维普资讯 http://www.cqvip.com

204~206,209

曲线拟合优度的一种检验方法

卫生统计教研室 田考聪 O212.1

提 要 本文对曲线拟合优度的检验问题提出了一种可以量化的检验方法，解决了长期以来只能定性评价曲线拟合优度的问题。该法从直接讨论拟合值 $\hat{y}$ 与实测值 y 的接近程度出发利用已经成熟的直线相关回归的理论和方法给出了推断曲线拟合效果优劣的一个明确标准。

关键词 曲线拟合；拟合优度
中图分类号 O212.1

问题的提出

关于曲线拟合优度的检验，常用的方法主要有两种：一是通过重复试验，将直线化方程的总变异分解为回归平方和，失拟平方和及误差平方和，然后作方差分析，以此来推断曲线拟合效果的优劣[1]；二是考察相关指数 R^2 的大小，R^2 值越接近于 1，则认为曲线拟合效果越好[2]。

$$R^2=1-\frac{\Sigma(y-\hat{y})^2}{\Sigma(y-\bar{y})^2} \qquad (1)$$

（其中，y 为实测值，$\hat{y}$ 为由曲线方程求得的 y 的估计值。）

[1]的方法，存在两个问题：一是直线化方程的拟合效果能否与曲线方程的拟合效果等价？这个问题目前尚无定论；二是该法显然不大适用，尤其是对临床观察指标而言，重复试验几乎是不可能进行的。至于[2]的方法，从形式上看，式(1)是套用了直线回归中复相关系数的计算公式。这样做亦为不妥[3]。此外，R^2 的值究竟要大到何种程度才能认为拟合效果好呢？至今尚未提出明确的衡量标准。

原理和方法

本文提出一种检验曲线拟合优度的方法，供同道商榷。

设 (X_i,y_i) 为实测值 $(i=1,2,\cdots,n)$，$\hat{y}_i$ 为经曲线拟合后 y_i 的估计值，即

$$\hat{y}=f(x)$$

为曲线回归方程。若对于所有的 X_i，有

$$\hat{y}_i=y_i=f(x_i) \quad i=1,2,\cdots,n \qquad (2)$$

则认为 $\hat{y}$ 对 y 的拟合效果为最佳。

显然，这只是一种理想情形。在实际问题中，(2)式一般不会成立。但这种理想情形必竟提供了一个推断曲线拟合优劣的方向：即若 $\hat{y}$ 与 y 越接近，则认为拟合效果越好。基于此，本文提出如下的检验方法：

对 y，$\hat{y}$ 作直线相关分析，并在此基础上以 y 为应变量，$\hat{y}$ 为自变量建立直线回归方程

$$\hat{Y}=a+b\hat{y} \qquad (3)$$

若假设 $H_{10}:\alpha=0$；$H_{20}:\beta=1$；$H_{30}:\rho=1$

（α：总体回归截距 β：总体回归系数 ρ：总体相关系数）

同时成立，则认为 $\hat{y}$ 对 y 的拟合效果为优。

这里，检验统计量分别为[4]：

$$t_i=a/S_a \qquad \upsilon=n-2 \qquad (4)$$

维普资讯 http://www.cqvip.com

$$S_s = S_{y\cdot\hat{y}} \sqrt{(1/n) + (\bar{\hat{y}}^2/l_{\hat{y}\hat{y}})} \quad (5)$$

$$t_b = (b-1)/S_b \qquad \upsilon = n-2 \quad (6)$$

$$S_b = \frac{S_{y\cdot\hat{y}}}{\sqrt{l_{\hat{y}\hat{y}}}} \quad (7)$$

其中：$S_{y\cdot\hat{y}}$ 为剩余标准差）

$$u = (Z_r - Z_{\rho'})/S_Z$$

$$Z_r = \frac{1}{2}\ln\frac{1+r}{1-r} \qquad Z_{\rho'} = \frac{1}{2}\ln\frac{1+\rho'}{1-\rho'} \quad (9)$$

$$S_Z = 1/\sqrt{n-3} \quad (10)$$

（$\rho' \approx \rho = 1$ 一般，取 $\rho' = 0.99$ 即可。）

需要指出的是，这里有一个样本含量的问题。文献[1]指出，当 n 较大，比如 $n \geqslant 20$ 时，变换后的 Z_r 值近似地服从正态分布。故有人提出，当 $n < 20$ 时，应采用 Hotelling. H(1953)建议的修正的 Z 变换[5]：

$$Z_H = Z_r - \frac{3Zr+r}{4n} \quad (11)$$

$$S_H = 1/\sqrt{n-1} \quad (12)$$

即当 $n < 20$ 时，用 Z_H 代替 Z_r 及 S_H 代替 S_Z，并代入式(8)来求 U 值。

实　例

以下表资料为例[2]

离污染源不同距离的空气中氯乙烯含量

距污染源中心的距离(m)	xi	50	100	150	200	250	500	1000
空气中氯乙烯浓度(μg/m³)	yi	4.81	2.50	1.65	1.08	0.86	0.65	0.47
$\hat{y}=87.751x^{-0.790}$	$\hat{y}$	3.99	2.31	1.67	1.34	1.12	0.65	0.37
$\hat{y}=595.101x^{-1.216}+0.3$	$\hat{y}$	4.91	2.38	1.52	1.17	0.97	0.62	0.47
$\hat{y}=109.111x^{-0.612}-100$	$\hat{y}$	3.65	2.31	2.17	1.78	1.18	0.56	−0.35

该资料用幂函数曲线拟合得回归方程：

$$\hat{y} = 87.751x^{-0.790} \quad (13)$$

并按[2]的方法求得其相关指数：$R^2 = 0.939$。该值究竟算不算接近于 1 呢？仅以此值能否认为方程(13)的拟合效果为优呢？这的确很难判断。若以本文提出的方法，求得直线回归方程：

$$\hat{y} = -0.312 + 1.239\hat{y} \quad (14)$$

及相关系数　$r = 0.989$

并作检验：$H_{10}: \alpha = 0, \beta = 1$；$H_{20}: \rho' = 0.999$

按式(4)—(7)求得各统计量的值为

$t_a = 1.952 < 2.571 = t_{0.05}(5)$，$P > 0.05$

$t_b = 2.979 > 2.571 = t_{0.05}(5)$，$P < 0.05$

由于本例 $n = 7 < 20$，故按(11)、(12)及(8)式，求得

$$Z_H = 2.285 \qquad Z_{\rho'} = 3.357 \qquad S_H = 0.408$$

$$U = 2.628 > 2.58, \qquad P < 0.01$$

故拒绝 H_{20} 及 H_{20}，即认为曲线回归方程(13)的拟合效果不够理想(图 1、图 2)。

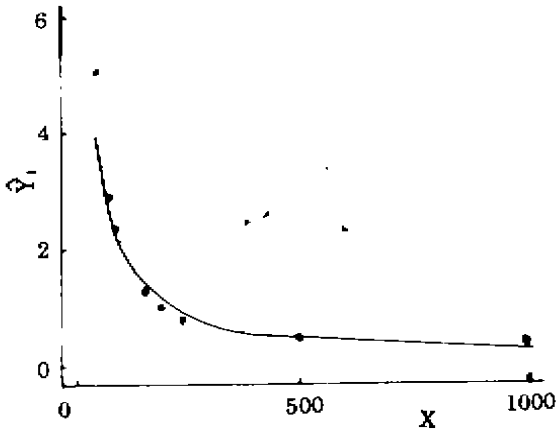


图 1　附表资料按方程(13)拟合的幂函数曲线

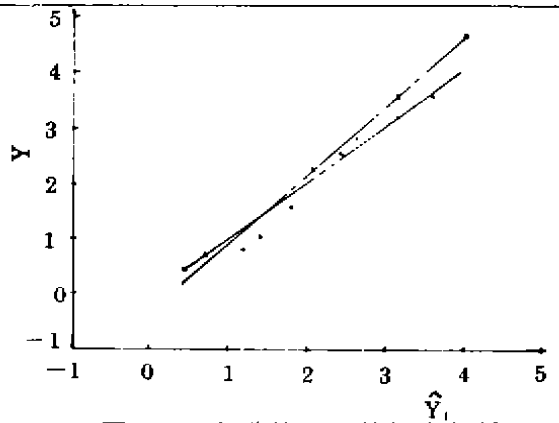


图 2　回归曲线(13)的拟合效果与理想曲线(2)的拟合效果的比较

维普资讯 http://www.cqvip.com

若再进一步求得该资料的曲线回归方程：

$$\hat{y}=595.10x^{-1.246}+0.36 \quad (15)$$

并对 y、$\hat{y}$ 作相关回归分析，求得 $\hat{Y}=0.027+0.991\hat{y}$ (16)

及 $r=0.997$

并作检验：$H_{10}:\alpha=0$；$H_{20}:\beta=1$；$H_{30}:\rho'=0.999$

按式(4)－(7)、(11)、(12)及(8)求得各统计量的值及相应的 p 值：

$t_a=0.330<2.571=t_{0.05}(5)$，$P>0.05$

$t_b=0.239<2.571=t_{0.05}(5)$，$P>0.05$

$Z_H=2.866$　　$Z_{\rho'}=3.357$

$S_H=0.408$

$U=1.203<1.96$　　$P>0.05$

故认为曲线回归方程(15)的拟合效果为优(参见图3、图4)。

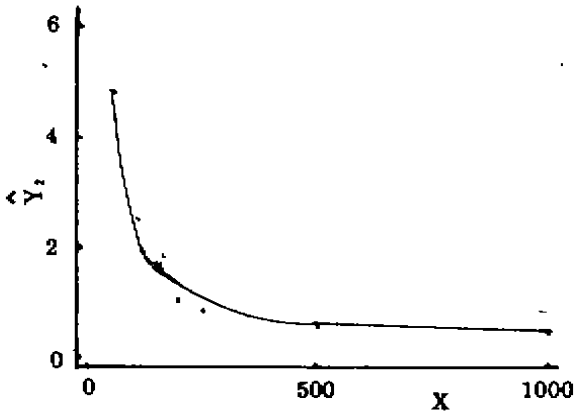


图 3　附表资料按方程(15)拟合幂函数曲线

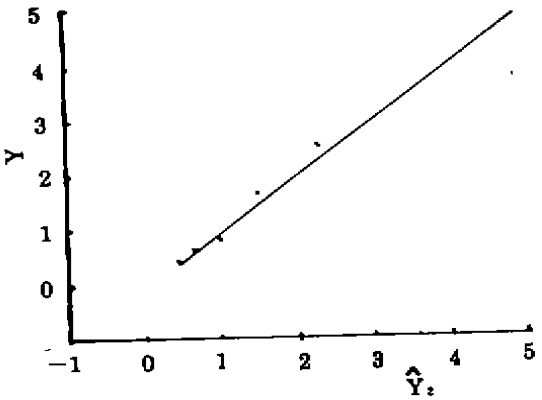


图 4　回归曲线(15)的拟合效果与理想曲线(2)的拟合效果的比较

需要指出的是，对假设 $H_{30}:\rho'=0.999$ 的检验是必须的。以本例资料为例，若求得一曲线回归方程：

$$\hat{y}=109.111x^{-0.915}-100 \quad (17)$$

及 $r=0.878$

作检验　$H_{10}:\alpha=0$；$H_{20}:\beta=1$；$H_{30}:\rho'=0.999$

按式(4)－(7)及(11)、(12)、(8)求得：

$t_b=0.032<2.571=t_{0.05}(5)$，$P>0.05$

$t_b=0.045<2.571=t_{0.05}(5)$，$P>0.05$

$Z_H=1.189$　　$Z_{\rho'}=3.357$

$S_H=0.408$

$U=5.311>2.58$，　　$P<0.01$

显然若不考虑对 H_{30} 作检验，则将得出不合理的结论(参见图5、图6)。

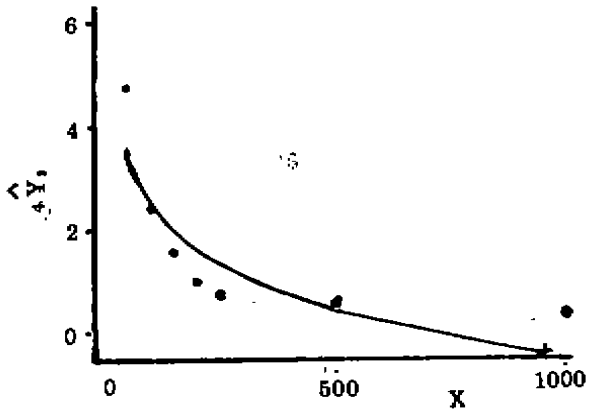


图 5　附表资料按方程(17)拟合幂函数曲线

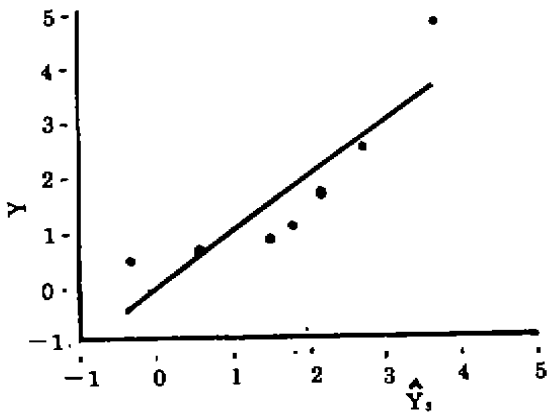


图 6　回归曲线(17)的拟合效果与理想曲线(2)的拟合效果的比较

下转 209 页

维普资讯 http://www.cqvip.com

同时补充二种营养素，机体血生化改变更加复杂之故。

参 考 文 献

1 王喜生，等. 营养学报 1986;8(2):115

2 Bendich A,et al. Am J Clim Nutr 1989;43:852

3 庄小陶. 上海医科大学学报 1988;15(6):459

4 Mejia LA. Am J Clin Nutr 1988;48:595

5 Bloem MW,et al. AM J Clin Nutr 1989;50:332

6 何志谦. 人类营养学 第一版 北京市崇文区天坛西里10号 人民卫生出版社 1988;P133

(收稿日期 1993—12—09)

CHAMGE OF PREALBLUMIN IN SUBCLINICAL VITAMIN A DEFIENT CHILDREN

Li Tingyu, et al

Dept. of Primary. Child care, Children Hospital

Serum Vitamin A(VA), Prealblumin(PA) and serum iron(SI) were observed in 112 cases with subclinical VA deficiency. These cases were randomly dinided 3 groups and were supplimented respectively with VA, Ferri(Fe), VA plus Fe for 1 month. The results showed that there was signifcantly relations between basal serum VA and PA, between VA increment and PA with supplemented VA only. However, VA increment had not correlaion to PA with supplemented Fe only. These results suggested that there be obvious reoationship between VA and PA.

KEY WORDS Vitamin A; Prealblumin; Iron

(上接206页)

小 结

本文提出的方法从直接讨论拟合值 $\hat{y}$ 与实测值 Y 的接近程度出发，利用已经成熟的直线相关回归的理论和方法，避开了变量转换后讨论 R^2 所引起的干扰因素 $\Sigma(y-\hat{y})(y-\bar{y})$ 的影响，给出了推断曲线拟合效果优劣的一个明确标准。

本法的不足之处在于：一是增加了计算量；二是对 $H_{30}:\rho=1$ 的检验只能近似地用 ρ' 来代替。第二个问题有待进一步探讨。

参 考 文 献

1 杨树勋，主编. 中国医学百科全书(医学统计学分册)，上海科技出版社 1985;155

2 倪宗瓒，主编. 医学统计学，人民卫生出版社 1990;143、148

3 徐秦，等，中国卫生统计 1992;9(6):44

4 郭祖超，主编. 医用数理统计方法，人民卫生出版社 1988;213

5 Lothar Sachs. Applied Statistics A Handbook of Techniques, Fifth Ed ition, Springer — Verlag Berlin Heidelberg New Yord, 1978;427

(收稿日期 1993—11—29)

A TEST METHOD FOR GOODNESS OF CURVE FITTING

Tian Kaocong

Dept. of Health Statistics

This article develops a quantitative test method that tests the goodness of curve fitting. This method solves the question that we only can, up to now, qualitatively criticize the goodness of curve fittin. From directly discussing the similar degree of the estimations and adtual values, by correlation that has been already very mature, the author found a more accurate standard that criticizes the result of curve fitting.

KEY WORDS Curve Fitting; Goodness of fitting