《生物实验设计》
第十三章　多项式回归分析

王超

广东药科大学

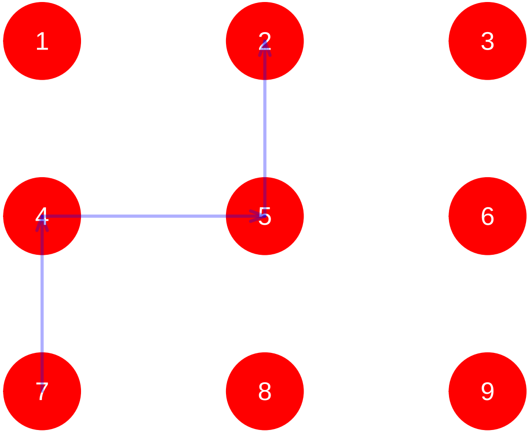
Email: wangchao@gdpu.edu.cn

2022-10-31

第十三章　多项式回归分析

Check In App Release version_0.87

Check In Code: 7452



- 如果 y 对 x 的关系为非线性，但又找不到适当的变量转换形式使其转化为线性，则可选用多项式回归方程进行描述
- 研究一个因变量与一个或多个自变量间多项式的回归分析方法，称为多项式回归
- k 次多项式回归模型可以定义为

$$y_i = \mu_y + \beta_1(x_i - \mu_x) + \beta_2(x_i^2 - \mu_{x^2}) + \cdots + \beta_k(x_i^k - \mu_{x^k}) + \epsilon_i$$

  - $\mu_y, \mu_x, \mu_{x^2}, \ldots, \mu_{x^k}$ 依次为 $y, x, x^2, \ldots, x^k$ 的总体平均数
  - $\beta_y, \beta_x, \beta_{x^2}, \ldots, \beta_{x^k}$ 依次为 1 次项、2 次项、…、k 次项的回归系数
  - ϵ_i 为随机误差，符合正态分布
  - 令 $\alpha = \mu_y - \beta_1\mu_x - \beta_2\mu_{x^2} - \cdots - \beta_k\mu_{x^k}$，模型可简化

$$y_i = \alpha + \beta_1 x_i + \beta_2 x_i^2 + \cdots + \beta_k x_i^k + \epsilon_i$$

- 逐步回归分析的两种基本途径:
  - 向前逐步回归
    - 从一元回归分析开始，按各自变量对 y 作用的秩次，依次每步仅选入一个对 y 作用显著的自变量
    - 每引入一个自变量后，对在此之前已引入的自变量进行重新检验，有不显著者即舍弃
    - 直到选入的自变量都显著，未被选入的自变量都不显著为止
  - 向后逐步回归
    - 从 m 元回归分析开始，每步舍去一个不显著且偏回归平方和为最小的自变量
    - 每次社区一个偏回归不显著且平方和最小的自变量之后，需对回归方程和各自变量重新进行假设检验
    - 直到回归方程所包含的自变量全部显著
    - 自变量个数较少，且大多都显著时，这种方法就比较实用

- m 元回归分析
  - 若各自变量的偏回归皆显著，分析结束
  - 若有一个或一个以上自变量的偏回归不显著，则舍弃偏回归平方和最小的自变量，进入下一步
- $m-1$ 元回归分析
  - 将舍弃的自变量所在的行、列及其 K 列划去，重新计算 $m-1$ 阶系数矩阵的逆矩阵元素
  - 如果仍有自变量偏回归不显著，则再将偏回归平方和最小的自变量舍去，进入下一步
- 重复进行，直至留下所有自变量的偏回归系数皆显著，即得到最优回归方程

在进行 m 元回归分析的基础上，余下自变量的偏回归系数和逆矩阵 A^{-1} 中 c_{ij} 的计算，可根据舍弃前的偏回归系数和 c_{ij}，通过公式直接求出

设 x_k 为舍弃的自变量，则

$$b_i^* = b_i - \frac{c_{ik}b_k}{c_{kk}}(i \neq k)$$
$$c_{ij}^* = c_{ij} - \frac{c_{ik}c_{kj}}{c_{kk}}(i, j \neq k)$$

- 每一次都选入一个显著的自变量，其方法步骤如下
  - 计算各变量的简单相关系数，得 $m+1$ 阶相关矩阵 $R^{(0)}$

$$R^{(0)}=\begin{bmatrix} r_{11}^{(0)} & r_{12}^{(0)} & \cdots & r_{1m}^{(0)} & r_{1y}^{(0)} \\ r_{21}^{(0)} & r_{22}^{(0)} & \cdots & r_{2m}^{(0)} & r_{2y}^{(0)} \\ \vdots & & & & \\ r_{m1}^{(0)} & r_{m2}^{(0)} & \cdots & r_{mm}^{(0)} & r_{my}^{(0)} \\ r_{y1}^{(0)} & r_{y2}^{(0)} & \cdots & r_{ym}^{(0)} & r_{yy}^{(0)} \end{bmatrix}$$

- 简记为 $R^{(0)}=(r_{ij}^{(0)}),(i,j=1,2,3,\ldots,m,y)$

- 选入自变量逐步回归
  - 以 $R^{(0)}$ 为基础，每进行一步回归选入一个显著的自变量，并对相关矩阵做一次变换
  - 在第一步，将 $R^{(0)}=(r_{ij}^{(0)})$ 变为 $R^{(1)}=(r_{ij}^{(1)})$
  - 在第二步，将 $R^{(1)}=(r_{ij}^{(1)})$ 变为 $R^{(2)}=(r_{ij}^{(2)})$
  - 在第 k 步，将 $R^{(k-1)}=(r_{ij}^{(k-1)})$ 变为 $R^{(k)}=(r_{ij}^{(k)})$

在第 k 步 $(k = 1, 2, \ldots, m+1)$，由下式算得任一尚未入选自变量 x_i 的标准偏回归平方和

$$U_i^{(k)} = \frac{(r_{iy}^{(k-1)})^2}{r_{ii}^{(k-1)}}$$

设最大 $U_i^{(k)}$ 的自变量 $x_i(i = l)$，则 x_l 在第 k 步是否入选由下式决定

$$F = \frac{U_l^{(k)}}{\frac{r_{yy}^{(k-1)} - U_l^{(k)}}{n-m-1}}$$

若 $F > F_\alpha$，则引入自变量 x_l，并将 $R^{(k-1)}$ 变换成 R^k。变换时由元素 $r_{ij}^{(k-1)}$ 计算元素 $r_{ij}^{(k)}$ 的通式为

$$\begin{cases} r_{ll}^{(k)} = \frac{1}{r_{ll}^{(k-1)}} \\ r_{lj}^{(k)} = \frac{r_{lj}^{(k-1)}}{r_{ll}^{(k-1)}} \\ r_{il}^{(k)} = -\frac{r_{il}^{(k-1)}}{r_{ll}^{(k-1)}} \\ r_{ij}^{(k)} = r_{ij}^{(k-1)} - (\frac{r_{il}^{(k-1)} r_{lj}^{(k-1)}}{r_{ll}^{(k-1)}}) \end{cases}$$

- 由于各个 x_i 单位不同和 x_i 变异度不同，各个 x_i 对 y 的贡献大小就不能直接进行比较
- 相关分析中，变量之间是一种平等关系，x_i 与 y 仅表示两个变量之间的密切程度
- 通过通径分析，可将相关系数 r_{ij} 剖分为 x_i 对 y 的直接作用和 x_i 通过与其相关的各个 x_i 对 y 的间接作用
- 通径分析是分析相关变量间因果关系的一种统计方法

假设变量 y 与自变量 $x_1, x_2, x_3, \ldots, x_m$ 之间存在线性关系，且 $x_1, x_2, x_3, \ldots, x_m$ 彼此相关，则有

$$\hat{y} = a + b_1 x_1 + b_2 x_2 + \cdots + b_m x_m$$

或

$$y = a + b_1 x_1 + b_2 x_2 + \cdots + b_m x_m + e$$

e 为 y 和 $\hat{y}$ 之间的误差