Regressão: Naval Propulsion Plants

Carolina Dias

Maio de 2022

Conteúdo

- 1. Aplicações da Regressão Linear
- 2. Regressão Linear: Método dos Mínimos Quadrados
- 3. Conjunto de Dados: Indústria Naval
- 4. Experimentos
- 5. Resultados

■ Legendre em 1805 e Gauss em 1809: primeira aplicação na **predição de movimentos planetários**.

- Legendre em 1805 e Gauss em 1809: primeira aplicação na **predição de movimentos planetários**.
- Prever quantidade de itens vendidos de um produto com informações sobre quantidade de pessoas na loja.

- Legendre em 1805 e Gauss em 1809: primeira aplicação na **predição de movimentos planetários**.
- Prever quantidade de itens vendidos de um produto com informações sobre quantidade de pessoas na loja.
- Encontrar a dosagem de um medicamento deve ser aplicada em um paciente com informações sobre seu peso e outros dados fisiológicos.

- Legendre em 1805 e Gauss em 1809: primeira aplicação na **predição de movimentos planetários**.
- Prever quantidade de itens vendidos de um produto com informações sobre quantidade de pessoas na loja.
- Encontrar a dosagem de um medicamento deve ser aplicada em um paciente com informações sobre seu peso e outros dados fisiológicos.
- Análise da qualidade de alimentos, utilizando dados como a qualidade da água utilizada.

- Legendre em 1805 e Gauss em 1809: primeira aplicação na **predição de movimentos planetários**.
- Prever quantidade de itens vendidos de um produto com informações sobre quantidade de pessoas na loja.
- Encontrar a dosagem de um medicamento deve ser aplicada em um paciente com informações sobre seu peso e outros dados fisiológicos.
- Análise da qualidade de alimentos, utilizando dados como a qualidade da água utilizada.
- Aproximação de dados sobre a poluição do ar pela concentração de NO em uma cidade, com informações sobre a quantidade de carros em cada período durante um dia.

Regressão Linear: Método dos Mínimos Quadrados

O Método dos Mínimos Quadrados consiste em encontrar uma solução aproximada, $\tilde{\mathbf{x}}$, de um sistema inconsistente

$$A\mathbf{x} = \mathbf{b}.$$

Isso é feito projetando o vetor ${\bf b}$ no espaço-nulo esquerdo de A e resolvendo as equações normais

$$A^T A \tilde{\mathbf{x}} = A^T \mathbf{b}.$$

Pode-se substituir A por sua decomposição QR, A=QR, e obter novas equações normais:

$$R\tilde{\mathbf{x}} = Q^T \mathbf{b},$$

sob determinadas condições em A.

Utilizamos um conjunto de dados relacionado à Fábrica de Propulsões Navais (*Naval Propulsion Plants*). Esses dados foram gerados através de um simulador numérico de turbinas de gás.

- 11.934 medições,
- 16 atributos,
- 2 variáveis dependentes,
- Total: vetor com 18 valores.

Utilizamos um conjunto de dados relacionado à Fábrica de Propulsões Navais (*Naval Propulsion Plants*). Esses dados foram gerados através de um simulador numérico de turbinas de gás.

- 11.934 medições,
- 16 atributos,
- 2 variáveis dependentes,
- Total: vetor com 18 valores.

Tratamos das variáveis dependentes uma por vez, separadamente. Inicialmente, utilizamos a GT Compressor decay state coefficient (chamamos de \mathbf{GTC}). Para a outra variável dependente, a GT Turbine decay state coefficient (\mathbf{GTT}), o processo é análogo.

Queremos encontrar solução para o sistema de equações:

$$\alpha_1 x_{11} + \alpha_2 x_{12} + \ldots + \alpha_{16} x_{116} + \alpha_{17} = GTC_1$$

$$\alpha_1 x_{21} + \alpha_2 x_{22} + \ldots + \alpha_{16} x_{216} + \alpha_{17} = GTC_2$$

$$\vdots = \vdots$$

$$\alpha_1 x_{119341} + \alpha_2 x_{119342} + \ldots + \alpha_{16} x_{1193416} + \alpha_{17} = GTC_{11934}$$

Queremos encontrar solução para o sistema de equações:

$$\alpha_1 x_{11} + \alpha_2 x_{12} + \ldots + \alpha_{16} x_{116} + \alpha_{17} = GTC_1$$

$$\alpha_1 x_{21} + \alpha_2 x_{22} + \ldots + \alpha_{16} x_{216} + \alpha_{17} = GTC_2$$

$$\vdots = \vdots$$

$$\alpha_1 x_{119341} + \alpha_2 x_{119342} + \ldots + \alpha_{16} x_{1193416} + \alpha_{17} = GTC_{11934}$$

Esse sistema equivale, matricialmente, à

$$\begin{bmatrix} x_{11} & x_{12} & \dots & x_{116} \\ x_{21} & x_{22} & \dots & x_{216} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ x_{119341} & x_{119342} & \dots & x_{1193416} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \alpha_1 \\ \alpha_2 \\ \vdots \\ \alpha_{16} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} GTC_1 \\ GTC_2 \\ \vdots \\ GTC_{11934} \end{bmatrix}$$

Requisitos: Python 3.8.10 e Jupyter Notebook.

- Download e leitura do conjunto de dados, utilizando a biblioteca *Pandas*.
- Criação de funções auxiliares.

Requisitos: Python 3.8.10 e Jupyter Notebook.

- Download e leitura do conjunto de dados, utilizando a biblioteca *Pandas*.
- Criação de funções auxiliares.

Queremos que nosso conjunto de dados possua n colunas linearmente independentes, onde $\mathbf{n} = \mathbf{posto}(\mathbf{A})$. Vamos calcular o posto da matriz de dados original após a remoção das duas variáveis independentes, ou seja, 16 variáveis restantes. Adicionamos uma coluna composta apenas do número 1 ao final da matriz. Ficamos com um vetor de tamanho 17. Ao calcularmos o posto dessa matriz, utilizando a função do $NumPy\ linalg.matrix_rank()$, obtemos que $\mathbf{posto}(\mathbf{A}) = \mathbf{14}$. Ou seja, existem 3 colunas que são linearmente dependentes nesse conjunto de dados.

Para encontramos essas colunas, podemos realizar a **decomposição LU** da matriz A, A = LU e encontrar as colunas correspondentes às colunas sem pivôs na matriz U. Mas, nesse caso, isso não é necessário. Ao olharmos para a matriz A, conseguimos observar que **existem duas colunas constantes e uma coluna que é repetição de outra**. Confirmamos que esse é realmente o caso, com funções específicas do NumPy e do Pandas, e removemos essas colunas do conjunto de dados.

Para encontramos essas colunas, podemos realizar a **decomposição LU** da matriz A, A = LU e encontrar as colunas correspondentes às colunas sem pivôs na matriz U. Mas, nesse caso, isso não é necessário. Ao olharmos para a matriz A, conseguimos observar que **existem duas colunas constantes e uma coluna que é repetição de outra**. Confirmamos que esse é realmente o caso, com funções específicas do NumPy e do Pandas, e removemos essas colunas do conjunto de dados.

Agora possuímos um conjunto de dados em forma de matriz com **14 variáveis** e, ao conferir o posto dessa matriz, vemos que ele é 14. Isso nos diz que agora **todas as colunas são linearmente independentes**, e podemos prosseguir para o cálculo da decomposição QR de A, do modo detalhado acima.

■ Com a matriz com todas as colunas linearmente independentes, a **separamos em dados de treino e teste**. Ficamos, assim, com 4 matrizes: *X_train*, *y_train*, *X_test*, *y_test*.

- Com a matriz com todas as colunas linearmente independentes, a **separamos em dados de treino e teste**. Ficamos, assim, com 4 matrizes: *X_train*, *y_train*, *X_test*, *y_test*.
- Finalmente, calculamos a decomposição QR da matriz de treinamento X_train, já com a coluna de 1s [1 1 ... 1]^T adicionada.

- Com a matriz com todas as colunas linearmente independentes, a **separamos em dados de treino e teste**. Ficamos, assim, com 4 matrizes: *X_train*, *y_train*, *X_test*, *y_test*.
- Finalmente, calculamos a decomposição QR da matriz de treinamento X_train, já com a coluna de 1s [1 1 ... 1]^T adicionada.
- Agora encontramos os coeficientes lineares $[\alpha_1, \alpha_2, \dots, \alpha_{14}]$ com o comando coefs_lineares =np.linalg.solve(R, np.dot(Q.T, y_train))

- Com os coeficientes lineares podemos calcular os valores de *GTC*, a primeira variável dependente, para cada um dos vetores medidos, tanto para o conjunto de treino, como para o conjunto de teste.
- Com isso podemos calcular o erro entre essa predição e o valor de fato. Utilizamos, aqui, a métrica da raiz quadrada do erro médio quadrático (RMSE), dada por

- Com os coeficientes lineares podemos calcular os valores de *GTC*, a primeira variável dependente, para cada um dos vetores medidos, tanto para o conjunto de treino, como para o conjunto de teste.
- Com isso podemos calcular o erro entre essa predição e o valor de fato. Utilizamos, aqui, a métrica da raiz quadrada do erro médio quadrático (RMSE), dada por

$$RMSE = \sqrt{\frac{(y_1 - \hat{y}_1)^2 + (y_2 - \hat{y}_2)^2 + \dots + (y_m - \hat{y}_m)^2}{m}},$$

sendo m a dimensão dos vetores y e y-preds, tanto para treino como para teste. Nesse caso, $m_{treino}=8353$ e $m_{teste}=3581$.

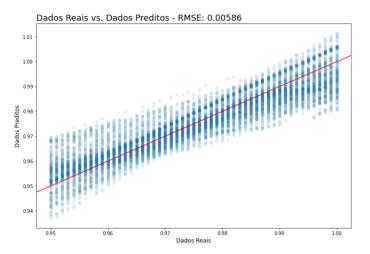


Figura: Resultado da predição de treino para a variável dependente GTC.

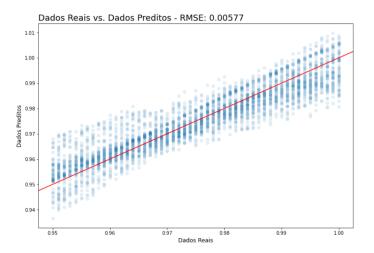


Figura: Resultado da predição de teste para a variável dependente GTC.

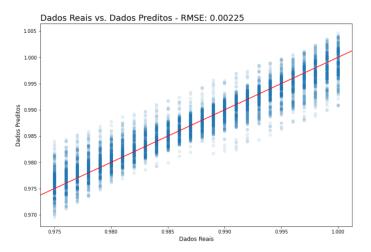


Figura: Resultado da predição de treino para a variável dependente GTT.

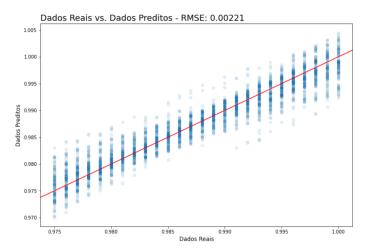


Figura: Resultado da predição de teste para a variável dependente GTT.