Regresní a korelační analýza

Regresní analýza – určování funkční závislosti na základě empirických modelů
Korelační analýza – stanovení míry těsnosti (závislosti, korelace) mezi veličinami

V přírodních vědách velmi často známe souvislosti mezi různými jevy (veličinami), které se řídí přírodními zákony a často je umíme popsat nějakými pravidly, nebo dokonce známe i funkční vztahy mezi nimi, např.: Archimedův zákon, Newtonův gravitační zákon, zákony optiky aj..
V přírodních a *technických vědách* často známe modelový systém (funkční vztahy), ale **parametry modelu** určujeme až na základě řízeného experimentu (nastavujeme/měříme příčiny a určujeme/měříme následky). Např.: stanovení indexu lomu pro určitý materiál, určení koeficientu délkové roztažnosti, určení kalibračních hodnot přístrojů či konstanty hranolu aj.
Společenské vědy se vyznačují velmi nepřehlednými vztahy a obtížně definovatelnými a zachytitelnými vlivy. Určování souvislostí na základě experimentů má zde obvykle časově omezenou platnost a takto definované modely lze jen velmi obtížně verifikovat opakovanými pokusy.

Regresní analýza

(určování funkčních závislostí na základě experimentu/měření)

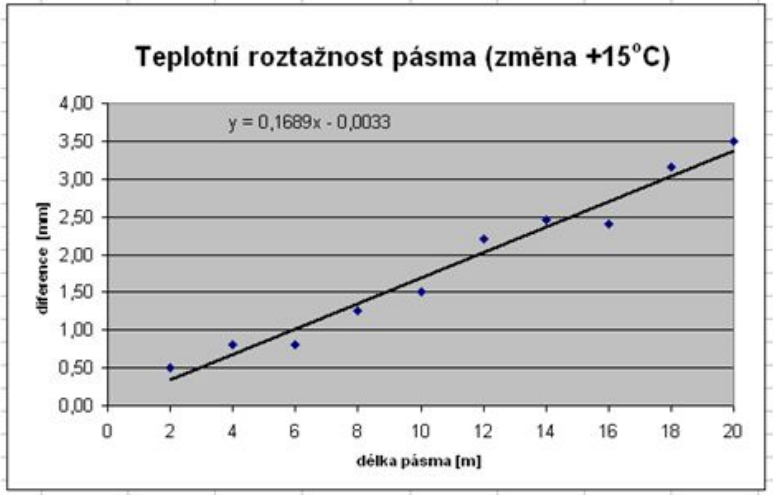
Regrese – systematické změny jedněch veličin při změně veličin jiných a zobrazení těchto změn pomocí matematických funkcí.

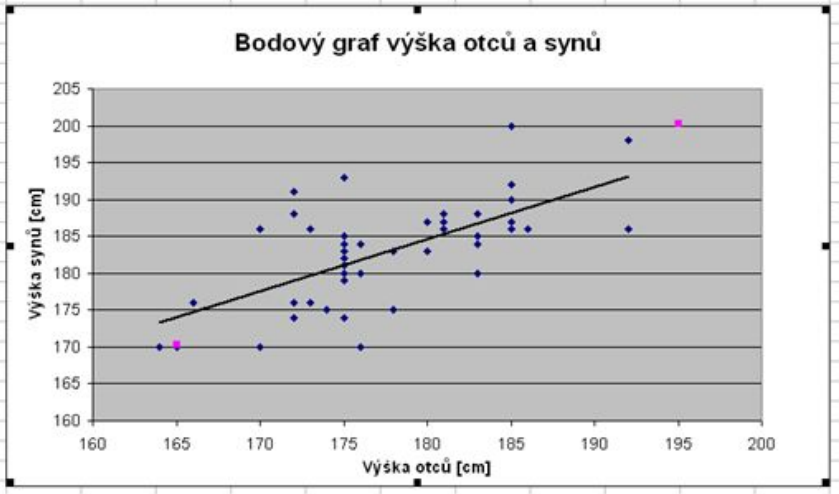
$$y = f(x), \qquad y = f(x_1, x_2, \ldots, x_k)$$

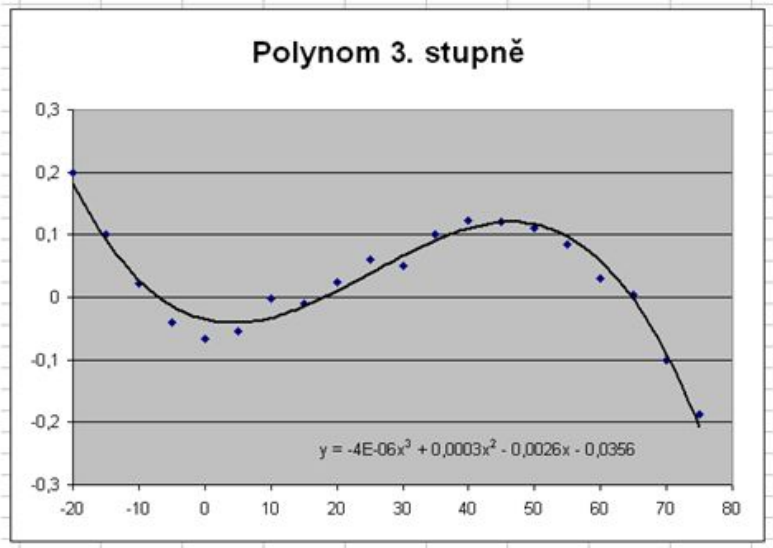
Vysvětlující proměnná/proměnné – též nezávislá proměnná x
Vysvětlovaná proměnná/proměnné – též závislá proměnná y

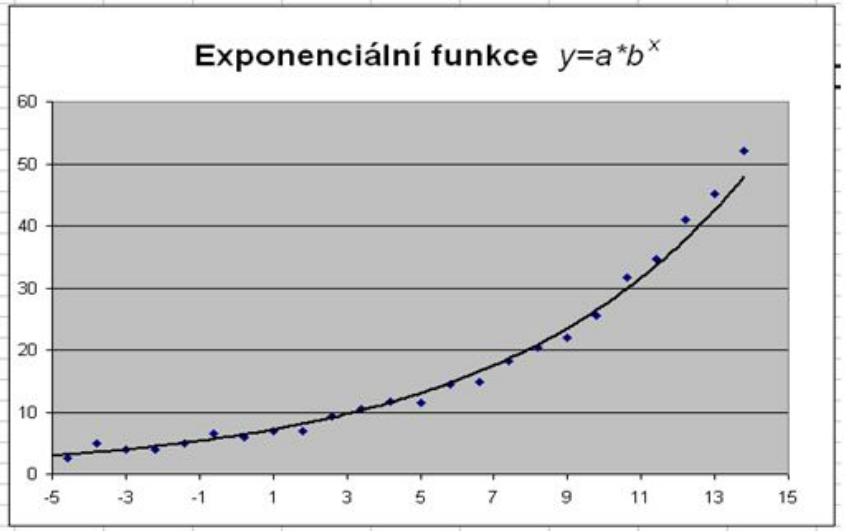
Nejprve definujeme matematický model, tj. stanovíme/určíme **tvar funkce** (lineární, nelineární), počet parametrů a jejich rozsah. Potom na základě výsledků **experimentu/měření** určíme **parametry** použité **funkce**. U těchto experimentů máme často možnost měnit (nastavovat) vysvětlující proměnné x. U některých experimentů/modelů vybíráme/registrujeme hodnoty x a měříme/registrujeme hodnoty y. Tvar funkce a její parametry určujeme až jako výsledek následné analýzy. Časté jsou také modely, ve kterých měřené (tj. zatížené měřickými chybami) jsou jak veličiny vysvětlující x, tak i veličiny vysvětlované y.
Definujeme-li na základě regresní analýzy vhodný matematický model, bylo by velmi žádoucí také stanovit podmínky jeho použitelnosti a ověřit jej dalším nezávislým experimentem (tzv. verifikace modelu).

Ukázky funkcí



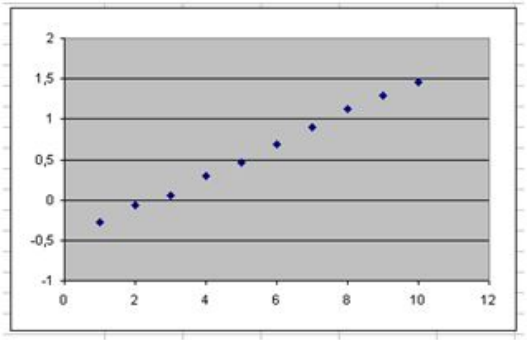




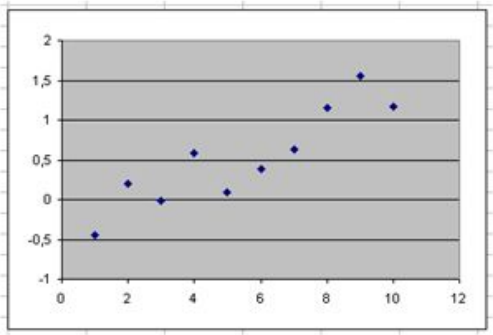


Korelační analýza

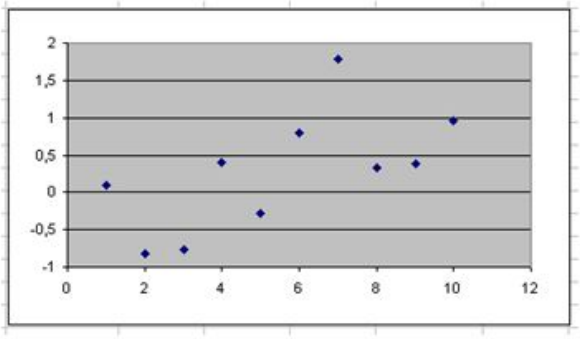
silná závislost



střední závislost

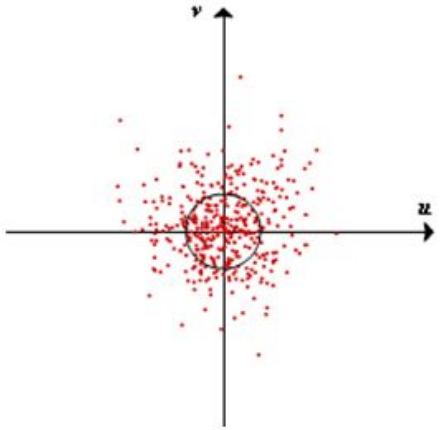


slabá závislost

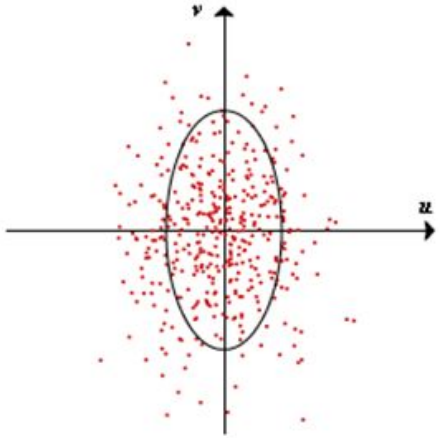


Ve všech třech případech lze určit parametry lineární funkce (budou přibližně stejné), ale s různou mírou těsnosti vztahu (korelace).

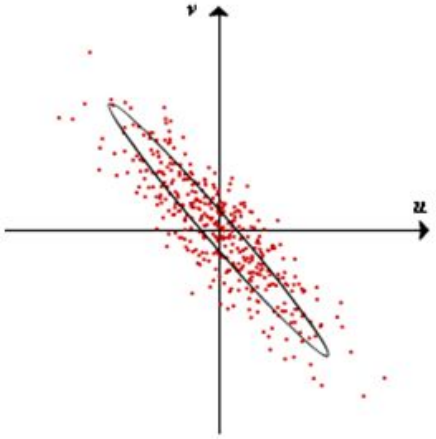
nezávislé veličiny



nezávislé veličiny



závislé veličiny



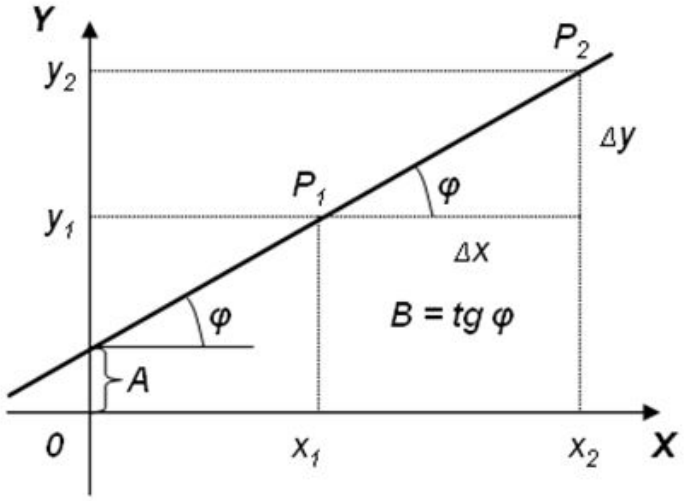
Lineární empirická funkce

(regresní přímka, vyrovnávací přímka)

$$y = A + B\,x \quad , \quad y = \beta_0 + \beta_1\,x$$

Přímka je dána 2 parametry A – konstantní koeficient, B – násobný koeficient (používá se různé označení těchto parametrů β_0, β_1 ; k_1, k_2 ; p, q aj.

Pro určení dvou parametrů A a B musíme znát minimálně dvě dvojice dat, čili dva různé body v rovině x,y. $P_1 \equiv (x_1, y_1)$ a $P_2 \equiv (x_2, y_2)$



parametr A = úsek na ose **Y** (pro $x = 0$)
parametr $B = tg\,\varphi$ (směrnice přímky)

Výpočet parametrů při zadaných 2 bodech:
$B = tg\,\varphi = \Delta y/\Delta x = (y_2 - y_1)/(x_2 - x_1)$
$A = y_1 - B\,x_1 = y_2 - B\,x_2$

V tomto případě přímka prochází právě oběma body.
Pozor při $\Delta x = 0$

Regresní (vyrovnávací) přímka při nadbytečných měřeních

- Chybami budou zatíženy jen hodnoty *y* – hodnoty *x* považujeme za bezchybné (standardní případ
- Chybami budou zatíženy jen hodnoty *x* – hodnoty *y* považujeme za bezchybné
- Chybami budou zatíženy obě veličiny *x* i *y*

V dalším budeme předpokládat, že se jedná o měřické chyby s normálním rozdělením pravděpodobnosti. Měřené veličiny mohou mít také různou přesnost.

n = počet měření (bodů), jedno měření = jeden bod (dvě souřadnice),
k = počet nutných měření = počet určovaných parametrů (u přímky *k*=2, *A* a *B*),
n – *k* = *n* - 2 = počet nadbytečných měření (stupňů volnosti).

Pořadí	1	2	. . .	*n*
Veličina x	x_1	x_2	. . .	x_n
Veličina y	y_1	y_2	. . .	y_n

A) Chybami jsou zatíženy jen hodnoty y_i

Aplikujeme MNČ (Σpvv = min) a sice **Vyrovnání zprostředkujících měření**:

(měření y je funkcí neznámých A, B): $y = f(A, B) = f(\beta_0, \beta_1)$

Zprostředkující funkce

$$\tilde{y}_1 = \tilde{A} + \tilde{B}\tilde{x}_1$$
$$\tilde{y}_2 = \tilde{A} + \tilde{B}\tilde{x}_2$$
$$\vdots$$
$$\tilde{y}_n = \tilde{A} + \tilde{B}\tilde{x}_n$$

Rovnice oprav

$$v_1 = \hat{A} + \hat{B}x_1 - y_1$$
$$v_2 = \hat{A} + \hat{B}x_2 - y_2$$
$$\vdots$$
$$v_n = \hat{A} + \hat{B}x_n - y_n$$

Maticový zápis rovnic oprav

$$\boldsymbol{v} = \boldsymbol{A\beta} - \boldsymbol{l}$$

Vektor měření $\boldsymbol{l}$ Vektor oprav $\boldsymbol{v}$ Matice plánu $\boldsymbol{A}$ Vektor neznámých $\boldsymbol{\beta}$

$$\boldsymbol{l} = \begin{pmatrix} y_1 \\ y_2 \\ \vdots \\ y_n \end{pmatrix}, \qquad \boldsymbol{v} = \begin{pmatrix} v_1 \\ v_2 \\ \vdots \\ v_n \end{pmatrix}, \qquad \underset{(n,2)}{\boldsymbol{A}} = \begin{pmatrix} \frac{\partial y_1}{\partial A} & \frac{\partial y_1}{\partial B} \\ \frac{\partial y_2}{\partial A} & \frac{\partial y_2}{\partial B} \\ \vdots & \vdots \\ \frac{\partial y_n}{\partial A} & \frac{\partial y_n}{\partial B} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & x_1 \\ 1 & x_2 \\ \vdots & \vdots \\ 1 & x_n \end{pmatrix}, \qquad \boldsymbol{\beta} = \begin{pmatrix} \hat{A} \\ \hat{B} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \beta_0 \\ \beta_1 \end{pmatrix}.$$

Normální rovnice a jejich řešení

Normální rovnice maticově

$$\boldsymbol{A}^T\boldsymbol{A}\,\boldsymbol{\beta}-\boldsymbol{A}^T\boldsymbol{l}=\boldsymbol{0}$$

$$\boldsymbol{N}\,\boldsymbol{\beta}-\boldsymbol{n}=\boldsymbol{0}$$

$$\begin{pmatrix} n & \sum x \\ \sum x & \sum x^2 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} \hat{A} \\ \hat{B} \end{pmatrix}-\begin{pmatrix} \sum y \\ \sum xy \end{pmatrix}=\begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix}$$

$$\boldsymbol{N}=\begin{pmatrix} n & \sum x \\ \sum x & \sum x^2 \end{pmatrix},\quad \boldsymbol{\beta}=\begin{pmatrix} \hat{A} \\ \hat{B} \end{pmatrix},\quad \boldsymbol{n}=\begin{pmatrix} \sum y \\ \sum xy \end{pmatrix},\quad \boldsymbol{0}=\begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix}$$

Řešení normálních rovnic

$$\boldsymbol{\beta}=\boldsymbol{N}^{-1}\boldsymbol{n}$$

$$\begin{pmatrix} \hat{A} \\ \hat{B} \end{pmatrix}=\begin{pmatrix} \dfrac{\sum x^2}{\det N} & -\dfrac{\sum x}{\det N} \\ -\dfrac{\sum x}{\det N} & \dfrac{n}{\det N} \end{pmatrix}\begin{pmatrix} \sum y \\ \sum xy \end{pmatrix}$$

$$\det N=n\sum x^2-\left(\sum x\right)^2$$

Výpočet určovaných parametrů klasicky

$$\hat{A}=\frac{\sum x^2\sum y-\sum x\sum xy}{n\sum x^2-\left(\sum x\right)^2}$$

$$\hat{B}=\frac{-\sum x\sum y+n\sum xy}{n\sum x^2-\left(\sum x\right)^2}$$

Vážená varianta určení regresní přímky

Zavedeme matici vah

$$\boldsymbol{P} = \begin{pmatrix} p_1 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & p_2 & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & p_n \end{pmatrix}, \quad kde \quad p_i = \frac{\sigma_0^{\,2}}{\sigma_i^{\,2}}$$

Řešení normálních rovnic

$$\boldsymbol{\beta} = \boldsymbol{N}^{-1}\,\boldsymbol{n}$$

$$\begin{pmatrix} \hat{A} \\ \hat{B} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \dfrac{\sum px^2}{\det N} & -\dfrac{\sum px}{\det N} \\ -\dfrac{\sum px}{\det N} & \dfrac{\sum p}{\det N} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \sum py \\ \sum pxy \end{pmatrix}$$

$$\det N = \sum p \sum px^2 - \left(\sum px\right)^2$$

Normální rovnice

$$\boldsymbol{A}^T \boldsymbol{P}\,\boldsymbol{A}\,\boldsymbol{\beta} - \boldsymbol{A}^T \boldsymbol{P}\,\boldsymbol{l} = \boldsymbol{0}$$

$$\boldsymbol{N}\,\boldsymbol{\beta} - \boldsymbol{n} = \boldsymbol{0}$$

$$\begin{pmatrix} \sum p & \sum px \\ \sum px & \sum px^2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \hat{A} \\ \hat{B} \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} \sum py \\ \sum pxy \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix}$$

Klasický postup výpočtu neznámých

$$\hat{A} = \frac{\sum px^2 \sum py - \sum px \sum pxy}{\sum p \sum px^2 - \left(\sum px\right)^2}$$

$$\hat{B} = \frac{-\sum px \sum py + \sum p \sum pxy}{\sum p \sum px^2 - \left(\sum px\right)^2}$$

Charakteristiky přesnosti

1. Výpočet oprav z rovnic oprav

$$v_i = \hat{A} + \hat{B}x_i - y_i$$

2. Výpočet vyrovnaných měření

$$\hat{y}_i = \hat{A} + \hat{B}x_i = y_i + v_i$$

3. Aposteriorní jednotková variance

$$\hat{\sigma}_0^{\,2} = \frac{\boldsymbol{v}^T \boldsymbol{P} \boldsymbol{v}}{n-2} = \frac{\sum pv^2}{n-2}$$

4. Aposteriorní směrodatné odchylky měřených veličin

$$\sigma_i = \hat{\sigma}_0 \sqrt{q_i}$$

5. Směrodatné odchylky neznámých

$$\boldsymbol{Q} = N^{-1} = \begin{pmatrix} Q_{\hat{A}\hat{A}} & Q_{\hat{A}\hat{B}} \\ Q_{\hat{A}\hat{B}} & Q_{\hat{B}\hat{B}} \end{pmatrix}, \quad \sigma_{\hat{A}} = \hat{\sigma}_0 \sqrt{Q_{\hat{A}\hat{A}}}\,, \quad \sigma_{\hat{B}} = \hat{\sigma}_0 \sqrt{Q_{\hat{B}\hat{B}}}$$

Pozn: V případě menšího počtu nadbytečných měření použijeme apriorní varianci či apriorní váhy

Použití přibližných hodnot A^0 , B^0

V mnoha případech je vhodné volit přibližné hodnoty neznámých

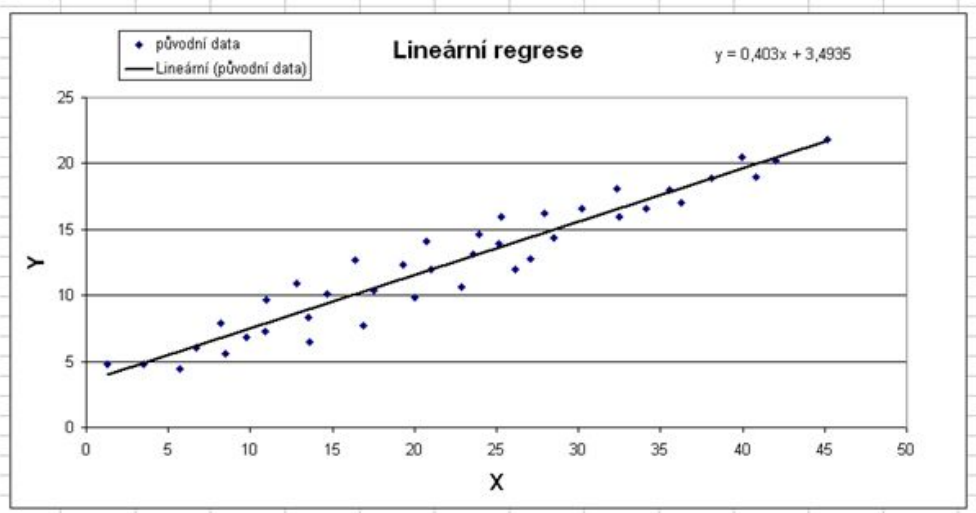
$$v_i = \left(A^0 + \delta A\right) + \left(B^0 + \delta B\right)x_i - y_i$$
$$v_i = \delta A + \delta B\, x_i + \left(A^0 + B^0 x_i - y_i\right)$$
$$v_i = \delta A + \delta B\, x_i + y_i'$$

$$\boldsymbol{l}' = \begin{pmatrix} y_1' \\ y_2' \\ \vdots \\ y_n' \end{pmatrix}, \quad \boldsymbol{\beta} = \begin{pmatrix} \hat{A} \\ \hat{B} \end{pmatrix} = \boldsymbol{\beta}^0 + \delta\boldsymbol{\beta} = \begin{pmatrix} A^0 \\ B^0 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} \delta A \\ \delta B \end{pmatrix}.$$

Rovnice oprav	Normální rovnice	Řešení normálních rovnic
$\boldsymbol{v} = \boldsymbol{A}\delta\boldsymbol{\beta} + \boldsymbol{l}'$	$\boldsymbol{A}^T\boldsymbol{A}\,\delta\boldsymbol{\beta} + \boldsymbol{A}^T\boldsymbol{l}' = \boldsymbol{0}$	$\delta\boldsymbol{\beta} = \boldsymbol{N}^{-1}\boldsymbol{n}'$

Další postup je obdobný i pro váženou variantu

Zavedení redukovaných souřadnic (redukce na těžiště)

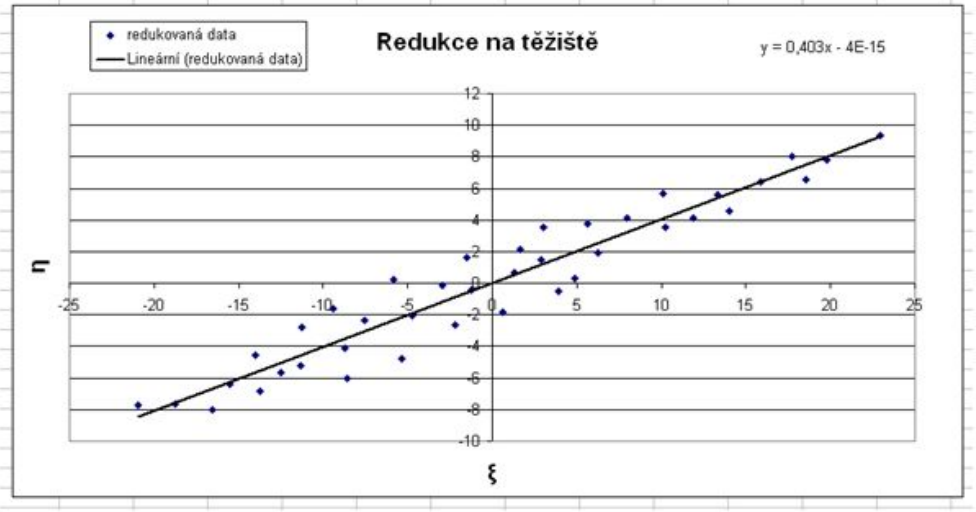


$$\xi_i = x_i - x_T\,, \quad \eta_i = y_i - y_T\,,$$

$$x_T = \frac{\sum x}{n}, \quad y_T = \frac{\sum y}{n}.$$

$$v_i = \hat{B}\xi_i - \eta_i\,,$$

$$\sum \xi^2\, \hat{B} - \sum \xi\eta = 0.$$



$$\hat{B} = \frac{\sum \xi\eta}{\sum \xi^2}$$

$$y_T = \hat{A} + \hat{B}x_T$$

$$\hat{A} = y_T - \hat{B}x_T$$

$$\hat{\sigma}_0^{\,2} = \frac{\sum v^2}{n-2}$$

B) Chybami jsou zatíženy jen hodnoty x_i

Tento případ není obvykle uvažován, protože regresní analýza řeší vztah závislé veličiny (y) na nezávislé veličině (x). Kterou veličinu prohlásíme za závislou (zatíženou chybami) a kterou za nezávislou (bezchybnou) je jen otázka případné záměny proměnných. Samozřejmě obdržíme jiné parametry přímky.

Provedeme tedy záměnu proměnných, rovnice přímky bude:

$$x_i = A^* + B^* y_i$$

Parametr A^* je nyní úsek na ose x (souřadnice x_i pro $y_i = 0$) a parametr B^* je směrnice přímky (tangenta úhlu tentokrát vzhledem k ose y).

Chceme-li vyjádřit tuto přímku ve tvaru $y_i = A' + B' x_i$,musíme provést transformaci koeficientů (vyjádřit z původní rovnice veličinu y jako funkci x)

C) Chybami jsou zatíženy hodnoty x_i , y_i

Tento případ je běžný v geodetických aplikacích, kde jsou obě souřadnice zatíženy měřickými chybami. Parametry A´´, B´´ určíme podle uvedených vztahů z redukovaných souřadnic na těžiště *T*. Minimalizuje nyní součet čtverců kolmých vzdáleností vzdálenosti *d* , tj. $\Sigma d^2 = \Sigma(v_x^2 + v_y^2) = \min$.

$$\xi_i = x_i - x_T\,, \quad \eta_i = y_i - y_T\,,$$

$$x_T = \frac{\sum x}{n}, \quad y_T = \frac{\sum y}{n}.$$

$$tg\,2\varphi = \frac{2\sum \xi\eta}{(\sum \xi^2) - (\sum \eta^2)},$$

$$B'' = tg\,\varphi$$

$$A'' = y_T - B''\,x_T$$