

# МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ

СТАТИСТИЧЕСКАЯ ОБРАБОТКА ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНЫХ ДАННЫХ

# РЕГРЕССИОННЫЙ АНАЛИЗ

Регрессионный анализ - это метод установления аналитического выражения стохастической зависимости между исследуемыми признаками. Уравнение регрессии показывает, как в среднем изменяется  $y$  при изменении любого из  $x_i$ , и имеет вид:

$$y = f(x_1, x_2 \dots x_n)$$

где  $y$  - зависимая переменная (она всегда одна);

$x_i$  - независимые переменные (факторы) (их может быть несколько).

Наиболее распространенным методом поиска коэффициентов уравнений регрессии является метод наименьших квадратов, разработанный Лежандром и Гауссом.

Метод заключается в поиске минимума функции

$$F(b_1, b_2 \dots b_n) = \sum_i (\Delta y_i)^2 \xrightarrow{b_1, b_2 \dots b_n} \min$$

# РЕГРЕССИОННЫЙ АНАЛИЗ

где

$$\Delta y_i = y_i - f(x_i, b_1, b_2 \dots b_n)$$

называются *остаточными погрешностями*.

В точке минимума частные производные функции остаточных погрешностей по каждому параметру должны обращаться в нуль, что приводит к системе уравнений

$$\frac{\partial \Phi(b_1, b_2 \dots b_n)}{\partial b_j} = \sum_i (y_i - f(x_i, b_1, b_2 \dots b_n))^2 \frac{\partial f(x_i, b_1, b_2 \dots b_n)}{\partial b_j} = 0$$

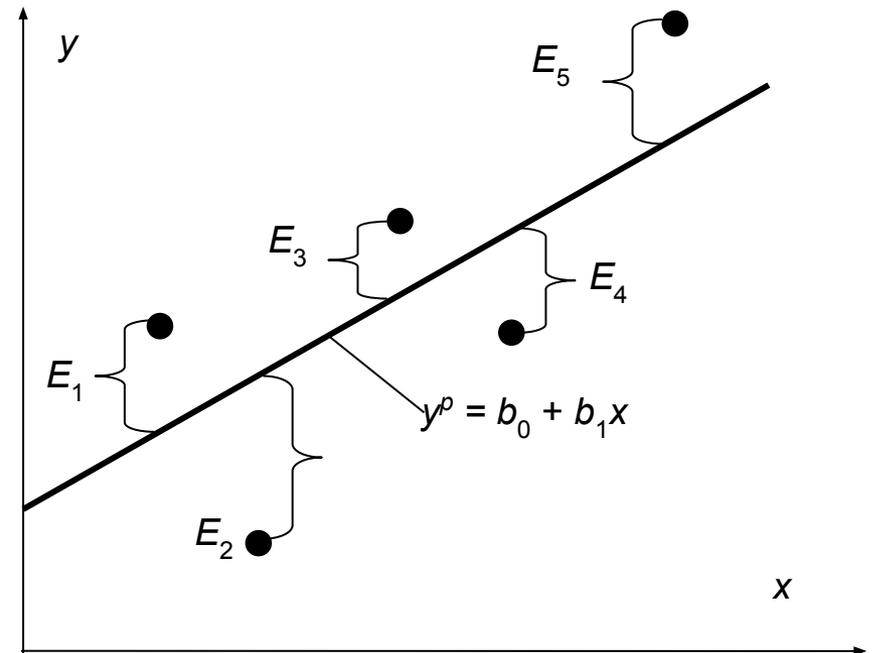
# РЕГРЕССИОННЫЙ АНАЛИЗ

Допустим, что модель представляет собой прямую линию:

$$y^p = b_0 + b_1x$$

где  $y^p$  – величина, предсказываемая регрессионной моделью.

Требуется получить такие значения коэффициентов  $b_0$ ,  $b_1$ , при которых сумма квадратов ошибок является минимальной. Ошибка  $E$  для каждой точки определяется как расстояние по вертикали от этой точки до прямой линии (рис).



# РЕГРЕССИОННЫЙ АНАЛИЗ

Обозначим

$$\begin{cases} y^p_1 = b_0 + b_1 x_1 \\ y^p_2 = b_0 + b_1 x_2 \\ \dots \\ y^p_n = b_0 + b_1 x_n \end{cases}$$

тогда ошибки будут выражаться в виде

$$\begin{cases} E_1 = y^p_1 - y_1 = b_0 + b_1 x_1 - y_1 \\ E_2 = y^p_2 - y_2 = b_0 + b_1 x_2 - y_2 \\ \dots \\ E_n = y^p_n - y_n = b_0 + b_1 x_n - y_n \end{cases}$$

# РЕГРЕССИОННЫЙ АНАЛИЗ

Функция ошибки  $F$  определяется выражением  $F = E_1^2 + E_2^2 \dots E_n^2$  или

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

Для получения таких значений  $b_0$  и  $b_1$ , при которых функция  $F$  является минимальной, применяются обычные методы математического анализа. Условиями минимума являются  $\frac{\partial F}{\partial b_0} = 0$ ,  $\frac{\partial F}{\partial b_1} = 0$ .

Дифференцируя  $F$ , получаем

$$\frac{\partial F}{\partial b_0} = \frac{\partial}{\partial b_0} \sum_{i=1}^n (b_0 + b_1 x_i - y_i)^2 = \sum_{i=1}^n 2(b_0 + b_1 x_i - y_i) = 2(nb_0 + b_1 \sum x_i - \sum y_i) = 0,$$

$$\frac{\partial F}{\partial b_1} = \frac{\partial}{\partial b_1} \sum_{i=1}^n (b_0 + b_1 x_i - y_i)^2 = \sum_{i=1}^n 2x_i (b_0 + b_1 x_i - y_i) = 2b_0 \sum_{i=1}^n x_i + 2b_1 \sum_{i=1}^n x_i^2 - 2 \sum_{i=1}^n y_i x_i = 0,$$

# РЕГРЕССИОННЫЙ АНАЛИЗ

$$\begin{cases} nb_0 + b_1 \sum_i x_i = \sum_i y_i \\ b_0 \sum_i x_i + b_1 \sum_i x_i^2 = \sum_i x_i y_i \end{cases}$$

Решая систему двух линейных алгебраических уравнений, можно получить значения  $b_0$  и  $b_1$ .

# РЕГРЕССИОННЫЙ АНАЛИЗ

$$b_0 = \frac{\sum_{i=1}^n y_i \sum_{i=1}^n x_i^2 - \sum_{i=1}^n x_i \sum_{i=1}^n y_i x_i}{n \sum_{i=1}^n x_i^2 - \left( \sum_{i=1}^n x_i \right)^2} \quad b_1 = \frac{n \sum_{i=1}^n y_i x_i - \sum_{i=1}^n x_i \sum_{i=1}^n y_i}{n \sum_{i=1}^n x_i^2 - \left( \sum_{i=1}^n x_i \right)^2}$$

Обычно мерой ошибки регрессионной модели служит стандартное (среднеквадратичное) отклонение  $S$  (*остаточная дисперсия*), определяемое по формуле

$$S = \sqrt{\frac{\sum_{i=1}^n E_i^2}{n-2}} = \sqrt{\frac{\sum_{i=1}^n (b_0 + b_1 x_i - y_i)^2}{n-2}}.$$

# РЕГРЕССИОННЫЙ АНАЛИЗ

Линеаризация нелинейных зависимостей производится путем соответствующей замены переменных. Примеры такой замены приведены в таблице.

Исходная функция	Замена переменных	Новая функция
$y = Ax^n$	$X = x^n, a = A$	$y = aX$
$y = Ax^n$	$Y = \ln y, X = \ln x,$ $a = n, b = \ln A$	$Y = aX + b$
$y = Ae^{ax}$	$Y = \ln y, b = \ln A$	$Y = ax + b$
$y = ax^n + b$	$X = xn$	$y = aX + b$
$y = ax^n + bx^m$	$Y = yx^{-m}, X = xn^{-m}$	$Y = aX + b$
$y = a \sin x + b \cos x$	$Y = y/\cos x, X = \operatorname{tg} x$	$Y = aX + b$

# РЕГРЕССИОННЫЙ АНАЛИЗ

Проверка соответствия установленной зависимости экспериментальному материалу (*проверка адекватности*) включает в себя три этапа.

1. Ищется остаточная дисперсия, или *дисперсия адекватности*

$$S_{\text{ад}}^2 = \frac{1}{f_{\text{ад}}} \sum_{i=1}^n (y_i^{\text{р}} - y_i)^2$$

$$f_{\text{ад}} = (n - m)$$

где

- количество степеней свободы, равное разности количества опытов  $n$  и количества коэффициентов в уравнении регрессии  $m$ .  
Дисперсия адекватности будет тем меньше, чем лучше совпадают расчетные значения параметра с экспериментальными данными.

# РЕГРЕССИОННЫЙ АНАЛИЗ

2. Определяется дисперсия воспроизводимости, показывающая точность определения параметра в опыте. В случае, если для каждого сочетания уровней факторов проводилось несколько параллельных опытов, ищутся дисперсии  $S_j^2$  для каждой группы опытов, проверяется их однородность и затем определяется средневзвешенная дисперсия  $S_{\bar{y}}^2$ , которая и принимается в качестве дисперсии воспроизводимости  $S_B^2$ .

$$S_{\bar{y}}^2 = \frac{1}{m} \sum_{j=1}^m S_j^2 = S_B^2$$

Если параллельные опыты не проводятся, то в качестве средневзвешенной дисперсии принимается

$$S_B^2 = \left( \frac{\Delta Y_{\text{пред}}}{2} \right)^2$$

где  $\Delta Y_{\text{пред}}$  предельная абсолютная погрешность измерения прибора

# РЕГРЕССИОННЫЙ АНАЛИЗ

3. Проверяется однородность дисперсий адекватности и воспроизводимости по критерию Фишера

$$F = \frac{S_{ад}^2}{S_{в}^2} < F_{\alpha}(f_{ад}, f_{в})$$

где  $f_{в} = \sum_{u=1}^n (n_u^{пар} - 1)$

количество степеней свободы дисперсии воспроизводимости;

$n_u^{пар}$  – количество параллельных опытов для  $u$ -го сочетания уровней факторов.

Если расчетное значение критерия Фишера окажется меньше табличного, то полученное уравнение регрессии адекватно эксперименту с уровнем значимости  $\alpha$ .

# ИСПОЛЬЗУЕМАЯ ЛИТЕРАТУРА

1. Горев М.В. Экспериментальные методы исследований. Как писать статьи и отчеты по лабораторным, практическим и курсовым работам – Красноярск: Сибирский федеральный университет, 2007. – 128 с. Код. Доступа <https://www.twirpx.com/file/816456/>