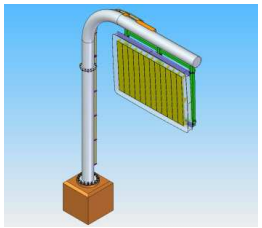
Прикладная статистика. Занятие 8. Регрессионный анализ, часть вторая.

12 апреля 2011 г.

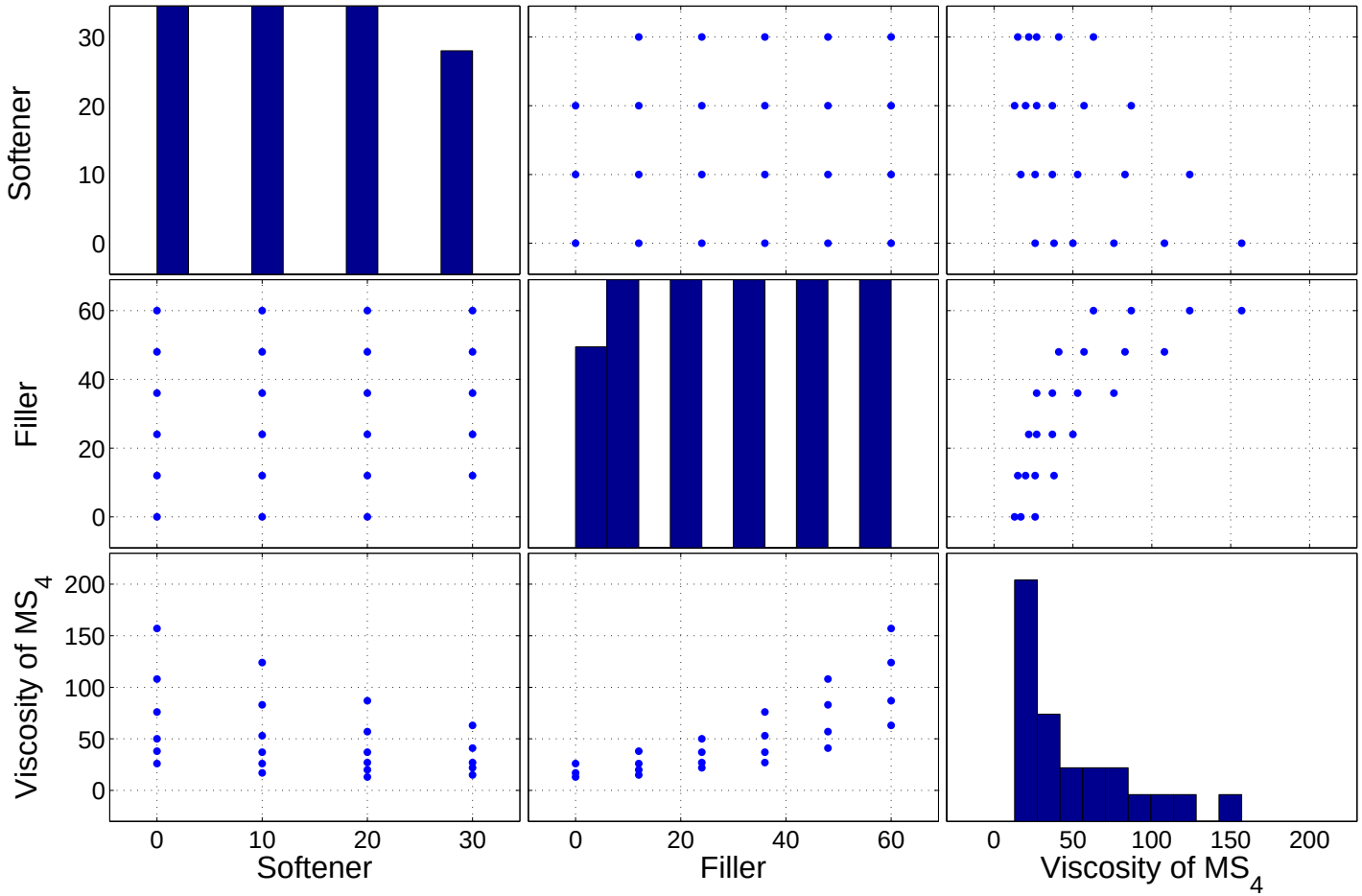
Вязкость MS_4

Derrigher GC, An empirical model for viscosity of filled and plasticized elastomer products (1974): исследовалась вязкость MS_4 при $100\,^{\circ}C$ при разных уровнях наполнителя и пластификатора.

Найти преобразование отклика, обеспечивающее хороший подбор модели первого порядка.



Вязкость MS_4



$$\max Y / \min Y = 12.0769.$$

Вязкость MS_4

Пусть имеются положительные значения отклика $Y_1, Y_2, \ldots, Y_n$.
Если отношение наибольшего наблюдаемого Y к наименьшему превосходит 10, стоит рассмотреть возможность преобразования Y.
В каком виде искать преобразование?

Часто полезно рассмотреть преобразования вида Y^λ, но оно не имеет смысла при $\lambda = 0$.
Вместо него можно рассмотреть преобразование вида

$$W = \begin{cases} \left(Y^\lambda - 1\right)/\lambda, & \lambda \neq 0; \\ \ln Y, & \lambda = 0, \end{cases}$$

но оно сильно варьируется по λ.
Вместо него можно рассмотреть преобразование вида

$$V = \begin{cases} \left(Y^\lambda - 1\right) / \left(\lambda \dot{Y}^{\lambda-1}\right), & \lambda \neq 0; \\ \dot{Y} \ln Y, & \lambda = 0, \end{cases}$$

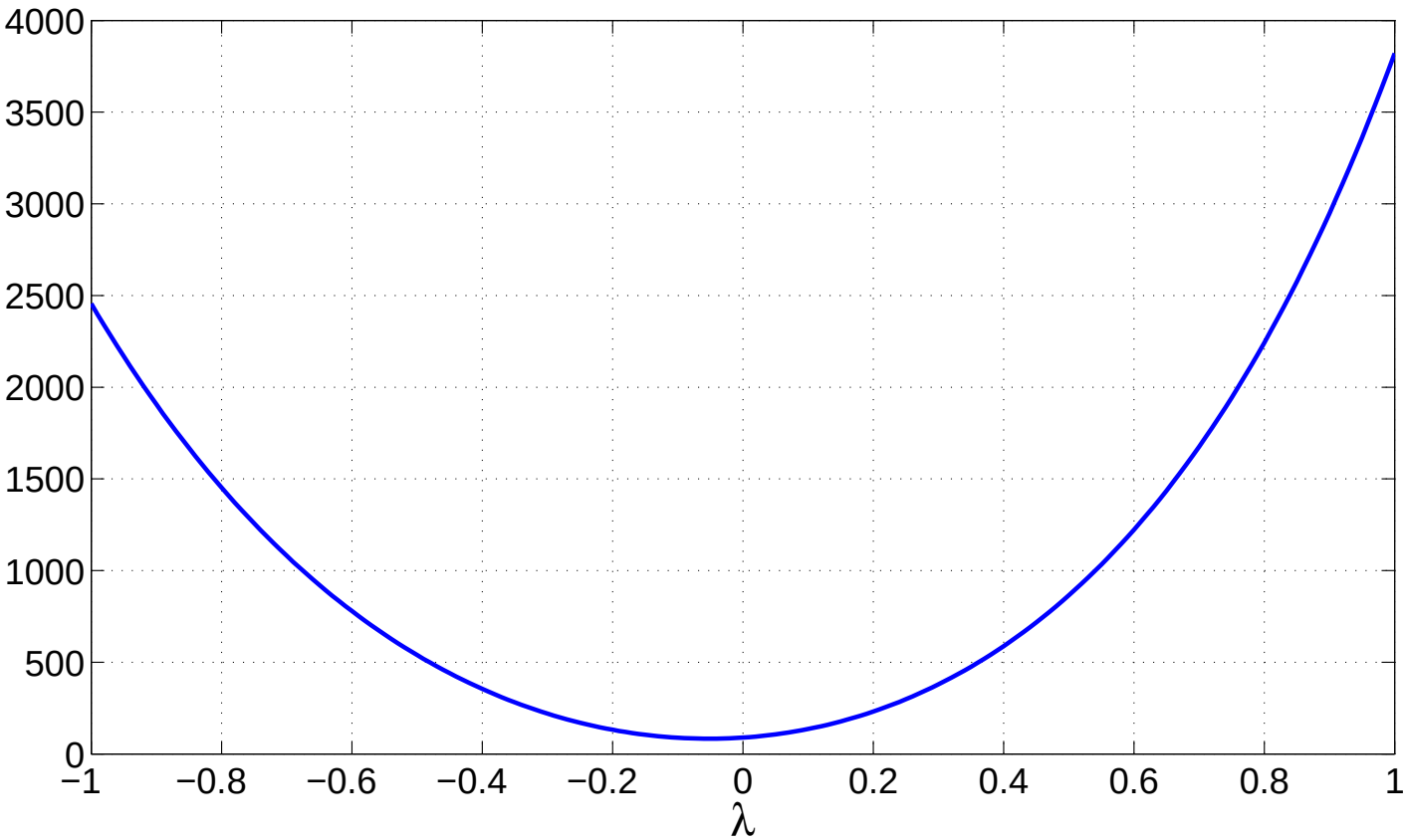
где $\dot{Y} = (Y_1 Y_2 \ldots Y_n)^{1/n}$ — среднее геометрическое наблюдений.

Вязкость MS_4

Процесс подбора λ:

1. выбирается набор значений λ в некотором интервале, например, $(-2; 2)$;
2. для каждого значения λ выполняется преобразование отклика, строится регрессия, вычисляется остаточная сумма квадратов SSE;
3. строится график $RSS\,(\lambda)$, по нему определяется оптимальное значение λ;
4. выбирается ближайшее к оптимальному удобное значение λ (например, полуцелое);
5. строится окончательная модель регрессии с откликом Y^{λ} или $\ln Y$.

Вязкость MS_4



Выбираем $\lambda = 0$, т.е., $Y = \ln Y$.

Вязкость MS_4

Доверительный интервал для λ выбирается из уравнения

$$L\left(\hat{\lambda}\right) - L\left(\lambda\right) \leq \frac{1}{2}\chi^2_1\left(1-\alpha\right),$$

где $L\left(\lambda\right) = n\ln\left(RSS(\lambda)/n\right)$.

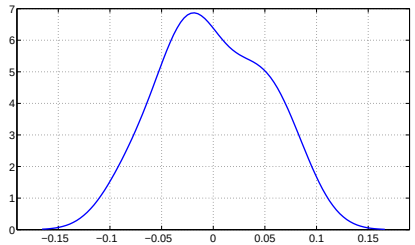
Если он содержит единицу, возможно, не стоит выполнять преобразование. Если он содержит несколько удобных значений λ, то всё равно, какое из них выбирать.

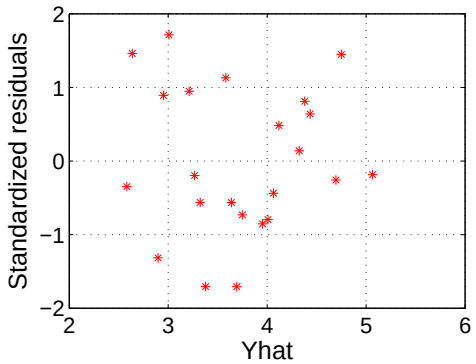
Для нашей задачи 95% доверительный интервал — $-0.13 \leq \lambda \leq 0.03$.

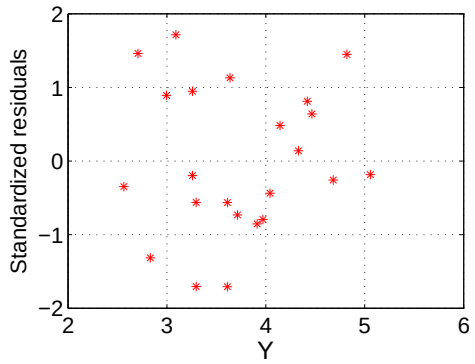
Итоговое уравнение:
$\ln Y = 3.212 + 0.03088f - 0.03152p, \quad F = 2045, \quad p \approx 0, \quad R^2 = 0.9951$
(модель объясняет $100R^2 = 99.51\%$ отклонения от среднего значения).
Без преобразования:
$Y = 28.184 + 1.55f - 1.717p, \quad F = 72.9, \quad p \approx 0, \quad R^2 = 0.8793$ (модель объясняет $100R^2 = 87.93\%$ отклонения от среднего значения).

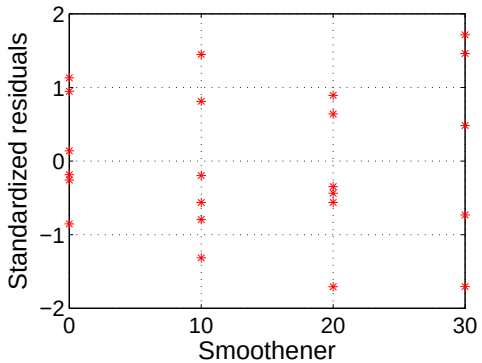
Вязкость MS_4

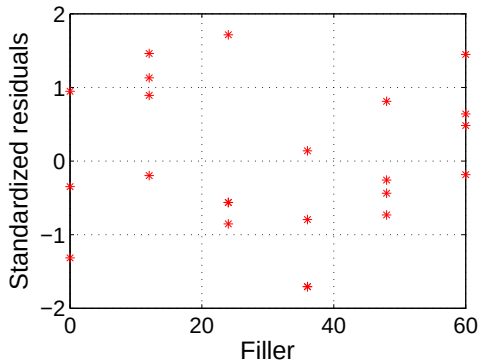
Особенно важно исследовать остатки.











Содержание свободного хлора

Smith H, Dubey SD, Some reliability problems in the chemical industry (1964): исследование корпорации Procter & Gamble. Исследуется продукт A, в момент производства доля свободного хлора в нём должна составлять 0.5. Известно, что со временем содержание хлора в продукте снижается. За первые 8 недель содержание хлора снизится до 0.49, но в более поздние сроки из-за влияния большого количества неконтролируемых факторов теоретические расчёты не могут достаточно надёжно предсказать содержание свободного хлора. Для определения закона убывания концентрации свободного хлора она была измерена в 44 образцах на разных сроках хранения.

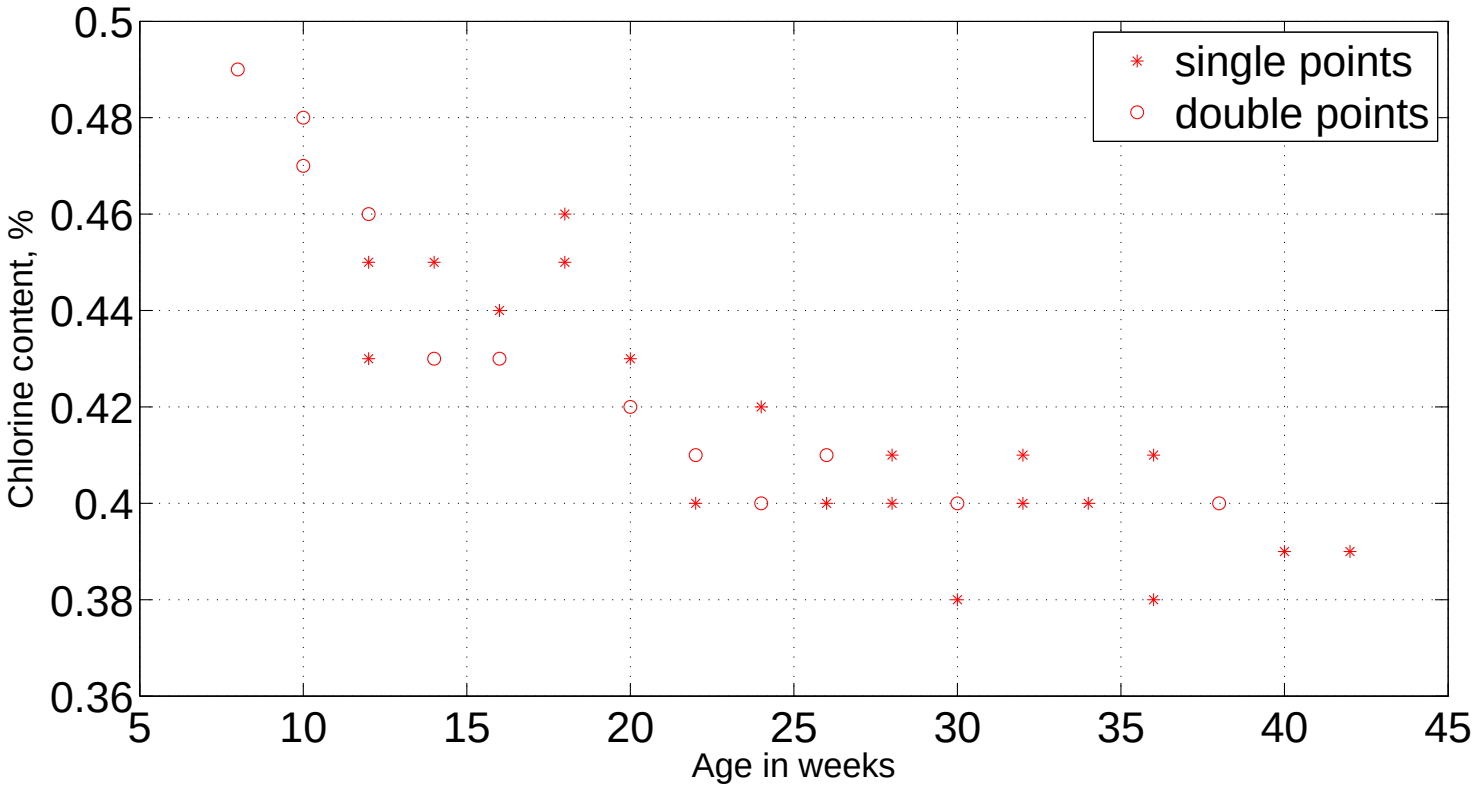
Была выдвинута гипотеза, что модель вида

$$Y = \alpha + (0.49 - \alpha)\, e^{-\beta(X-8)} + \epsilon$$

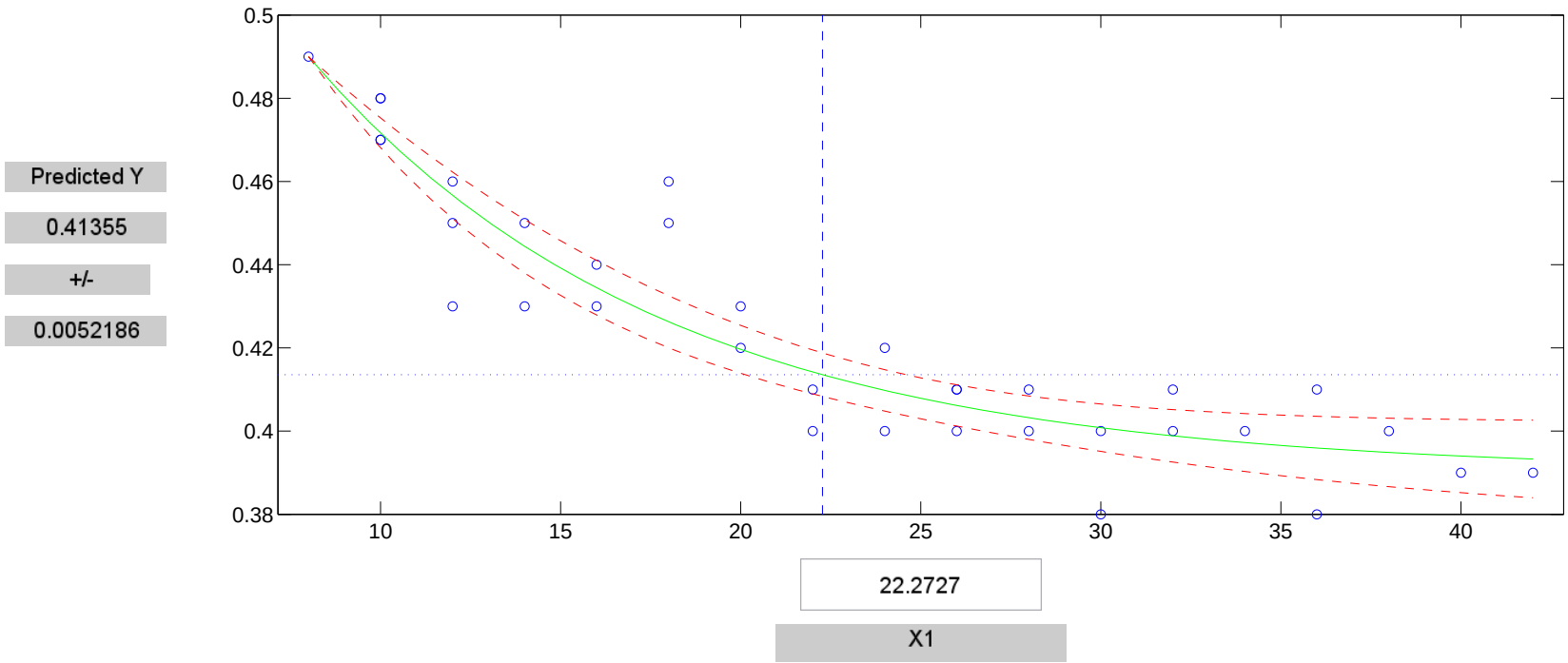
описывает содержание хлора в продукте при $X \geq 8$.

Требуется оценить параметры α и β по данным.

Содержание свободного хлора



Содержание свободного хлора



$\hat{\alpha} = 0.3901, \quad \hat{\beta} = 0.1016, \quad RSS = 0.00500168.$

Что дальше?

Содержание свободного хлора

Чистая ошибка σ^2 — дисперсия ϵ, может быть оценена по повторяющимся наблюдениям.
$Y_{11}, Y_{12}, \ldots, Y_{1n_1}$ — n_1 повторных наблюдений при X_1;
$Y_{21}, Y_{22}, \ldots, Y_{2n_2}$ — n_2 повторных наблюдений при X_2;
...
$Y_{m1}, Y_{m2}, \ldots, Y_{mn_m}$ — n_m повторных наблюдений при X_m.

$$\hat{\sigma}^2 = \frac{S_{pe}}{n_e} = \frac{\sum_{j=1}^{m} \sum_{u=1}^{n} \left(Y_{ju} - \bar{Y}_j\right)^2}{\sum_{j=1}^{m} n_j - m}.$$

В нашем случае $S_{pe} = 0.0024, \quad n_e = 26;$

$$\frac{RSS - S_{pe}}{44 - 2 - n_e} = 0.00016,$$

$$\frac{S_{pe}}{26} = 0.00009.$$

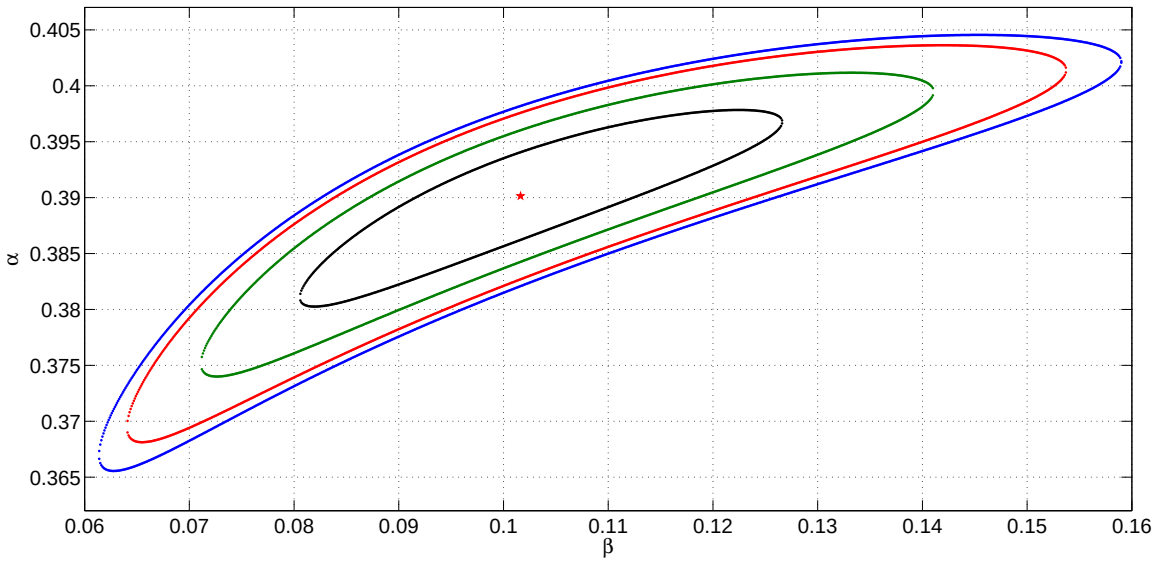
Формально F-критерий неприменим, но можно на него ориентироваться: $F\left(16; 26; 0.95\right) = 2.08, \quad \frac{0.00016}{0.00009} = 1.8$ — можно надеяться, что модель подобрана хорошо.

Содержание свободного хлора

Можно построить приблизительные $100\,(1-q)$-процентные доверительные области для значений параметров α и β, подбирая их из уравнения

$$\sum_{u=1}^{n}\left(Y_u-\hat{Y}_u\right)^2 = RSS\times\left(1+\frac{p}{n-p}F\left(p;n-p;1-q\right)\right),$$

где p — число оцениваемых параметров, n — число точек в массивах X и Y, F — распределение Фишера.



Синий контур — $q=0.005$, красный — $q=0.01$, зелёный — $q=0.05$, чёрный — $q=0.25$.

Химический состав цемента

Woods H, Steinour HH, Starke HR, Effect of composition of Portland cement on heat involved during hardening (1932): измерено тепло, выделенное цементом при отвердевании (калорий на грамм цемента), а также количество в составе цемента трикальциум аллюмината, трикальциум силиката, тетракальциум аллюминиоферрита и дикальциум силиката.

Была подобрана полная линейная модель вида
$Y = \beta_0 + \beta_1 X_1 + \beta_2 X_2 + \beta_3 X_3 + \beta_4 X_4$.
Необходимо проверить гипотезу $H_0 : \beta_1 = \beta_3, \beta_2 = \beta_4$.

Химический состав цемента

Общая линейная гипотеза — гипотеза, содержащая одно или несколько утверждений о линейных комбинациях коэффициентов регрессии.

Примеры:

- модель $E(Y) = \beta_0 + \beta_1 X_1 + \beta_2 X_2$, гипотеза $H_0 \colon \beta_1 = 0, \beta_2 = 0$ — две линейно независимые функции;
- модель $E(Y) = \beta_0 + \beta_1 X_1 + \beta_2 X_2 + \ldots + \beta_k X_k$, гипотеза $H_0 \colon \beta_1 = \beta_2 = \ldots = \beta_k = \beta \Leftrightarrow H_0 \colon \beta_1 - \beta_2 = 0, \beta_2 - \beta_3 = 0, \ldots, \beta_{k-1} - \beta_k = 0$ — $k-1$ линейно независимых функций;
- общий случай: модель $E(Y) = \beta_0 + \beta_1 X_1 + \beta_2 X_2 + \ldots + \beta_k X_k$, гипотеза $H_0 \colon \mathbf{C}\beta = 0$ —q линейно независимых функций, $m - q$ являются линейными комбинациями.

Химический состав цемента

Проверка общей линейной гипотезы:

RSS_{full} — остаточная сумма квадратов исходной модели, $n - p$ степеней свободы;
RSS_{short} — остаточная сумма квадратов модели при справедливости общей линейной гипотезы, $n - p + q$ степеней свободы.

$$\left(\frac{RSS_{short} - RSS_{full}}{q}\right) \Big/ \left(\frac{RSS_{full}}{n-p}\right) \sim F\left(q; n-p\right).$$

Химический состав цемента

Матрица корреляций исходных признаков (Пирсона):

r	X_1	X_2	X_3	X_4
X_1	1.0000	0.2286	**-0.8241**	-0.2454
X_2	0.2286	1.0000	-0.1392	**-0.9730**
X_3	**-0.8241**	-0.1392	1.0000	0.0295
X_4	-0.2454	**-0.9730**	0.0295	1.0000

Полная модель:
$Y = 62.4 + 1.55X_1 + 0.51X_2 + 0.102X_3 - 0.144X_4, \quad RSS = 47.8636.$
Сокращённая модель:
$Y = 241.1 - 1.106(X_1 + X_3) - 2.104(X_2 + X_4), \quad RSS = 2510.1032.$

$$F = \left(\frac{2510.1032 - 47.8636}{2}\right) \Big/ \left(\frac{47.8636}{8}\right) = 205.7714, \quad p \approx 0.$$

Гипотеза H_0 отвергается.

Прикладная статистика
Семинар 8. Регрессионный анализ, часть вторая.

Рябенко Евгений
riabenko.e@gmail.com