

مقارنة بين المكونات الرئيسية وطريقة المربعات الصغرى الجزئية لمعالجة مشكلة التعدد الخطي مع التطبيق على معمل السمنت

فرح عبد الغني يونس الصالح

قسم الاحصاء ، كلية علوم الحاسوب والرياضيات ، جامعة الموصل ، الموصل ، العراق

(تاريخ الاستلام: ١٩ / ١٠ / ٢٠١٠ ---- تاريخ القبول: ١٦ / ٣ / ٢٠١١)

الملخص:

تعتبر مشكلة التعدد الخطي مشكلة خطيرة في مسائل تحليل الانحدار لذلك تم تسليط الضوء على هذه المشكلة بشكل أكثر دقة وإيجاد الحلول لها ، وفي هذا البحث تم مقارنة المكونات الرئيسية PC ومقدرات المربعات الصغرى الجزئية pls والتي تعتبر إحدى طرق معالجة مشكلة التعدد الخطي، لاختبار افضل طريقة بالاعتماد على معيار اقل مربعات الخطأ MSE كمعيار للمقارنة بين المقدرات

الجانب النظري

المميزة $\lambda_1 > \lambda_2 > \dots > \lambda_m$ وان كل عمود من الاعمدة المصفوفة A يمثل إحدى المكونات الرئيسية وتعمد فكرة احتساب المكونات الرئيسية على خصائص الجذور المميزة ومايرافقها من المتجهات المميزة لمصفوفة الارتباط او مصفوفة التباين والتباين المشترك للمتغيرات الاصلية x_s وحسب وحدات قياسها من حيث كونها متشابهة او مختلفة . حيث ان (s) تمثل جميع المتغيرات المدروسة من $x_1, x_2, \dots, x_n$ فاذا كانت المتغيرات x_s لها نفس وحدات القياس ففي هذه الحالة تكون معاملات المكونات الرئيسية a_{ji} قيم المتجهات المميزة لمصفوفة التباين والتباين المشترك v للمتغيرات x_s المتمثلة ب :

$$v = \begin{bmatrix} v_{11} & v_{12} & \dots & v_{1m} \\ v_{21} & v_{22} & \dots & v_{2m} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ v_{m1} & v_{m2} & \dots & v_{mm} \end{bmatrix}$$

ولإيجاد الجذور المميزة λ نقوم بطرح من القيم القطرية للمصفوفة v ثم نجعل قيمة محدثها تساوي صفر فنحصل على المعادلة المميزة للمصفوفة v أي

$$|v - \lambda I| = 0$$

وشكل المعادلة المميزة هو متعدد الحدود (polynomial) في λ من الدرجة m أي

$$\lambda^m + C_{m-1}\lambda^{m-1} + \dots + C_1\lambda + C_0 = 0$$

وعند حل هذه المعادلة سنحصل على m من الجذور $\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_m$ وهذه الجذور ترتب بحيث λ_1 هو اكبر قيمة ويليها λ_2 وهكذا $\lambda_1 > \lambda_2 > \dots > \lambda_m$ وان لكل جذر مميز λ_j قيمة (a_j) مميز خاص يقابله ولايجاد هذه المتجهات تستخدم المعادلة

$$(v - \lambda I)a = 0$$

ونختار a_{ji} بحيث تساوي قيم المتجه المميز القياسي أي تكون $a'a = 1$ وعندئذ تدخل a_{ji} كمعادلة للمتغيرات x_j للمكونات الرئيسية اما عندما يكون للمتغيرات x'_s وحدات قياس مختلفة يستحسن تحويل x الى متغيرات قياسية لها وسط حسابي = صفر

ان تحليل الانحدار من الطرق الاحصائية الواسعة الاستخدام وان الهدف الأساسي منها هو السعي الدائم لمعرفة وتفسير العلاقات المختلفة بين الظواهر وذلك بتحديد العلاقات بين المتغيرات ، والذي يوضح العلاقة بين متغير واحد يدعى بالمتغير التابع (متغير الاستجابة (Response variable) ومتغير او متغيرات أخرى يعتقد أنها تسبب التباين في المتغير التابع وتسمى بالمتغيرات التوضيحية (التنبؤية) (predicted variables) كذلك يصف العلاقة بين المتغير المعتمد والمتغيرات التوضيحية على هيئة نموذج رياضي وان دقة هذا النموذج الرياضي تعتمد على فروض التحليل حيث ان بعض هذه الفروض مرتبط بالعلاقة الدالية والبعض الآخر مرتبط بالمتغير العشوائي ، وهذه الفروض عدة واهمها مشكلة التعدد الخطي حيث أكددت العديد من البحوث والدراسات الاهتمام الكبير بمشكلة التعدد الخطي وإيجاد الحل المناسب لها واهمها المكونات الرئيسية التي تعود الى العام ١٩٠١ عندما اقترحها karl person بوصفها وسيلة لحل مشكلة تعدد العلاقة الخطية واعتمدها طريقة استكشافية يمكن الاستفادة منها للتوصل الى تفسير وفهم العلاقة المتداخلة بين المتغيرات . ويعرف تحليل المكونات الرئيسية بأنه أسلوب يهدف الى ايجاد عوامل factors او توليفات خطية تسمى بالمكونات الرئيسية قليلة مشتقة من المتغيرات الاصلية لتحل محلها بحيث تكون مؤهلة لتفسير معظم التباين الكلي للقيم الاصلية وتكون هذه المكونات الرئيسية متعامدة أي لا يوجد ارتباط فيما بينها ويمكن كتابة المكونات الرئيسية كالآتي :

$$pc_i = a_{1i} x_1 + a_{2i} x_2 + \dots + a_{mi} x_m$$

$$pc_i = \sum_{j=1}^m a_{ji} x_j \quad (i, j = 1, 2, \dots, m)$$

حيث ان

PC_i : تمثل المكون الرئيسي

a_{ji} : يمثل معامل z في المكون الرئيسي i الذي يمثل قيم المتجهات المميزة a_{ji} المرافقة للجذور المميزة λ_j للمصفوفة المستخدمة وباستخدام أسلوب المصفوفات فان $PC = X A$ وان المصفوفة A في الصيغة اعلاه اعتمدتها تمثل المتجهات المميزة المرافقة للمصفوفة المستخدمة والمرتبطة وفقاً لمقادير الجذور

من حيث حساب معلمات الانحدار ومصفوفة المتغيرات الصماء T والاعمدة المحملة P وكخطوة أولية يتم تحويل مصفوفة المتغيرات التنبؤية X ومصفوفة المتغيرات المعتمدة Y الى الصيغة القياسية بحيث تصبح E,F على التوالي وخطوات هذه الخوارزمية كما يلي (Abdi,2003).

١ - اخذ قيم ابتدائية عشوائية للمتجه U

٢- ايجاد المتجه W من خلال العلاقة $W = E'U$

٣- ايجاد المتجه t وهو احد الاعمدة المصفوفة T للمتغيرات المستخلصة من المصفوفة X أي ان $t_{old} = Ew$

٤- تحويل المتجه t الى صيغة normalized بضربه ب $\frac{1}{\|t\|}$

$$t_{new} = \frac{1}{\|t\|} \cdot t_{old}$$

$$\|t\| = \sqrt{t_1^2 + t_2^2 + t_3^2 + \dots + t_n^2}$$

٥- ايجاد المتجه الموزون c للمصفوفة Y . $c = F't$

٦- ايجاد المتجه U وهو احد اعمدة المصفوفة U للمتغيرات المستخلصة للمصفوفة y أي ان

$$U_{old} = FC$$

٧- تحويل المتجه U الى صيغة normalized بضربه ب $\frac{1}{\|U\|}$

$$U_{NEW} = \frac{1}{\|U\|} \cdot U_{old}$$

$$\|U\| = \sqrt{U_1^2 + U_2^2 + U_3^2 + \dots + U_n^2}$$

٨- مقارنة قيم t_{new} في الخطوة (4) مع قيم U_{new} في الخطوة (7) فاذا كانت القيم متقاربة يتم حساب قيم β في حالة عدم التقارب يتم حساب قيمة المحمل P للمصفوفة X من خلال المعادلة التالية .

$$P = E't$$

بعد ذلك يتم حساب المصفوفتين الجديدين E_1, F_1 من طرح المتجه t من كل من المصفوفتين E,F وكما يلي :-

$$E_1 = E - tp'$$

$$F_1 = F - btc'$$

بالتعويض عن قيمة P بالمعادلة

$$C = F't$$

$$E_1 = E - t(E't)'$$

$$= E - ttE$$

$$F = F - bt(F't)'$$

$$= F - btt'F$$

بعد ذلك تعاد الخوارزمية من جديد بنفس الخطوات ولكن باستخدام المصفوفتين الجديدين F_1, E_1 مع العلم ان في كل عملية تكرار يتم مقارنة قيم المتجه (t) للدورة الاخيرة مع قيم المتجه (t) للدورة السابقة وتستمر عملية التكرار الى ان يتم الحصول على جميع اعمدة المصفوفة T (والتي عددها مساو الى رتبة المصفوفة X) ومن ثم يتم ايجاد مصفوفة المعلمات β وكما يلي

وتباين $\lambda = 1$ قبل ايجاد a_{ji} يتم اختيار المكونات الرئيسية المؤثرة تأثيراً معنوياً باختبار النسبة التجميعية للتباين المفسر لكل مكون كما ذكر (الراوي-١٩٨٧) ان عدد المكونات الرئيسية المختارة يكون بعدد الجذور المميزة الاكبر من واحد ($\lambda > 1$) اما بالنسبة لطريقة المربعات الصغرى الجزئية (pls) فقد ظهرت في العديد من الدراسات فيها الكيمياء والعلوم الاجتماعية ويعد الباحث (wold;1966) اول من وجد هذه الطريقة واصبحت شائعة الاستخدام في الطب وخاصة في المعالجات السريرية حيث قلة عدد المشاهدات (عدد المرضى) مع كثرة عدد المتغيرات (X'_s) المتمثلة بأعراض المرض مع عدد المتغيرات المعتمدة (Y'_s) والمتمثلة بالمستوى الصحي للمريض مع تحسن حالته الصحية ونتائج اخرى كما طورت هذه الطريقة من قبل (Friedman;1993). تعتمد طريقة انحدار المربعات الصغرى الجزئية على مصفوفة التباين والتباين المشترك cov(x,y) اذ ان هذه الطريقة تسمح بتحديد العوامل بالمتغيرات الصماء (latent variables) والتي بدورها تكون افضل نموذج للمتغير المعتمد (Y'_s) ويمكن وصفها بالشكل التالي : ليكن لدينا مدور مصفوفة المتغيرات التنبؤية (X'_s) مضرورة بمتجه عشوائي من U أي ان :

$$X'U = \begin{bmatrix} \sum x_{i1} U_i \\ \sum x_{i2} U_i \\ \vdots \\ \sum x_{ip} U_i \end{bmatrix}$$

ومن خلالها يمكن الحصول على مصفوفة الـ β والتي توضح نوع وشكل العلاقة بين كل متغير معتمد مع كل متغير تنبؤي كالآتي

	Y_1	Y_2		Y_j
X_1	β_{11}	β_{12}		β_{1j}
X_2	β_{21}	β_{22}		β_{2j}
$\vdots$	$\vdots$	$\vdots$		$\vdots$
X_k	β_{k1}	β_{k2}		β_{kj}

ان طريقة المربعات الصغرى الجزئية عبارة عن تركيبة خطية للمربعات الصغرى لمصفوفة الارتباط والتباين المشترك بين المتغيرات التنبؤية والمتغيرات المعتمدة ، والجزء الذي تعتمد عليه طريقة المربعات الصغرى الجزئية في مصفوفة الارتباط والتباين هو جزء التقاطع Cross Block أي الارتباطات بين المتغيرات التنبؤية والمتغيرات المعتمدة . كما تقدم هذه الطريقة عوامل Factor scores على شكل مجموعات خطية بين المتغيرات التنبؤية الاصلية ، بذلك سوف لا يكون هناك ارتباطات بين عوامل المتغيرات المستخدمة في النموذج الانحدار التنبؤي يمكن توضيح عمل طريقة المربعات الصغرى الجزئية

$$\beta = E'U(TEEU)^{-1}T'F$$

الجانب التطبيقي :

ان البيانات في هذا البحث تم الحصول عليها من كتاب (DRAPER & SMTTH , 1966) حيث تمثلت بأربعة عناصر أساسية كمواد أولية لانتاج مادة السمنت والتي تمثل متغيرات مستقلة يحتوي كل متغير على (١٣) مشاهدة ومتغير معتمد y كمايلي :

$$y_i = B_0 + B_1x_1 + B_2x_2 + B_3x_3 + B_4x_4 + e_i$$

وكما موضحة بالجدول الاتي :

جدول (١)

$X_1 : 3 \text{ Ca O} . \text{AL}_2\text{O}_3$	الومينات الكالسيوم الثلاثي
$X_2 : 3 \text{ Ca O} . \text{S}_i\text{O}_2$	سليكات الكالسيوم الثلاثي
$X_3 : 4 \text{ Ca O} . \text{AL}_2\text{O}_3 . \text{Fe}_2\text{O}_3$	الوهينات الكالسيوم الرباعي الحديد يکسي
$X_4 : 2 \text{ Ca O} . \text{S}_i\text{O}_2$	سليكات الكالسيوم الثنائي

Y : الحرارة المنبعثة (سعة / غم) بالنسبة المئوية لوزن مادة الذي يصنع منها مادة السمنت e_i : الخطأ العشوائي ويكون ذي توزيع طبيعي بوسط (٥) وتباين σ^2 اجري تحليل الانحدار بصورة عامة بين المتغير المعتمد y مع بقية المتغيرات المؤثرة الأربعة بأستخدام البرمجة الجاهزة v15 minitab وكانت نتائج التحليل بالشكل التالي :

وكانت نتائج التحليل بالشكل التالي :

$$y_i = 74.0 + 1.41x_1 + 0.390x_2 - 0.031x_3 - 0.266x_4$$

جدول (٢) قيم معلمات الانحدار B وال VIF والمختبر الاحصائي T

predictor	coef	sEcoef	T	P	VIF
constant	73.97	72.39	1.02	0.337	-
X_1	1.4111	0.7695	1.83	0.104	38.5
X_2	0.3896	0.7478	0.52	0.616	254.4
X_3	-0.0314	0.7797	-0.04	0.969	46.9
X_4	-0.2656	0.7326	-0.36	0.726	282.5

$$S=2.527 \quad R\text{-sq}=98.1 \% \quad R\text{-sq (adj)}=97.2\%$$

وللتأكد على وجود تداخل خطي بين المتغيرات التنبؤية فقد تم استخدام بعض اساليب للكشف عنها منها :

١-١ استخدام عامل تضخم التباين Variance Inflation (VIF)

من ملاحظة قيم عوامل تضخم التباين في الجدول اعلاه نجد انها مرتفعة جدا ولقد (marquardt , 1970) على وجد تعدد العلاقة الخطية بين المتغيرات التنبؤية في حالة كون قيم العوامل تضم التباين VIF اكبر من (٤) او (١٠) ومن خلال التحليل السابق يلاحظ ان هذه القيم جداً مرتفعة وهذا يدل على وجود تداخل خطي كبير بين المتغيرات التنبؤية .

١-٢ إيجاد محدد المصفوفة $|x'x|$

اقترح هذا المعيار من قبل (Mason & Webster , 1975) ان ينص على انه اذا كان $|x'x| = 0$ فهذا يدل على وجود تداخل تام بين المتغيرات التنبؤية اما اذا كان $|x'x| = 1$ فهذا يدل على استقلالية المتغيرات التنبؤية فيما بينها . اما ان كانت قيمة $|x'x|$ بين الصفر والواحد فهذا يدل على وجود تداخل خطي شبه تام ومن خلال القيم الذاتية للمصفوفة $(x'x)$ تم حساب محدد المصفوفة $(x'x)$ والذي كان يساوي

$$|x'x| = \prod_{j=1}^p L_j = 0.000014$$

وهذه القيم صغيرة جداً وقريبة من الصفر وهذا دليل اخر على وجود تداخل خطي كبير بين المتغيرات التنبؤية .

١-٣ استخدام عناصر مصفوفة الارتباط الواقعة خارج القطر :

اقترح هذا الاسلوب من قبل (Gunst & Mason,1980) حيث تم

خلال مصفوفة الارتباط $(x'x)$ والموضحة ادناه

$$(x'x) = \begin{bmatrix} 1.000 & 0.229 & -0.824 & -0.245 \\ 0.229 & 1.000 & -0.139 & -0.973 \\ -0.824 & -0.139 & 1.000 & 0.030 \\ -0.245 & -0.973 & 0.030 & 1.000 \end{bmatrix}$$

نلاحظ ان هنالك ارتباط تام بين جميع المتغيرات مما يدل وجود تداخل خطي كبير بين هذه المتغيرات والذي يؤدي الى عدم دقة نتائج التحليل . كذلك نلاحظ دليل اخر على التداخل بين المتغيرات التنبؤية هو قيمة R^2 أي تمثل (معامل التحديد) حيث ظهرت كبيرة جداً

٢- طريقة المكونات الرئيسية

لأجل معالجة مشكلة التعدد الخطي تم استخدام طريقة المكونات الرئيسية بالاعتماد على مصفوفة التباين والتباين المشترك لحساب

معاملات المكونات الرئيسية aij كالاتي :-

$$v = \begin{bmatrix} 34.603 & 20.923 & -31.051 & -24.167 \\ 20.923 & 242.141 & -13.878 & -253.417 \\ -31.051 & -13.878 & 41.026 & 3.167 \\ -241.167 & -253.417 & 3.167 & 280.167 \end{bmatrix}$$

ثم نجد الجذور المميزة وهي :

$$\lambda_1 = 517.80$$

$$\lambda_2 = 67.50$$

$$\lambda_3 = 12.41$$

$$\lambda_4 = 0.24$$

ومن الجذور المميزة نحسب مصفوفة المتجهات المميزة:

$$\begin{bmatrix} -0.068 & 0.646 & -0.567 & 0.506 \\ -0.679 & 0.020 & 0.544 & 0.493 \\ 0.029 & -0.755 & -0.404 & 0.516 \\ 0.731 & 0.108 & 0.468 & 0.484 \end{bmatrix}$$

$$pc_1 = -0.068x_1 - 0.679x_2 + 0.021x_3 + 0.731x_4$$

$$pc_2 = 0.646x_1 + 0.020x_2 - 0.755x_3 + 0.108x_4$$

$$pc_3 = -0.567x_1 + 0.544x_2 - 0.404x_3 + 0.468x_4$$

$$pc_4 = 0.506x_1 + 0.493x_2 + 0.516x_3 + 0.484x_4$$

وتكون المكونات الرئيسية هي :

اذ تبين من نتائج جدول (٣) رفض فرضية العدم وقبول الفرضية البديلة عند مستوى معنوية $(\alpha) 1\%$ وهذا يعني ان هناك اختلافات معنوية بين المتغيرات التوضيحية على المتغير المعتمد ولا يوجد مشكلة تعدد العلاقة الخطية وكذلك الحالة بالنسبة الى نتائج جدول (٤) رفض فرضية العدم وقبول الفرضية البديلة عند مستوى معنوية $(\alpha) 1\%$ أي انه لا يوجد مشكلة تعدد العلاقة الخطية .

الاستنتاجات

لقد تبين اهمية دراسة مشكلة تعدد العلاقة الخطية وتأثيرها على نتائج تحليل الانحدار

١ - تم اختبار فروض التحليل للبيانات واستنتجنا من خلال الاختبارات بأن البيانات تعاني من مشكلة التعدد الخطي حيث تم كشفه وفق اختبار تصخم التباين (VIF) ومصفوفة الارتباط حيث ظهرت ارتباط تام بين المتغيرات وكذلك عن طريق معامل الارتباط حيث ظهرت قيمة كبيرة جداً

٢ - في بحثنا هذا تم معالجة مشكلة تعدد العلاقة الخطية بطريقتين المكونات الرئيسية PC المربعات الصغرى الجزئية (PLS) حيث تبين من خلال التحليل الاحصائي Mse متوسط مربعات الخطأ ان طريقة المكونات الرئيسية اكثر كفاءة من طريقة المربعات الصغرى الجزئية تمتلك اقل قيمة لـ MSE .

٣- كما تبين من خلال التحليلات الاحصائية والمقارنة بين قيمة F المحسوبة مع F الجدولية ان هنالك اختلافات معنوية بين المتغيرات التوضيحية على المتغير المعتمد وكما اظهرت الدراسة انه لا يوجد مشكلة تعدد خطي .

حيث نختار الجذور المميزة الاكبر من واحد وهي الجذور (الاول والثاني والثالث) ثم نحسب معادلة الانحدار المتعدد وهي كالآتي :

$$y = 1.02557 + 0.01393pc_1 - 0.42407pc_2 - 0.63449pc_3$$

والان نعوض عن كل من PC_1 و PC_2 و PC_3 في معادلة الانحدار

المتعدد اعلاه فنحصل على المعادلة الانحدار الاتية :

$$y = 1.02557 + 2.15701x_1 + 1.15367x_2 + 0.73568x_3 + 0.4823x_4$$

وان جدول تحليل التباين لـ y كالآتي

جدول (٣) تحليل التباين لانتاج السممت بطريقة (pc)

source	DF	SS	MS	F	P
Regression	3	2664.18	888.06	151.54	0.000
Residual	9	52.74	5.86		
Error	12	2716.92			
Total					

٣- طريقة المربعات الصغرى الجزئية (PLS)

ان الطريقة الثانية لاجل معالجة مشكلة التعدد الخطي تم استخدام طريقة المربعات الصغرى الجزئية (pls) التي تم توضيحها بالجانب النظري وكانت النتائج كما يلي:-

جدول (٤) تحليل التباين لانتاج السممت بطريقة (pls)

source	DF	SS	MS	F	P
Regression	4	26665.83	666.458	104.3	0.000
Residual Error	8	51.09	6.386	6	
Total	12	2716.92			

وللتعرف على مدى معنوية العلاقة الخطية المقترحة واختبار مدى تأثير المتغيرات التوضيحية على المتغير المعتمد . اختبرت الفرضية الخاصة نموذج الانحدار كالآتي :

$$H_0 : B_1 = B_2 = B_3 = B_4$$

$$H_1 : B_1 \neq B_2 \neq B_3 \neq B_4$$

المصادر

- 1- Nonlinear Estimation ⁾⁾ , Technometrics , Vol . 12 , pp (591-612) .
- 2- Mason ,R.L.,Gunst,R.F. and Webster, I.T., (1975), "Regression Analysis and problems of Multicollinearity", comm. . In statistics .VOL.(4) No.(3) pp(277-292).
- 3- Saikat Maitra and Jun yan , (2008) , " Principle component Analysis and Partial Least squares : Two Dimension Reduction Techiques for Regression , ⁾⁾ casualty Actuarial society , pp (79-90).
- 4- Wold , H . (1966) " La Regression PLS . Paris : Technip Iterative Least squares ⁾⁾ , In P . R . Kishnaiaah (Ed) . Multivairte Analysis , New york, Academic Press . PP (391 -420).

١. الراوي ، خاشع محمود ، ١٩٨٧ ، " المدخل الى تحليل الانحدار " ، دار الكتب للطباعة والنشر جامعة الموصل .
- 1- Abdi , H . (2003). Partial least squares (pls) Regression .In Lewis – Beck , M . , A . Bryman , & T . Futing , editors , Encyclopedia of social oaks : Sage
- 2- Draper , N . R . and smth , H . (1966) , " Applied Regression Analysis ⁾⁾ , University of Wisconsin and Rensselaer polytechnic Institute .
- 3- Frank , I . E . and friedman , J . H . (1993) . " Astatistical view of chemometrics Regression Tools ⁾⁾ Technometrics , 35 , pp (109-148)
- 4- Marquardt , D . W . (1970) , " Generalized Inverse , Ridge Regression , Biased Linear Estimation and

Comparision between principal components and partial least square method in multicollinrarity

Farah Abdul – Ghana y. Al – Saleh

Dept. of statistic , Coll. Of comp.& math. Science, Mosul University, Mosul, Iraq

(Received: 19 / 10 / 2010 ---- Accepted: 16 / 3 / 2011)

Abstract: -

Multicollinearity is considered as one of the serions problem in regression analysis , so in this paper we give a big accuracy intention to this problem and to find its solutions .We compare between pc and pls , which is considered as one of important methods of multicollinraity MSE criterion is used for choosing the best estimation Method