

Netiesinė regresija

Laboratorinis darbas

Darbą atliko:

Vainius Gataveckas, Matas Gaulia, Dovydas Martinkus

Duomenų Mokslas

3 kursas 2 gr.

Turinys

Naudoti metodai	3
Duomenys ir jų šaltiniai	4
Tikslas ir uždaviniai	
Atliktos analizės aprašymas	6
1. Naudojant R	6

Naudoti metodai

Šiame darbe naudotas apibendrintas adityvus modelis su glodniaisiais splainais. Darbas atliktas naudojant R.

Naudoti R paketai:	
tidyverse	
rsample	
corrplot	
car	
mgcv	
gratia	
effect	

Duomenys ir jų šaltiniai

Betono mišinio stiprio duomenys pagal betono mišinį sudarančias medžiagas.

Duomenų šaltinis – UCI Machine Learning Repository. Prieiga per internetą:

https://archive.ics.uci.edu/ml/datasets/concrete+compressive+strength.

```
"cement" - Cemento kiekis (kg viename m³ mišinio).

"blast_furnace_slag"- aukštakrosnių šlako (kg viename m³ mišinio).

"fly_ash" - Lakiųjų pelenų kiekis (kg viename m³ mišinio).

"water" - Vandens kiekis (kg viename m³ mišinio).

"superplasticizer" - Superplastiklių kiekis (kg viename m³ mišinio).

"coarse_aggregate" - stambiojo užpildo kiekis betono mišinyje (kg viename m³ mišinio).

"fine_aggregate" - smulkiojo (smėlio) užpildo kiekis betono mišinyje (kg viename m³ mišinio).

"age" - Amžius (dienomis).

"strength" - Cemento stipris gniaužiant (viekiant kompresinė spauda) (MPa) (atsako kintamasis).
```

Tikslas ir uždaviniai

Tikslas: Sudaryti netiesinį regresijos modelį betono stipriui prognozuoti pagal jo sudėties mišinį, kuris reikšmes prognozuotų tiksliau už tiesinį regresijos modelį.

Uždaviniai:

Tiesinio regresijos modelio betono stipriui sudarymas.

Tinkamų netiesinės regresijos metodų pasirinkimas turimai duomenų aibei.

Netiesinio regresijos modelio sudarymas.

Modelių tinkamumo analizė.

Modelių palyginimas, panaudojimas prognozuoti betono stiprį esant tam tikrai mišinio sudėčiai.

Atliktos analizės aprašymas

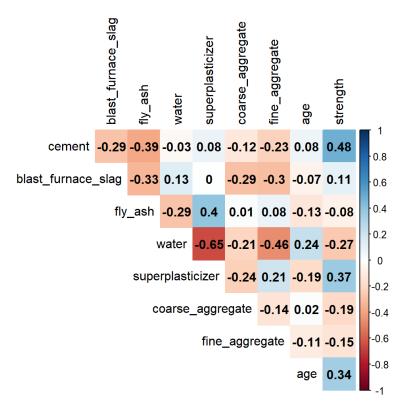
1. Naudojant R

Duomenų aibę apskritai sudaro 1030 stebėjų, tačiau 25 iš jų yra pasikartojantys (pagal visus požymius). Laikyta, kad šitie pasikartojantys stebėjimai neturėtų įtakoti modeliuojamo sąryšio tarp kovariančių ir atsako kintamojo, todėl pasirinkta šiuos stebėjimus pašalinti. Duomenų aibėje nėra praleistų reikšmių. Duomenys padalinti į mokymo ir testavimo aibes naudojant 75-25 santykį.

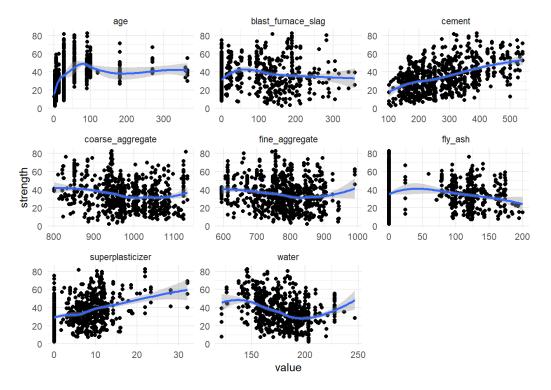
Nagrinėjant Pirsono koreliacijas tarp betono stiprio ir kovariančių vidutinė arba stipri koreliacija rasta tik su maža dalimi požymių. Kadangi Pirsono koreliacija matuoja tik tiesinį sąryšį tarp kintamųjų, iš prieš tai gauto rezultato pasirinkta laikyti, kad betono stipris gali būti ir netiesinė savo mišinio sudedamųjų dalių funkcija.

Panašus rezultatas dėl betono stiprio ir kovariančių netiesinio sąryšio gautas kiekvienai kovariantei ir atsakui nubraižius sklaidos diagramas kartu su lokalios regresijos kreive. Šie gauti rezultatai neatsižvelgia į kitų kovariančių reikšmes, todėl jie gali tik sufleruoti apie galimą sąryšį tarp kovariantės ir atsako pilname regresijos modelyje (kuriame atsižvelgiama į kitų kovariančių reikšmes).

```
# Duomeny šaltinis
# https://archive.ics.uci.edu/ml/datasets/concrete+compressive+strength
# (https://www.kaggle.com/datasets/elikplim/concrete-compressive-strength-data-set)
library(tidyverse)
library(rsample)
concrete <- read csv("concrete data.csv")</pre>
concrete <- concrete %>%
  unique() %>%
  rename(strength = concrete_compressive_strength)
# Padalijama į mokymo ir testavimo aibes
set.seed(123)
concrete_split <- initial_split(concrete)</pre>
concrete_train <- training(concrete_split)</pre>
concrete_test <- testing(concrete_split)</pre>
library(corrplot)
correlation_matrix <- concrete_train %>%
corrplot(correlation_matrix, order = "original", method = "color", type = "upper", diag =
FALSE, tl.col = "black", addCoef.col = "black")
```



```
# tarp kovariančių ir atsako matome galimus netiesinis sąryšius
concrete_train %>%
  pivot_longer(-strength) %>%
  ggplot(aes(value, strength)) +
  geom_point() +
  facet_wrap(vars(name), scales = "free") +
  geom_smooth() +
  theme_minimal()
```

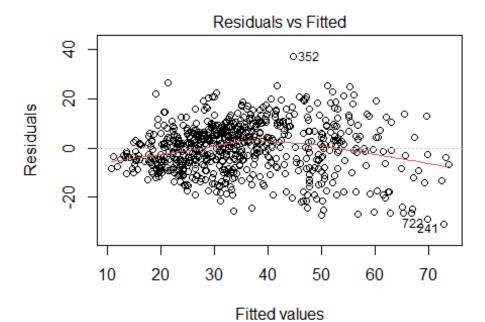


Pirmiausiai sudarytas paprastas tiesinės regresijos modelis. Analizuojant modelio diagnostinius grafikus rastas pakankamai stiprus liekanų heteroskedatiškumas. Pagal dalinių liekanų grafikus (partial residual plot / component residual plot) rasta, kad požymiuose "water" "superplastisizer" "age" turima papildoma informacija, į kurią paprastas tiesinis modelis nesugebėjo atsižvelgti.

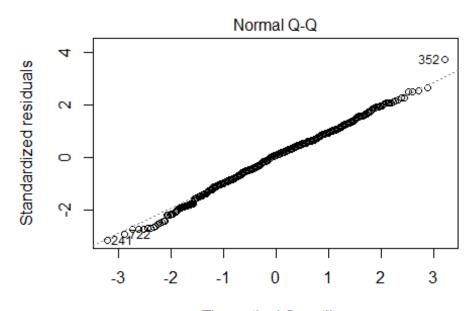
```
# Pirma sudaromas regresijos modelis su vien tiesiniais
    # kovariančių ir atsako sąryšiais (lyginamasis)
library(car)

baseline <- lm(strength ~ cement + blast_furnace_slag + fly_ash +
    water + superplasticizer
    + coarse_aggregate + fine_aggregate + age, data = concrete_train)

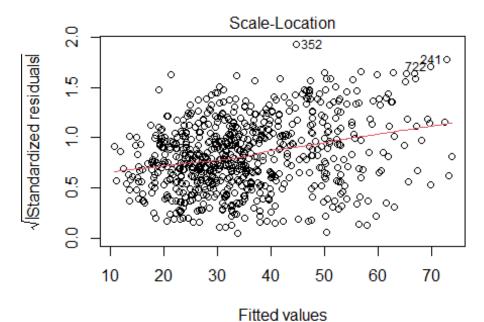
plot(baseline)</pre>
```



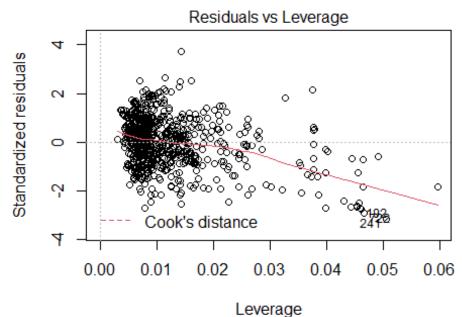
n(strength ~ cement + blast_furnace_slag + fly_ash + water + superpla



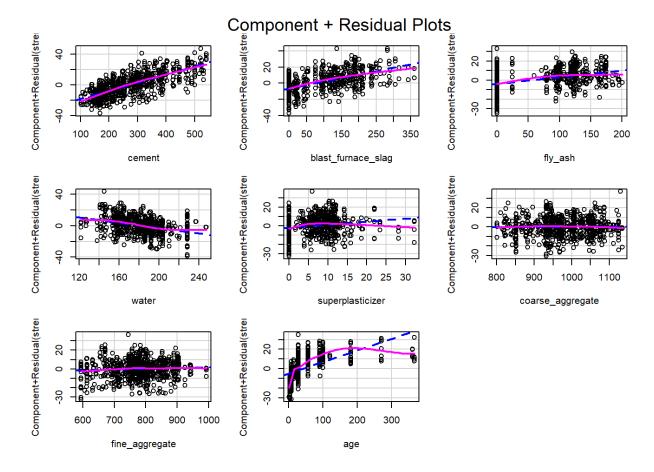
Theoretical Quantiles n(strength ~ cement + blast_furnace_slag + fly_ash + water + superpla



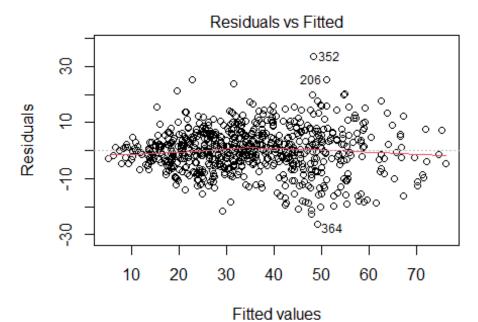
n(strength ~ cement + blast_furnace_slag + fly_ash + water + superpla



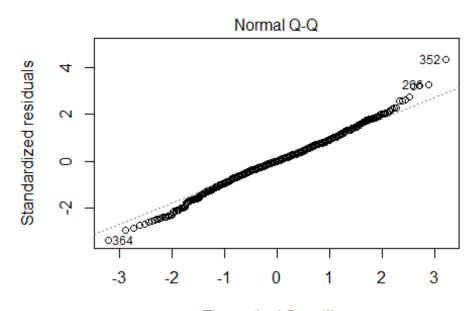
n(strength ~ cement + blast_furnace_slag + fly_ash + water + superpla crPlots(baseline)



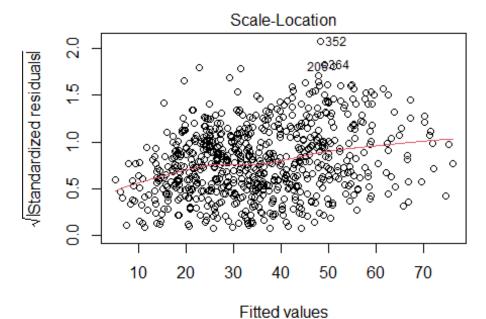
Siekiant patobulinti gautus rezultatus, sudarytas kitas regresijos modelis, papildomai į modelį įtraukiant prieš tai paminėtų kovariančių antruosius laipsnius (polinominės regresijos modelis). Naudojantis tomis pačiomis diagnostinėmis priemonėmis, laikyta, kad prieš tai rasti modelio nukrypimai nuo teorinio sumažėjo. Naudojant hierarchinių modelių (nested models) palyginimo testą, gautas statistiškai reikšmingas antro modelio skirtumas nuo sudaryto prieš tai (p<0.001).



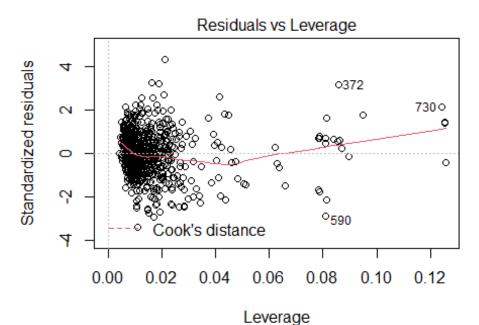
n(strength ~ cement + +blast_furnace_slag + fly_ash + water + I(water'



Theoretical Quantiles n(strength ~ cement + +blast_furnace_slag + fly_ash + water + I(water'



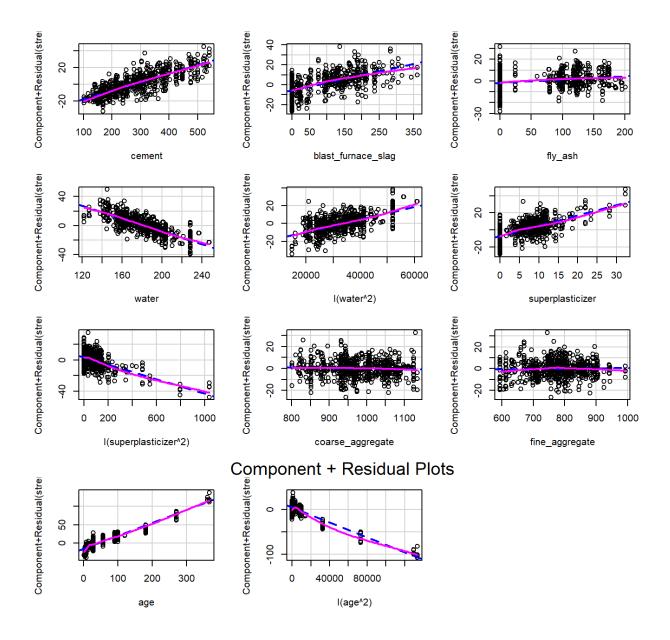
n(strength ~ cement + +blast_furnace_slag + fly_ash + water + I(water'



n(strength ~ cement + +blast_furnace_slag + fly_ash + water + I(water'

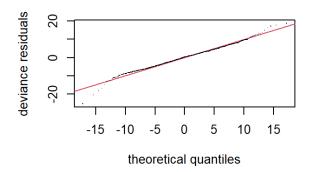
```
summary(model_polynomial)
##
## Call:
## Im(formula = strength ~ cement + +blast_furnace_slag + fly_ash +
```

```
##
      water + I(water^2) + superplasticizer + I(superplasticizer^2) +
##
      coarse_aggregate + fine_aggregate + age + I(age^2), data = concrete_train)
##
## Residuals:
##
      Min
               10 Median
                              3Q
                                     Max
## -26.172 -4.597
                  0.047
                           4.843 33.480
##
## Coefficients:
                         Estimate Std. Error t value Pr(>|t|)
##
## (Intercept)
                        4.325e+01 2.519e+01 1.717 0.08639 .
                        1.025e-01 7.386e-03 13.870 < 2e-16 ***
## cement
                       7.631e-02 8.966e-03
                                             8.511 < 2e-16 ***
## blast_furnace_slag
                        3.166e-02 1.147e-02
                                             2.761 0.00591 **
## fly_ash
                        -4.414e-01 1.716e-01 -2.571 0.01032 *
## water
## I(water^2)
                       6.992e-04 4.763e-04 1.468 0.14259
## superplasticizer
                       1.209e+00 1.494e-01 8.095 2.35e-15 ***
## I(superplasticizer^2) -4.655e-02 5.935e-03 -7.843 1.53e-14 ***
                     -5.052e-03 8.459e-03 -0.597 0.55051
## coarse_aggregate
## fine_aggregate
                       3.445e-03 9.486e-03 0.363 0.71660
                        3.527e-01 1.255e-02 28.095 < 2e-16 ***
## age
## I(age^2)
                        -8.310e-04 4.081e-05 -20.364 < 2e-16 ***
## ---
## Signif. codes: 0 '***' 0.001 '**' 0.05 '.' 0.1 ' ' 1
## Residual standard error: 7.825 on 741 degrees of freedom
## Multiple R-squared: 0.7635, Adjusted R-squared:
## F-statistic: 217.5 on 11 and 741 DF, \, p-value: < 2.2e-16
crPlots(model polynomial)
```

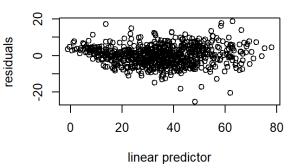


```
# modelis reikšmingai skiriasi nuo modelio be aukštesnio laipsnio narių
anova(baseline, model_polynomial)
## Analysis of Variance Table
##
## Model 1: strength ~ cement + blast_furnace_slag + fly_ash + water + superplasticizer +
       coarse_aggregate + fine_aggregate + age
##
## Model 2: strength ~ cement + +blast_furnace_slag + fly_ash + water + I(water^2) +
##
       superplasticizer + I(superplasticizer^2) + coarse_aggregate +
##
       fine_aggregate + age + I(age^2)
     Res.Df
             RSS Df Sum of Sq
##
                                         Pr(>F)
## 1
        744 75286
                         29912 162.83 < 2.2e-16 ***
## 2
        741 45374
                   3
## Signif. codes: 0 '***' 0.001 '**' 0.01 '*' 0.05 '.' 0.1 ' ' 1
```

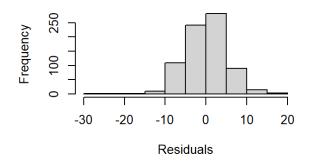
Siekiant tiksliau modeliuoti betono stiprį negu polinominės regresijos modeliu pasirinkta sudaryti apibendrintą adityvų regresijos modelį, naudojant glodniaisius splainus. Šiam tikslui pasitelkta *mgcv* biblioteka. Naudojant *gam* funkciją iš šios bibliotekos, parametras λ parenkamas automatiškai, naudojant generalized cross validation. Imant numatytąjį mazgų skaičių kiekvienai kovariantei, diagnostinuose grafikuose stiprių nukrypimų nuo modelio prielaidų nerasta, tačiau tiek statistiniais testais, tiek naudojantis modelio kovariančių efektų grafikais pastebėta, kad pradinis mazgų skaičius gali būti per mažas tinkamai įvertinti sąryšius tarp kovariančių ir atsako (stipriausiai tai matoma su kovariante "coarse _aggregate")



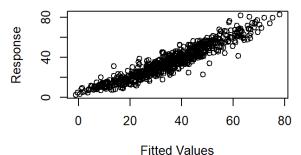
Resids vs. linear pred.



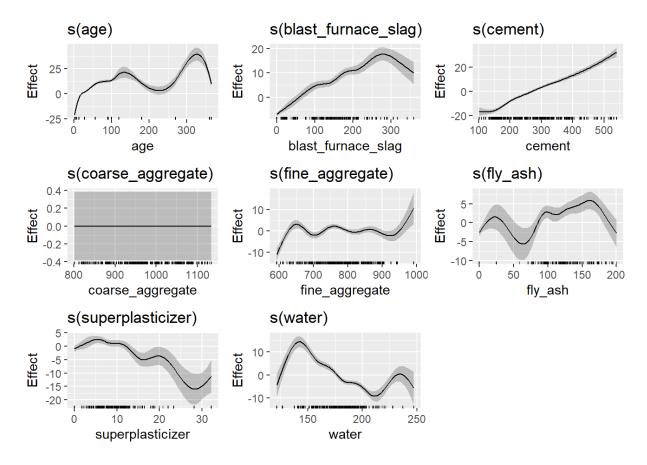
Histogram of residuals



Response vs. Fitted Values

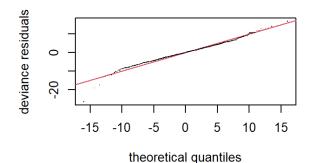


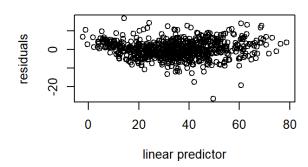
```
##
## Method: GCV
               Optimizer: magic
## Smoothing parameter selection converged after 128 iterations.
## The RMS GCV score gradient at convergence was 0.0003962093 .
## The Hessian was not positive definite.
## Model rank = 73 / 73
##
## Basis dimension (k) checking results. Low p-value (k-index<1) may
\#\# indicate that k is too low, especially if edf is close to k'.
##
##
                                      edf k-index p-value
## s(cement)
                        9.00e+00 6.85e+00
                                             0.91
                                                    0.020 *
## s(blast_furnace_slag) 9.00e+00 6.72e+00
                                             0.96
                                                    0.085 .
## s(fly_ash)
                        9.00e+00 7.16e+00
                                             1.01
                                                    0.655
## s(water)
                        9.00e+00 8.38e+00
                                             0.94
                                                    0.005 **
## s(superplasticizer)
                        9.00e+00 7.85e+00
                                             0.93
                                                   0.030 *
                                             0.86 <2e-16 ***
                        9.00e+00 2.33e-07
## s(coarse_aggregate)
## s(fine_aggregate)
                        9.00e+00 8.51e+00
                                             0.87 <2e-16 ***
## s(age)
                        9.00e+00 7.99e+00
                                             1.06
                                                   0.950
## ---
## Signif. codes: 0 '***' 0.001 '**' 0.05 '.' 0.1 ' ' 1
summary(model_gam)
## Family: gaussian
## Link function: identity
##
## Formula:
## strength ~ s(cement) + s(blast_furnace_slag) + s(fly_ash) + s(water) +
##
      s(superplasticizer) + s(coarse_aggregate) + s(fine_aggregate) +
##
      s(age)
##
## Parametric coefficients:
##
              Estimate Std. Error t value Pr(>|t|)
                           0.1955 177.7 <2e-16 ***
## (Intercept) 34.7507
## ---
## Signif. codes: 0 '***' 0.001 '**' 0.05 '.' 0.1 ' ' 1
##
## Approximate significance of smooth terms:
                              edf Ref.df
                                               F p-value
                                     9 100.841 <2e-16 ***
## s(cement)
                        6.853e+00
                                       9 50.595 <2e-16 ***
## s(blast_furnace_slag) 6.723e+00
                                      9 6.798 <2e-16 ***
## s(fly_ash)
                        7.162e+00
                                      9 29.612 <2e-16 ***
## s(water)
                        8.383e+00
                        7.851e+00
                                       9 7.709 <2e-16 ***
## s(superplasticizer)
                                      9 0.000 0.958
## s(coarse_aggregate)
                        2.332e-07
                                      9 9.957 <2e-16 ***
                        8.514e+00
## s(fine_aggregate)
                                      9 266.120 <2e-16 ***
                        7.986e+00
## s(age)
## --
## Signif. codes: 0 '***' 0.001 '**' 0.01 '*' 0.05 '.' 0.1 ' ' 1
##
## R-sq.(adj) = 0.887 Deviance explained = 89.5\%
## GCV = 31.031 Scale est. = 28.787
draw(model_gam)
```



Padidinus mazgų skaičių ir naudojant visas prieš tai aprašytas diagnostikas nerasta stiprių nukrypimų nuo teorinio modelio. Gautame modelyje visos kovariantės reikšmingos, taip pat gautas statistiškai reikšmingas skirtumas nuo modelio, naudojančio mažesnį (numatytąjį) mazgų skaičių (p<0.001). Siekiant palyginti prieš tai sudarytą daug paprastenį polinominės regresijos ir gautą glodniųjų splainų modelį, abiems iš jų nubraižyti kovariančių efektų grafikai. Matoma, kad apibendrinto adityvaus modelio atveju gauti daug sudėtingesni sąryšiai tarp kovariančių ir atsako.

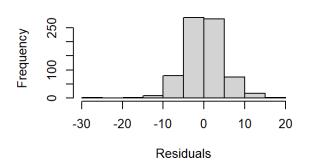
Resids vs. linear pred.

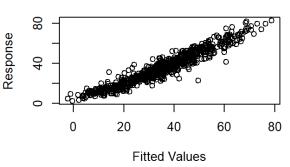




Histogram of residuals

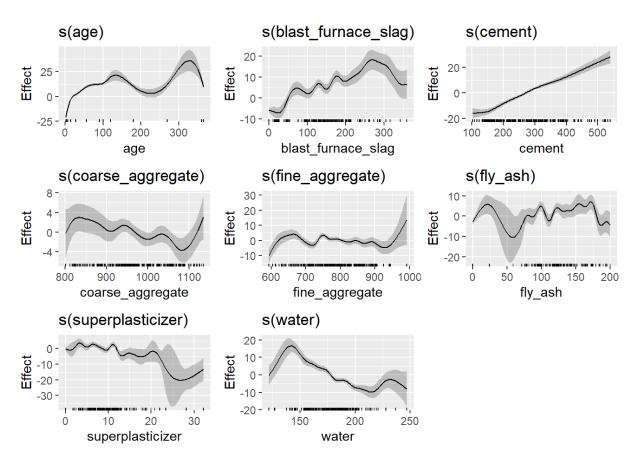
Response vs. Fitted Values



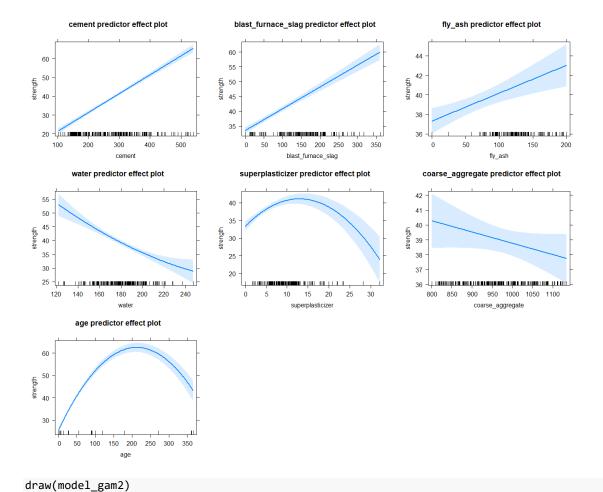


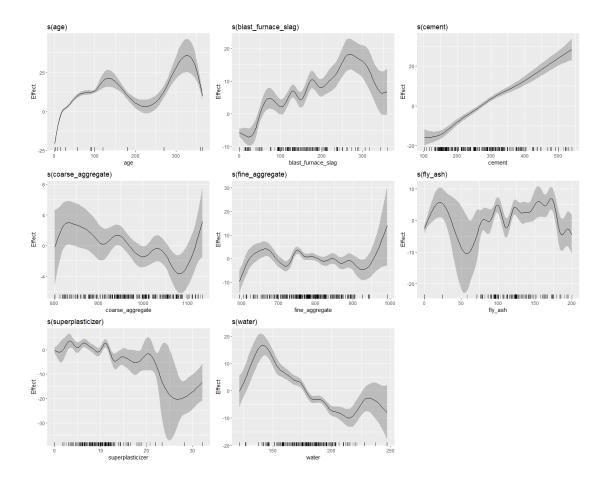
```
##
## Method: GCV
                 Optimizer: magic
## Smoothing parameter selection converged after 82 iterations.
## The RMS GCV score gradient at convergence was 0.0004353583 .
## The Hessian was not positive definite.
## Model rank = 133 / 133
## Basis dimension (k) checking results. Low p-value (k-index<1) may</pre>
\#\# indicate that k is too low, especially if edf is close to k'.
##
##
                                  edf k-index p-value
                           9.00
## s(cement)
                                         0.99
                                                0.375
                                6.19
## s(blast_furnace_slag) 19.00 13.96
                                         1.03
                                                0.845
## s(fly_ash)
                          19.00 15.09
                                         1.05
                                                0.940
## s(water)
                          19.00 12.16
                                         1.01
                                                0.635
## s(superplasticizer)
                          19.00 16.00
                                         0.97
                                                0.220
                                         0.96
## s(coarse_aggregate)
                          19.00
                                9.28
                                                0.105
## s(fine_aggregate)
                          19.00 15.01
                                         0.95
                                                0.055
## s(age)
                           9.00
                                8.18
                                         1.07
                                                0.990
## --
## Signif. codes:
                   0 '***' 0.001 '**' 0.01 '*' 0.05 '.' 0.1 ' ' 1
summary(model_gam2)
##
## Family: gaussian
## Link function: identity
## Formula:
```

```
## strength ~ s(cement) + s(blast_furnace_slag, k = 20) + s(fly_ash,
##
       k = 20) + s(water, k = 20) + s(superplasticizer, k = 20) +
       s(coarse_aggregate, k = 20) + s(fine_aggregate, k = 20) +
##
##
       s(age, k = 10)
##
## Parametric coefficients:
##
               Estimate Std. Error t value Pr(>|t|)
## (Intercept) 34.7507
                            0.1821
                                     190.9
                                             <2e-16 ***
##
## Signif. codes: 0 '***' 0.001 '**' 0.05 '.' 0.1 ' ' 1
##
## Approximate significance of smooth terms:
##
                            edf Ref.df
                                             F p-value
                                        23.149 < 2e-16 ***
## s(cement)
                          6.188
## s(blast_furnace_slag) 13.959
                                    19
                                         7.039 < 2e-16 ***
## s(fly_ash)
                         15.091
                                    19
                                         3.670 < 2e-16
## s(water)
                         12.163
                                         8.275 < 2e-16 ***
                                    19
## s(superplasticizer)
                         16.005
                                    19
                                         3.923 < 2e-16 ***
## s(coarse_aggregate)
                          9.276
                                    19
                                         1.151 0.00268 **
                                         5.826 < 2e-16 ***
## s(fine_aggregate)
                         15.014
                                    19
## s(age)
                          8.177
                                     9 298.256 < 2e-16 ***
## --
## Signif. codes: 0 '***' 0.001 '**' 0.05 '.' 0.1 ' ' 1
##
## R-sq.(adj) = 0.902
                         Deviance explained = 91.5%
## GCV = 28.651 Scale est. = 24.965
draw(model_gam2)
```



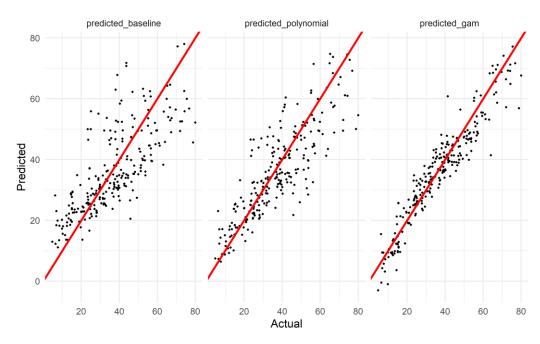
```
# modelis statistiškai reikšmingai skiriasi nuo modelio su mažesniu mazgų skaičiumi
anova(model_gam, model_gam2,test="F")
## Analysis of Deviance Table
## Model 1: strength ~ s(cement) + s(blast_furnace_slag) + s(fly_ash) + s(water) +
       s(superplasticizer) + s(coarse_aggregate) + s(fine_aggregate) +
##
       s(age)
## Model 2: strength ~ s(cement) + s(blast_furnace_slag, k = 20) + s(fly_ash,
##
       k = 20) + s(water, k = 20) + s(superplasticizer, k = 20) +
       s(coarse\_aggregate, k = 20) + s(fine\_aggregate, k = 20) +
##
##
       s(age, k = 10)
##
    Resid. Df Resid. Dev
                             Df Deviance
                                              F Pr(>F)
## 1
       694.30
                   20108
## 2
       643.57
                   16380 50.732
                                 3728.2 2.9437 3.48e-10 ***
## ---
## Signif. codes: 0 '***' 0.001 '**' 0.05 '.' 0.1 ' ' 1
# modelio palyginimas su prieš tai sudarytu polinominės regresijos modeliu
library(effects)
AIC(model polynomial)
## [1] 5247.325
AIC(model_gam2)
## [1] 4651.725
plot(predictorEffects(model_polynomial))
```





Kaip pastebėta naudojantis praėjusiais grafikais, glodniųjų splainų modeliu gauti daug sudėtingesni sąryšiai negu gauti naudojantis polinominės regresijos modeliu. Nors sudarytame modelyje naudoti glodnieji splainai, kurie dėl glodinimo baudos apsaugo nuo per didelio modelio prisitaikymo mokymo duomenims, pasirinkta panaudoti testavimo aibę patikrinti, ar modelis tikrai nepersimokė ir tuo pačiu metu įvertinti visų sudarytų modelių prognozavimo kokybę. Gauta, kad tiek pagal vidutinę absoliučią paklaidą (Mean Absolute Error), tiek matuojant vidutinę kvadratinę paklaidą (Root) Mean Square Error), glodniųjų splainų modeliu gauti žymiai geresni rezultatai už prieš tai sudarytus modelius (paklaidos daugiau nei dvigubai mažesnės lyginant su paprastu tiesiniu modeliu, apie 50% mažesnės lyginant su polinominiu modeliu). Grafiškai modelių prognozės palygintos naudojant prognozuotų ir tikrų reikšmių sklaidos diagramas. Matoma, kad glodniųjų splainų modeliu gauta daug mažesnė sklaida aplink prognozuotos ir tikros reikšmės lygybės tiesę lyginant su kitais modeliais.

```
set <- metric_set(rmse,mae)</pre>
set(concrete_test, strength, predicted_baseline)
## # A tibble: 2 x 3
     .metric .estimator .estimate
     <chr>
            <chr>
                            <dbl>
## 1 rmse
            standard
                            11.1
## 2 mae
            standard
                             8.79
set(concrete_test, strength, predicted_polynomial)
## # A tibble: 2 x 3
##
     .metric .estimator .estimate
##
     <chr> <chr>
                            <dbl>
                             9.08
             standard
## 1 rmse
## 2 mae
            standard
                             6.76
set(concrete_test, strength, predicted_gam)
## # A tibble: 2 x 3
     .metric .estimator .estimate
##
##
     <chr> <chr>
                            <dbl>
## 1 rmse
            standard
                             5.47
## 2 mae
            standard
                             4.28
# tiek pagal MAE, tiek pagal RMSE naudojant gam modeli gaunami geresni rezultatai
# Modelių prognozių palyginimas
concrete test %>%
 pivot_longer(c(predicted_gam, predicted_polynomial,predicted_baseline)) %>%
 ggplot(aes(strength, value)) +
 geom_point() +
 facet wrap(vars(name)) +
 geom_abline(color = "red", size = 1.25) +
  labs(x = "Actual", y = "Predicted") +
 theme minimal()
```



Išvados:

Atlikus pirminę duomenų aibės analizę rasta, kad betono stipris gali netiesiškai priklausyti nuo jo mišinį sudarančių medžiagų, todėl laikyta, kad paprastas tiesinės regresijos modelis gali būti netinkamas prognozuoti betono stiprį.

Siekiant turėti palyginamąjį modelį sudarytas paprastas tiesinės regresijos modelis. Kaip vienas iš būdų pagerinti modelį buvo pasirinkta polinominė regresija. Į modelį buvo įtraukti antrieji laipsniai tų kintamųjų, kuriuose pagal tiesinės regresijos diagnostinius grafikus rasta neišnaudotos informacijos. Pasitelkiant grafines modelių diagnostikas ir statistinius testus laikyta, kad antru modeliu gaunami geresni rezultatai.

Siekiant dar labiau pagerinti rezultatus (ir parodyti, kad aukštesnių laipsnių įtraukimas į paprasta tiesinį modelį nėra pakankamas tikslioms prognozėms gauti) sudarytas apibendrintas adityvus regresijos modelis, naudojantis glodniuosius splainus. Pirmiausia naudotas numatytasis mazgų skaičius, tačiau naudojant modelio diagnostikas pasirinkta šį skaičių padidinti. Parinkus didesnį mazgų skaičių modelio diagnostikose beveik nerasta nukrypimų. Visos modelyje naudotos kovariantės modelyje statistiškai reikšmingos.

Testavimo aibė panaudota įvertinti visų šių modelių gebėjimą prognozuoti reikšmes. Kaip ir tikėtasi, geriausi rezultatai gauti naudojant glodniųjų splainų modelį (paklaidos pagal dvi skirtingas matavimo metrikas daugiau nei dvigubai mažesnės už tiesinį ir apie 50% mažesnės už polinominį modelį). Dėl šios priežasties daroma išvada, kad sudarytas glodniųjų splainų apibendrintas adityvus tinkamas prognozuoti betono stiprį, be to šiuo modeliu gaunami ryškiai geresni rezultatai negu naudojant paprastesnį metodą netiesiniams sąryšiams tarp atsako ir kovariančių modeliuoti, kuriuo paprastas tiesinės regresijos modelis papildomas kovariančių aukštesniais laipsniais.