Regressões Não Lineares

Danilo A C Souto

Programação Não Linear

Diferentemente dos sistemas lineares, a programação não linear é um sistema equações sobre um conjunto de variáveis cujos valores são desconhecidos e uma *Função Objetivo* a ser maximizada, ou minimizada, sendo esta não Linear.

Modelos lineares, refletem apenas aproximações dos modelos reais. Os fenômenos naturais são melhor representados por modelos não lineares.

- As equações precisam ser resolvidas em todas as áreas

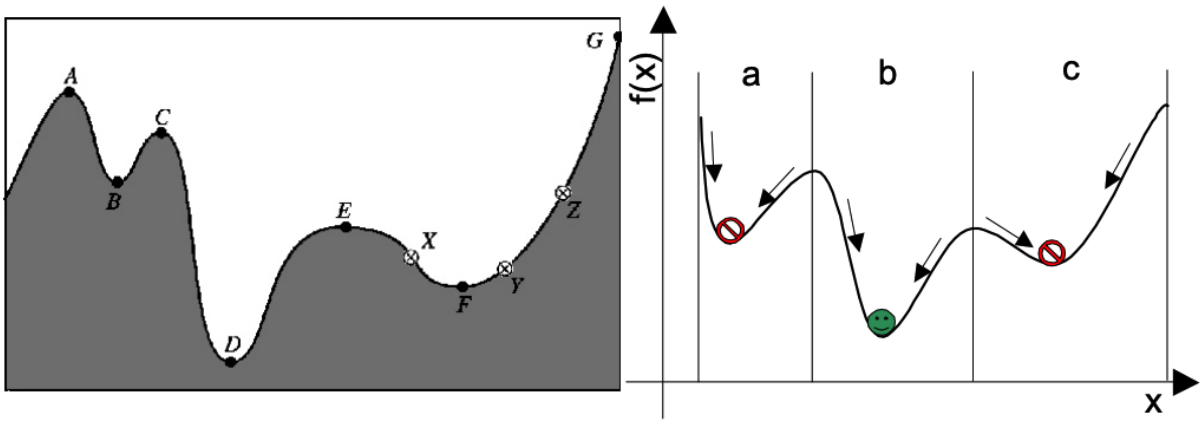
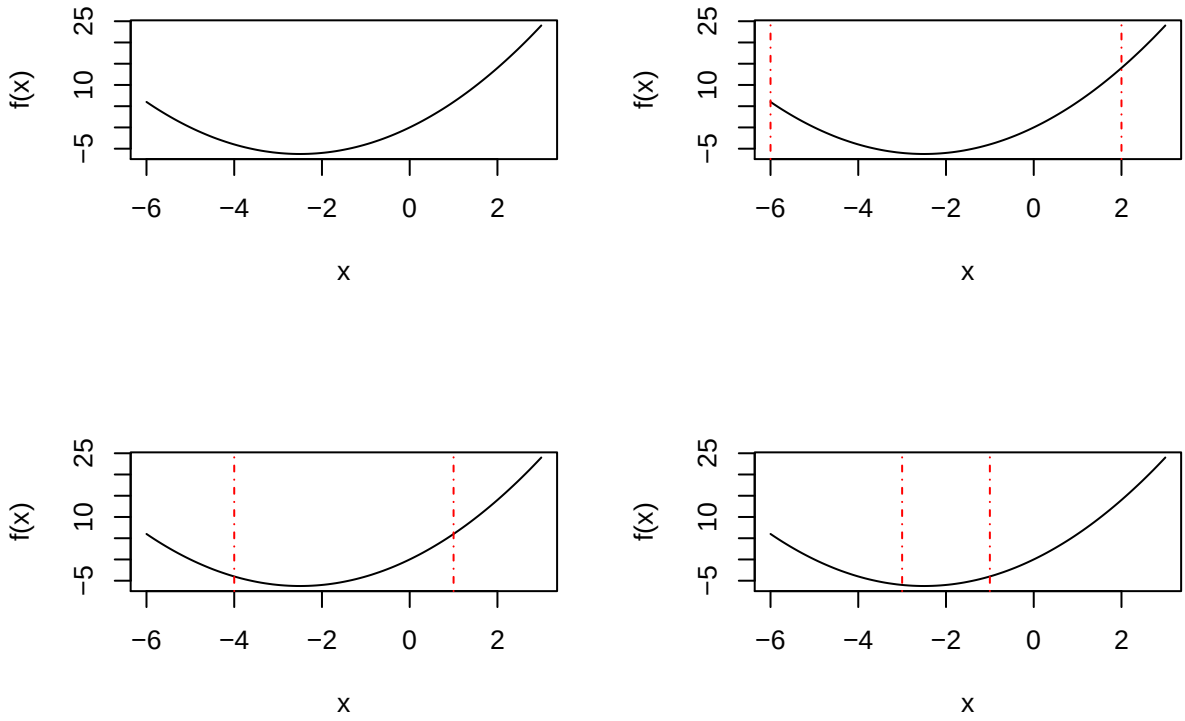


Figure 1: https://www.ufjf.br/epd015/files/2010/06/ProgramacaoNaoLinear.pdf

Métodos de confinamento

Uma das formas é utilizar um método de confinamento. Ao utilizar um método de confinamento, definimos uma área área para busca e esse intervalo é reduzido sucessivamente até uma precisão desejada.

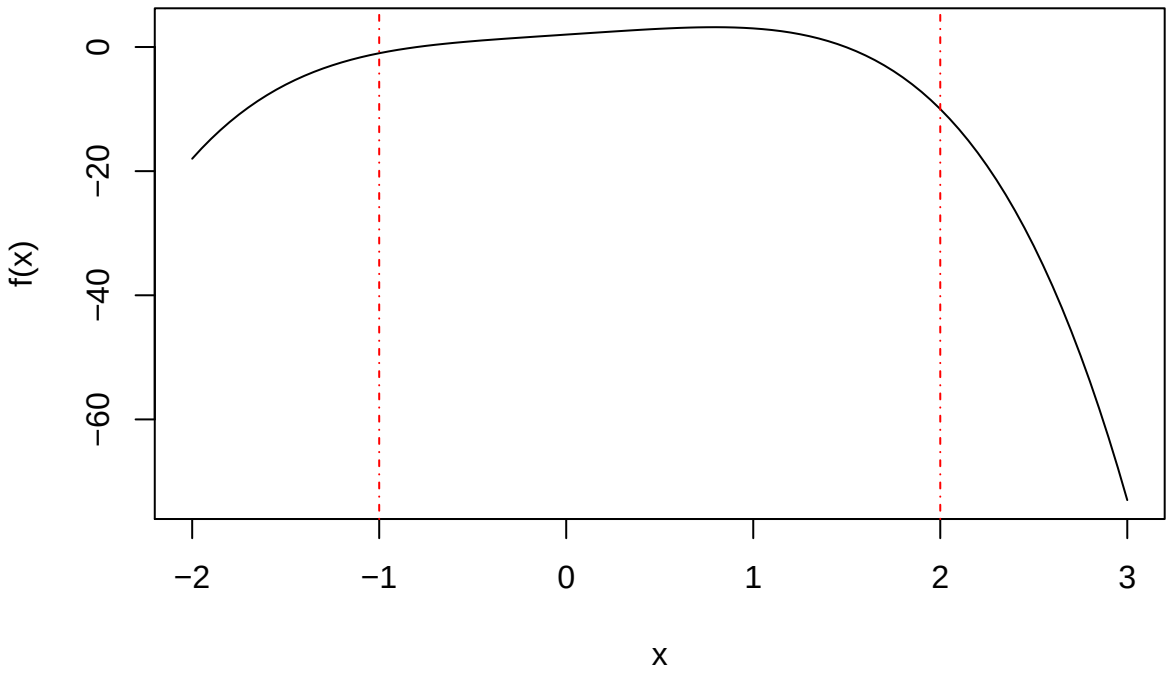


Outro exemplo é a função abaixo

$$f(x) = -x^4 + 2x + 2$$

Quando plotamos a equação temos a seguinte imagem:

```
f <- function(x){-x^4+2*x+2}
curve(expr = f, from = -2, to =3)
abline(v = -1, col="red", lty=4)
abline(v = 2, col="red", lty=4)
```



Como ela possui apenas uma dimensão, neste caso dada por x, podemos utilizar a função do pacote **stats**, padrão no R, `optimize(funcao, intervalo, tol, maximum)`

Portanto para definirmos uma função para otimização temos que definir 4 itens:

1. Função a ser otimizada
2. Intervalo de pesquisa
3. Tolerância ou precisão desejada
4. Se a função deve ser maximizada ou minimizada

Para a otimização, ou melhor, maximização da função descrita acima $f(x)=-x^4+2x+2 $ temos o seguinte código:

```
opt <- optimize(f,interval = c(-2, 2), tol = 0.0001, maximum = T)
```

```
## [1] -0.472136
## [1] 0.472136
## [1] 1.055728
## [1] 1.121517
## [1] 0.8634195
## [1] 0.7139625
## [1] 0.8983338
## [1] 0.9058533
## [1] 0.9087909
## [1] 0.9085694
## [1] 0.9085361
## [1] 0.9086028
## [1] 0.9085694
```

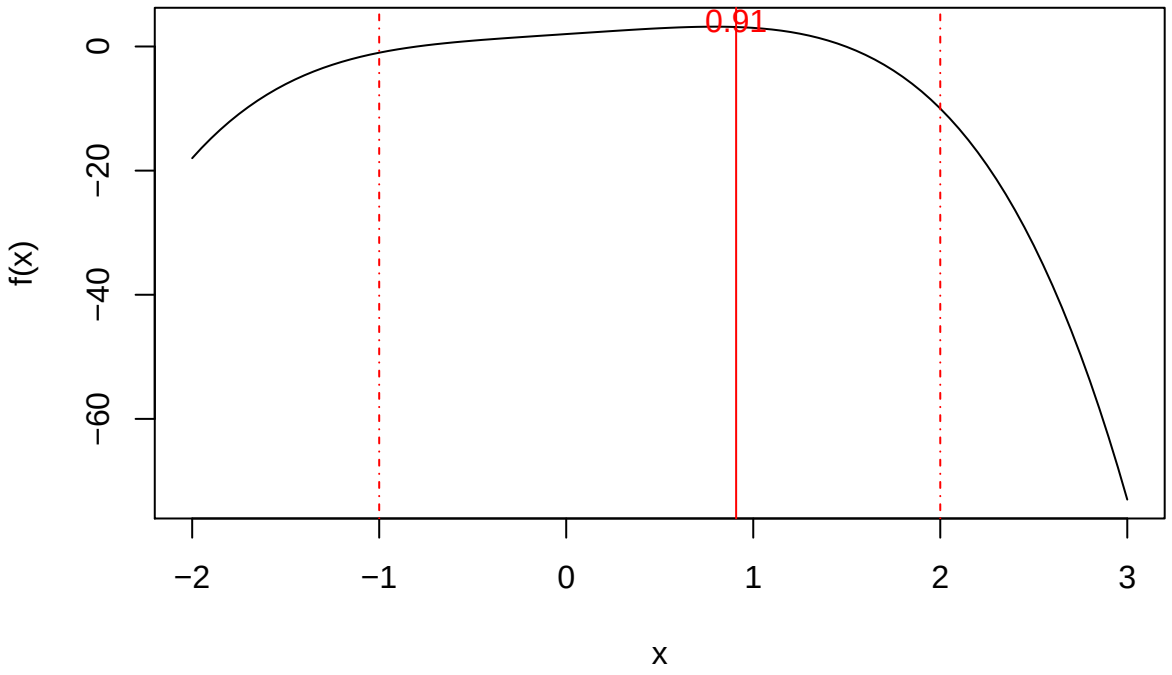
Note que a função faz busca no intervalo alterando os valores até alcançar a precisão desejada. Como saimos temos

```
opt
```

```
## $maximum
## [1] 0.9085694
##
## $objective
## [1] 4.044261
```

Caso o problema seja de minimização, no lugar do *maximum* teremos *minimum*

```
curve(expr = f, from = -2, to =3)
abline(v = -1, col="red", lty=4)
abline(v = 2, col="red", lty=4)
abline(v = opt$maximum, col="red")
text(round(opt$maximum,2), col= "red", x = opt$maximum, y = opt$objective)
```



Funções não lineares

Mas para as funções descritas acima é muito fácil encontrar o máximo. Basta fazer a derivada da função e igualar a zero!!!

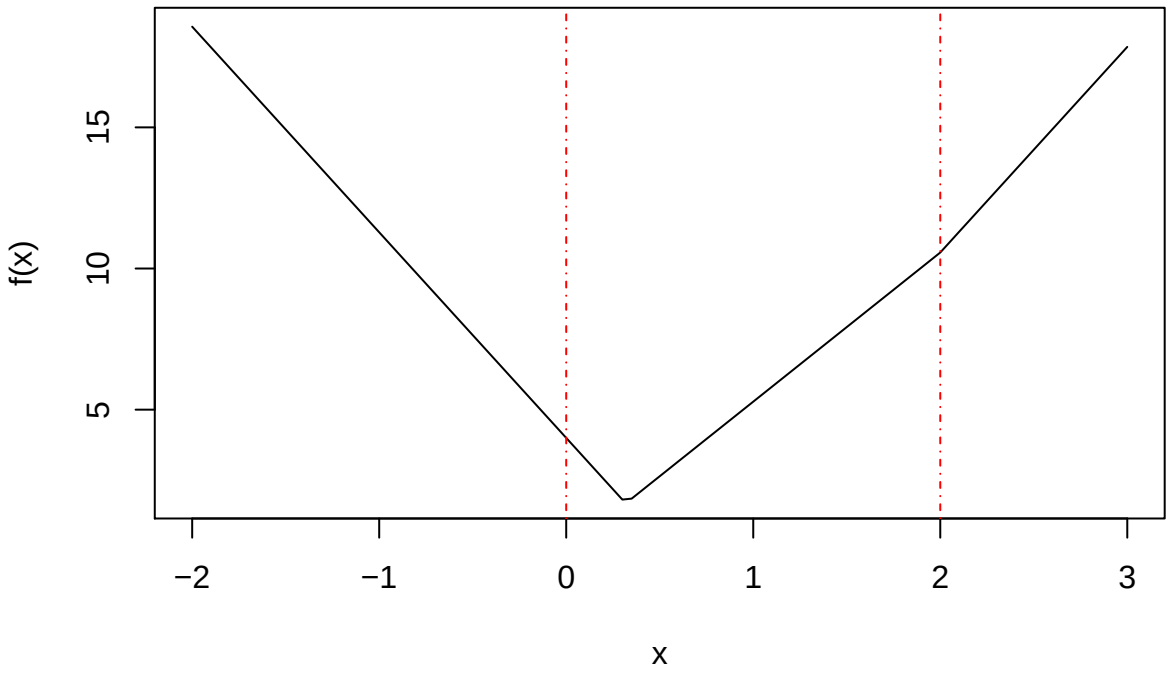
Correto?

Mas para funções não deriváveis como a função a seguir

$$f(x) = |x - 2| + 2.|\pi.x - 1|$$

Segue a imagem da função. Como pode ser observado não fica claro qual seria o mínimo dela. E perceba que neste caso temos um problema de minimização. Ou seja temos que encontrar o menor valor.

```
f <- function(x){abs(x-2) + 2*abs(pi*x-1)}
curve(expr = f, from = -2, to =3)
abline(v = -0, col="red", lty=4)
abline(v = 2, col="red", lty=4)
```

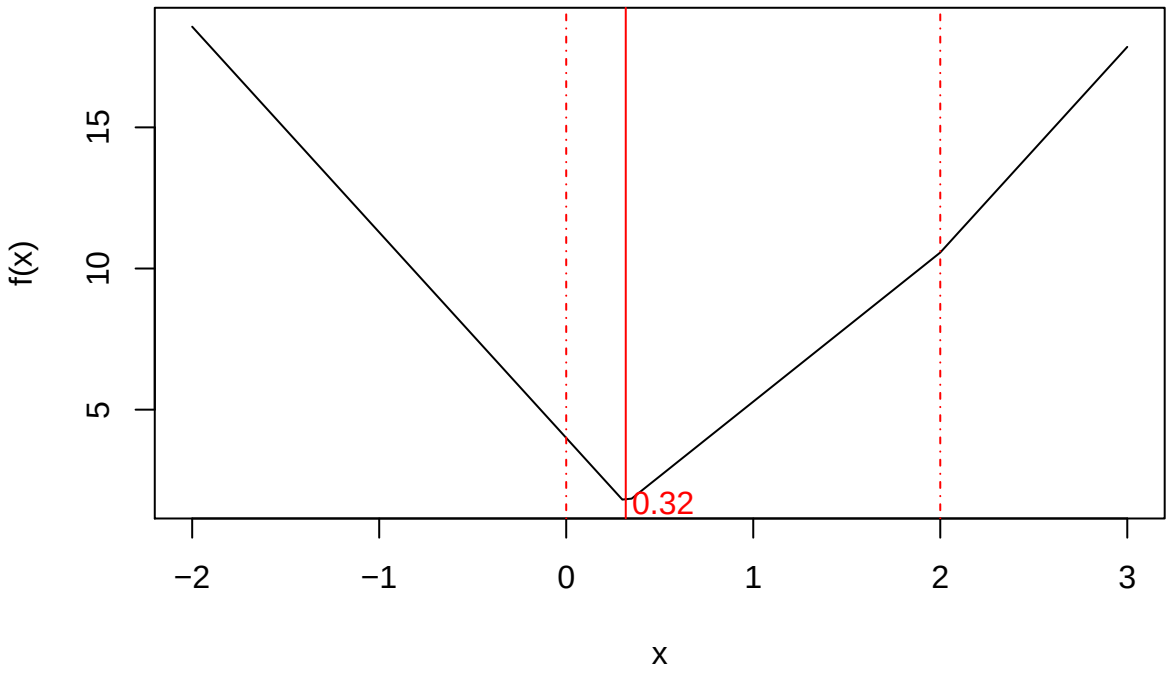


Neste caso a computação nos ajuda a resolver o problema de otimização. Mas lembre-se de que devemos seguir os mesmos passos já descritos

1. Definir a função a ser otimizada
2. Definir o intervalo de busca
3. Definir a precisão desejada
4. Definir se é um critério de maximização ou minimização

O código pode ser visto a seguir:

```
opt <- optimize(f,interval = c(0, 2), tol = 0.0001 , maximum = FALSE)
curve(expr = f, from = -2, to =3)
abline(v = -0, col="red", lty=4)
abline(v = 2, col="red", lty=4)
abline(v = opt$minimum, col="red")
text(round(opt$minimum,2), col= "red", x = opt$minimum+0.2, y = opt$objective)
```



Para este problema temos x = 0.3183126 e y = 1.6817044

Multi Dimenensões

As funções podem possuir muitas dimensões ou muitas variáveis. Assim os sistemas simplificados, como vistos anteriormente, não funcionam.

Para isso temos alguns pacotes específicos para este fim, dentre tantos temos o `optimx()`

Um conjunto de métodos não lineares estão no pacote *optimx*

```
require(optimx)
optimx(par, fn, gr=Null, Hess=Null, lower=inf,
upper=inf, method='', itnmax=Null, ...)
```

- Métodos baseados em Gradiente Descendente
- Métodos baseados em Hessiana
- Nelder-Mead

Hessiana

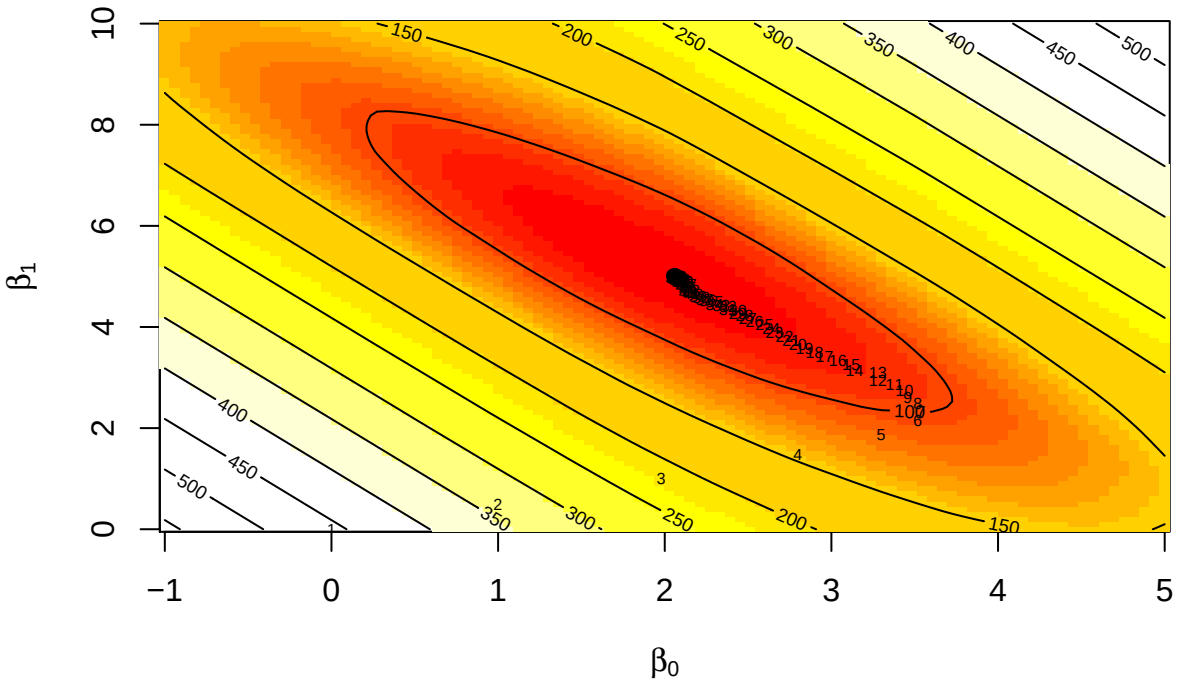
- Vantagem
  - Converge rapidamente
- Desvantagem
  - As derivadas parciais devem ser determinadas
  - A cada passo involve a inversão de uma matriz
  - A estimativa inicial deve estar próxima da solução ideal

Gradiente Descendente

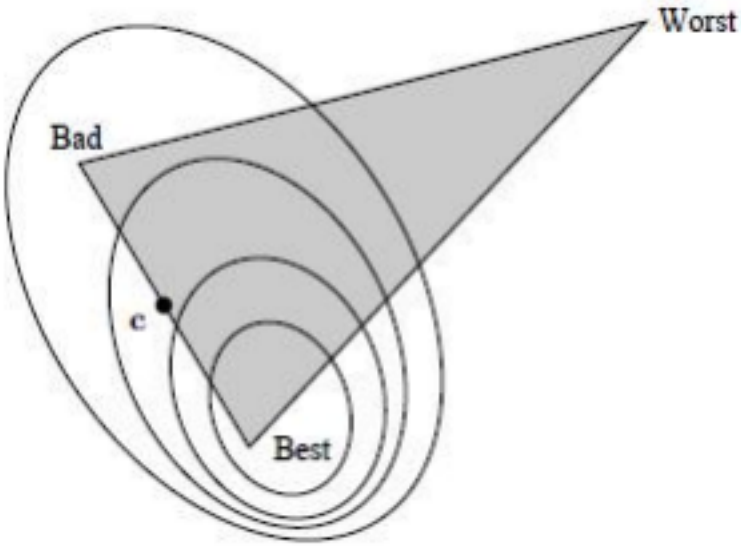
- Vantagem
  - Não precisa calcular a matriz inversa
  - Cada itereção é barata computacionalmente
  - O tamanho do passo pode ser adaptativo

- Desvantagem
  - Precisa de *tunning*
  - Mais iterações que o método de Newton

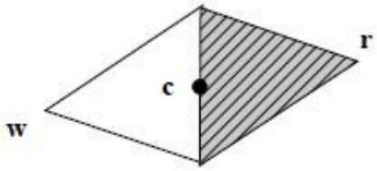
```
## [1]  0.0000000 -0.2626263
```



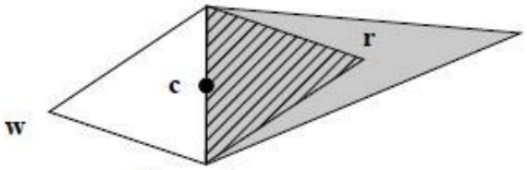
Nelder Mead



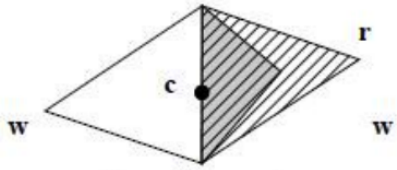
Aqui são os 5 possíveis caminhos que a função pode assumir a cada passo



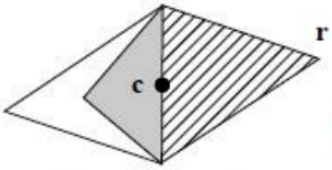
Reflection



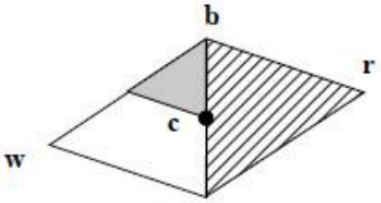
Expansion



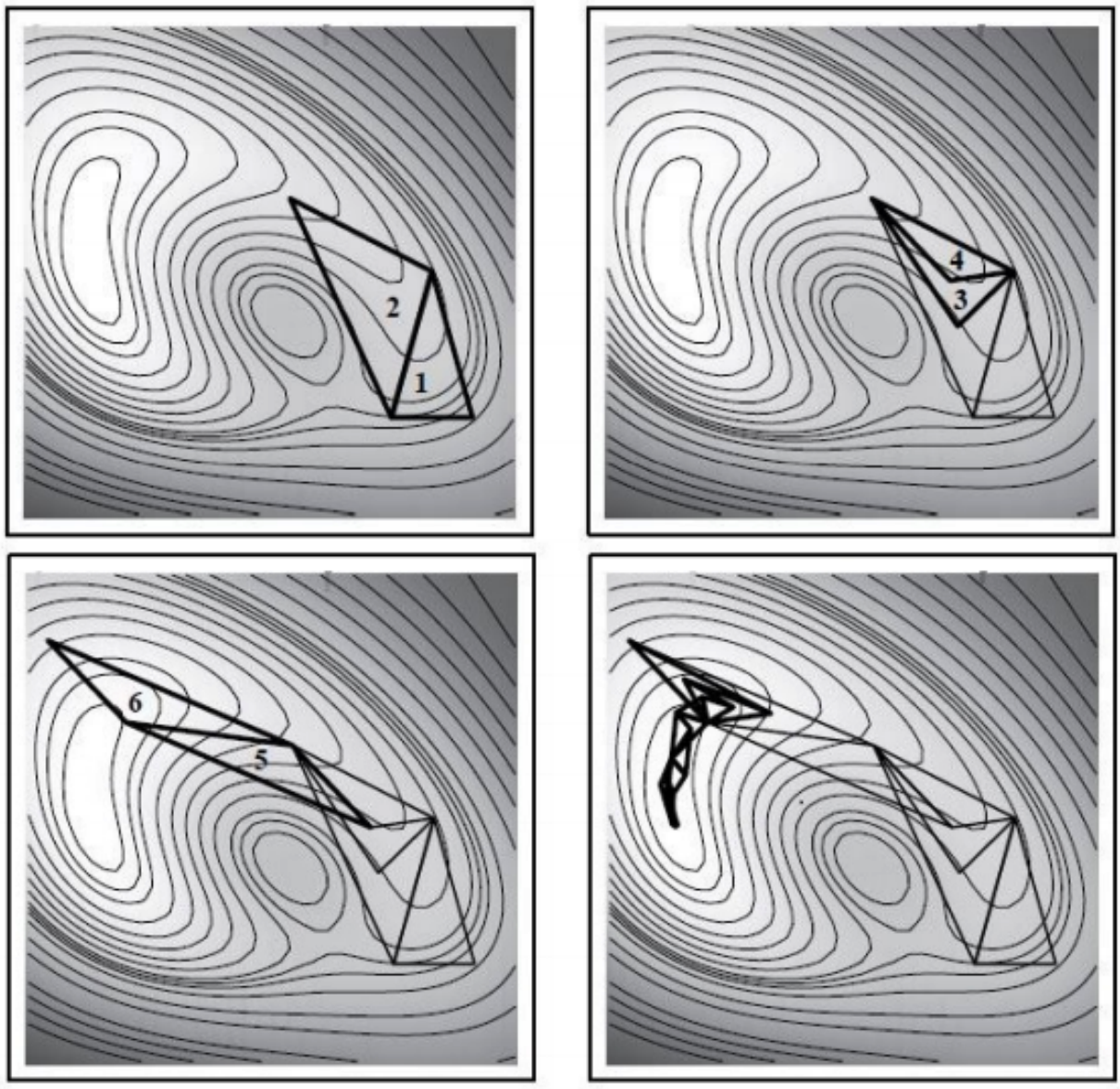
Outer Contraction



Inner Contraction



Shrinkage



- Vantagens
  - Não precisa de derivadas
  - Eficiente para um número baixo de dimensões
  - Pode ser utilizado para funções não contínuas
  - Resistente ao ruído
- Desvantages
  - Depende da natureza do problema
  - Pode convergir para soluções intermediárias que não são nem máximos nem mínimos
  - Baixa velocidade

Givens, G. H., Hoeting, J. A. (2013). Computational Statistics. 2 ed. Wiley

Exemplo de função multidimensional

$$f(x, y) = (x^2 + y - 11)^2 + (x + y^2 - 7)^2$$

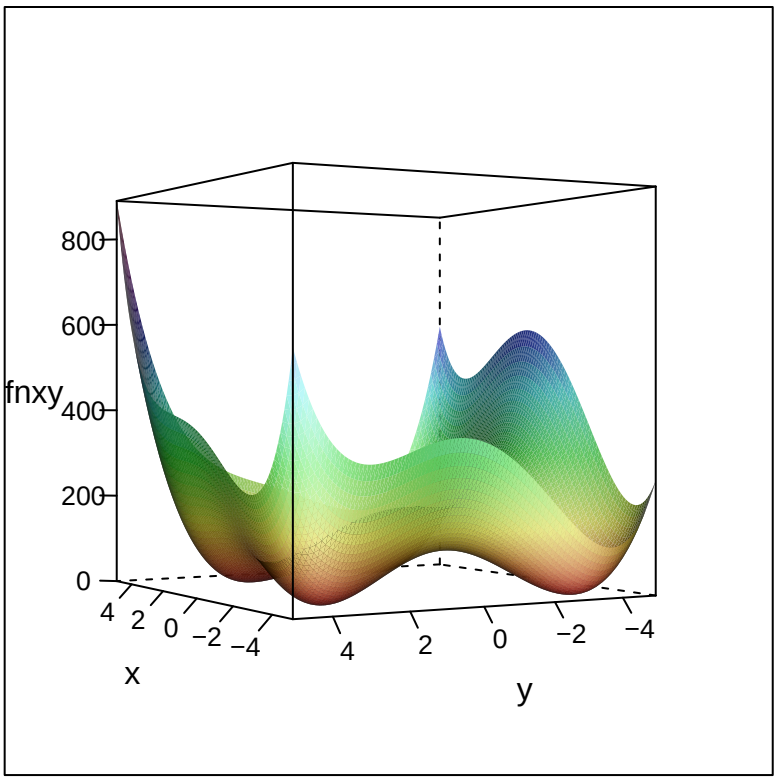
Note que para este caso temos mais de um parâmetro. Na definição da função temos uma entrada de um vetor como parâmetros.

```
#install.packages("optimx")
library(optimx)

#definição da função
fn <- function(para){
  #transforma o vetor de parametros para em matriz
  matrix.A <- matrix(para, ncol=2)
  x <- matrix.A[,1]
  y <- matrix.A[,2]

  #função a ser otimizada
  f.x <- (x^2+y-11)^2+(x+y^2-7)^2

  return(f.x)
}
```

Aqui a visualização da função. Como pode ser visto é uma função com vários pontos de mínimos locais.

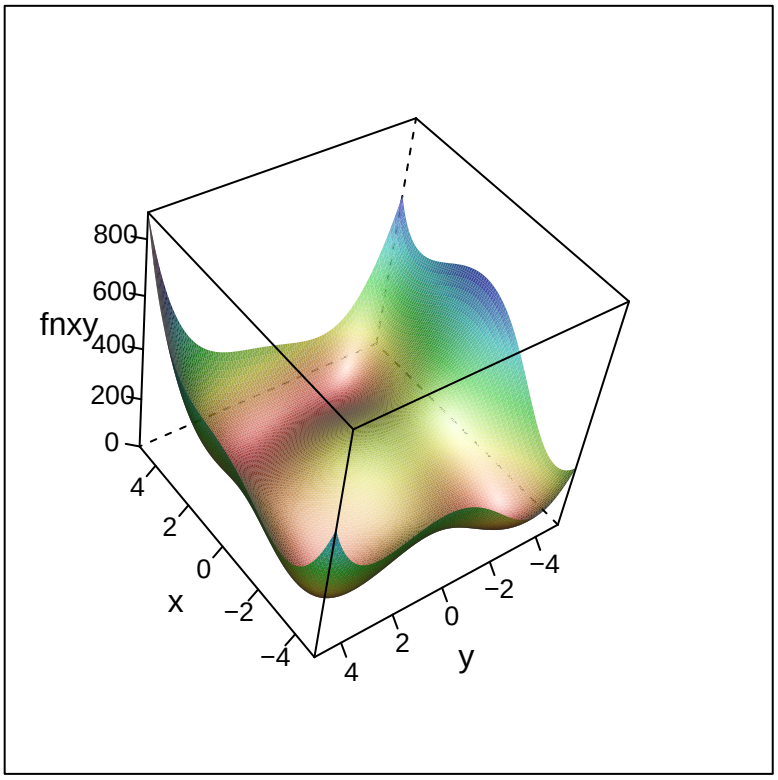
Portanto precisamos descobrir como encontrar o mínimo global

```
wireframe(fnxy ~ x*y, data = df, shade = TRUE, drape=FALSE,
scales = list(arrows = FALSE),
screen = list(z=-240,x=-90))
```



De outro ângulo

```
wireframe(fnxy ~ x*y, data = df, shade = TRUE, drape=FALSE,
scales = list(arrows = FALSE),
screen = list(z=-240, x=-45, y=10))
```



Nelder Mead

```
#parametros iniciais
par <- c(1,1)

optimx(par, fn, method = "Nelder-Mead")
```

```
##                    p1       p2       value fevals gevals niter convcode  kkt1
## Nelder-Mead 2.999995 2.000183 5.56163e-07     67     NA    NA        0 FALSE
##             kkt2 xtime
## Nelder-Mead TRUE 0.001
```

Gradientes

```
#parametros iniciais
par <- c(1,1)

optimx(par, fn, method = "CG")
```

```
##    p1 p2        value fevals gevals niter convcode kkt1 kkt2 xtime
## CG  3  2 1.081231e-12    119     31    NA        0 TRUE TRUE 0.001
```

BFGS

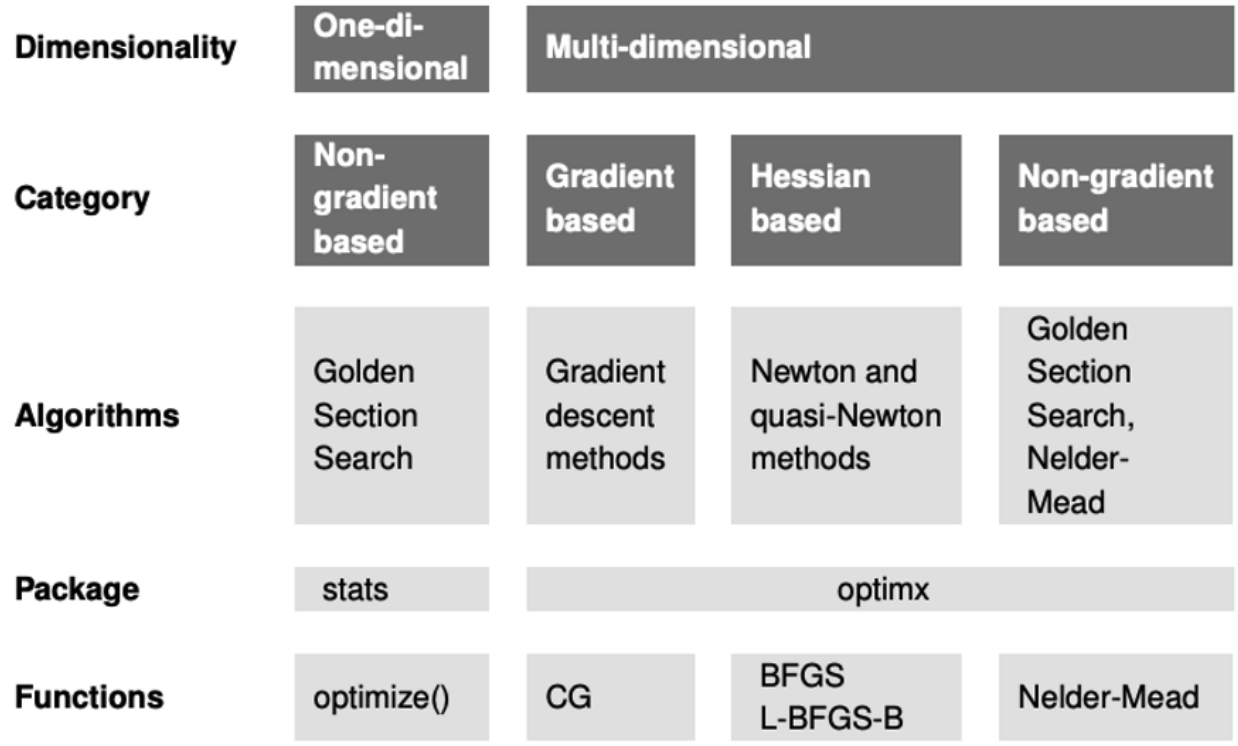
```
#parametros iniciais
par <- c(1,1)
```

```r
optimx(par, fn, method = "BFGS")
```

```
##      p1 p2        value fevals gevals niter convcode kkt1 kkt2 xtime
## BFGS  3  2 1.354193e-12     32     11    NA        0 TRUE TRUE     0
```

Vimos aqui os valores encontrados para os parametros **p1 e p2** como o número de vezes que a função foi avaliada em **fevals**. Outro resultado muito importante a ser avaliado é **convcode** pois ele indica os possíveis casos de sucesso ou falha na otimização. (0 para sucesso).

Em resumo, quanto aos métodos de otimização, temos



Regressões Não Lineares

"Modelos não lineares (MNL) usualmente são sustentados por alguma informação sobre a relação entre Y e x. Tal informação está vinculada à diferentes graus de conhecimento como

1) uma análise de um diagrama de dispersão de y contra x,
2) restrições de forma da função (ser monótona, ser sigmóide),
3) a solução de uma equação diferencial sustentada por algum príncipio/teoria,
4) ou a interpretação dos seus parâmetros. Seja qual for o grau de conhecimento, **a escolha de um modelo não linear raramente é empírica.**" (Zeviani, 2013)

Possui algumas vantages: * sustentação em princípios físicos, químicos ou biológicos * Parâmetros de interesse do pesquisador * Podem ser feitas predições fora do domínio observado * Poucos parâmetros * Conhecimento do pesquisador

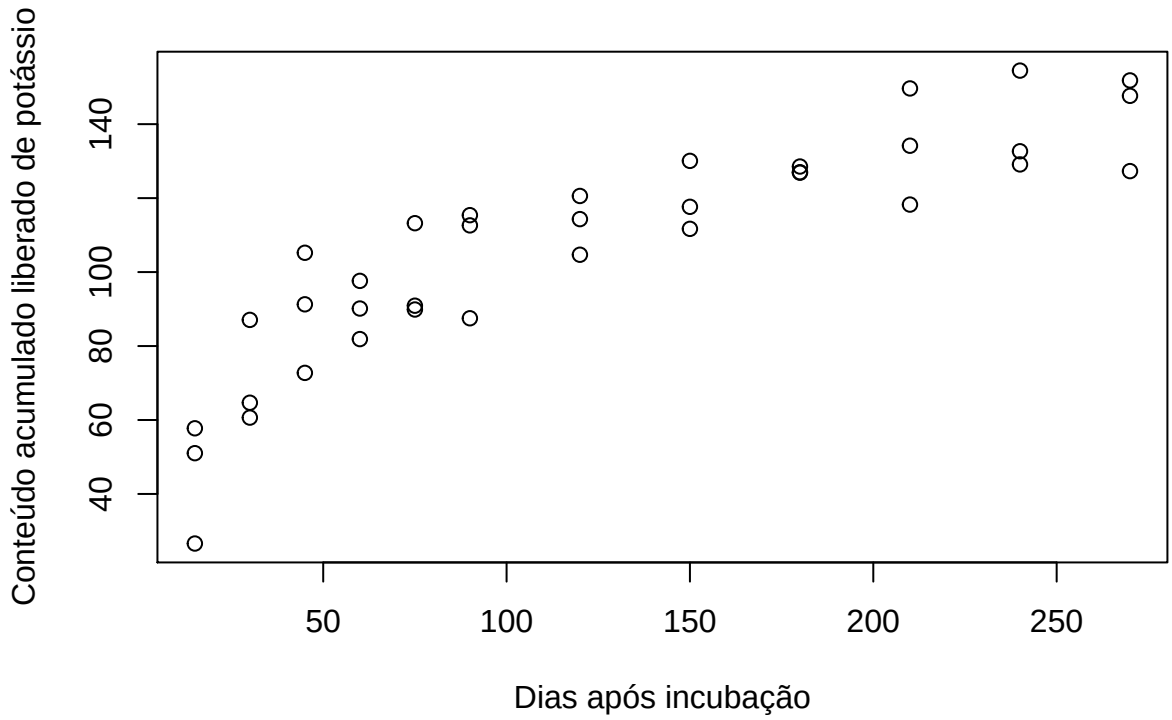
Mas também tem desvantagens * Procedimentos iterativos * Conhecimento sobre os parâmetros iniciais * Exigem conhecimento do pesquisador

A função no R básica para trabalhar modelos não lineares é `nls()`

Exemplo: Quantidade de potássio liberado por esterco (Zeviani, 2013)

```
da <- data.frame(y=c(51.03, 57.76, 26.60, 60.65, 87.07, 64.67, 91.28, 105.22,
                     72.74, 81.88, 97.62, 90.14, 89.88, 113.22, 90.91, 115.39,
                     112.63, 87.51, 104.69, 120.58, 114.32, 130.07, 117.65,
                     111.69, 128.54, 126.88, 127.00, 134.17, 149.66, 118.25,
                     132.67, 154.48, 129.11, 151.83, 147.66, 127.30),
                 x=rep(c(15, 30, 45, 60, 75, 90, 120, 150, 180, 210, 240, 270), each=3),
                 r=rep(1:3, 12))
```

```
plot(y~x, data=da, xlab="Dias após incubação", ylab="Conteúdo acumulado liberado de potássio")
```



Deve-se considerar uma função crescente a partir da origem (Michalis-Menten)

$$f(x, \theta) = \frac{\theta_\alpha x}{\theta_v + x}$$

Como a fórmula é de conhecimento do pesquisador, temos que θ_a é a assíntota e θ_v é a meia vida. Desta maneira temos que a fórmula a ser ajustada é `formula=y~A*x/(V+x)` e podemo escolher o intervalo de busca entre 160 e 40.

```
 n0 <- nls(formula=y~A*x/(V+x), data=da, start=list(A=160, V=40), trace=T)
```

```
## 4698.534 :  160  40
## 4547.358 :  157.59100  40.52048
## 4547.345 :  157.62960  40.57067
## 4547.345 :  157.63309  40.57431
```

```
summary(n0)
```

```
##
## Formula: y ~ A * x/(V + x)
##
```

```
## Parameters:
##   Estimate Std. Error t value Pr(>|t|)
## A  157.633      6.110  25.800  < 2e-16 ***
## V   40.574      5.658   7.171 2.71e-08 ***
## ---
## Signif. codes:  0 '***' 0.001 '**' 0.01 '*' 0.05 '.' 0.1 ' ' 1
##
## Residual standard error: 11.56 on 34 degrees of freedom
##
## Number of iterations to convergence: 3
## Achieved convergence tolerance: 7.907e-06
```

Aqui temos o intervalo de confiança

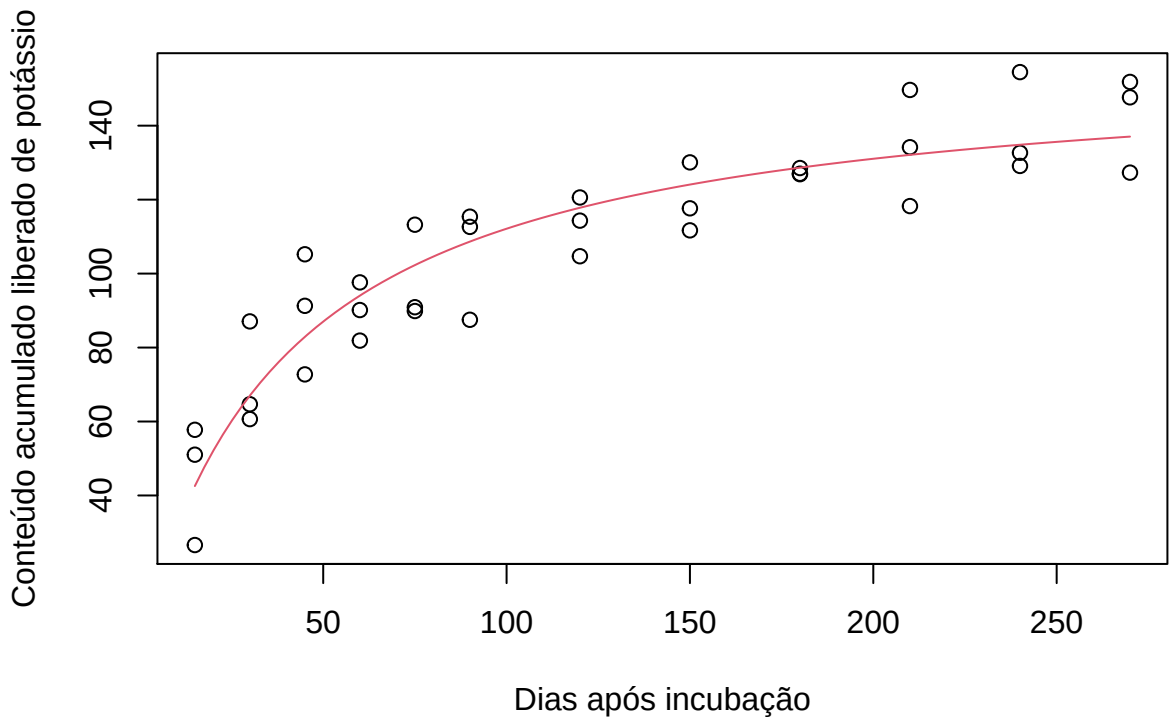
```
intervalo <- confint(n0)
```

```
## Waiting for profiling to be done...
```

```
intervalo
```

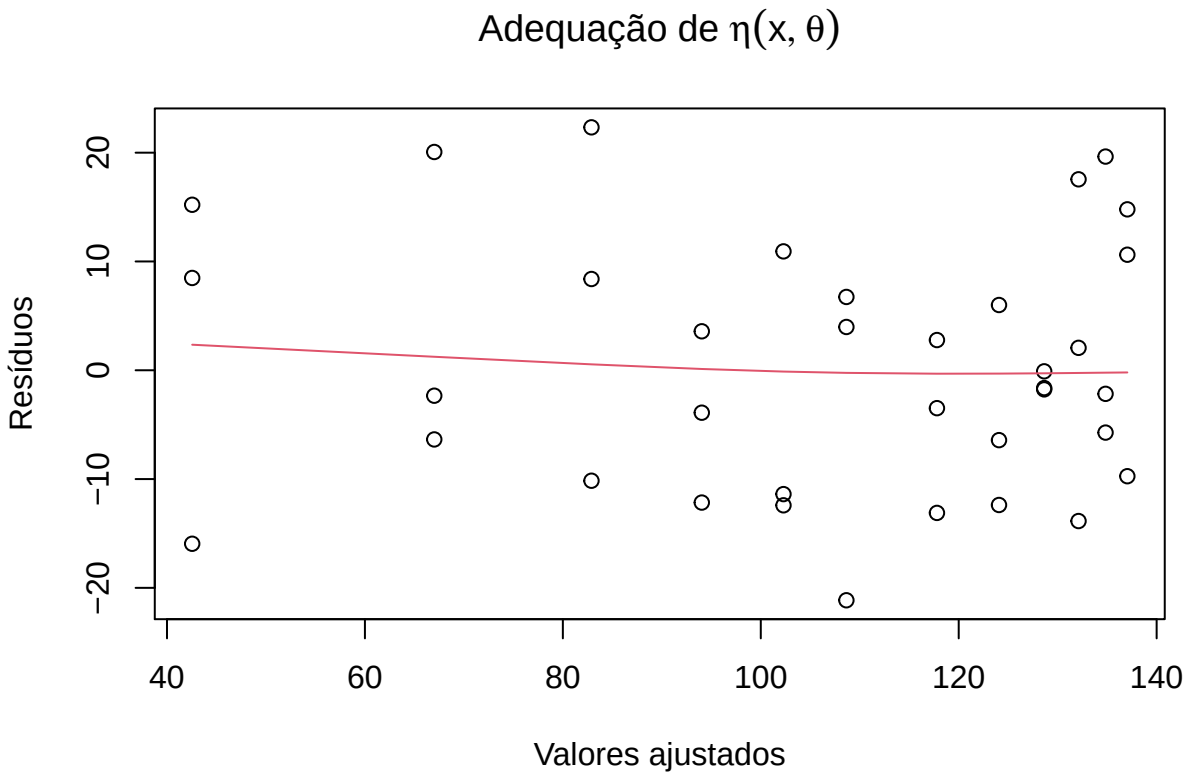
```
##        2.5%     97.5%
## A 145.75164 171.54842
## V  30.02655  54.21178
```

```
plot(y~x, data=da, xlab="Dias após incubação", ylab="Conteúdo acumulado liberado de potássio")
with(as.list(coef(n0)), curve(A*x/(V+x), add=TRUE, col=2) )
```

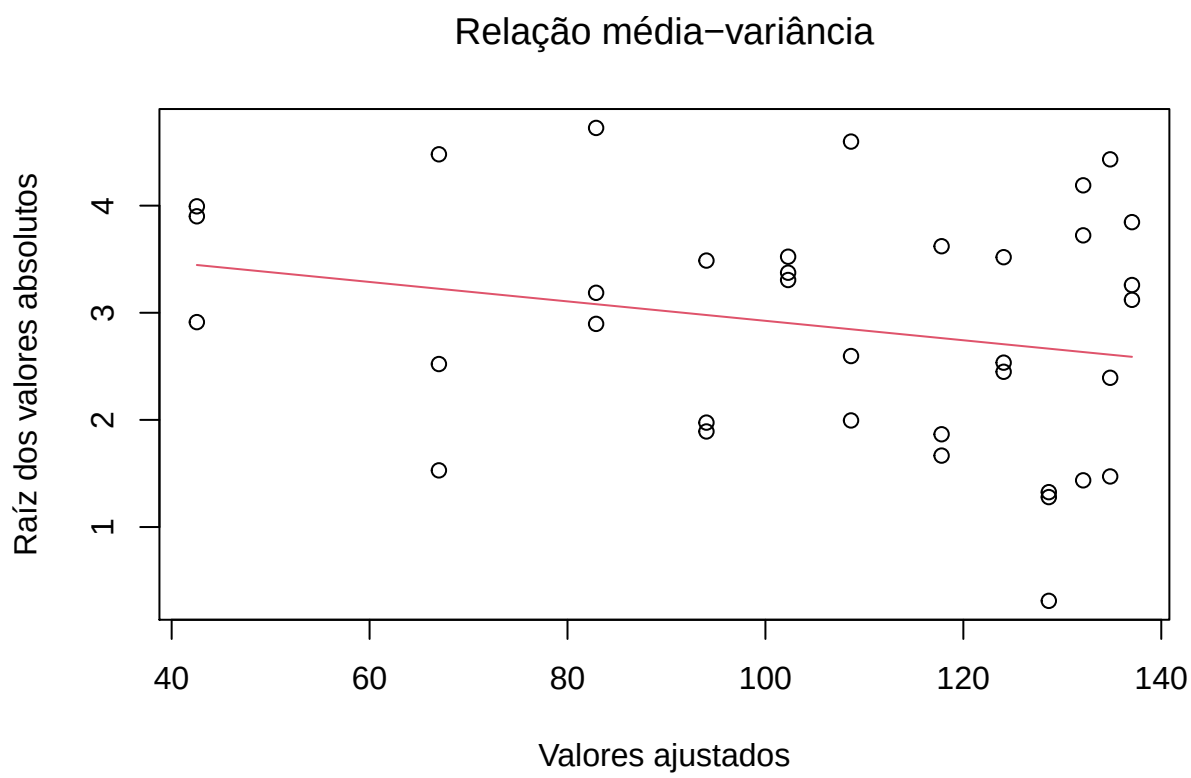


Quanto à análise de resíduos

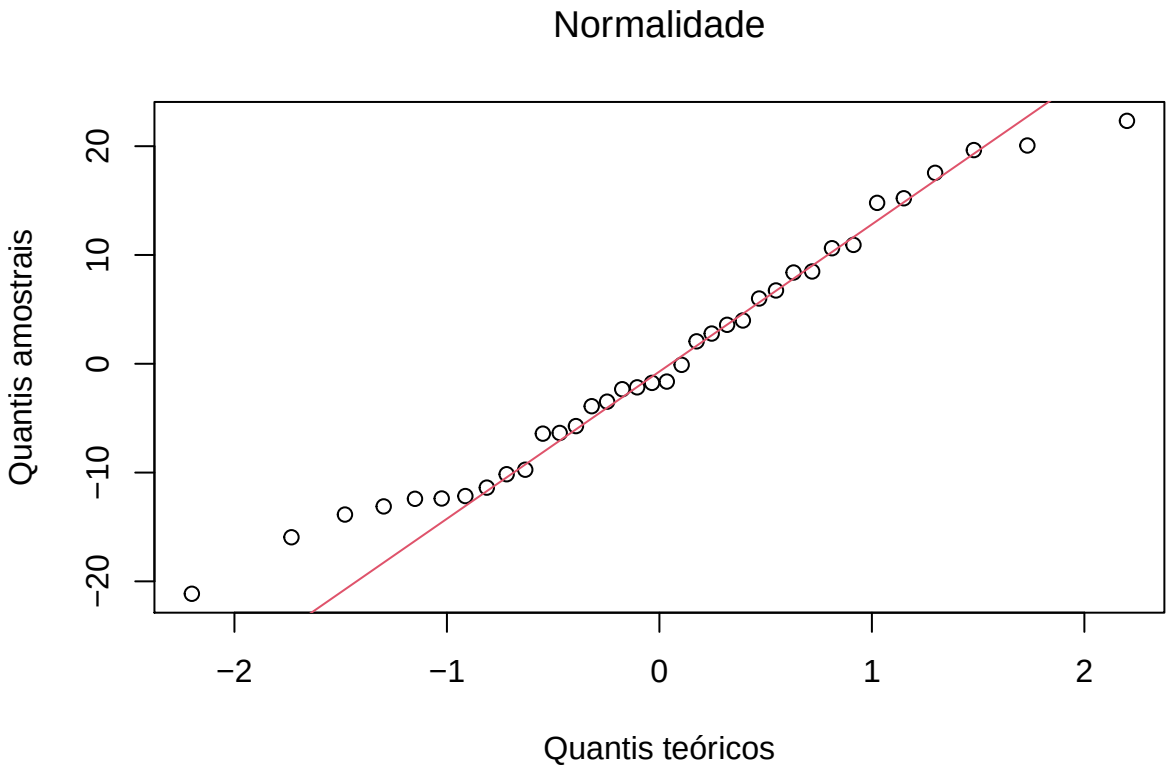
```
r <- residuals(n0)
 f <- fitted(n0)
plot(r~f, xlab="Valores ajustados", ylab="Resíduos", main=expression("Adequação de "*eta(x,theta)))
lines(smooth.spline(r~f), col=2)
```




```
plot(sqrt(abs(r))~f, xlab="Valores ajustados", ylab="Raíz dos valores absolutos", main=list("Relação mé
lines(smooth.spline(sqrt(abs(r))~f), col=2)
```



```r
qqnorm(r, xlab="Quantis teóricos", ylab="Quantis amostrais", main=list("Normalidade", font=1)); qqline(
```




```r
layout(1)
```

Zeviani, Walmes Marques; Júnior, Paulo Justiniano Ribeiro; Bonat, Wagner Hugo. Modelos de regressão não linear, 2013.