第七章、回归分析方法

§7.1 一元线形回归

- 回归分析方法是数理统计的重要工具,
  是处理多个变量之间**相关关系**的一种数学方法.
- **函数: 确定性关系**. $h = \frac{1}{2}gt^2$.
- 相关关系: 给定x 后, 不能确定y 的值. 如, 存在测量误差.
- 回归分析: 建立关系, 判断公式的有效性, 预测、控制.
- 一元线性回归: **随机变量** Y **与普通变量** x 之间的线性关系.
- 数据成对观测:

$$(x_1, y_1), (x_2, y_2), \ldots, (x_n, y_n).$$

- **重点**: $x_1, x_2, \cdots, x_n$ 不全相等.

例1.1. 某纤维的强度Y 与拉伸倍数x 有关. $n = 24$ 数据:

$$(1.9, 1.4), (2.0, 1.3), (2.1, 1.8), \cdots, (9.5, 8.1), (10.0, 8.1).$$

目标: 找出x 和Y 的关系式.

- 散点图:

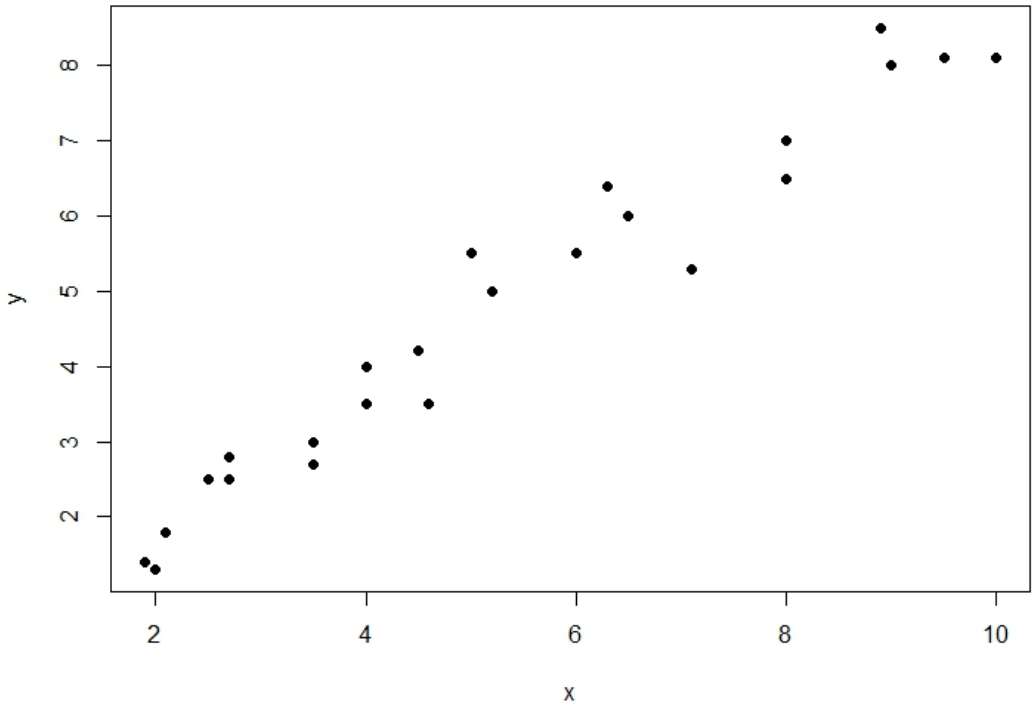
  散点围绕在

  一条直线周围.

- 建立**回归方程**:

  $\hat{y} = a + bx$,

  回归系数: b.



- **线性**:

  x每增加1, y的变化量是恒定的.

- **非线性**: x每增加1, y的变化量不是恒定的.

点估计$\hat{a}$, $\hat{b}$.

最小二乘法: 求均方误差Q 的最小值点$\hat{a}, \hat{b}$.

$$Q = Q(a,b) = \sum_{i=1}^{n} \Big(y_i - (a + bx_i)\Big)^2. \tag{1.2}$$

- **方法一(微分法)、求解方程组:**

$$\frac{\partial Q}{\partial a} = -2\sum_{i=1}^{n} \big(y_i - (a + bx_i)\big) = 0, \tag{1.3}$$

$$\frac{\partial Q}{\partial b} = -2\sum_{i=1}^{n} \big(y_i - (a + bx_i)\big)\cdot x_i = 0. \tag{1.4}$$

- 由(1.3) 解得$a = \bar{y} - b\bar{x}$. 代入(1.4) 以求解b.

- 由(1.3) 解得$a = \bar{y} - b\bar{x}$. 代入

$$\frac{\partial Q}{\partial b} = -2\sum_{i=1}^{n} \big(y_i - (a + bx_i)\big)\cdot x_i = 0. \qquad (1.4)$$

- 解: $\star \Rightarrow \sum_{i=1}^{n} \big((y_i - \bar{y}) - b(x_i - \bar{x})\big)(x_i - \bar{x}) = 0$. 记

$$\ell_{xx} = \sum_{i=1}^{n}(x_i - \bar{x})^2, \quad \ell_{xy} = \sum_{i=1}^{n}(x_i - \bar{x})(y_i - \bar{y}).$$

则$\ell_{xy} = b \cdot \ell_{xx}$. 解得$b = \ell_{xy}/\ell_{xx}$. (**前提**: x_i's 不全相等.)

- $\hat{a} = \bar{y} - \hat{b}\bar{x}$, $\hat{b} = \sum_{i=1}^{n}(x_i - \bar{x})(y_i - \bar{y}) / \sum_{i=1}^{n}(x_i - \bar{x})^2$.
可以证明$(\hat{a}, \hat{b})$ 是$Q(a, b)$ 的最小值点. (理由: 二阶导数矩阵/海色阵H 正定.)

$$H = \begin{pmatrix} 2n & 2n\bar{x} \\ 2n\bar{x} & 2\left(\sum_{i=1}^{n}(x_i - \bar{x})^2 + n\bar{x}^2\right) \end{pmatrix}.$$

最小二乘法: 求均方误差Q 的最小值点$\hat{a}, \hat{b}$.

$$Q = Q(a,b) = \sum_{i=1}^{n} \Big(y_i - (a + bx_i) \Big)^2. \tag{1.2}$$

- 方法二(配方法)、 (注: $\sum_{i=1}^{n} \star \cdot \star_i = 0$, $\ell_{yy} = \sum_{i=1}^{n} (y_i - \bar{y})^2$.)

$$\begin{aligned} Q(a,b) = & \sum_{i=1}^{n} \Big((y_i - \bar{y}) + \big(\bar{y} - (a + b\bar{x})\big) - b(x_i - \bar{x}) \Big)^2 \\ = & \ell_{yy} + n \cdot \star^2 + b^2 \ell_{xx} - 2b\ell_{xy} \\ = & \ell_{yy} + n \cdot \star^2 + \ell_{xx} \left(b - \frac{\ell_{xy}}{\ell_{xx}} \right)^2 - \frac{\ell_{xy}^2}{\ell_{xx}}. \end{aligned}$$

- 最小值点: $\star = * = 0$ 的解, 即, $\hat{a} = \bar{y} - \hat{b}\bar{x}$, $\hat{b} = \ell_{xy}/\ell_{xx}$.
  最小值: $\ell_{yy} - \ell_{xy}^2/\ell_{xx}$.

总结:

- 均方误差Q 的最小值点为$\hat{a} = \bar{y} - \hat{b}\bar{x}$, $\hat{b} = \frac{\ell_{xy}}{\ell_{xx}}$.

$$Q = Q(a,b) = \sum_{i=1}^{n} \Big(y_i - (a + bx_i)\Big)^2. \tag{1.2}$$

- **回归方程/回归直线/经验公式:**

$$y = \hat{a} + \hat{b}x.$$

- $\bar{y} = \hat{a} + \hat{b}\bar{x}$. 因此,
  (1) 点$(\bar{x}, \bar{y})$ 落在回归直线上, (2) $\hat{y}_i$'s 的平均值也为$\bar{y}$.

$$\hat{y}_i := \hat{a} + \hat{b}x_i.$$

- 例1.1. 由24 个数据计算得$\hat{y} = \hat{a} + \hat{b}x = 0.15 + 0.859x$.
  回归系数$\hat{b}$ 的含义: 拉伸倍数x 每增加1, 强度Y 平均增加0.859.

非线性关系之线性化

例1.2. 彩色显影中, 染料光学密度Y 与析出银的光学密度x 关系如下, $A, B > 0$:

$$Y \approx Ae^{-B/x},$$

- 这不是线性关系. 两边取对数得

$$Y^* \approx \ln A - Bx^*, \quad \text{其中}, Y^* = \ln Y,\ x^* = \frac{1}{x}.$$

- 数据: $(x_1, y_1), \cdots, (x_n, y_n) \to (x_1^*, y_1^*), \cdots, (x_n^*, y_n^*)$.
- 建立线性回归方程: $\hat{y}^* = \hat{a} + \hat{b}x^*$.
- 反变换: $\hat{A} = e^{\hat{a}}$, $\hat{B} = -\hat{b}$.
- 回归方程: $\hat{Y} = \hat{A}e^{-\hat{B}/x}$.

例1.3. 炼钢钢包容积Y 随使用次数x 增大. $n = 13$, 数据:

$$(2, 106.42), (3, 108.20), (4, 109.58), \cdots, (19, 111.20)$$

- 画散点图. 用双曲线$\frac{1}{y} \approx a + b \cdot \frac{1}{x}$.
- 线性回归方程: $\hat{y}^* = \hat{a} + \hat{b}x^*$, $x^* = 1/x$, $y^* = 1/y$,

  其中$\hat{a} = 0.008967$, $\hat{b} = 0.0008292$.
- 经验公式:

$$\frac{1}{\hat{y}} = 0.008967 + 0.0008292 \cdot \frac{1}{x}.$$

平方和分解公式

- **前提:** $x_1, x_2, \ldots, x_n$ 不全相等.

  结论: 均方误差Q 的(唯一的)最小值点为$\hat{a} = \bar{y} - \hat{b}\bar{x}$, $\hat{b} = \frac{\ell_{xy}}{\ell_{xx}}$.

$$Q = Q(a, b) = \sum_{i=1}^{n} \Big(y_i - (a + bx_i) \Big)^2.$$

  估计: $\hat{y} = \hat{a} + \hat{b}x$, $\bar{y} = \hat{a} + \hat{b}\bar{x}$, $\hat{y}_i = \hat{a} + \hat{b}x_i$.

- 注: 经验公式并不都能反映实际情况. 需要判别x与Y之间是否真的具有线性相关关系: Y是否随着x增大而线性地增大(或者线性地减小).

平方和分解公式:

$$\sum_{i=1}^{n}(y_i-\bar{y})^2=\sum_{i=1}^{n}(y_i-\hat{y}_i)^2+\sum_{i=1}^{n}(\hat{y}_i-\bar{y})^2. \tag{1.7}$$

$\hat{a}=\bar{y}-\hat{b}\bar{x}$, $\hat{b}=\frac{\ell_{xy}}{\ell_{xx}}$, $\hat{y}=\hat{a}+\hat{b}x$, $\bar{y}=\hat{a}+\hat{b}\bar{x}$, $\hat{y}_i=\hat{a}+\hat{b}x_i$, $\overline{\hat{y}}=\bar{y}$.

- 证: $\star=\star+\star$. 即, $\star=\star-\star$.
- 交叉项: $\sum_{i=1}^{n}\star\cdot\star=\sum_{i=1}^{n}\star\cdot\star-\sum_{i=1}^{n}\star^2$.
- $\star=\hat{b}(x_i-\bar{x})$. 故$\sum_{i=1}^{n}\star\cdot\star=\hat{b}\ell_{xy}$, $\sum_{i=1}^{n}\star^2=\hat{b}^2\ell_{xx}$.
- $\hat{b}=\frac{\ell_{xy}}{\ell_{xx}}$, 即$\ell_{xy}=\hat{b}\ell_{xx}$. 故交叉项为0, 从而(1.7) 成立.

$\sum_{i=1}^n (y_i - \bar{y})^2 = \sum_{i=1}^n (y_i - \hat{y}_i)^2 + \sum_{i=1}^n (\hat{y}_i - \bar{y})^2$.

$\hat{a} = \bar{y} - \hat{b}\bar{x}$, $\hat{b} = \frac{\ell_{xy}}{\ell_{xx}}$, $\hat{y} = \hat{a} + \hat{b}x$, $\bar{y} = \hat{a} + \hat{b}\bar{x}$, $\hat{y}_i = \hat{a} + \hat{b}x_i$, $\bar{\hat{y}} = \bar{y}$.

- 离差平方和: $\ell_{yy} = \sum_{i=1}^n (y_i - \bar{y})^2$.
  (注: $\ell_{\alpha\alpha}$ 称为$\alpha = \alpha_i$'s 的离差平方和.)
- 残差平方和: $Q = \sum_{i=1}^n (y_i - \hat{y}_i)^2 = \sum_{i=1}^n \hat{\varepsilon}_i^2$.
  模型拟合的误差的度量, 是自变量和模型不能解释的部分.
  越小越好, 说明模型与实际数据越相符. $\hat{\varepsilon}_i$'s 称为残差.)
- 回归平方和: $U = \sum_{i=1}^n (\hat{y}_i - \bar{y})^2 = \hat{b}^2 \ell_{xx}$.
  源于自变量x 的分散程度, 通过线性关系影响了因变量Y, 造成Y 的变差, 是模型可以解释的部分.
- 一般地, 计算流程如下:
  (1) 计算$\ell_{xx}, \ell_{yy}, \ell_{xy}$.
  (2) 估计$\hat{b} = \ell_{xy}/\ell_{xx}$. 计算$U$: $U = \hat{b}^2 \ell_{xx}$.
  (3) 计算Q: $Q = \ell_{yy} - U$.

正态模型的方差估计与相关性检验

- **正态模型:**

$$Y_i = a + bx_i + \varepsilon_i, \quad i = 1, \cdots, n \tag{1.10}$$

其中$\varepsilon_1, \cdots, \varepsilon_n$ 独立同分布, 都服从$\sim \mathrm{N}(0, \sigma^2)$, σ^2 未知.

- 注: 易得$(Y_1, \cdots, Y_n)$ 的联合密度.
- 可以证明: 残差平方和$Q = \sum_{i=1}^n (y_i - \hat{y}_i)^2 = \sum_{i=1}^n \hat{\varepsilon}_i^2$ 满足

$$\frac{1}{\sigma^2} Q \sim \chi^2(n-2),$$

- $\hat{\varepsilon}_i = y_i - \hat{y}_i = y_i - \bar{y} - \hat{b}(x_i - \bar{x})$ 满足两个约束方程:

$$\sum_{i=1}^n \hat{\varepsilon}_i = 0, \quad \sum_{i=1}^n \hat{\varepsilon}_i (x_i - \bar{x}) = 0.$$

- σ^2 的无偏估计: $\hat{\sigma}^2 = \frac{1}{n-2} Q$. (因为$E \frac{1}{\sigma^2} Q = n - 2$.)

- **相关性检验**. $H_0 : b = 0$.

  (注: H_0 不成立, 则Y 与x 有线性相关关系.)

- 相对而言, $U = \hat{b}^2 \ell_{xx}$ 越大& $Q = \sum_{i=1}^{n} (y_i - \hat{y}_i)^2$ 越小, 则模型越准确描述x 和Y 之间的线性相关关系. 反之, 则x 和Y 之间没有线性相关关系.

- **检验统计量**:

$$F = F(\vec{x}, \vec{Y}) = \frac{U}{Q/(n-2)}. \tag{1.9}$$

  若F 相当大, 则表明x 对Y 的线性影响强, 两者有线性相关性. 否则, 没有线性相关性.

- 可证明: 在H_0 下, $F \sim F(1, n-2)$.

- **否定域**: $\mathcal{W} = \{(\vec{x}, \vec{y}) : F(\vec{x}, \vec{y}) > \lambda\}$, 其中$\lambda = F_{1-\alpha}(1, n-2)$.

- 结论: $F(\vec{x}, \vec{y}) > \lambda$, 则拒绝$H_0$, 认为$Y$ 显著地线性依赖于x.

  否则, 接受H_0, 认为x 与Y 之间没有显著的线性相关性.

- 有些书的检验统计量取样本相关系数:

$$R = R(\vec{x}, \vec{y}) = \ell_{xy}/\sqrt{\ell_{xx}\ell_{yy}}.$$

(回顾, 随机变量ξ 与η 的(线性)相关系数: $\rho_{\xi\eta} = \dfrac{\mathrm{Cov}(\xi,\eta)}{\sqrt{D(\xi)D(\eta)}}$.)

- 当$|R|$ 很大时, 拒绝$H_0 : b = 0$.
- 复相关系数平方:

$$R^2 = \frac{\ell_{xy}^2}{\ell_{xx}^2} \cdot \frac{\ell_{xx}}{\ell_{yy}} = \frac{\hat{b}^2\ell_{xx}}{\ell_{yy}} = \frac{U}{\ell_{yy}} = 1 - \frac{Q}{\ell_{yy}}.$$

注: $0 \leqslant R^2 \leqslant 1$. R^2 越接近1, 回归模型对数据拟合得越好.

- F 与R^2 的关系: 一一对应, 严格增,

$$\begin{aligned} F =& \frac{U}{Q/(n-2)} = (n-2)\frac{U}{\ell_{yy} - U} \\ =& (n-2)\frac{R^2}{1-R^2} = \frac{n-2}{1/R^2 - 1}. \end{aligned}$$

例1.4. 炼钢, 碳含量x 越高, 冶炼时间Y 越长. $n = 34$, 数据:

$$(180, 200), (104, 100), \cdots, (143, 160)$$

- 画散点图, 观察数据, 建线形回归模型.
- 计算结果: $\hat{a} = -23.20$, $\hat{b} = 1.270$, $F = 145.0$, $R^2 = 0.8192$.
- 查$F(1, n-2) = F(1, 32)$ 表: $\alpha = 0.01$, 得$\lambda = 4.15$.
- 下结论: $F > \lambda$, 否定H_0, 认为x, Y 存在线性相关关系. 或: 直线回归是显著的.

应用1. 预报.

- 对新的自变量值x_0, 预报

$$Y_0 = a + bx_0 + \varepsilon_0.$$

- 点估计: 用$\hat{y}_0 = \hat{a} + \hat{b}x_0$ 预报Y_0.
- 还需要衡量预报精度.
  区间估计: 用$\hat{\sigma}^2 = \frac{1}{n-2}Q$ 代替σ^2.

$$T := \frac{Y_0 - \hat{y}_0}{s\sqrt{1 + \frac{1}{n} + \frac{(x_0-\bar{x})^2}{\ell_{xx}}}} \sim t(n-2).$$

- 查$t(n-2)$ 表: $\lambda = t_{1-\alpha/2}(n-2)$.
- 区间两端点: $\hat{y}_\pm = \hat{y}_0 \pm \lambda s\sqrt{1 + \frac{1}{n} + \frac{(x_0-\bar{x})^2}{\ell_{xx}}}$.

- 区间估计: $\lambda = t_{1-\alpha/2}(n-2)$,

$$\left[\hat{y}_0 - \lambda s\star,\ \hat{y}_0 + \lambda s\sqrt{1+\frac{1}{n}+\frac{(x_0-\bar{x})^2}{\ell_{xx}}}\right].$$

- x_0 离$\bar{x}$ 越远，预报区间长度越长.
  误差标准差的估计s 越小, 预报区间越短, 预报越精确.
- 注: x_0 不能超出原数据的范围.
- 当n 较大且$x_0 - \bar{x}$ 较小时, $\star \approx 1$. 于是预测区间近似为

$$[\hat{y}_0 - \lambda s, \hat{y}_0 + \lambda s].$$

- 当n 较大时, λ 可用标准正态分布的临界值$z_{1-\alpha/2}$.

应用2: 控制.

- 要求控制Y 在区间$[A, B]$ 内, 如何选取x?
- 办法: 让$\hat{y}_{\pm} \in [A, B]$, 反解出x 的区间.

回归诊断和残差分析

- 即使否定了$H_0 : b = 0$, 也并不说明模型就是合适的.
- 常见问题包括:
  (1) 缺少重要自变量;
  (2) 有非线性相关;
  (3) 误差项方差非恒定;
  (4) 误差项存在序列相关;
  (5) 自变量严重共线（多元回归中）;
  (6) 数据有异常值或强影响点.
  (7) 可以用残差散点图等进行回归诊断.

- 残差: $\hat{\varepsilon}_i = y_i - \hat{y}_i$.
- 令

$$h_i = \frac{1}{n} + \frac{(x_i - \bar{x})^2}{\ell_{xx}}, \quad s = \sqrt{\frac{Q}{n-2}}, \quad r_i = \frac{\hat{\varepsilon}_i}{s\sqrt{1-h_i}}.$$

- **近似地**, $r_1, \ldots, r_n$ 相互独立, 且都服从N$(0,1)$. 故

$$P(|r_i| > 2) \approx 0.05.$$

- 当n 比较大时, r_i's 应该只有约$[0.05n]$ 个的绝对值大于2.

  注: 可用来检验模型关于误差项的假设是否成立, 以及发现异常值点.