \bar{y})^2}}$ $\qquad$ $x_i = \dfrac{x_i - \bar{x}}{\sqrt{\sum_i (x_i - \bar{x})^2}}$

$$\sum_i y_i^2 = 1 \qquad \sum_i x_i^2 = 1$$

коефіцієнт кореляції
(множинний коефіцієнт кореляції)

$$y_i \rightarrow \frac{y_i - \bar{y}}{\sqrt{\sum_i (y_i - \bar{y})^2}} \qquad x_i \rightarrow \frac{x_i - \bar{x}}{\sqrt{\sum_i (x_i - \bar{x})^2}}$$

Скалярний добуток двох нормованих (і центрованих) векторів.

$$r_{y,x} = \frac{\sum_i (y_i - \bar{y})(x_i - \bar{x})}{\sqrt{\sum_i (y_i - \bar{y})^2 (x_i - \bar{x})^2}}$$

$$0 \le |r| \le 1$$

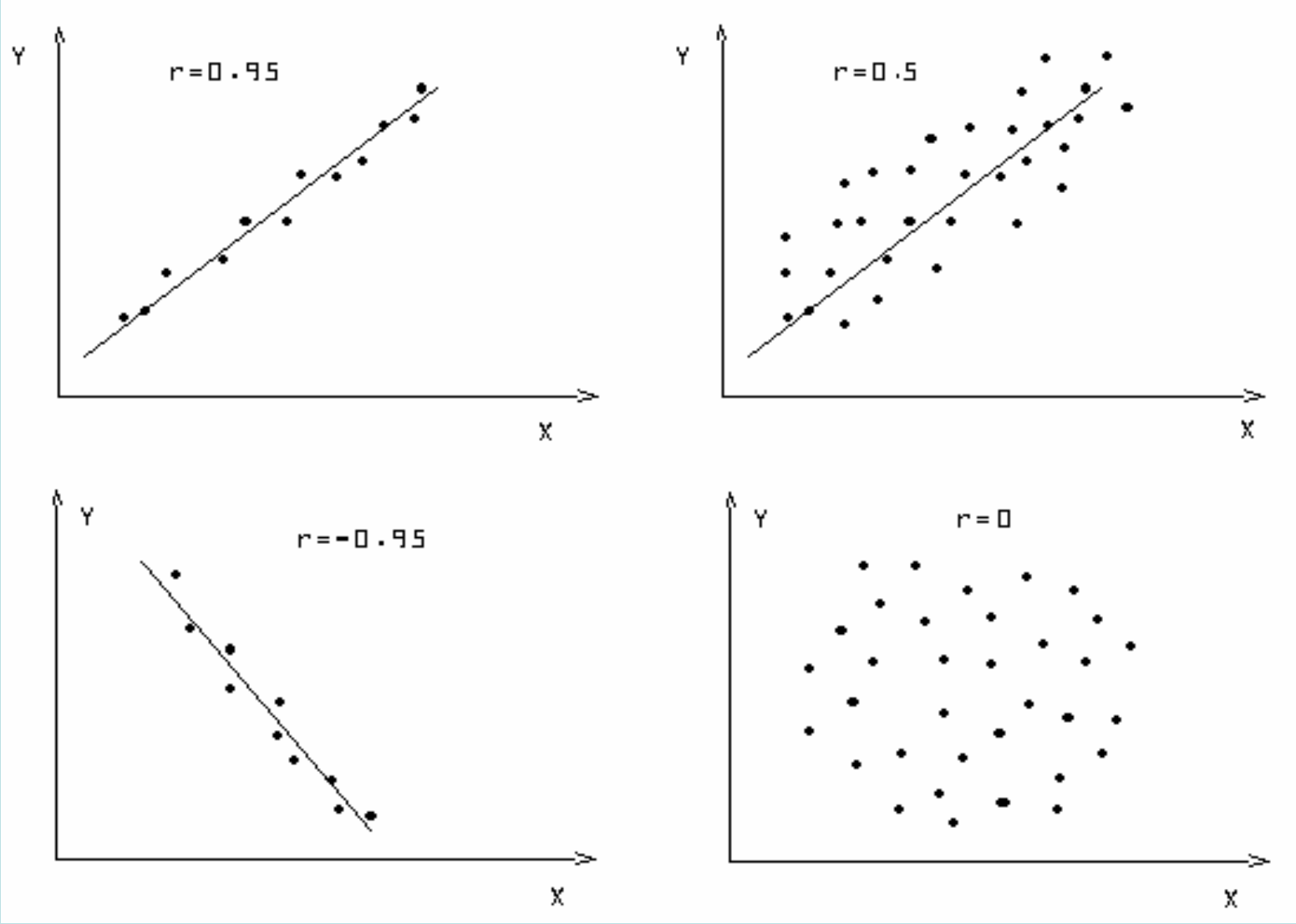
“відмінні” $|r| > 0.99$

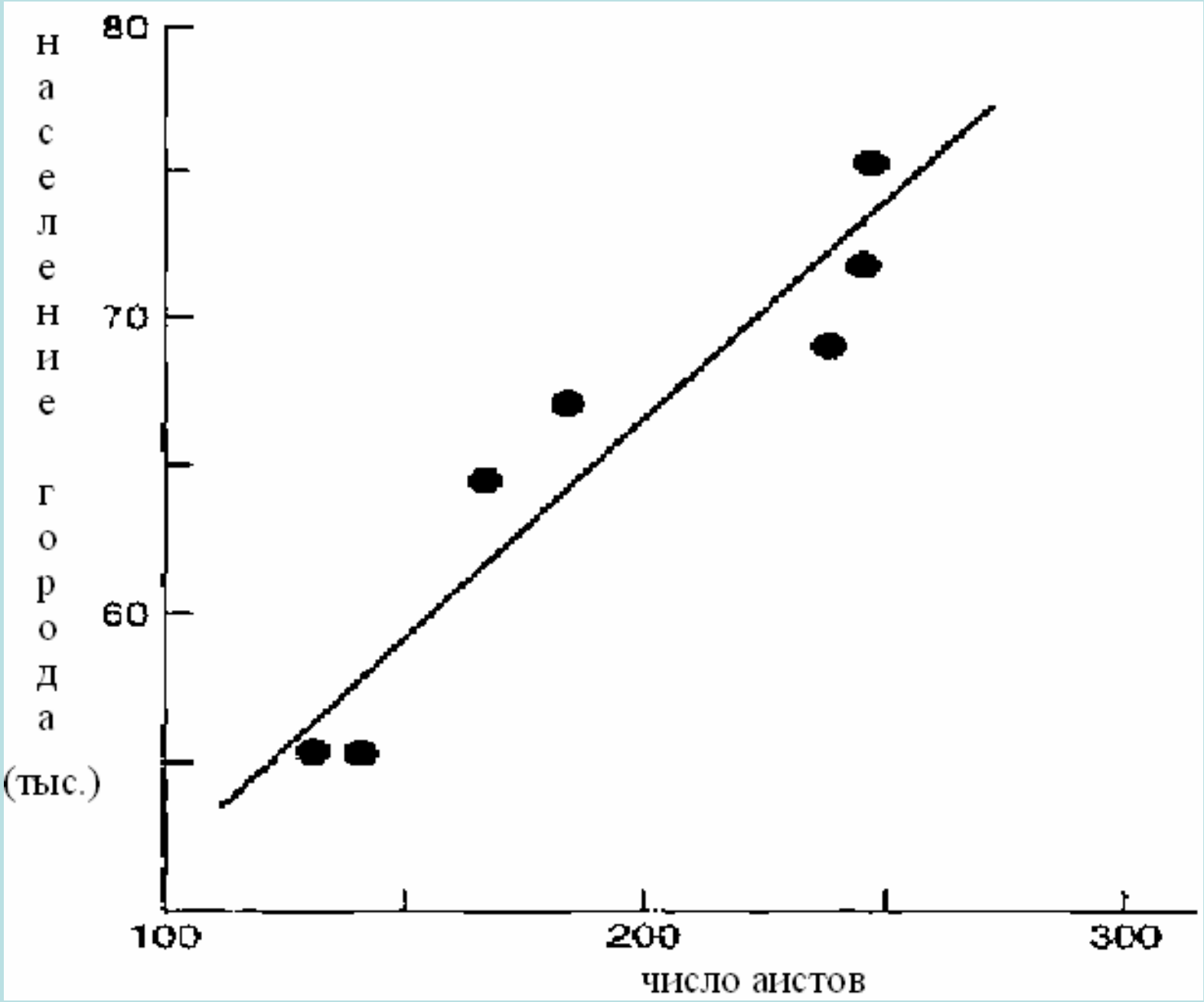
“добрі” $0.98 \le |r| \le 0.99$

“задовільні” $0.95 \le |r| < 0.98$

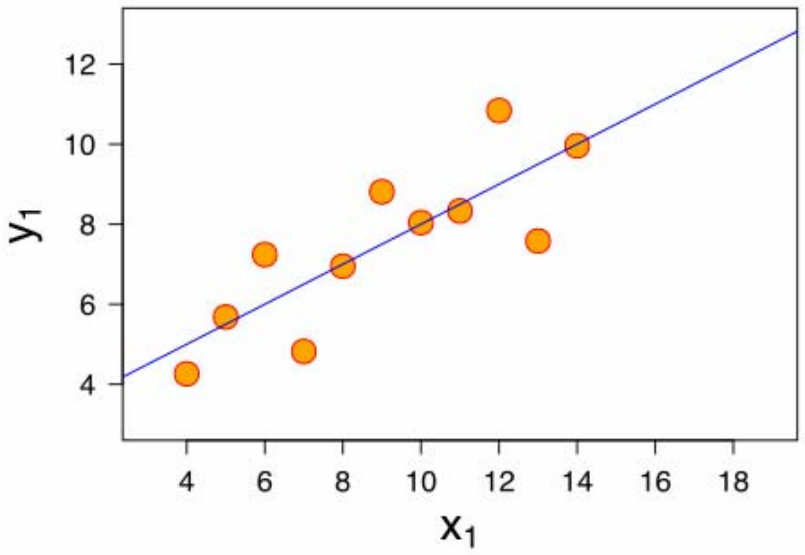
“погані” $|r| < 0.9$

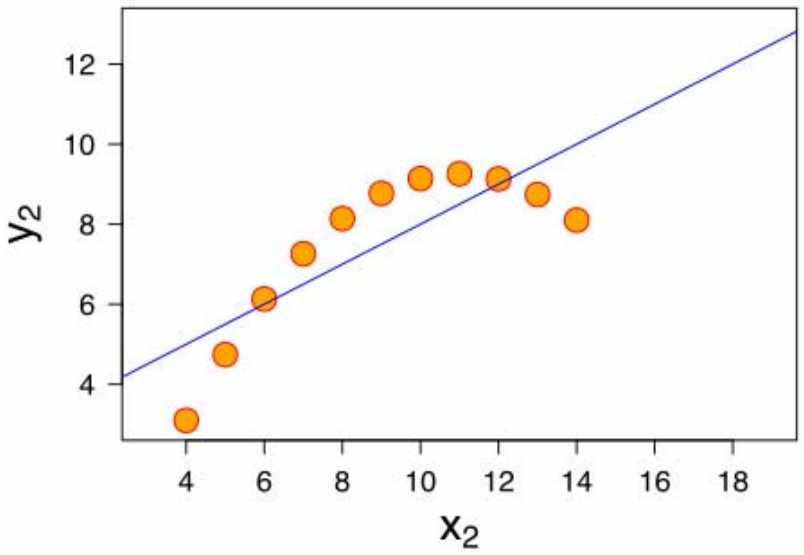
Приклади

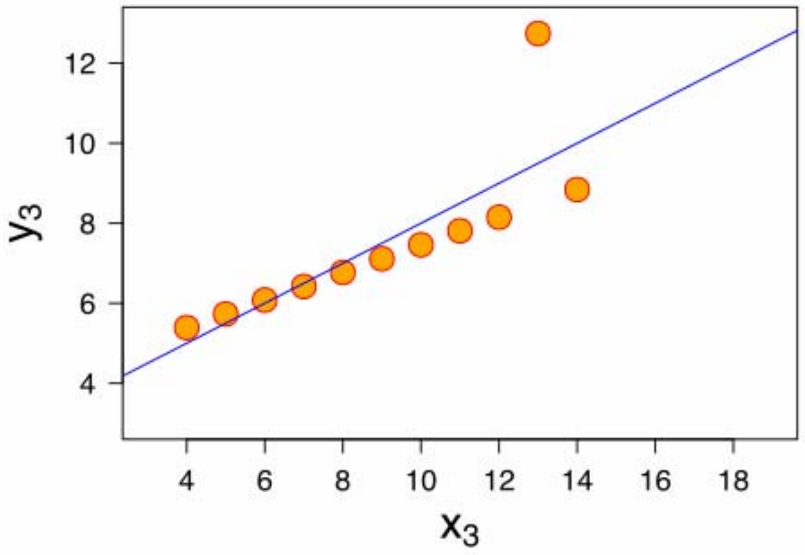


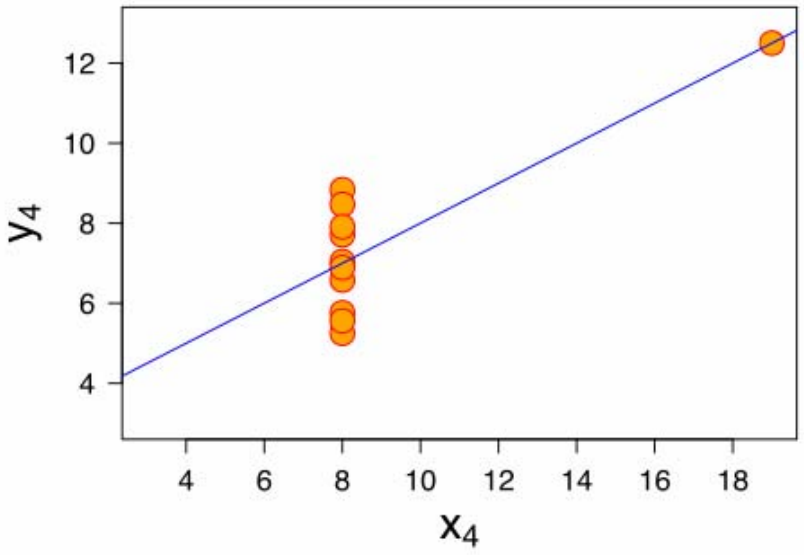

80
70
60
население города (тыс.)
100
200
300
число аистов

Abscomb Plots





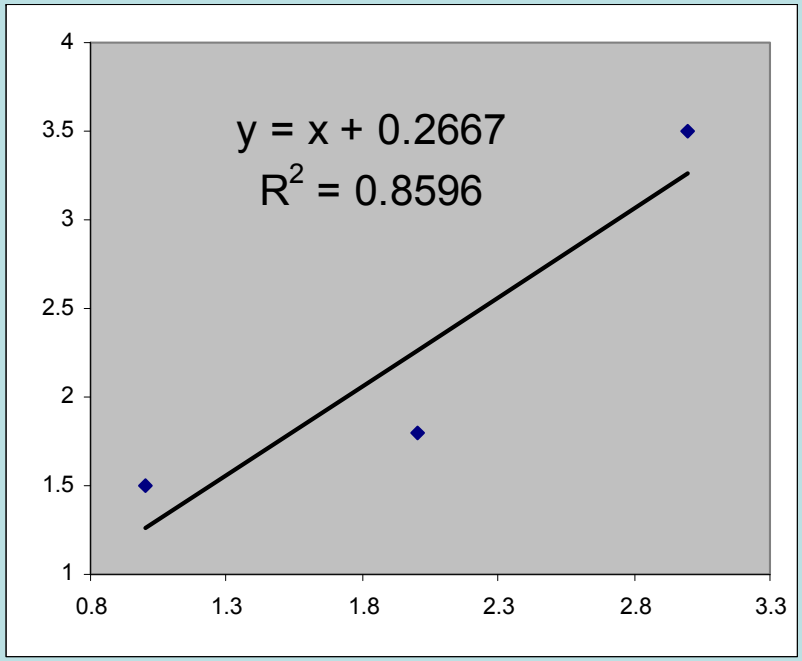




Процедура LOO (Leave-one-out cross-validation)

Перехрестне оцінювання

X	Y	Y(calc)	eqs.	Y(pred)
1	1.5	1.267	Y=1.7x-1.6	0.1
2	1.8	2.267	Y=x+0.5	2.5
3	3.5	3.267	Y=0.3x+1.2	2.1



Calculated

$$\sigma^2 = \frac{1}{3-2}\sum_i (y_i - \hat{y}_i)^2 =$$

$$\left((1.5-1.267)^2 + (1.8-2.267)^2 + (3.5-3.267)^2\right)$$

$$\approx 0.33 \qquad \sigma \approx \sqrt{0.33} = 0.57$$

Predicted

$$\sigma^2 = 4.41 \qquad \sigma \approx \sqrt{4.41} = 2.1$$

Щодо вибору апроксимуючої Функції

$$y = ax + b \qquad \frac{dy}{dx} = a \quad \Longrightarrow \quad \frac{\Delta y}{\Delta x} = \text{const}$$

$$\Delta y = y_i - y_{i-1}$$

$$\Delta x = x_i - x_{i-1}$$

$y = a_0 x^{a_1}$	$\frac{\Delta \ln y}{\Delta \ln x} = \text{const}$
$y = a_0 a_1^{\,x}$	$\frac{\Delta \ln y}{\Delta x} = \text{const}$
$y = a_0 + a_1 x + a_2 x^2$	$\frac{\Delta y^2}{\Delta x^2} = \text{const}$
$y = \frac{x}{a_0 + a_1 x}$	$\frac{\Delta\left(\frac{x}{y}\right)}{\Delta x} = \text{const}$

Опис аналітично заданих функцій

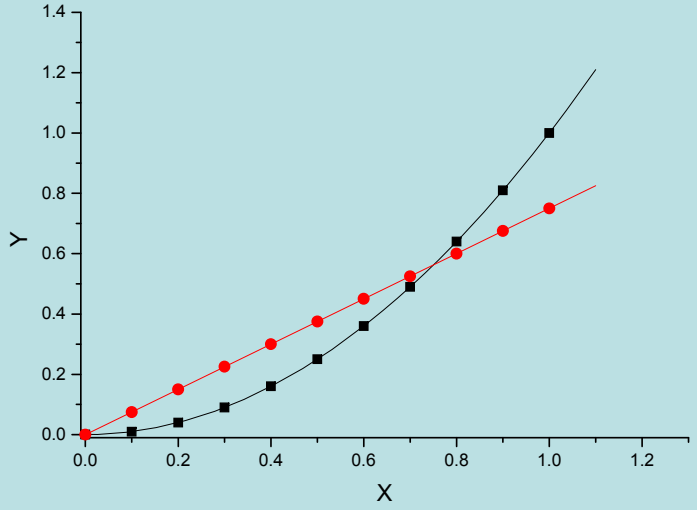
STO =N GTO

$$e^{-\alpha r} \approx \sum_i C_i e^{-\zeta_i r^2}$$

$$J = \int_0^{\infty} \left(e^{-\alpha r} - \sum_i C_i e^{-\zeta_i r^2} \right)^2 dr$$

Приклад № 4

$$y(x) = x^2 \qquad x = [0 \div 1]$$



$$f(x) = a_1 x$$

$$F(a_1) = \int_0^1 \left(x^2 - a_1 x \right)^2 dx$$

$$F(a_1) = \int_0^1 \left(x^2 - a_1 x\right)^2 dx$$

$$F(a_1) = \int_0^1 \left(x^4 - 2a_1 x^3 + a_1^2 x^2\right) dx = \int_0^1 x^4 dx - 2a_1 \int_0^1 x^3 dx + a_1^2 \int_0^1 x^2 dx$$

$$F(a_1) = \frac{x^5}{5}\Big|_0^1 - 2a_1 \frac{x^4}{4}\Big|_0^1 + a_1^2 \frac{x^3}{3}\Big|_0^1 = \frac{1}{5} - a_1 \frac{1}{2} + a_1^2 \frac{1}{3}$$

$$\frac{dF(a_1)}{da_1} = -\frac{1}{2} + a_1 \frac{2}{3} = 0 \qquad a_1 = \frac{3}{4} = 0.75$$

$$y(x) = 0.75x$$

Наближена апроксимація параболи лінійною функцією

X	$y = x^2$
0	0
0.1	0.01
0.2	0.04
0.3	0.09
0.4	0.16
0.5	0.25
0.6	0.36
0.7	0.49
0.8	0.64
0.9	0.81
1	1

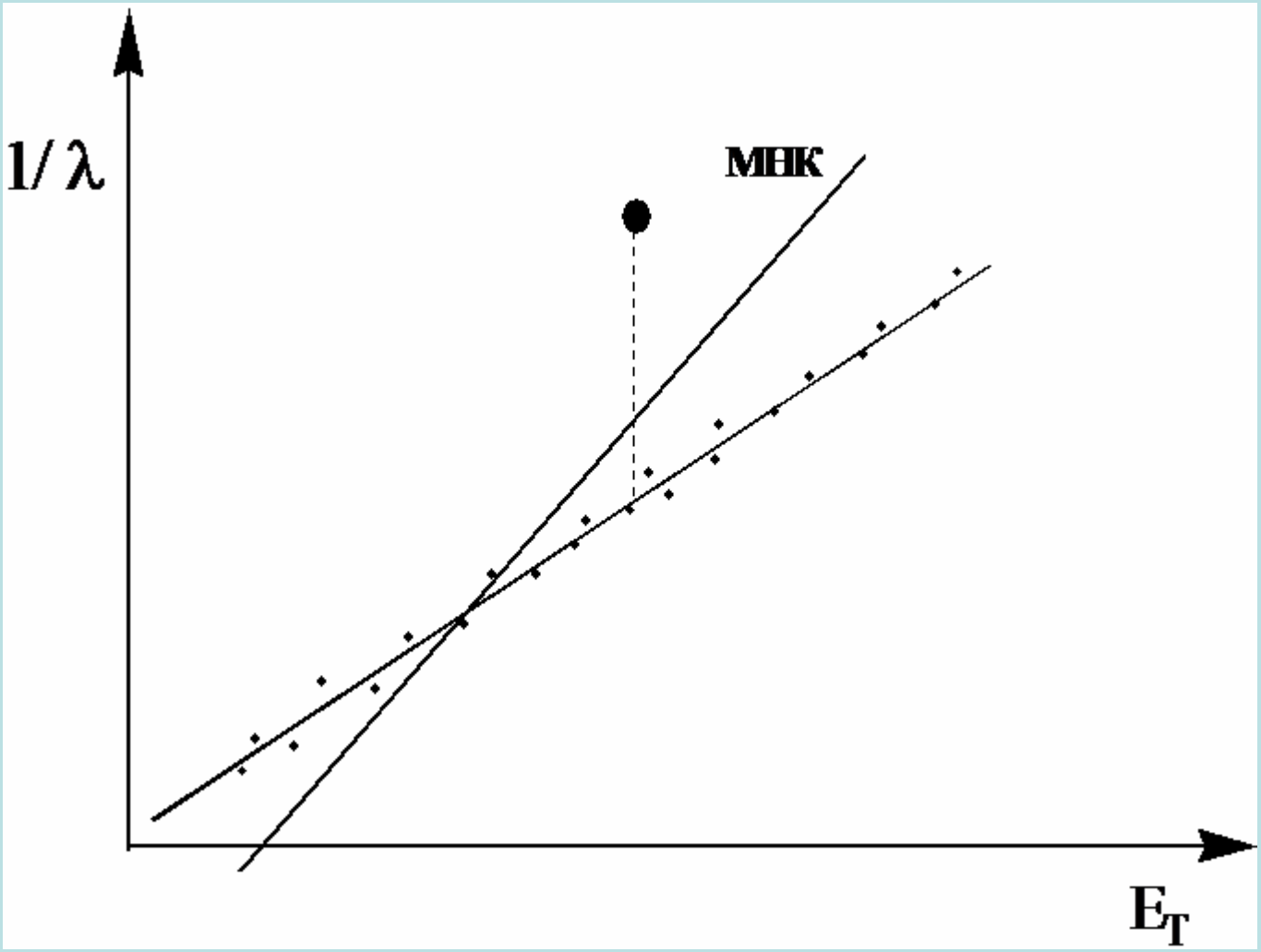
$$a_1 = \frac{\sum_i y_i x_i}{\sum_i x_i^2}$$

$$a_1 = \frac{\sum_i x_i^3}{\sum_i x_i^2}$$

$$a_1 \approx 0.7857$$

Нагадаємо точне значення: $a_1 = \frac{3}{4} = 0.75$

Недоліки МНК
(*не* робастність)



Зважений метод найменших квадратів

$$F = F(a_0, a_1, a_2, \ldots a_k) = \sum_i (y_i - \hat{y}_i)^2$$ МНК

$$F = F(a_0, a_1, a_2, \ldots a_k) = \sum_i p_i (y_i - \hat{y}_i)^2$$ Зважений МНК

$$p_i = \frac{1}{\sigma_i^2}$$

«Істинне знання полягає в тому, щоб знати **чому (!)** речі такі, які вони є, а не тільки в тому які вони»

сэр ***Ісайя Бе́рлін.***

(6/6/1909, Рига — 5/11/1997, Оксфорд ***) Англійський філософ***