

研究简报

数据回归分析通用程序的研制

DEVELOPMENT ON GENERAL PROGRAM OF DATA REGRESSION ANALYSIS

楼文高

(上海水产大学工程技术学院, 200090)

Lou Wen-gao

(College of Engineering Technology, SFU, 200090)

关键词 回归分析, 通用程序, 最佳回归方程

KEYWORDS regression analysis, general program, optimum regression equation

在科学实(试)验和研究中,为找出变量之间的变化规律以及化简繁复的理论公式,大量用到数据回归分析处理技术[刘国安等,1988;徐庆登等,1992;楼文高,1992;臧维玲等,1993;戴祥庆等,1988]。此时,一般可以根据理论、专业知识或实验数据的“散点图”确定待回归问题的数学模型。但是,在实际应用中,特别是对未知现象变化规律的探索研究时,回归现象的数学模型是未知的,必须通过比较各种模型的回归结果即相关系数、F检验值和剩余标准离差等,确定经检验是显著的最佳回归方程。为此,作者研制了常用函数类型回归分析的通用程序,以满足科学研究的需要。

1 材料与方方法

1.1 常用的函数类型

用于回归分析的常用函数类型有:

- (1) 直线: $y = b_0 + b_1x_1 + \dots + b_px_p$
- (2) 双曲线: $1/y = b_0 + b_1/x$
- (3) 抛物线: $y = b_0 + b_1 \sqrt{x}$
- (4) 幂函数: $y = b_0x_1^{b_1}x_2^{b_2}\dots x_p^{b_p}$
- (5) 指数函数 I: $y = e^{b_0+b_1x_1+\dots+b_px_p}$
- (6) 指数函数 II: $y = e^{b_0+b_1/x}$
- (7) 对数函数: $y = b_0 + b_1 \ln x_1 + \dots + b_p \ln x_p$

(8)S型曲线： $y = 1/(b_0 + b_1e^{-x})$

(9)多项式： $y = b_0 + b_1x + b_2x^2 + \dots + b_px^p \quad p(> 1)$

对于函数(1)(4)(5)(7)P是自变量个数，函数(9)中P为多项式最高次数。

1.2 回归分析理论

1.2.1 函数的线性化处理

上述函数类型经表1的线性化变换均可化为线性函数：

$$Y = B_0 + B_1X_1 + B_2X_2 + \dots + B_pX_p \tag{1}$$

其中P为自变量个数或多项式最高次数。

1.2.2 线性回归分析

设有P+1个相关的变量Y, X₁, X₂, …, X_P, 则线性回归方程可表示为(1)式, 其中B₀, B₁, B₂, …, B_P为待定的回归常数。

表1 常用函数的线性变换

Tab. 1 Linearization transformation of functions

函数类型 序号	线性化变换关系式									
	X ₁	X ₂	……	X _P	Y	B ₀	B ₁	B ₂	……	B _P
1	x ₁	x ₂	……	x _p	y	b ₀	b ₁	b ₂	……	b _p
2	1/x	—	……	—	1/y	b ₀	b ₁	—	……	—
3	\sqrt{x}	—	……	—	y	b ₀	b ₁	—	……	—
4	lnx ₁	lnx ₂	……	lnx _p	lny	lnb ₀	b ₁	b ₂	……	b _p
5	x ₁	x ₂	……	x _p	lny	b ₀	b ₁	b ₂	……	b _p
6	1/x	—	……	—	lny	b ₀	b ₁	—	……	—
7	lnx ₁	lnx ₂	……	lnx _p	y	b ₀	b ₁	b ₂	……	b _p
8	x	—	……	—	1/y	b ₀	b ₁	—	……	—
9	x	x ²	……	x ^p	y	b ₀	b ₁	b ₂	……	b _p

由样本数据(X_{1i}, X_{2i}, …, X_{pi}, Y_i), 可求得上述回归常数B₀, B₁, B₂, …, B_P, 则对于n组样本数据, 其估计值 \hat{Y}_i 为:

$$\hat{Y}_i = B_0 + B_1X_{1i} + B_2X_{2i} + \dots + B_pX_{pi} \quad (i = 1, 2, \dots, n) \tag{2}$$

则根据最小二乘法原理即误差平方和最小得函数:

$$F = \sum_{i=1}^n (Y_i - \hat{Y}_i)^2 = \sum_{i=1}^n [Y_i - (B_0 + B_1X_{1i} + B_2X_{2i} + \dots + B_pX_{pi})]^2 \rightarrow \min$$

由函数极值定理知, F有极小值的条件为:

$$\partial F / \partial B_i = 0 \quad (i = 0, 1, 2, \dots, P) \tag{3}$$

由(3)式得正规方程组:

$$AB = D \tag{4}$$

其中A = X^TX, B = [B₀, B₁, B₂, …, B_P]^T, D = X^TY, Y = [Y₁, Y₂, …, Y_n]^T,

$$X = \begin{bmatrix} 1 & 1 & & 1 \\ X_{11} & X_{12} & \cdots & X_{1n} \\ X_{21} & X_{22} & \cdots & X_{2n} \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \\ X_{p1} & X_{p2} & \cdots & X_{pn} \end{bmatrix}^T$$

解方程组(4)得 $B_i (i=0, 1, 2, \dots, p)$, 再利用线性化变换的逆变换可求得 b_i , 即得到样本数据的回归预测和控制方程。

1.2.3 回归方程的相关系数 R、F 检验值和剩余标准离差 S

相关系数 R、F 检验值和剩余标准离差 S 为:

$$R = \sqrt{1 - Q/L_{yy}} \quad (5)$$

$$F = U(n-p-1)/(L_{yy} - U)/P \quad (6)$$

$$S = \sqrt{Q/(n-p-1)} \quad (7)$$

其中 $L_{yy} = \sum_{i=1}^n (y_i - \bar{y})^2$, $U = \sum_{i=1}^n (\hat{y}_i - \bar{y})^2$, $Q = \sum_{i=1}^n (y_i - \hat{y}_i)^2$, $\bar{y} = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n y_i$, 公式(5)(6)(7)中的 y_i , \bar{y} , \hat{y}_i

不能用线性化后的 Y_i , \bar{Y} 和 \hat{Y}_i 代替, 对于非线性函数类型, $L_{yy} = U + Q$ 不一定成立, 有时 $U > L_{yy}$, 因此不宜用式 $R = \sqrt{U/L_{yy}}$ 计算相关系数(另文讨论)。

1.2.4 回归方程的显著性检验

对于给定的置信度 α , 可查 F 分布表[白新桂, 1986], 得临界值 F_α , 从而由下式求得相关系数 R 的临界值 R_α 。

$$R_\alpha = pF_\alpha / [(n-p-1) + pF_\alpha] \quad (8)$$

若 $R > R_\alpha$, $F > F_\alpha$, 则上述回归方程对于置信度 α 时是显著的, 即求得的回归方程能较好地描述样本数据变量间的关系, 回归方程有实用价值, 可用于预测或控制。

又由回归理论知, R_i 、F 值越大和 S 值越小, 回归方程的适用性越好。即在未知样本数据函数类型时, 可以选用几种函数类型分别进行回归分析计算, 比较 R、F 和 S 值, 即 R、F 大的和 S 小的为最佳, 其回归方程为最佳回归方程。

2 计算实例分析

文献(1)中鲮体重与体长的科研实测数据, 采用 1、4、5 三种函数类型, 其回归分析的计算结果如表 2 所示。

表 2 不同函数类型回归计算结果比较 ($\alpha = 0.01$)
Tab. 2 Comparison of regression results of several functions

函数类型序号	回归计算结果						
	b_0	b_1	R	F	S	F_α	R_α
1	-9136.43	253.39	0.9779	525.3	1169	5.66	0.44
4	0.04344	2.8248	0.9814	705.8	1073	5.66	0.44
5	5.4907	0.04615	0.8858	175.6	2596	5.66	0.44

由表 2 知, 鲮体重与体长关系确以指数函数表示为最佳, 即要求满足 von Bertalffy 生长方程的基本假设 $W = aL^b$ 。

3 源程序清单

```

2 REM * * * * *
4 REM 数据回归分析通用程序
6 REM * * * * *
8 INPUT "输入数据组数 N=" ; N
10 DIM X(N,10),Y(N),A(11,12),Y1(N),
    XX(N,12),XXT(12,N),X1(N,10),BB(11),
    YY(N)
12 PRINT "-----总菜单-----"
14 PRINT "1-一元函数回归"
16 PRINT "2-多元函数回归"
18 INPUT "请输入编号";CHO%;CLS
20 IF CHO%=1 THEN P=1;GOTO 24
22 INPUT "输入自变量维数(P<10)",P
24 PRINT "-----数据调用方式-----"
26 PRINT "1---input 方式"
28 PRINT "2---顺序文件方式"
30 INPUT "请输入编号";CH1%
32 ON CH1% GOTO 34,50
34 FOR I=1 TO N
36 FOR J=1 TO P
38 PRINT "x(" ;I;" , " ;J;" )" ;
40 INPUT X1(I,J);X(I,J)=X1(I,J)
42 NEXT J
44 PRINT "y(" ;I;" )=" ;
46 INPUT Y1(I);Y(I)=Y1(I)
48 NEXT I;CLS;GOTO 70
50 INPUT "输入文件名 F $ =" ;F $
52 F $ =F $ + ".dta"
54 OPEN F $ FOR INPUT AS # 1
56 FOR I=1 TO N
58 FOR J=1 TO P
60 INPUT #1,X1(I,J);X(I,J)=X1(I,J)
62 NEXT J
64 INPUT #1 ,Y1(I);Y(I)=Y1(I)
66 IF EOF(1) THEN CLOSE #1;
    N=I;GOTO 70
68 NEXT I;CLOSE #1;CLS
70 PRINT "一元函数类型"
72 PRINT "1-y=b0+b1 * x1+... +bp * xp"
74 PRINT "2-1/y=b0+b1/x"
76 PRINT "3-y=b0+b1 * x ^ (1/2)"
78 PRINT "4-y=b0 * x1 ^ b1 * ... * xp ^ bp"
80 PRINT "5-y=exp(b0+b1 * x1+... +bp *
    xp)"
82 PRINT "6-y=exp(b0+b1/x)"
84 PRINT "7-y=b0+b1 * ln(x1)+... +
    bp * ln(xp)"
86 PRINT "8-y=1/(b0+b1 * exp(-x))"
88 PRINT "9-y=b0+b1 * x+... +bp * x ^ p"
90 INPUT "请输入编号";CH%
92 ON CH% GOSUB 102,116,130,144,166,184,
    196,214,100
94 GOSUB 306;GOSUB 340
96 END
98 REM---数据线性化处理---
100 INPUT "输入多项式次数(P<10)",P
102 GOSUB 230
104 LPRINT "y=" ;BB(0);
106 FOR J=1 TO P
108 IF BB(J)>0 THEN LPRINT "+ " ;
110 LPRINT BB(J);
112 IF CH%=9 THEN LPRINT " * x" ;J
    ELSE LPRINT " * x ^ " ;J
114 NEXT J;LPRINT;RETURN
116 FOR I=1 TO N
118 X(I,1)=1/X(I,1);Y(I)=1/Y(I)
120 NEXT I
122 GOSUB 230
124 LPRINT "1/y=" ;BB(0);
126 IF BB(1)>0 THEN LPRINT "+ " ;
128 LPRINT BB(1);"/x";RETURN
130 FOR I=1 TO N
132 X(I,1)=SQR(X(I,1));Y(I)=Y(I)
134 NEXT I;GOSUB 230
136 LPRINT "y=" ;BB(0);
138 IF BB(1)>0 THEN LPRINT "+ " ;
140 LPRINT BB(1);" * x ^ (1/2)"
142 RETURN
144 FOR I=1 TO N
146 PRINT Y(I);

```

```

148 FOR J=1 TO P
150 PRINT X(I,J)
152 X(I,J)=LOG(X(I,J))
154 NEXT J:Y(I)=LOG(Y(I))
156 NEXT I:GOSUB 230
158 LPRINT "y=";EXP(BB(0));
160 FOR I=1 TO P
162 LPRINT " * x";I;" ^ ";BB(I);
164 NEXT I:LPRINT:RETURN
166 FOR I=1 TO N
168 Y(I)=LOG(Y(I))
170 NEXT I:GOSUB 230
172 LPRINT "y=";"exp(";BB(0));
174 FOR I=1 TO P
176 IF BB(I)>0 THEN LPRINT "+";
178 LPRINT BB(I);" * x";I;
180 NEXT I
182 LPRINT ")":LPRINT:RETURN
184 FOR I=1 TO N
186 X(I,1)=1/X(I,1):Y(I)=LOG(Y(I))
188 NEXT I:GOSUB 230
190 LPRINT "y=exp(";BB(0));
192 IF BB(1)>0 THEN LPRINT "+";
194 LPRINT BB(1);"/x";:RETURN
196 FOR I=1 TO N
198 FOR J=1 TO P
200 X(I,J)=LOG(X(I,J))
202 NEXT J,I:GOSUB 230
204 LPRINT "y=";BB(0);
206 FOR I=1 TO P
208 IF BB(I)>0 THEN LPRINT "+";
210 LPRINT BB(I);"ln(x";I;")";
212 NEXT I:LPRINT:RETURN
214 FOR I=1 TO N
216 X(I,1)=EXP(-X(I,1))
218 Y(I)=1/Y(I):NEXT I:RETURN
220 LPRINT "y=1/(";BB(0);
222 IF BB(1)>0 THEN LPRINT "+";
224 LPRINT BB(1);" * exp(-x))"
226 RETURN
228 REM 求系数矩阵
230 FOR I=1 TO N
232 XX(I,1)=1:XXT(1,I)=XX(I,1)
234 FOR J=2 TO P+2
236 IF CH%<>9 THEN XX(I,J)=X(I,J-1)
      ELSE XX(I,J)=XX(I,J-1) * X(I,1)
238 IF J=P+2 THEN XX(I,J)=Y(I)
240 XXT(J,I)=XX(I,J)
242 NEXT J,I
244 FOR I=1 TO P+1
246 FOR J=1 TO P+2
248 A(I,J)=0
250 FOR K=1 TO N
252 A(I,J)=XXT(I,K) * XX(K,J)+A(I,J)
254 NEXT K,J,I
256 REM --- 解方程 ---
258 FOR I=1 TO P+1
260 FOR J=I TO P+1
262 IF A(J,I)<>0 THEN 270
264 NEXT J
266 PRINT "矩阵某列元数全为0,方程无解!";
      GOTO 96
268 REM 求方程的系数 BB(I)
270 FOR K=1 TO P+2
272 SWAP A(I,K),A(J,K):NEXT K
274 T=1/A(I,I)
276 FOR L=1 TO P+2
278 A(I,L)=A(I,L) * T
280 NEXT L
282 FOR L=1 TO P+1
284 IF L=I THEN 294
286 T=-A(L,I)
288 FOR K=1 TO P+2
290 A(L,K)=A(L,K)+A(I,K) * T
292 NEXT K
294 NEXT L,I
296 FOR I=1 TO P+1
298 BB(I-1)=A(I,P+2)
300 LPRINT "b(";I-1;")=";BB(I-1);
302 NEXT I:LPRINT
304 RETURN
306 REM 求 Y(I)的近似值 YY(I)
308 FOR I=1 TO N
310 YY(I)=BB(0)
312 FOR J=1 TO P
314 IF CH%=9 THEN Y=BB(J) * X(I,1) ^ J

```

```

ELSE Y=BB(J)*X(I,J)
316 YY(I)=YY(I)+Y
318 NEXT J,I
320 ON CH% GOTO 328,322,328,322,322,322,
328,322,328
322 FOR I=1 TO N
324 IF CH%=8 OR CH%=2 THEN YY(I)=
1/YY(I) ELSE YY(I)=EXP(YY(I))
326 NEXT I
328 IF CH%=9 THEN P=1
330 FOR I=1 TO N
332 FOR J=1 TO P
334 LPRINT X1(I,J),NEXT J
336 LPRINT Y1(I),YY(I)
338 NEXT I:RETURN
340 REM 回归方程显著性和相关性检验
342 Y=0:M=N-P-1
344 FOR I=1 TO N:Y=Y+Y1(I):NEXT I
346 Y=Y/N:U=0:LYY=0:Q=0
348 FOR I=1 TO N
350 U=U+(YY(I)-Y)^2
352 LYY=LYY+(Y1(I)-Y)^2
354 Q=Q+(Y1(I)-YY(I))^2
356 NEXT I
358 R=SQR(U/LYY):R1=SQR(1-Q/LYY)
360 F=U*M/(P*Q):S=SQR(Q/M)
362 LPRINT "R,R1,F,S=";R;R1;F;S
364 INPUT "输入某一置信度的F值";FO
366 RO=SQR(P*FO/(M+P*FO))
368 LPRINT "FO=";FO;"RO=";RO
370 IF F<FO OR R<RO THEN 374
372 LPRINT "回归方程显著";GOTO 376
374 LPRINT "回归方程不显著;重新回归"
376 RETURN

```

参 考 文 献

- [1] 白新桂,1986.数据分析与试验优化设计,126-127.清华大学出版社(京).
- [2] 刘国安等,1988.乌龟性腺发育的研究.水产学报,12(1):13-20.
- [3] 徐庆登等,1992.高邮杂交鲫杂种优势利用及其遗传性状.上海水产大学学报,1(1-2):10-19.
- [4] 楼文高,1992.分压式拦鱼电栅实用设计方程的初步研究.渔业机械仪器,19(5):29-31.
- [5] 臧维玲等,1993.河口区中国对虾幼虾中间培育池水化学状况.上海水产大学学报,2(2):101-112.
- [6] 戴祥庆等,1988.青鱼饲料最适能量蛋白比的研究.水产学报,12(1):35-41.