首都师范大学
数学科学学院
统计学系
Department of Statistics

C -- 题

颜色与物质浓度辨识

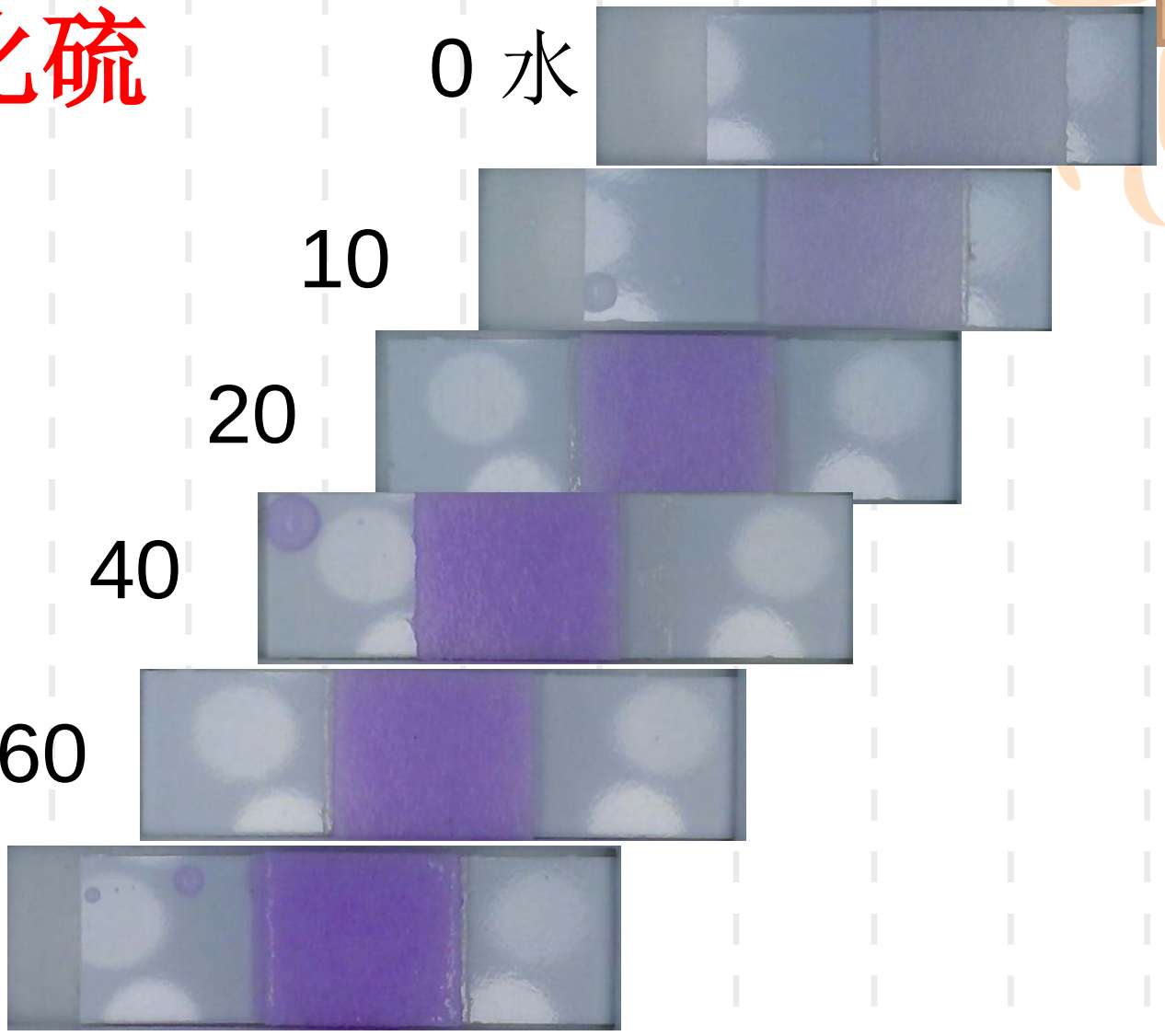
崔 恒 建

首都师范大学

昆明，2017.11.25

- 甲醛测量，试纸读颜色
- 随着照相技术和颜色分辨率的提高，希望建立颜色读数和物质浓度的数量关系
- 只要输入照片中颜色读数就能够获得待测物质浓度

二氧化硫



- 试根据附件所提供的有关颜色读数和物质浓度数据，请你完成下列问题：
- 1. 附件Data1.xls中分别给出了5种物质的在不同浓度下的颜色读数，讨论从这5组数据能否确定颜色读数和物质浓度之间的关系，并给出一些准则来评价这5组数据的优劣。
- 2. 对附件Data2.xls中所给数据，建立颜色读数和物质浓度的数学模型，并给出模型的误差分析。
- 3. 探讨数据量和颜色维度对模型的影响。

- 希望用颜色预测浓度构建模型：

$$Y \sim f(R, G, B, H, S)$$

这里 f 一般未知，根据机理，可对每个变量单调。

首都师范大学 数学科学学院 统计学系 Department of Statistics

思路：

- 用 Data1 探索建模方法（数据质量评估）
- 用 Data2 验证上述建模方法
- 影响建模的变量选择与分析

1. 建模过程就是选择 f 的过程。

通常 f 选择的类型（可用于预测）：

参数或半参数函数形式，如：

$$f = f_0(b_0 + b_1R + b_2G + b_3B + b_4S + b_5H)$$

f_0 **单调，S型。**

- 线性模型（大多数学生用）
- 线性模型的单调变换（建议）

$$Y \sim f_0(b_0 + b_1 R + b_2 G + b_3 B + b_4 S + b_5 H)$$

广义线性模型（f_0形式已知，
如 logistic 变换等）

2. 数据质量评估（新）：

数据质量是建模的基础，本题主要考虑基于模型的

误差分析与评判：

残差图、MSE、MSCV、R^2

异常或离群点识别：

3sigma准则、Boxplot

3. 样本大小和颜色维数对模型的影响。

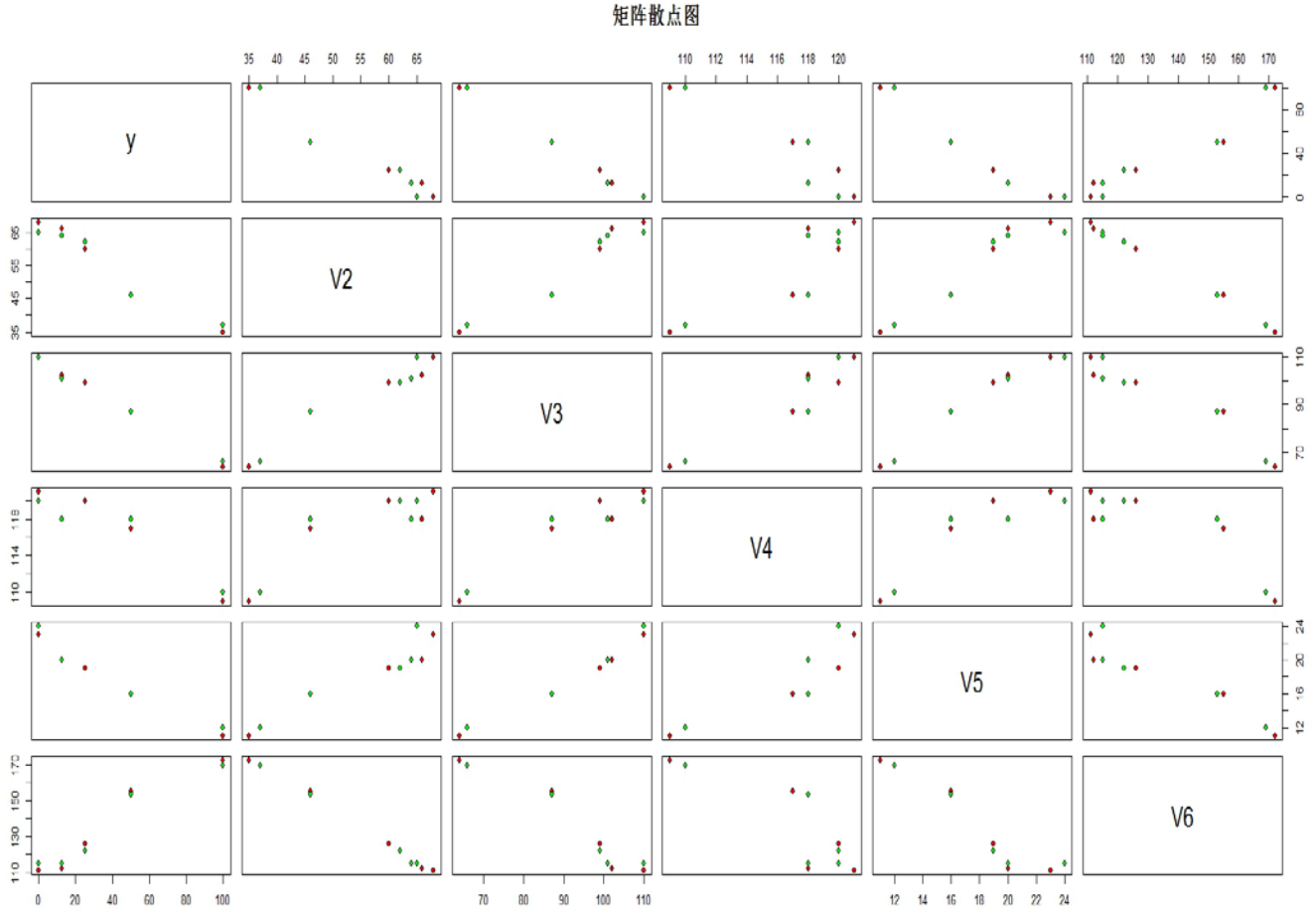
逐步回归，变量选择

误差分析与比较

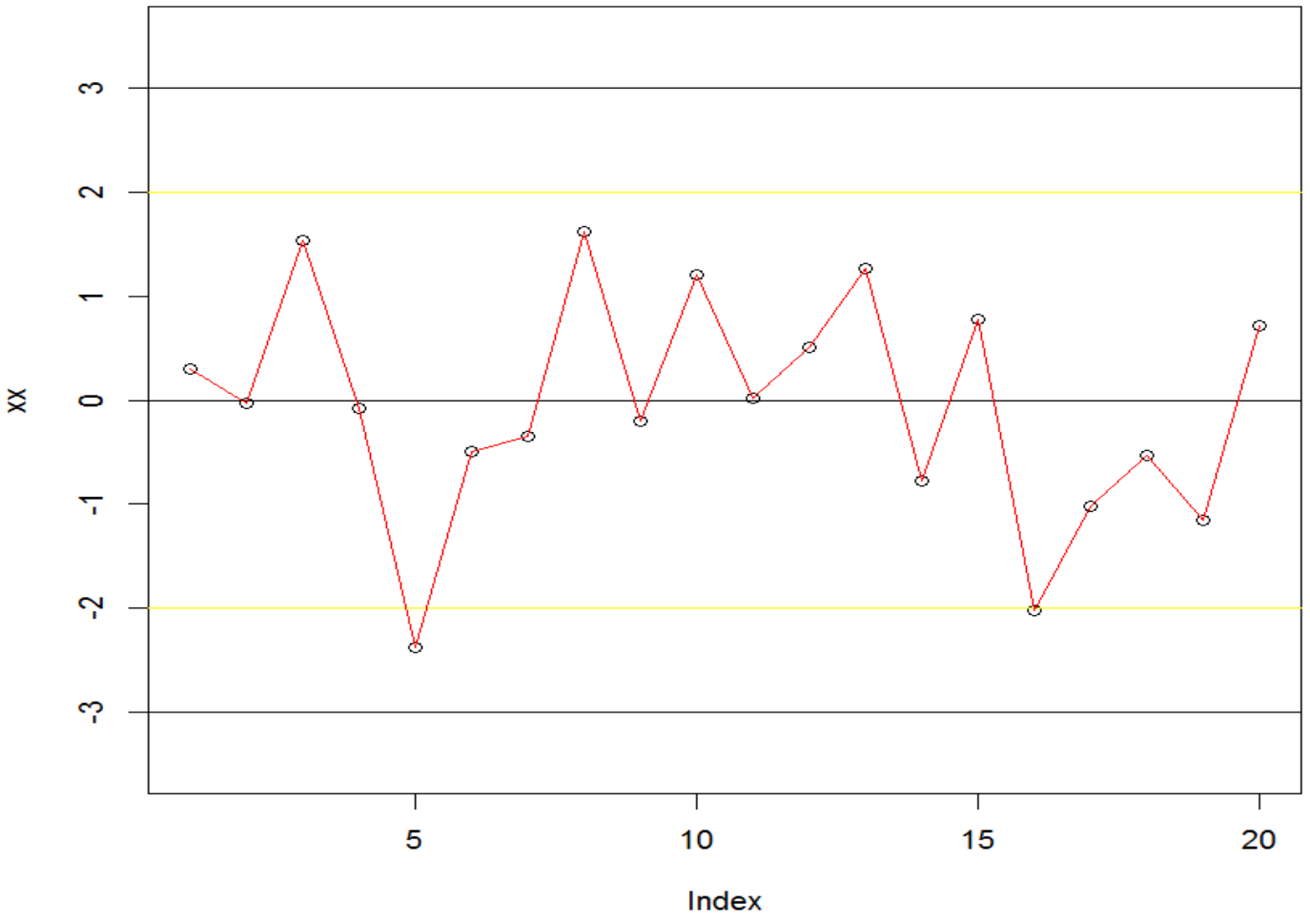
4. 使用R、Matlab语言

基本数据可视化

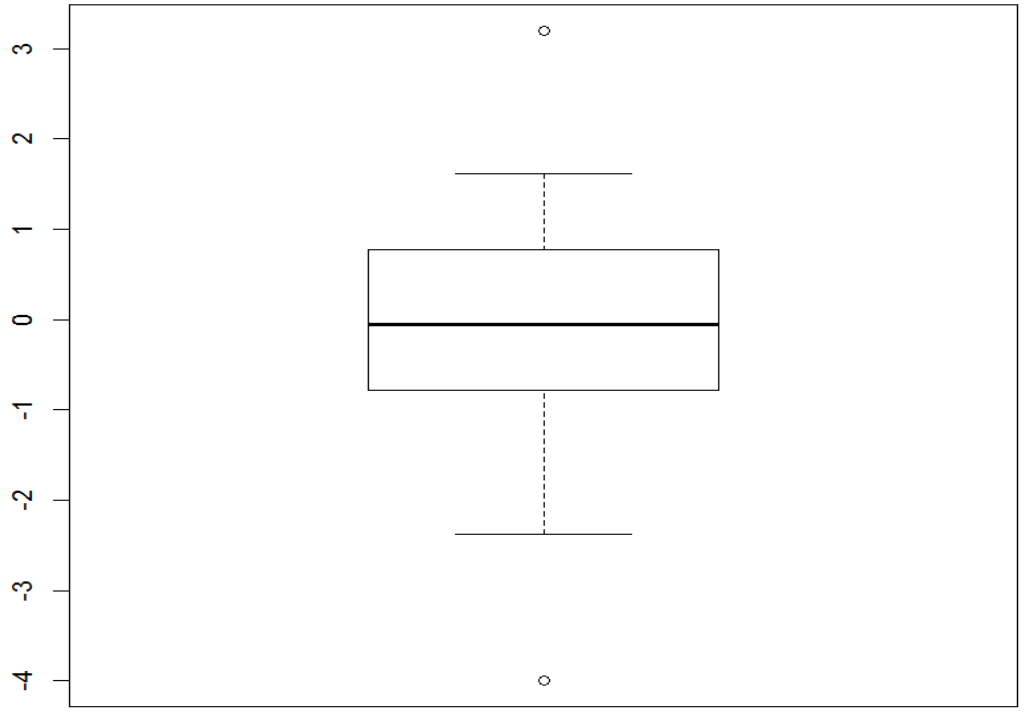
1. 矩阵散点图



2. 3-sigma控制图：



3. 箱线图（异常点识别）



4. 其他可视化方法

二、线性回归模型

$$Y = b_0 + b_1 R + b_2 G + b_3 B + b_4 S + b_5 H + \varepsilon$$

$$= X^T b + \varepsilon$$

其中：$X^T = (1, R, G, B, S, H)$

$$E(\varepsilon) = 0,$$

$$Var(\varepsilon) = \sigma^2$$

$$Y_i = X_i^T b + \varepsilon_i (1 \le i \le n)$$

- 最小二乘估计：

$$\hat{b} = (\mathbf{X}^T\mathbf{X})^{-1}\mathbf{X}^T\mathbf{Y}$$

$$E(\hat{b}) = b, \quad Cov(\hat{b}) = (\mathbf{X}^T\mathbf{X})^{-1}\sigma^2$$

- 残差：　　$r_i = y_i - X_i^T\hat{b}$

- T-化残差：　$r_i^* = r_i / s(r)$

- 复相关系数（决定系数）：

$$R^2 = \frac{SSR}{SST} = 1 - \frac{SSE}{SST}$$

- 调整的复相关系数：

$$R^{*2} = 1 - \frac{SSE/(n-p-1)}{SST/(n-1)}$$

- MSE：$MSE = \frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n} r_i^2$

- MSCV（平均平方交叉核实预测误差）：

$$MSCV = \frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n}\left(y_i - X_i^T \hat{b}_{(-i)}\right)^2$$

- 显著性检验：$H_0 : b_j = 0, \quad H_1 : b_j \neq 0$

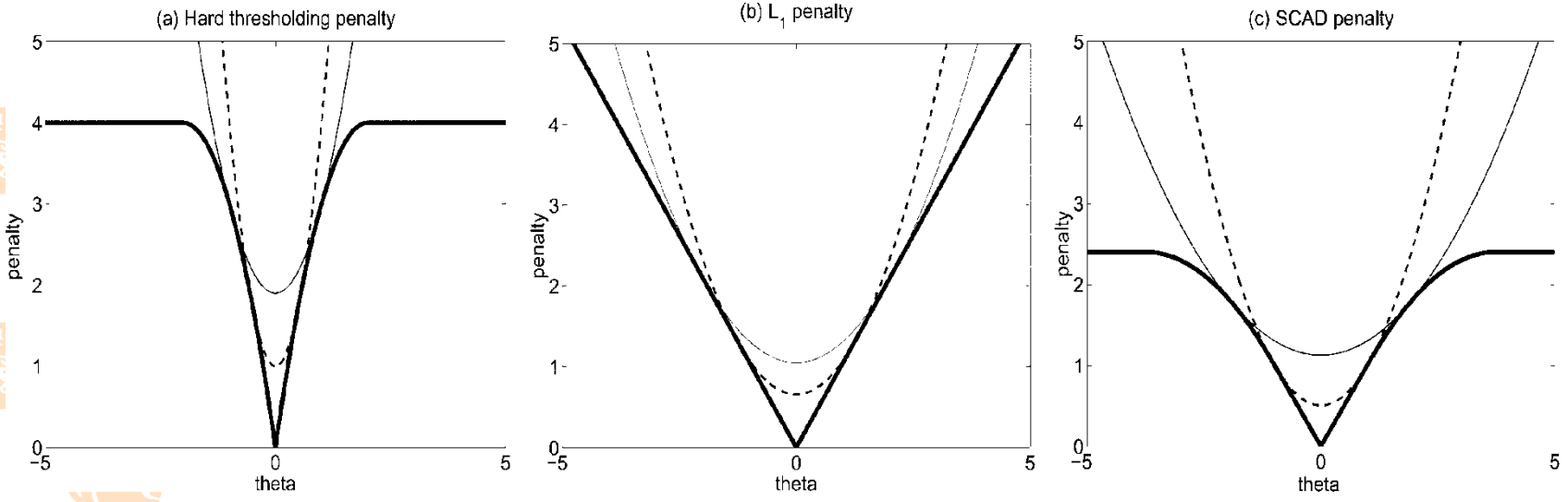
$$T = \frac{(\mathbf{X}^{\mathbf{T}}\mathbf{X})_i^{1/2}\hat{b}_i}{\sqrt{nMSE/(n-p-1)}} \approx t(n-p-1)$$

近似t检验。

- **变量选择**

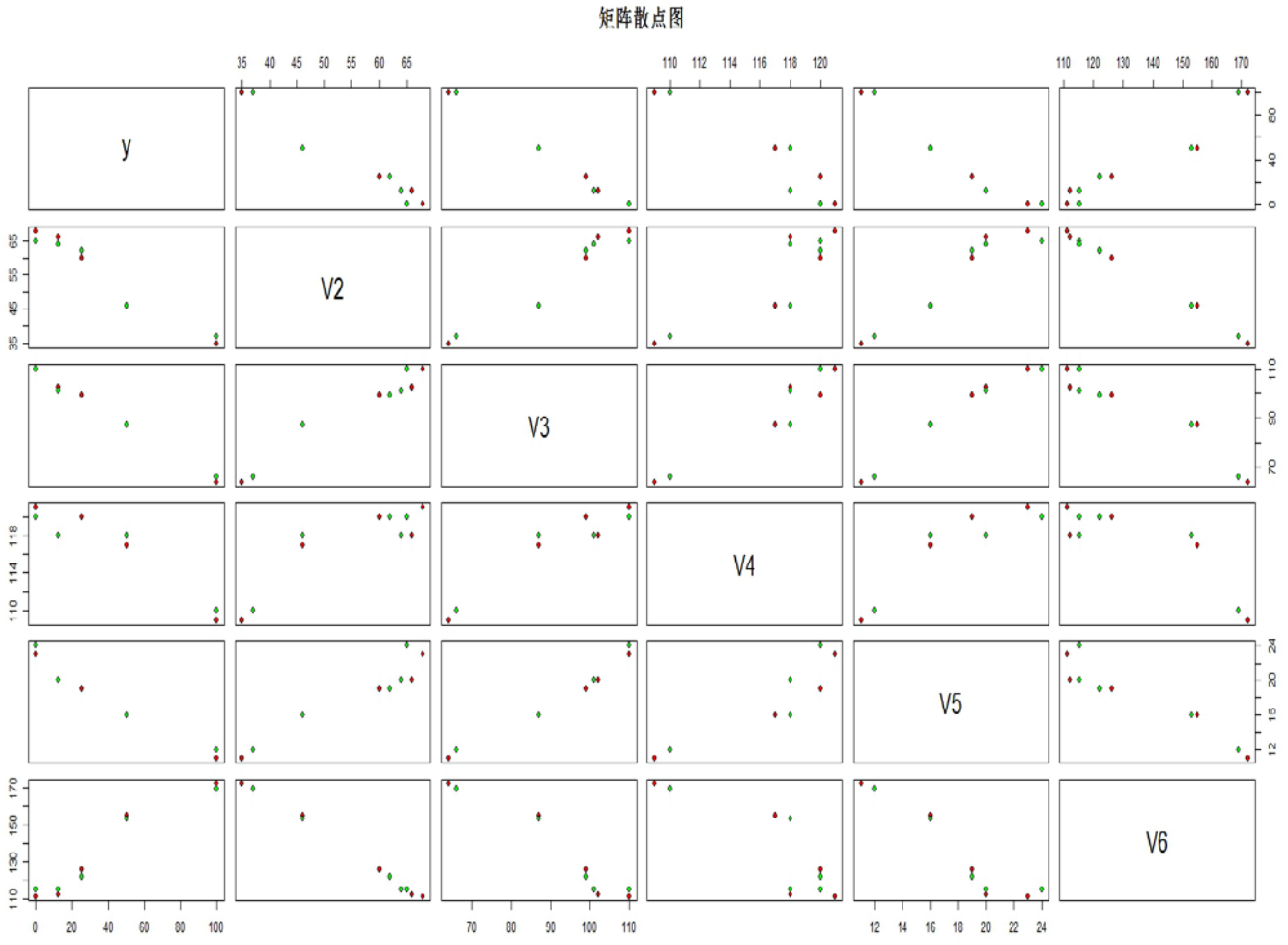
$$\frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n}\left(y_i - X_i^T b\right)^2 + \sum_{j=1}^{p} P_\lambda\left(\left|b_j\right|\right) = \min$$

- $P_\lambda(\cdot)$是惩罚函数：



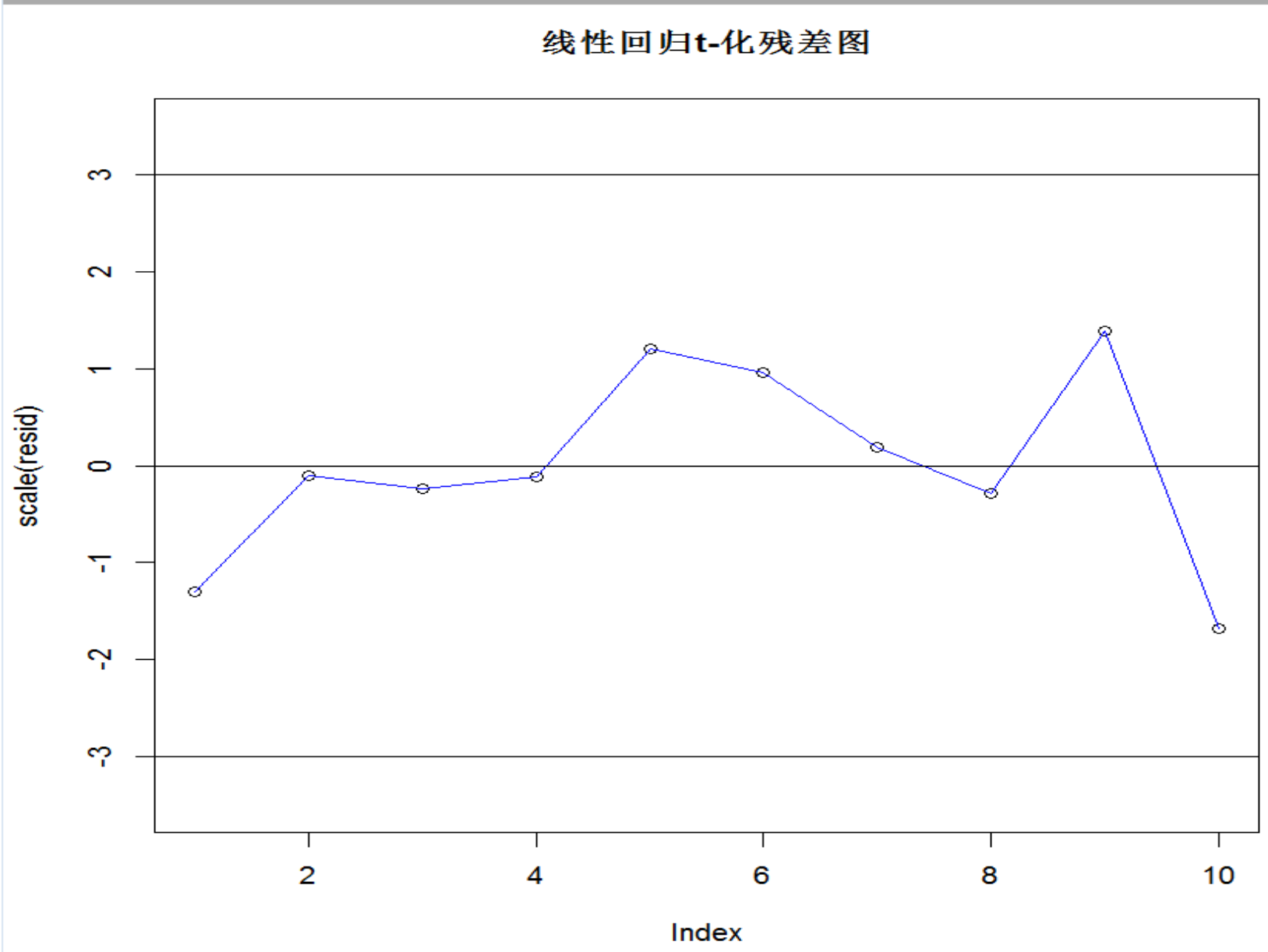
例如：　　组胺（n=10）

一、矩阵散点图

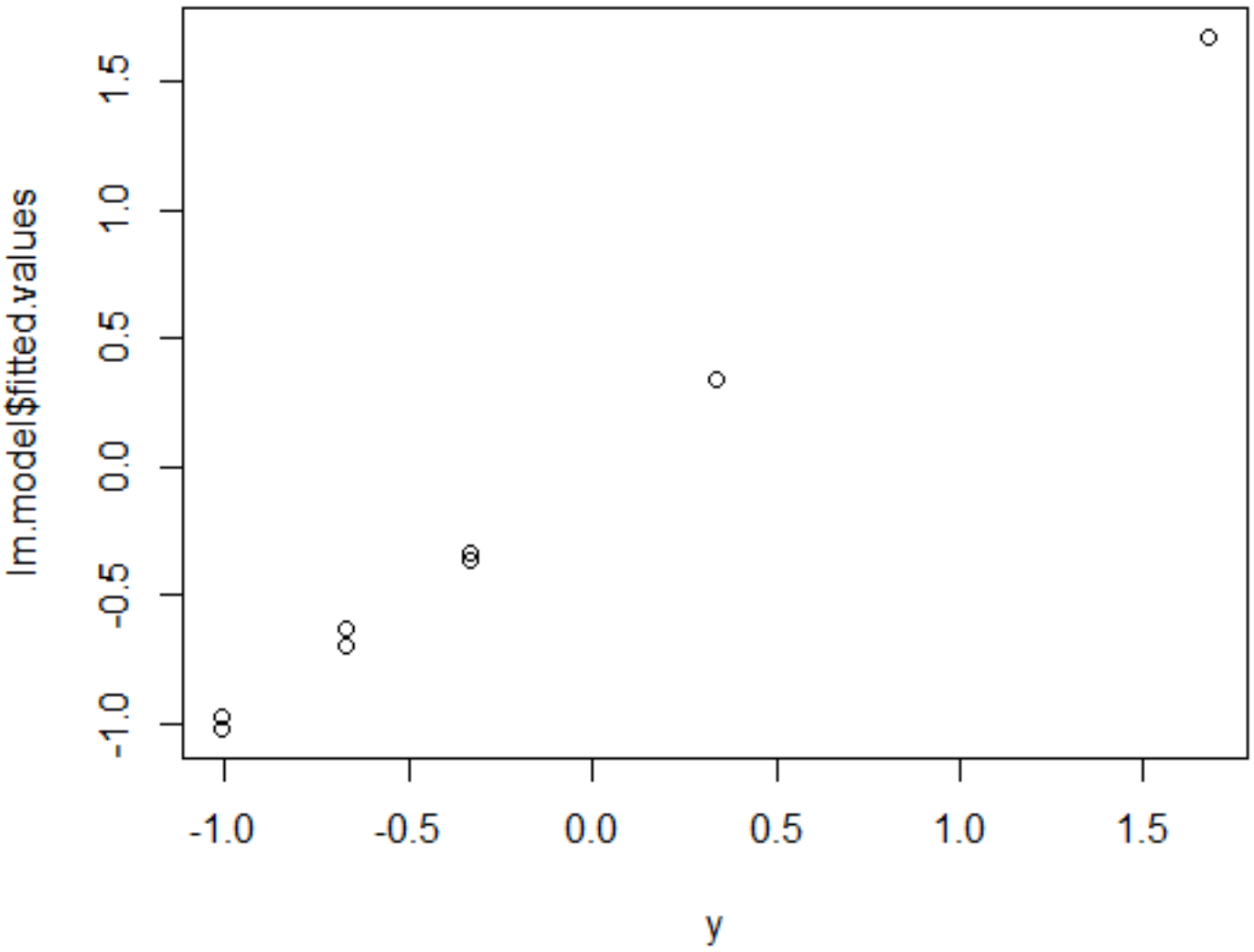


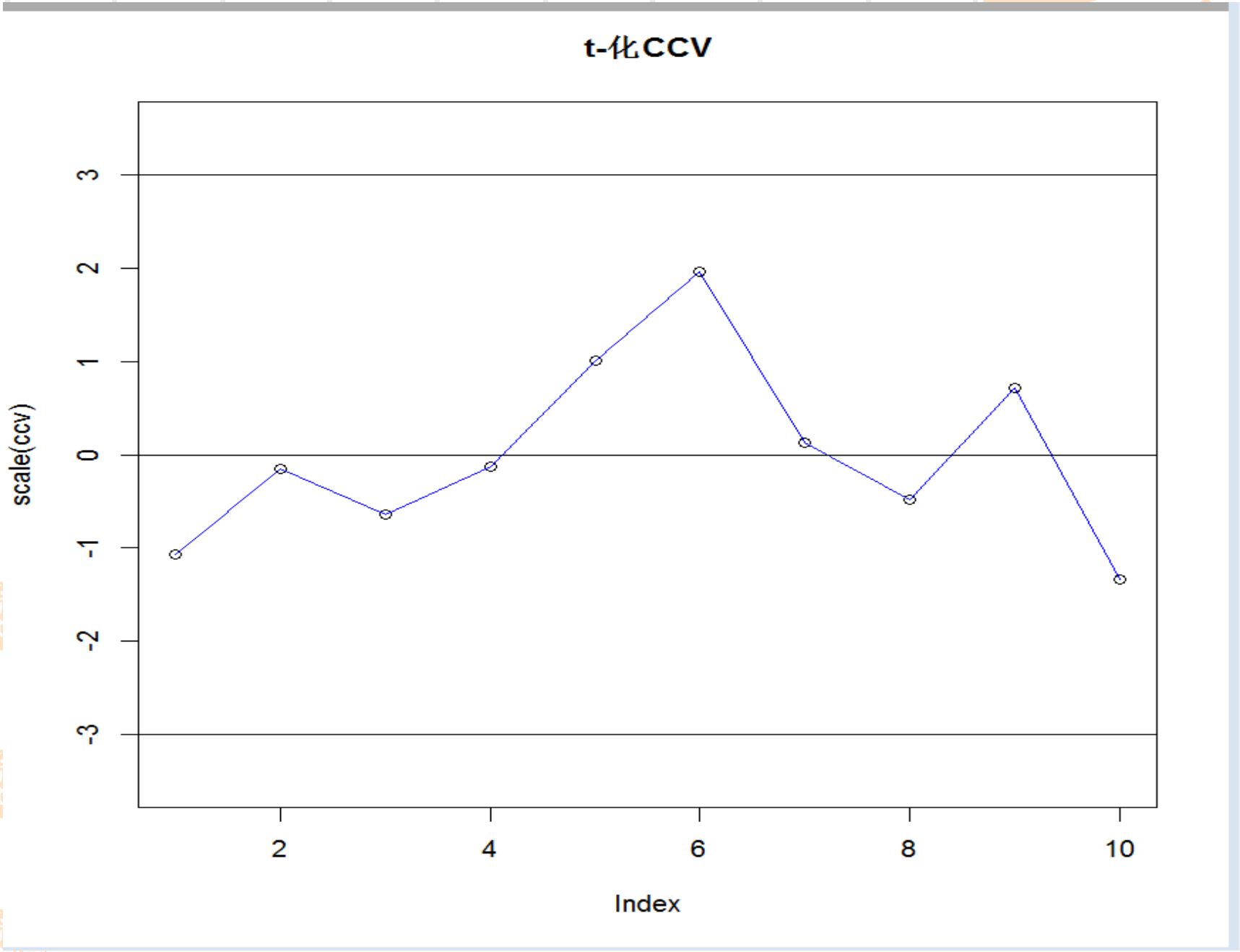
二、线性回归模型：

```
Call:
lm(formula = y ~ x[, 1] + x[, 2] + x[, 3] + x[, 4] + x[, 5])

Residuals:
      1       2       3       4       5       6       7       8       9
-0.99313 -0.08324 -0.18405 -0.08707  0.92020  0.73337  0.14180 -0.22235  1.05651
      10
-1.28202

Coefficients:
             Estimate Std. Error t value Pr(>|t|)
(Intercept) -212.7650    84.1714  -2.528 0.064819 .
x[, 1]         2.8548     0.9089   3.141 0.034819 *
x[, 2]        -4.4873     0.4470 -10.039 0.000554 ***
x[, 3]         2.3213     0.6533   3.553 0.023733 *
x[, 4]         4.5932     0.8663   5.302 0.006078 **
x[, 5]         1.1415     0.4298   2.656 0.056641 .
---
Signif. codes:  0 '***' 0.001 '**' 0.01 '*' 0.05 '.' 0.1 ' ' 1

Residual standard error: 1.145 on 4 degrees of freedom
Multiple R-squared:  0.9996,    Adjusted R-squared:  0.9991
F-statistic:  1904 on 5 and 4 DF,  p-value: 7.71e-07
```


线性回归t-化残差图
scale(resid)
3
2
1
0
-1
-2
-3
2
4
6
8
10
Index

线性回归真实值与预测值之间的关系




t-化CCV
scale(ccv)
3
2
1
0
-1
-2
-3
2
4
6
8
10
Index

1. MSE和MSCV(标准化)

   MSE： 0.525 （0.0004）

   MSCV: 3.511 （0.0025）

2. 3或 2sigma 点

   2sigma: 无，　　3sigma： 无

三、Logistic回归模型

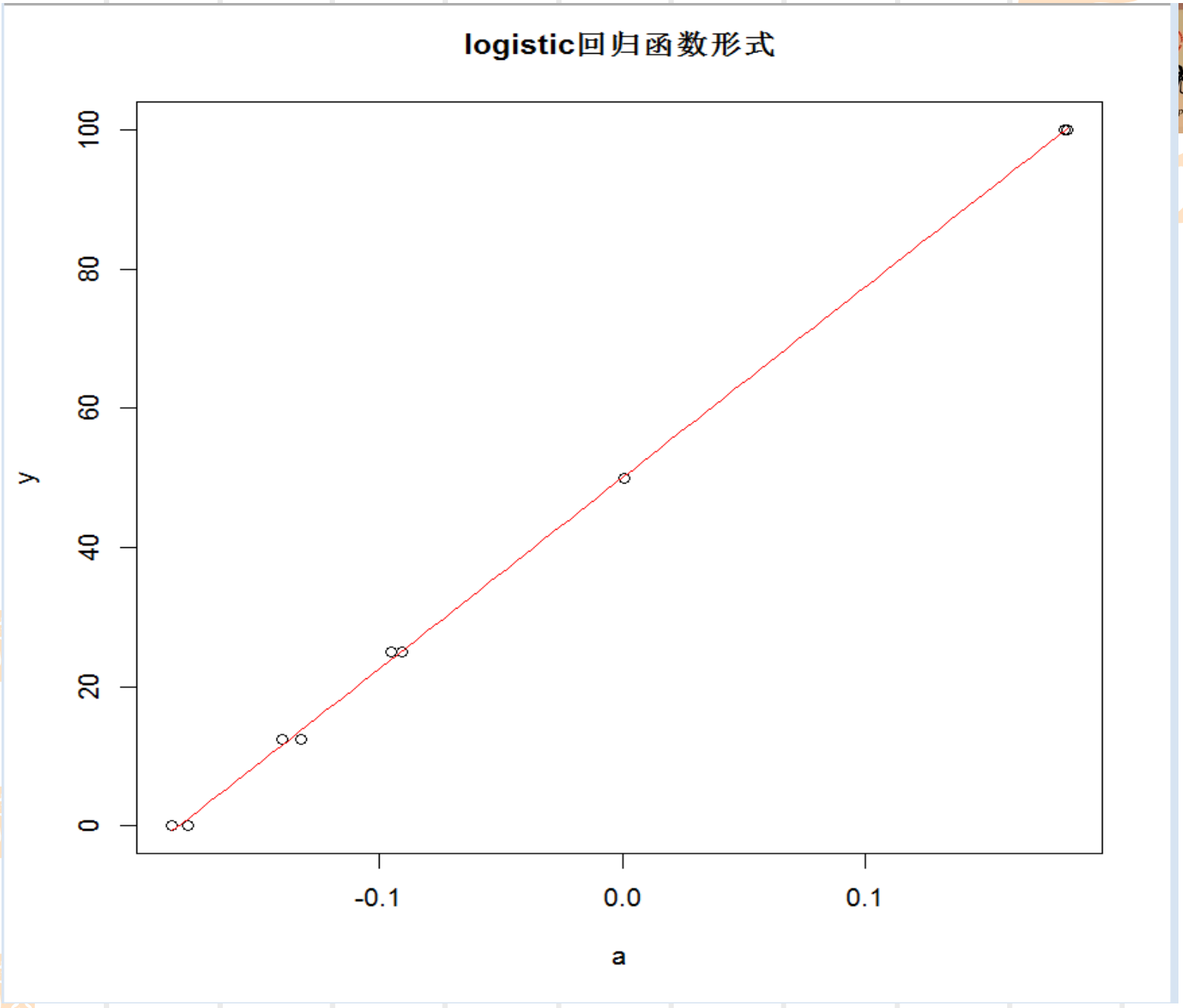
- 机理：取

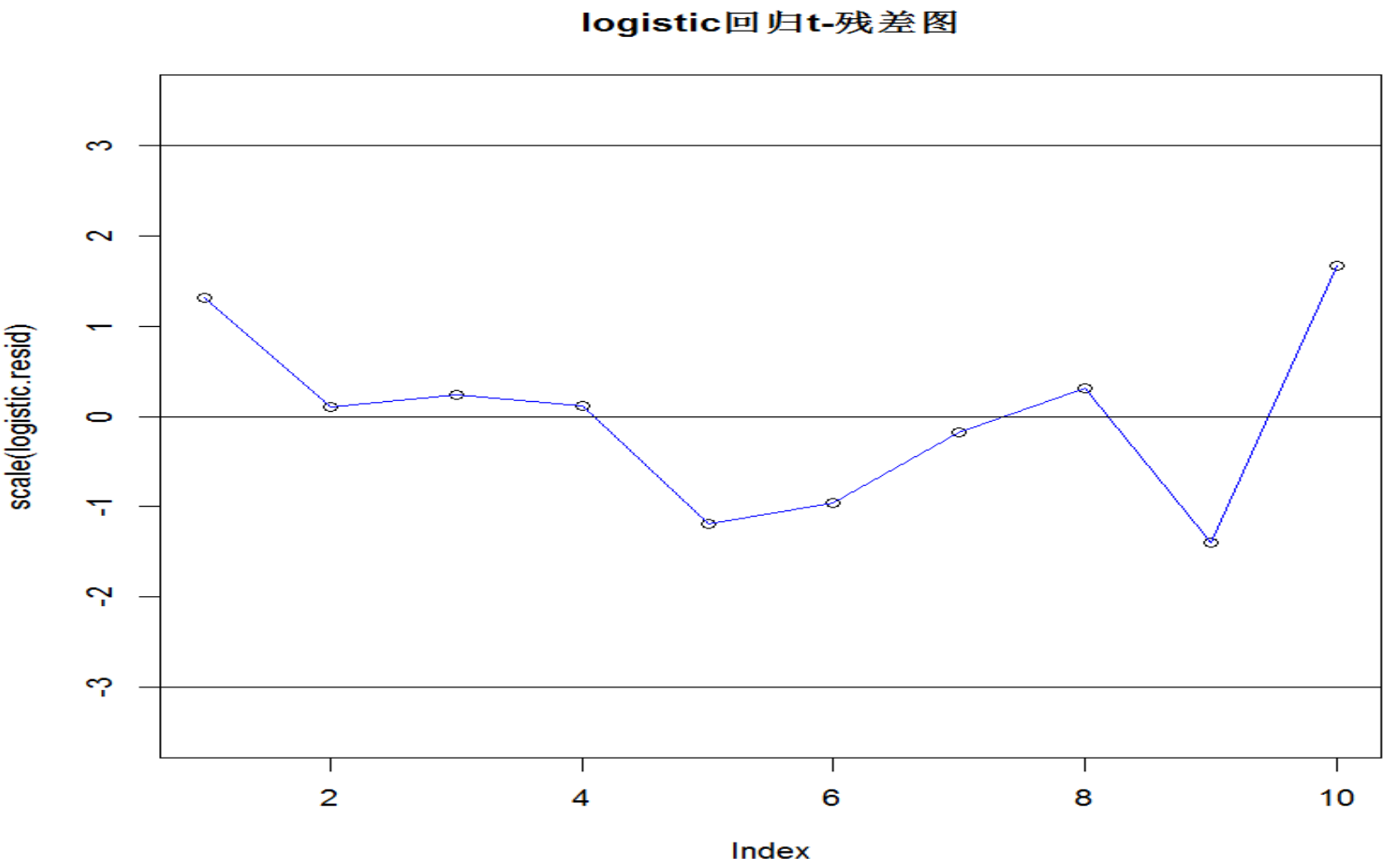
$$f_0(x)=\frac{\exp(x)}{1+\exp(x)}$$

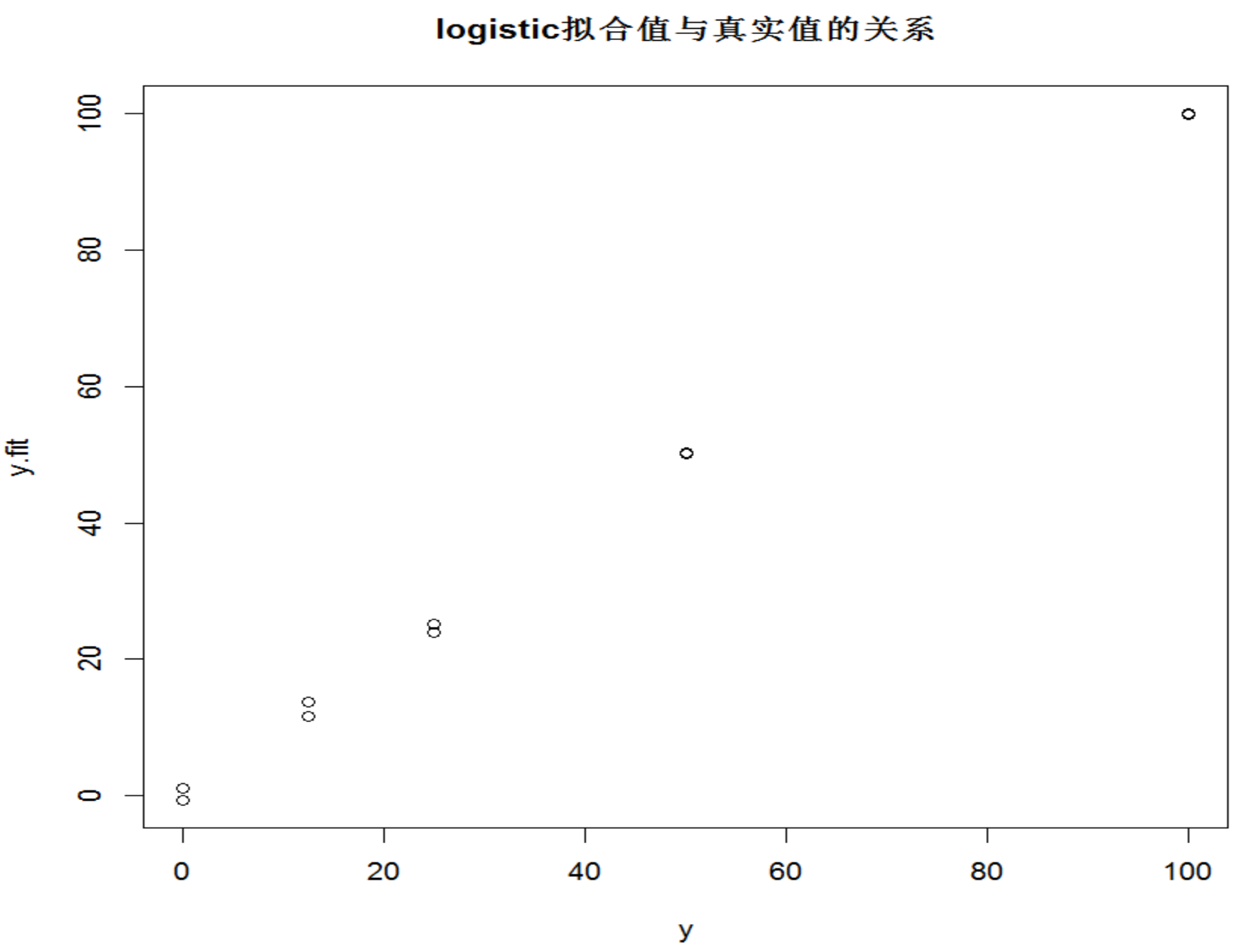
$$Z\approx\frac{\exp(b_0+b_1R+b_2G+b_3B+b_4S+b_5H)}{1+\exp(b_0+b_1R+b_2G+b_3B+b_4S+b_5H)}$$

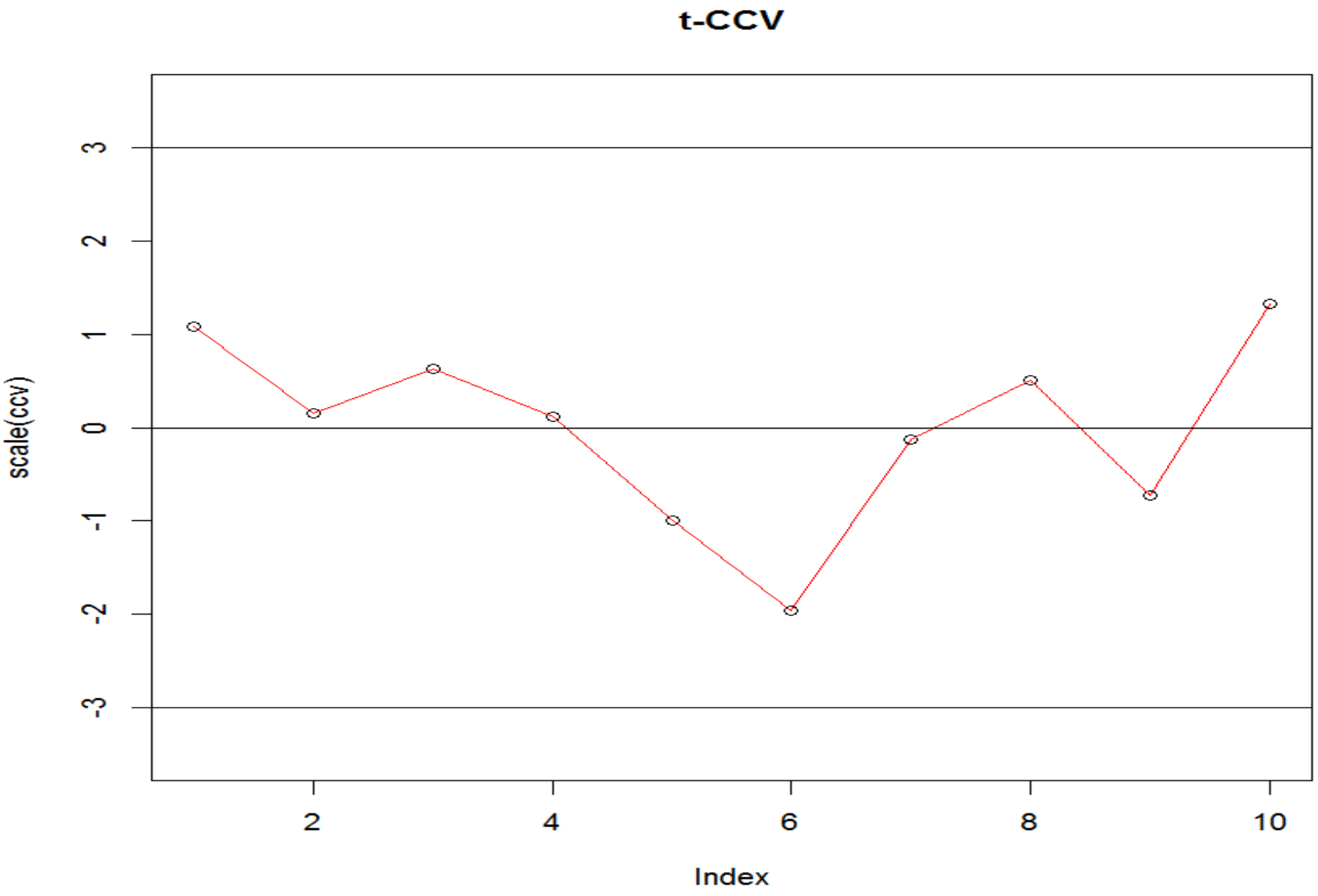
- 这里，$Z=\dfrac{Y-\min+d}{\max-\min+2d}$，$Y$ 是浓度。

```
Call:
lm(formula = Z ~ x)

Residuals:
         1          2          3          4          5          6          7          8
-0.0036797 -0.0002991 -0.0006495 -0.0003076  0.0033442  0.0027068  0.0005114 -0.0008541
         9         10
 0.0039005 -0.0046728

Coefficients:
             Estimate Std. Error t value Pr(>|t|)
(Intercept) -0.956310   0.308917  -3.096 0.036373 *
xV2          0.010391   0.003336   3.115 0.035700 *
xV3         -0.016369   0.001640  -9.978 0.000567 ***
xV4          0.008492   0.002398   3.541 0.023981 *
xV5          0.016704   0.003179   5.254 0.006280 **
xV6          0.004144   0.001578   2.627 0.058394 .
---
Signif. codes:  0 '***' 0.001 '**' 0.01 '*' 0.05 '.' 0.1 ' ' 1

Residual standard error: 0.004204 on 4 degrees of freedom
Multiple R-squared:  0.9996,    Adjusted R-squared:  0.999
F-statistic:  1879 on 5 and 4 DF,  p-value: 7.921e-07
```


logistic回归函数形式
y
0
20
40
60
80
100
-0.1
0.0
0.1
a







1. MSE和MSCV(标准化)

   MSE： 0.529 （0.0004），

   MSCV: 3.536 （0.0025）

2. 3或 2sigma 点

   2sigma: 无， 3sigma： 无

四、变量选择

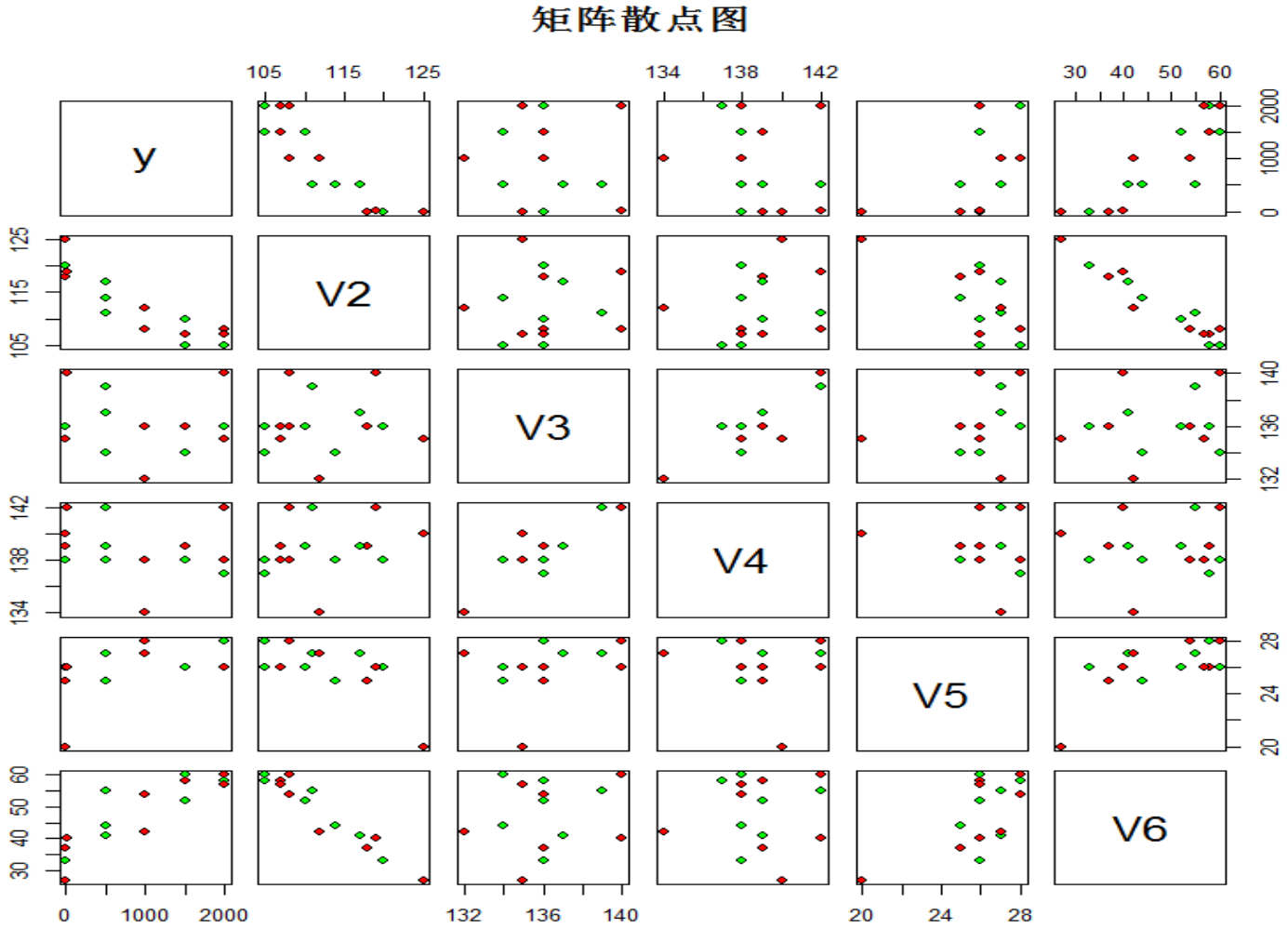
首都师范大学 数学科学学院
统计学系
Department of Statistics

```
> scad<-ncvreg(x+0,y,family="gaussian",penalty="SCAD")
> dof<-apply(abs(scad$beta[2:(pp+1),])>.Machine$double.eps,2,sum)
> bic<-as.vector(n*log(scad$loss)+2*log(n)*dof)  ###BIC准则
> t1<-sort(bic,ind=T)
> sbeta<-as.vector(scad$beta[2:(pp+1),t1$ix[1]])
> sbeta
[1]  0.401292 -4.445134  2.979073  4.578606  0.000000
>
```

- 可去掉第5个变量，再进行建模，影响不大，与上述结果基本一致。

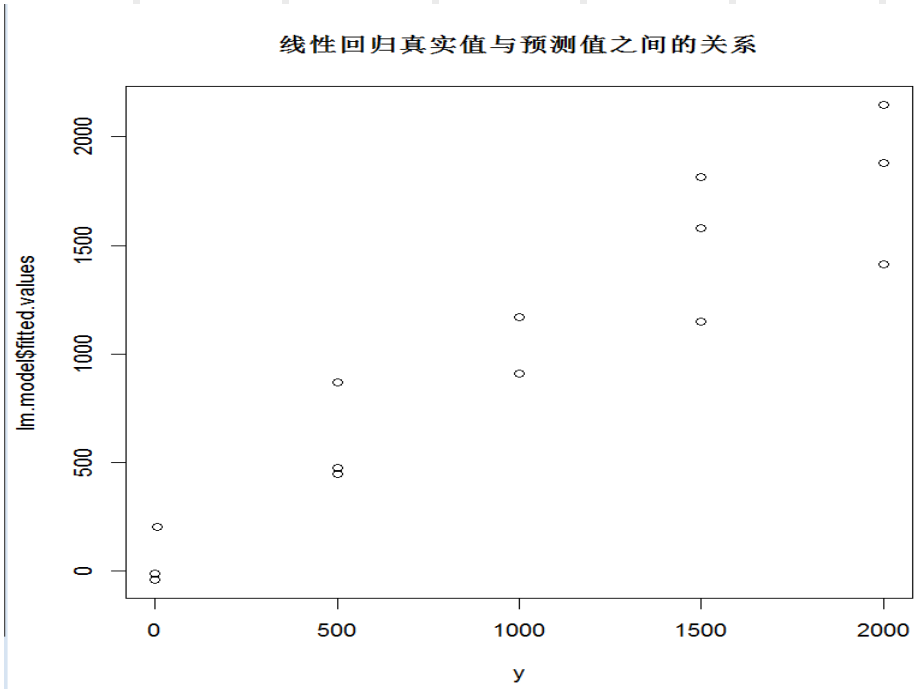
奶中尿素（n=15）

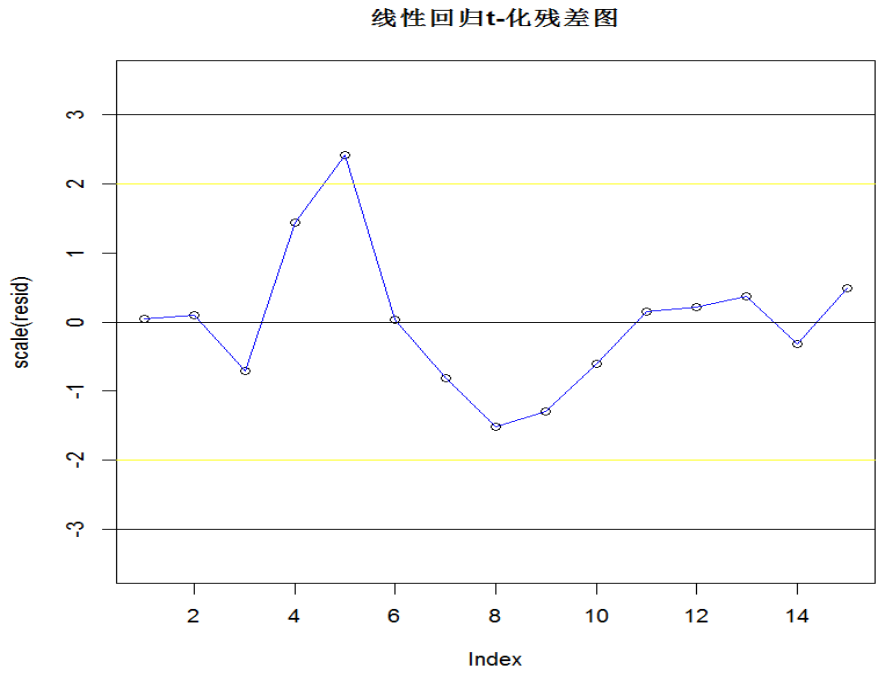
一、矩阵图散点图

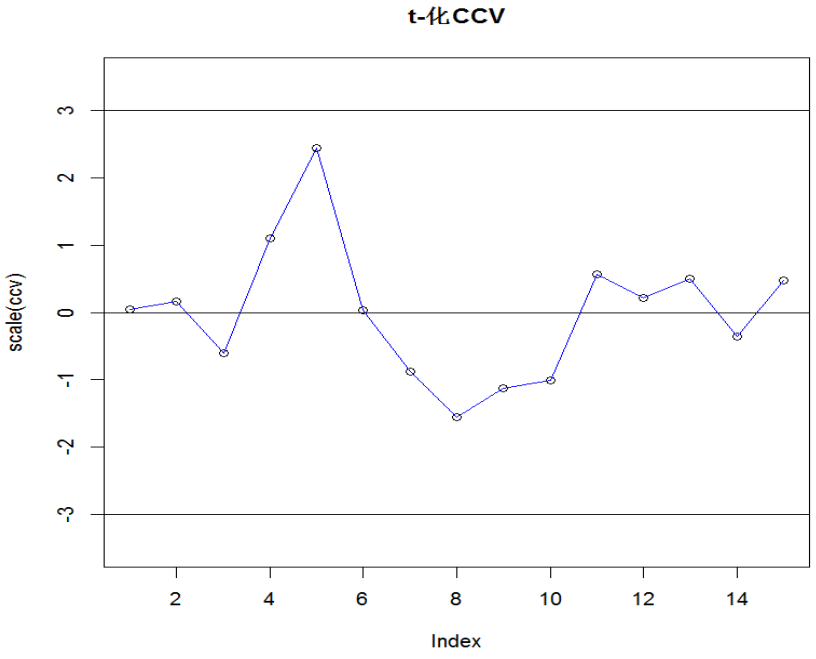


二、线性回归


```
Call:
lm(formula = y ~ x[, 1] + x[, 2] + x[, 3] + x[, 4] + x[, 5])

Residuals:
    Min      1Q  Median      3Q     Max
-368.58 -158.55   10.19   71.70  587.03

Coefficients:
            Estimate Std. Error t value Pr(>|t|)
(Intercept)  12221.2    10790.0   1.133   0.2866
x[, 1]         280.1      280.5   0.999   0.3440
x[, 2]         495.2      181.6   2.726   0.0234 *
x[, 3]        -811.3      314.9  -2.576   0.0299 *
x[, 4]        -365.9      122.7  -2.981   0.0154 *
x[, 5]         251.1      158.2   1.587   0.1470
---
Signif. codes:  0 '***' 0.001 '**' 0.01 '*' 0.05 '.' 0.1 ' ' 1

Residual standard error: 303.1 on 9 degrees of freedom
  (2 observations deleted due to missingness)
Multiple R-squared:  0.9019,    Adjusted R-squared:  0.8473
F-statistic: 16.54 on 5 and 9 DF,  p-value: 0.0002653
```







1. MSE和MSCV(标准化)

   MSE： 55118 （0.1910）

   MSCV: 125338 （0.2083）

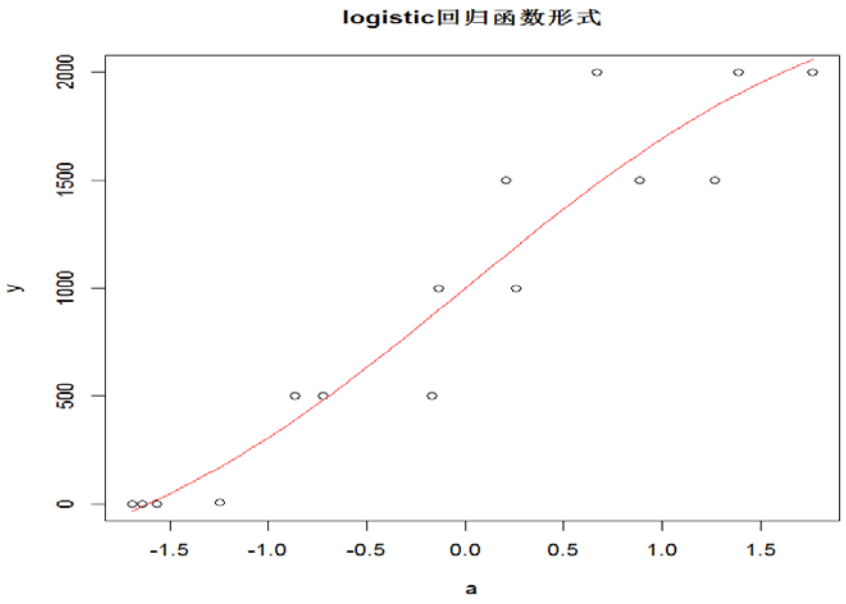
2. 3或 2sigma 点

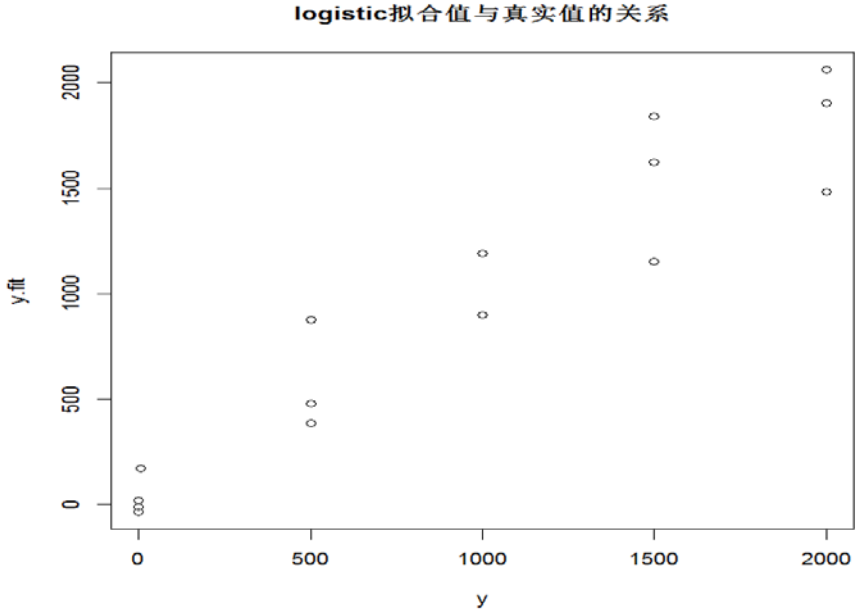
   2sigma: 5， 3sigma： 无

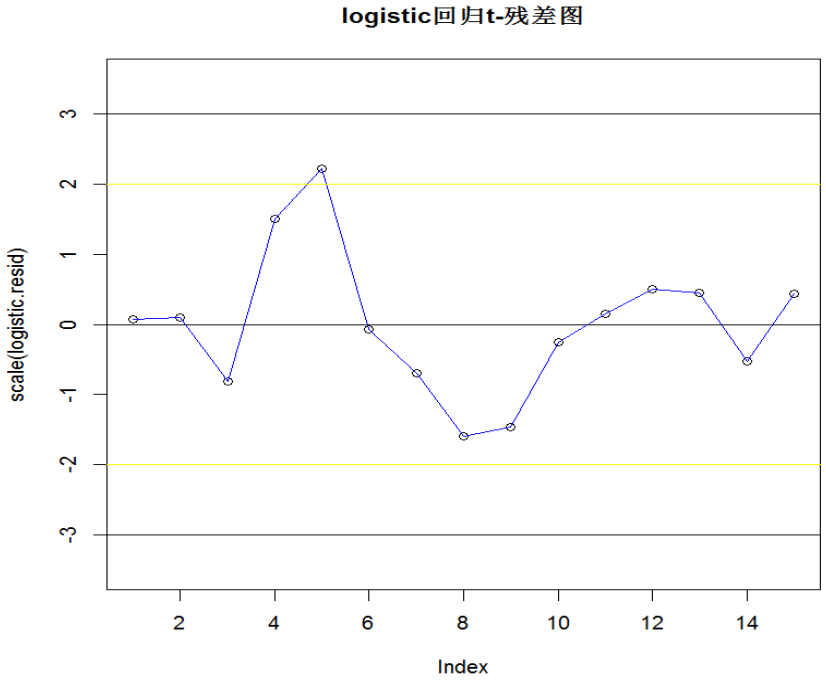
3. 点7，8不匹配。

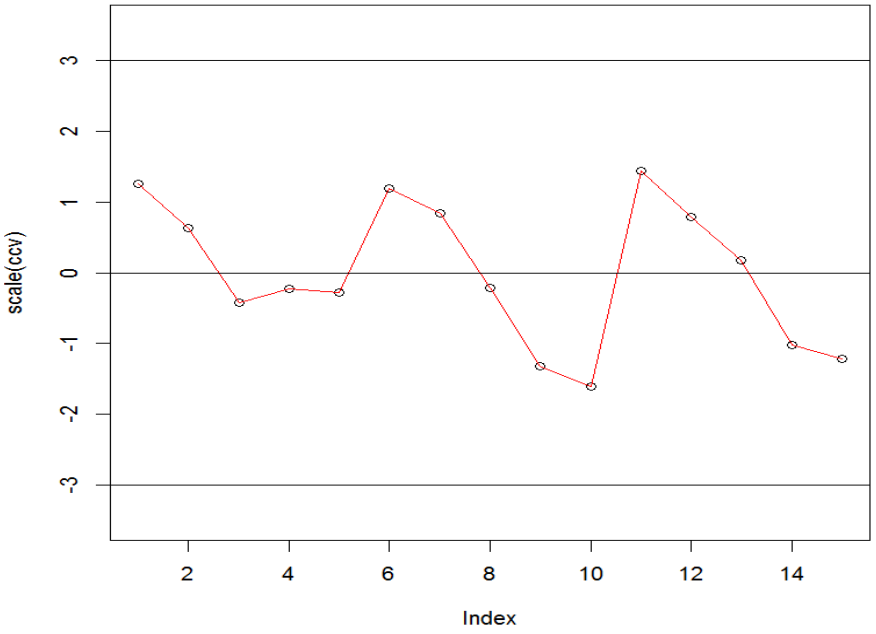
三、Logistic回归模型

```
Call:
lm(formula = Z ~ x)

Residuals:
     Min       1Q   Median       3Q      Max
-0.57775 -0.22457  0.03125  0.15490  0.93991

Coefficients:
             Estimate Std. Error t value Pr(>|t|)
(Intercept)  13.1882    17.1554   0.769   0.4617
xV2           0.5379     0.4460   1.206   0.2585
xV3           0.7686     0.2888   2.662   0.0260 *
xV4          -1.3352     0.5007  -2.667   0.0258 *
xV5          -0.5507     0.1952  -2.822   0.0200 *
xV6           0.4466     0.2516   1.775   0.1096
---
Signif. codes:  0 '***' 0.001 '**' 0.01 '*' 0.05 '.' 0.1 ' ' 1

Residual standard error: 0.4819 on 9 degrees of freedom
Multiple R-squared:  0.8995,    Adjusted R-squared:  0.8437
F-statistic: 16.12 on 5 and 9 DF,  p-value: 0.0002936
```


logistic回归函数形式
y
a
0
500
1000
1500
2000
-1.5
-1.0
-0.5
0.0
0.5
1.0
1.5


logistic拟合值与真实值的关系
y.fit
y
0
500
1000
1500
2000


logistic回归t-残差图
scale(logistic.resid)
Index
-3
-2
-1
0
1
2
3
2
4
6
8
10
12
14


t-CCV
scale(ccv)
Index
-3
-2
-1
0
1
2
3
2
4
6
8
10
12
14

1. MSE和MSCV(标准化)

   MSE： 50788 （0.0916）

   MSCV: 117778 （0.2083）

2. 3或 2sigma 点

   2sigma: 5， 3sigma： 无

3. 点7，8不匹配。

四、变量选择

```
> scad<-ncvreg(x+0,y,family="gaussian",penalty="SCAD")
> dof<-apply(abs(scad$beta[2:(pp+1),])>.Machine$double.eps,2,sum)
> bic<-as.vector(n*log(scad$loss)+2*log(n)*dof)  ###BIC准则
> t1<-sort(bic,ind=T)
> sbeta<-as.vector(scad$beta[2:(pp+1),t1$ix[1]])
> sbeta
[1] -112.4755    0.0000    0.0000    0.0000    0.0000
```

- 只与x1有关。

- **5组数据中，依照模型与数据的拟合和匹配程度评估：**

组胺 >= 溴酸钾 ： 基本可以确定关系

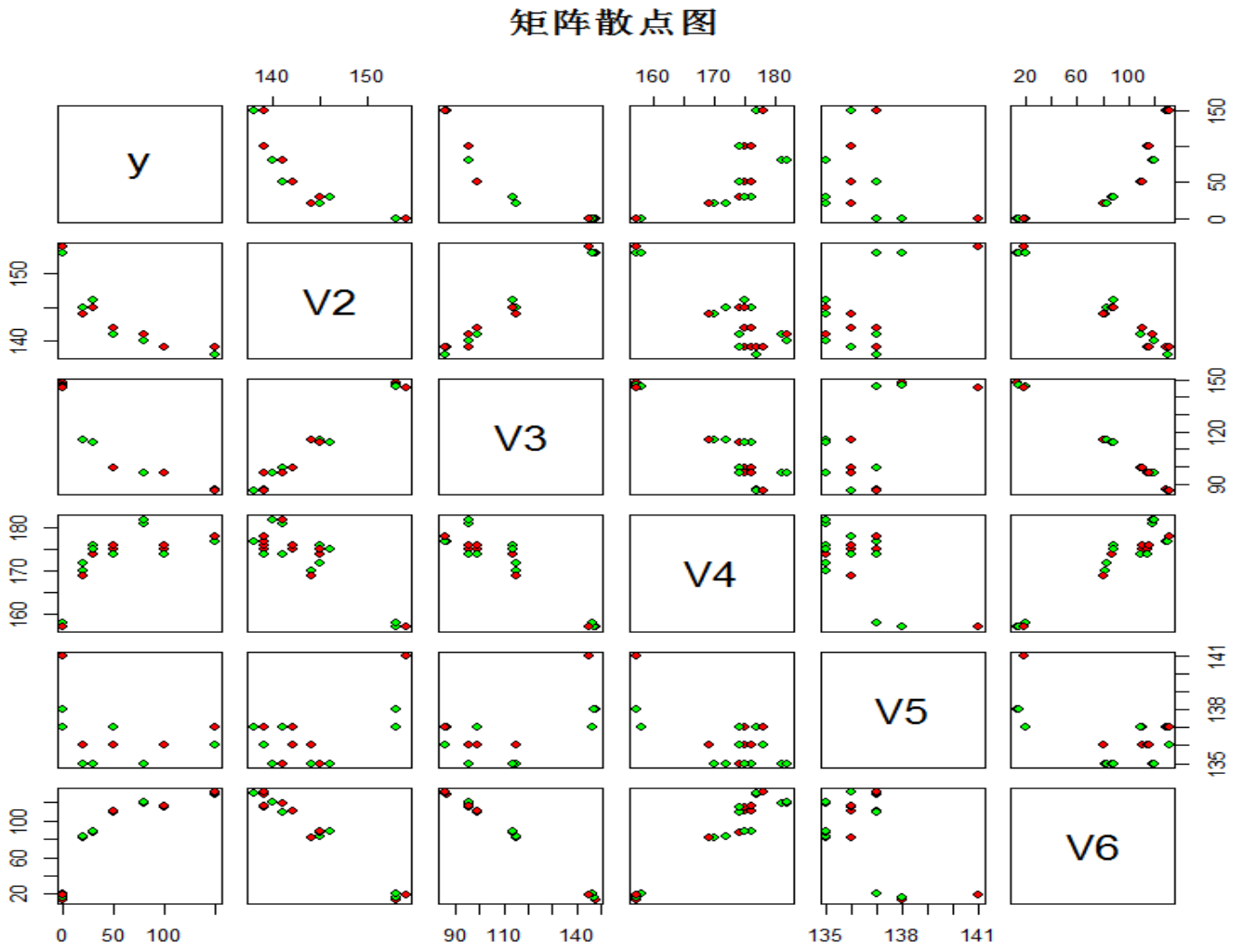
奶中尿素：不确定，倾向于可以确定关系

硫酸铝钾 >=工业碱 ： 不能很好确定关系。

二氧化硫 (n=25)

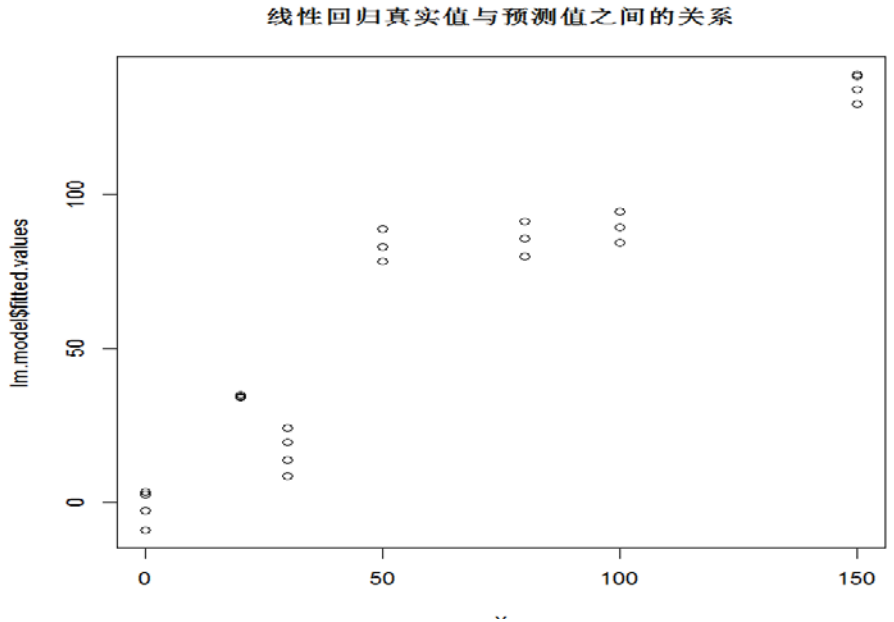
首都师范大学 数学科学学院 统计学系 Department of Statistics

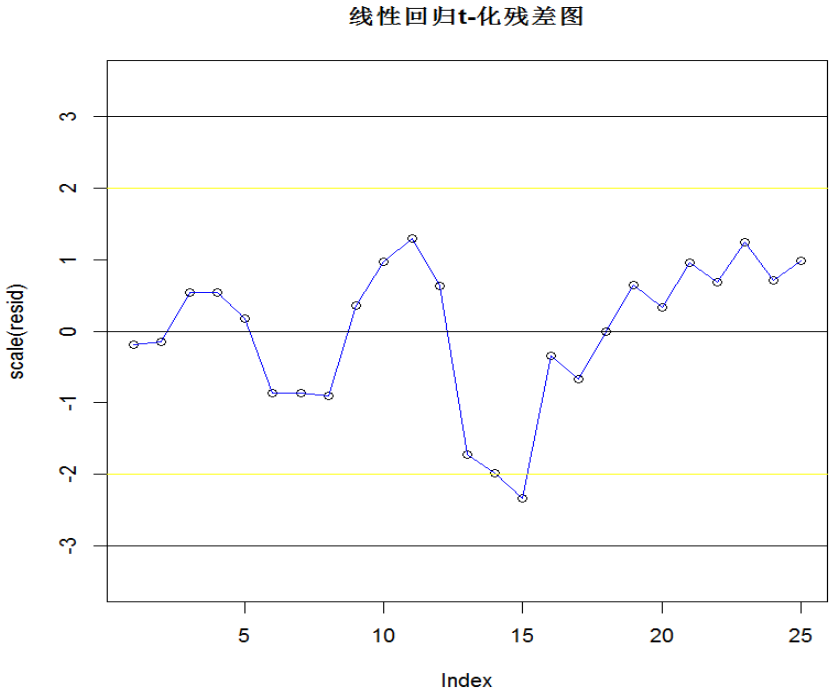
一、矩阵图散点图

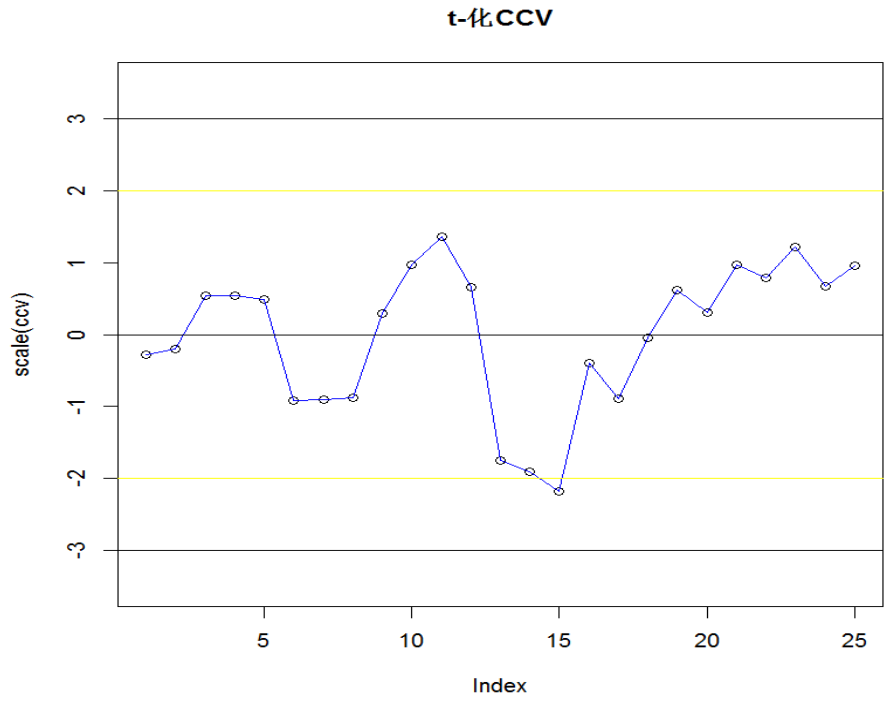


二、线性回归

```
Call:
lm(formula = y ~ x[, 1] + x[, 2] + x[, 3] + x[, 4] + x[, 5])

Residuals:
    Min      1Q  Median      3Q     Max
-38.558 -11.042   5.562  11.209  21.361

Coefficients:
             Estimate Std. Error t value Pr(>|t|)
(Intercept) 2846.2912  1235.6515   2.303 0.032719 *
x[, 1]         0.6472     5.8138   0.111 0.912533
x[, 2]       -19.9277     5.1190  -3.893 0.000978 ***
x[, 3]         5.2729     3.8861   1.357 0.190735
x[, 4]        -4.8962     6.0724  -0.806 0.430049
x[, 5]       -10.3539     3.3588  -3.083 0.006128 **
---
Signif. codes:  0 '***' 0.001 '**' 0.01 '*' 0.05 '.' 0.1 ' ' 1

Residual standard error: 18.55 on 19 degrees of freedom
Multiple R-squared:  0.8996,    Adjusted R-squared:  0.8731
F-statistic: 34.04 on 5 and 19 DF,  p-value: 7.567e-09
```







1. MSE和MSCV(标准化)

   MSE:　261.38　（0.0964）

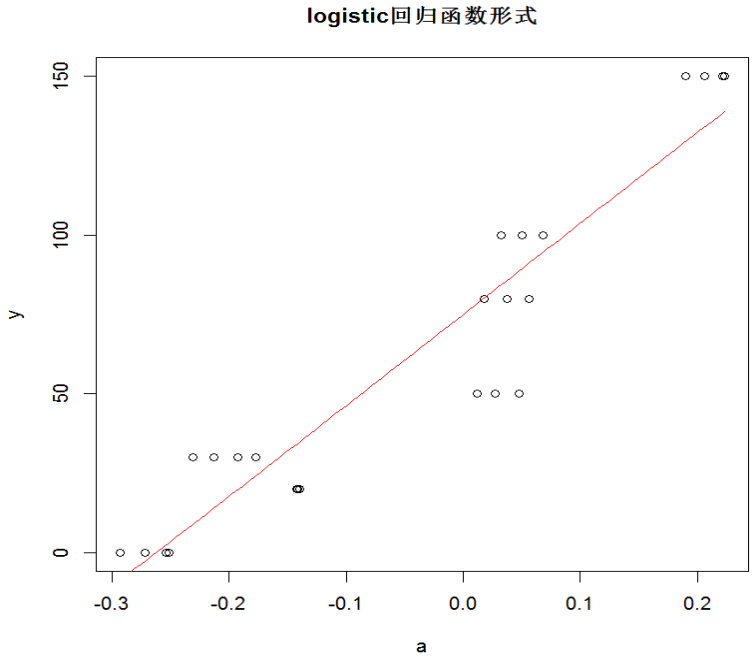
   MSCV: 390.38　（0.1440）

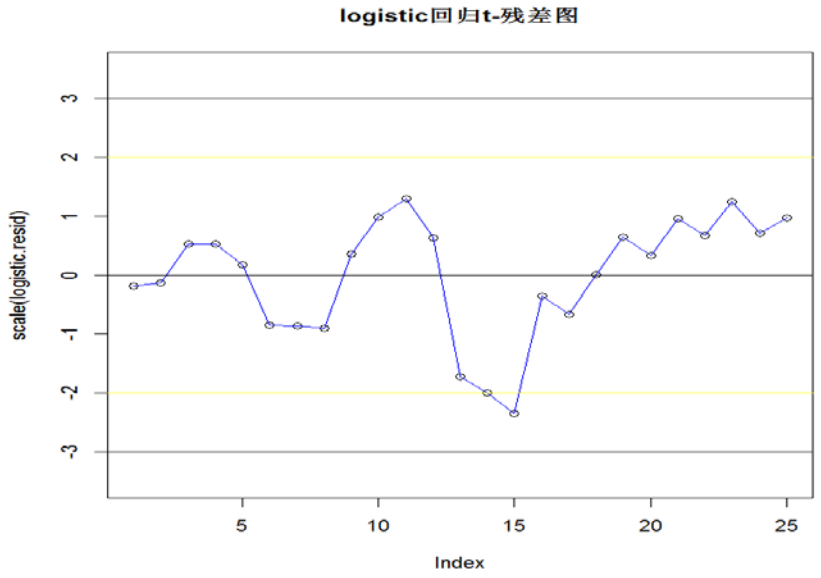
2. 3或 2sigma 点

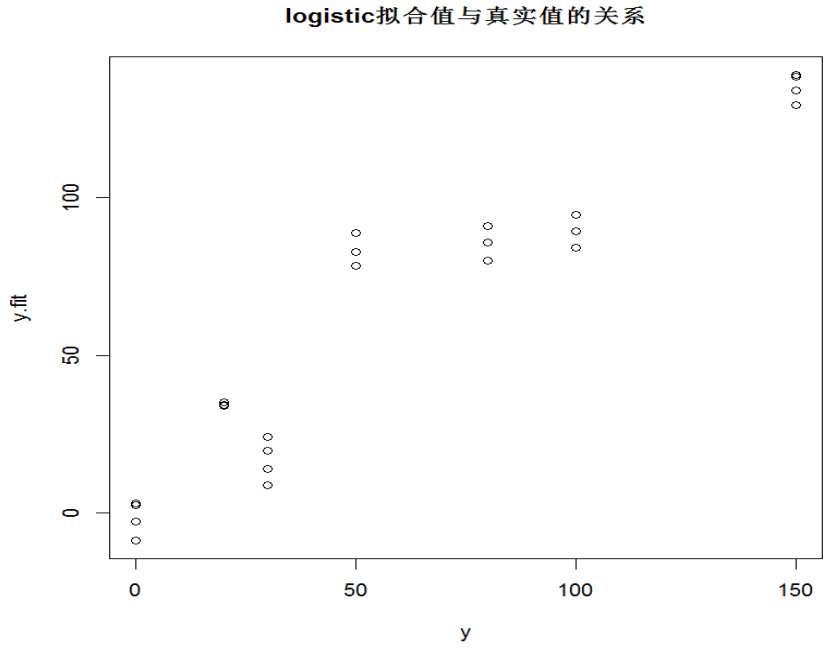
   2sigma: 第15，　3sigma：　无

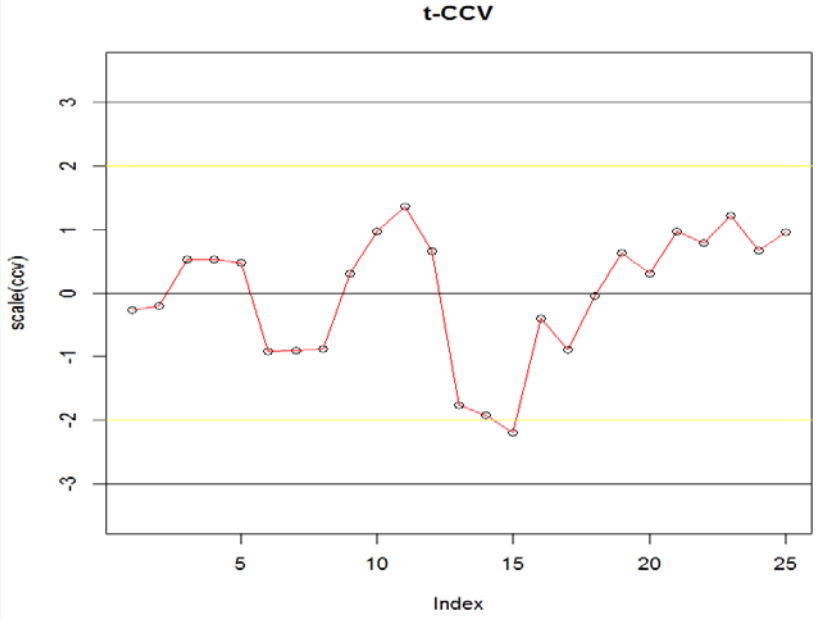
三、 logistic回归


```
Call:
lm(formula = Z ~ x)

Residuals:
     Min       1Q   Median       3Q      Max
-0.13467 -0.03865  0.01915  0.03913  0.07464

Coefficients:
            Estimate Std. Error t value Pr(>|t|)
(Intercept)  9.65521    4.31349   2.238 0.037365 *
xV2          0.00253    0.02030   0.125 0.902103
xV3         -0.06951    0.01787  -3.890 0.000985 ***
xV4          0.01827    0.01357   1.347 0.193812
xV5         -0.01717    0.02120  -0.810 0.427846
xV6         -0.03605    0.01172  -3.075 0.006238 **
---
Signif. codes:  0 '***' 0.001 '**' 0.01 '*' 0.05 '.' 0.1 ' ' 1

Residual standard error: 0.06474 on 19 degrees of freedom
Multiple R-squared:  0.8998,    Adjusted R-squared:  0.8734
F-statistic: 34.13 on 5 and 19 DF,  p-value: 7.395e-09
```


logistic回归函数形式
y
a
150
100
50
0
-0.3
-0.2
-0.1
0.0
0.1
0.2


logistic回归t-残差图
scale(logistic.resid)
Index
3
2
1
0
-1
-2
-3
5
10
15
20
25


logistic拟合值与真实值的关系
y.fit
y
100
50
0
0
50
100
150


t-CCV
scale(ccv)
Index
3
2
1
0
-1
-2
-3
5
10
15
20
25

1. MSE和MSCV(标准化)

   MSE:　260.84　（0.0956）

   MSCV:　389.02　（0.1389）

2. 3或 2sigma 点

   2sigma: 第14，15，　3sigma：　无

四、变量选择

```
> scad<-ncvreg(x+0,y,family="gaussian",penalty="SCAD")
> dof<-apply(abs(scad$beta[2:(pp+1),])>.Machine$double.eps,2,sum)
> bic<-as.vector(n*log(scad$loss)+2*log(n)*dof)  ###BIC准则
> t1<-sort(bic,ind=T)
> sbeta<-as.vector(scad$beta[2:(pp+1),t1$ix[1]])
> sbeta
[1]   1.468999 -11.109252   0.000000   0.000000  -4.530689
>
```

- 可去掉第2，3个变量，再进行建模，与上述结果基本一致。

可考虑其他模型：

- 概率变换模型
- 单指标（single-index）模型（f_0 形式未知，用于探索）

首都师范大学
数学科学学院
统计学系
Department of Statistics

谢 谢！

C评判标准: 关键是模型的选择与误差分析

首都师范大学 数学科学学院 统计学系 Department of Statistics

一、仅是线性模型+拟合 (<=5):

i).无误差分析(R^2,MSE,残差图,CV等)和异常点分析（3sigma准则等）、单一变量模型 <=2；

ii). 误差分析和异常点分析至少有一个 >=2；

iii). ii)+逐步回归或变量选择(共线分析)或样本变化分析： >=3。

二、非线性回归+拟合： i)+0; ii) +1; iii) +1；

三、非线性单调回归+拟合： i)+0; ii)+2; iii)+2.

- 5组数据中，依照模型与数据的拟合和匹配程度排序：

组胺 >= 溴酸钾 ： 基本可以确定关系

奶中尿素：不确定，倾向于可以确定关系

硫酸铝钾 >=工业碱 ： 不能很好确定关系。