Μη-γραμμική παλινδρόμηση

Δημήτρης Κουγιουμτζής

19 Νοεμβρίου 2019

Επάρκεια μοντέλου απλής γραμμικής παλινδρόμησης

Είναι το μοντέλο κατάλληλο / επαρκές;

Επάρκεια μοντέλου απλής γραμμικής παλινδρόμησης

Είναι το μοντέλο κατάλληλο / επαρκές;

Ένδειξη από το διάγραμμα διασποράς της Y προς τη X

Επάρκεια μοντέλου απλής γραμμικής παλινδρόμησης

Είναι το μοντέλο κατάλληλο / επαρκές;

Ένδειξη από το διάγραμμα διασποράς της Y προς τη X

Καλύτερα: κατάλληλα γραφήματα των υπολοίπων $e_i = y_i - \hat{y}_i$

Επάρκεια μοντέλου απλής γραμμικής παλινδρόμησης

Είναι το μοντέλο κατάλληλο / επαρκές;

Ένδειξη από το διάγραμμα διασποράς της Y προς τη X

Καλύτερα: κατάλληλα γραφήματα των υπολοίπων $e_i = y_i - \hat{y}_i$

Καλύτερα: τυποποιημένα σφάλματα προσαρμογής, $e_i^* = e_i / s_e$

Επάρκεια μοντέλου απλής γραμμικής παλινδρόμησης

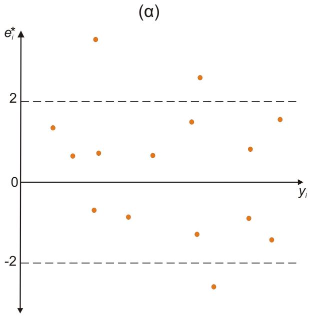
Είναι το μοντέλο κατάλληλο / επαρκές;

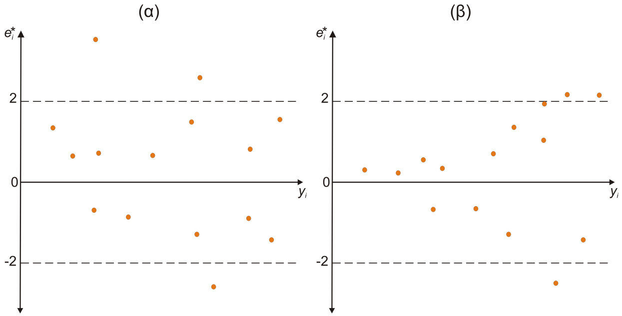
Ένδειξη από το διάγραμμα διασποράς της Y προς τη X

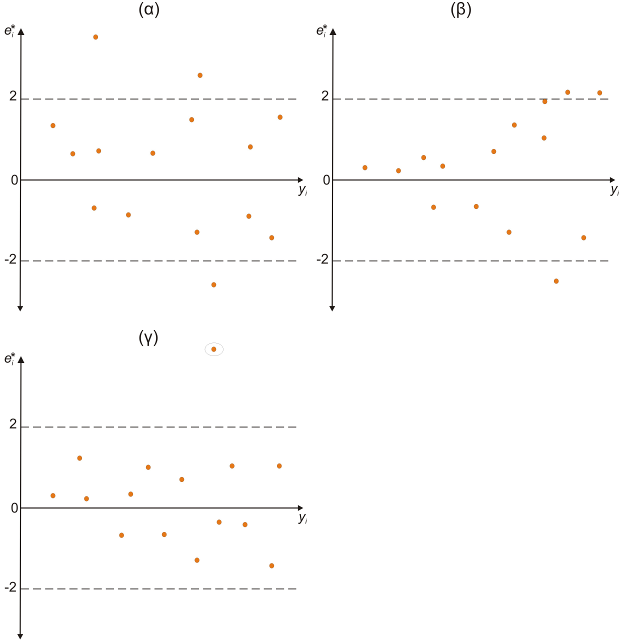
Καλύτερα: κατάλληλα γραφήματα των υπολοίπων $e_i = y_i - \hat{y}_i$

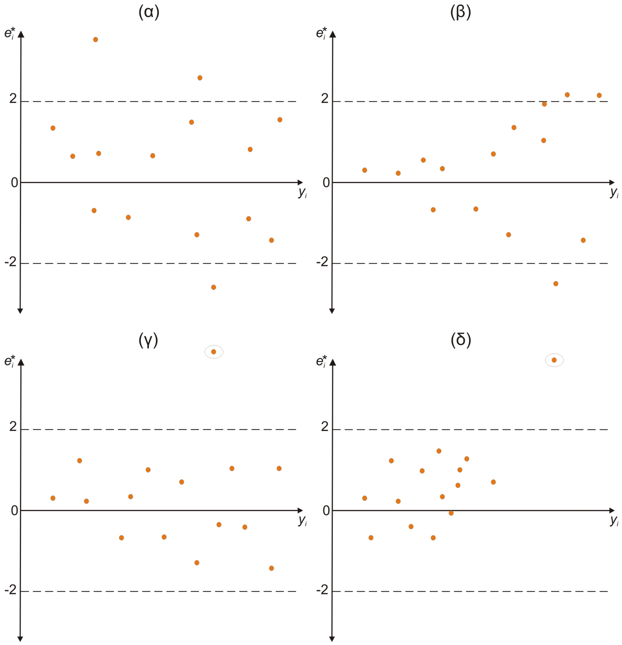
Καλύτερα: τυποποιημένα σφάλματα προσαρμογής, $e_i^* = e_i / s_e$

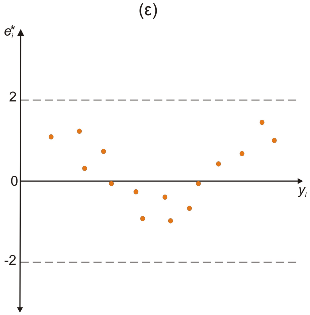
διαγνωστικό γράφημα των e_i^* προς $\hat{y}_i$

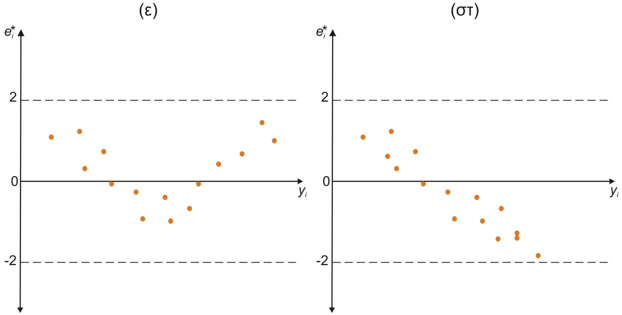

(α)
e_i^*
2
0
y_i
-2


(α)
(β)
e_i^*
2
0
-2
y_i


(α)
e_i^*
2
0
-2
y_i
(β)
e_i^*
2
0
-2
y_i
(γ)
e_i^*
2
0
-2
y_i


(α)
(β)
(γ)
(δ)
e_i^*
y_i
2
0
-2


(ε)
e_i^*
2
0
y_i
-2


(ε)
(στ)
e_i^*
2
0
-2
y_i

Μη-Γραμμική Παλινδρόμηση

Μη-γραμμική εξάρτηση της Y από τη X.

Μη-Γραμμική Παλινδρόμηση

Μη-γραμμική εξάρτηση της Y από τη X.

Εγγενής γραμμική συνάρτηση παλινδρόμησης

Μη-Γραμμική Παλινδρόμηση

Μη-γραμμική εξάρτηση της Y από τη X.

Εγγενής γραμμική συνάρτηση παλινδρόμησης

εγγενής γραμμική συνάρτηση όταν μπορεί να γίνει γραμμική με κατάλληλο μετασχηματισμό

Μη-γραμμική εξάρτηση της Y από τη X.

Εγγενής γραμμική συνάρτηση παλινδρόμησης

εγγενής γραμμική συνάρτηση όταν μπορεί να γίνει γραμμική με κατάλληλο μετασχηματισμό

Εγγενής συνάρτηση	*Μετασχηματισμός*	*Γραμμική*
1. Εκθετική: $y = \alpha e^{\beta x}$	$y' = \ln(y)$	$y' = \ln(\alpha) + \beta x$
2. Δύναμης: $y = \alpha x^{\beta}$	$y' = \log(y)$, $x' = \log(x)$	$y' = \log(\alpha) + \beta x'$
3. $y = \alpha + \beta \log(x)$	$x' = \log(x)$	$y = \alpha + \beta x'$
4. Αντίστροφη: $y = \alpha + \beta \frac{1}{x}$	$x' = \frac{1}{x}$	$y = \alpha + \beta x'$

Εγγενής γραμμική συνάρτηση παλινδρόμησης

Μετασχηματισμός σε γραμμική συνάρτηση $\Longrightarrow$

υπολογισμός / εκτίμηση παραμέτρων (μέθοδος ελαχίστων τετραγώνων)

Εγγενής γραμμική συνάρτηση παλινδρόμησης

Μετασχηματισμός σε γραμμική συνάρτηση $\Longrightarrow$

υπολογισμός / εκτίμηση παραμέτρων (μέθοδος ελαχίστων τετραγώνων)

Στοχαστική εγγενή γραμμική συνάρτηση: συνάρτηση $+$ ή $*$ θόρυβο.

$y = \alpha e^{\beta x} + \epsilon$: μη εγγενής γραμμική

Εγγενής γραμμική συνάρτηση παλινδρόμησης

Μετασχηματισμός σε γραμμική συνάρτηση $\Longrightarrow$

υπολογισμός / εκτίμηση παραμέτρων (μέθοδος ελαχίστων τετραγώνων)

Στοχαστική εγγενή γραμμική συνάρτηση: συνάρτηση $+$ ή $*$ θόρυβο.

$y = \alpha e^{\beta x} + \epsilon$: μη εγγενής γραμμική

$y = \alpha x^{\beta} + \epsilon$: μη εγγενής γραμμική

Εγγενής γραμμική συνάρτηση παλινδρόμησης

Μετασχηματισμός σε γραμμική συνάρτηση $\Longrightarrow$

υπολογισμός / εκτίμηση παραμέτρων (μέθοδος ελαχίστων τετραγώνων)

Στοχαστική εγγενή γραμμική συνάρτηση: συνάρτηση + ή * θόρυβο.

$y = \alpha e^{\beta x} + \epsilon$: μη εγγενής γραμμική

$y = \alpha x^{\beta} + \epsilon$: μη εγγενής γραμμική

$y = \alpha e^{\beta x} \cdot \epsilon$: εγγενής γραμμική

Εγγενής γραμμική συνάρτηση παλινδρόμησης

Μετασχηματισμός σε γραμμική συνάρτηση $\Longrightarrow$

υπολογισμός / εκτίμηση παραμέτρων (μέθοδος ελαχίστων τετραγώνων)

Στοχαστική εγγενή γραμμική συνάρτηση: συνάρτηση + ή * θόρυβο.

$y = \alpha e^{\beta x} + \epsilon$: μη εγγενής γραμμική

$y = \alpha x^{\beta} + \epsilon$: μη εγγενής γραμμική

$y = \alpha e^{\beta x} \cdot \epsilon$: εγγενής γραμμική

$y = \alpha x^{\beta} \cdot \epsilon$: εγγενής γραμμική

Εγγενής γραμμική συνάρτηση παλινδρόμησης

Μετασχηματισμός σε γραμμική συνάρτηση $\Longrightarrow$

υπολογισμός / εκτίμηση παραμέτρων (μέθοδος ελαχίστων τετραγώνων)

Στοχαστική εγγενή γραμμική συνάρτηση: συνάρτηση + ή * θόρυβο.

$y = \alpha e^{\beta x} + \epsilon$: μη εγγενής γραμμική

$y = \alpha x^{\beta} + \epsilon$: μη εγγενής γραμμική

$y = \alpha e^{\beta x} \cdot \epsilon$: εγγενής γραμμική

$y = \alpha x^{\beta} \cdot \epsilon$: εγγενής γραμμική

Αν $\epsilon \sim$ λογαριθμική κανονική $\Longrightarrow$ $\epsilon' = \ln \epsilon \sim$ κανονική κατανομή.

Εγγενής γραμμική συνάρτηση παλινδρόμησης

Μετασχηματισμός σε γραμμική συνάρτηση $\Longrightarrow$

υπολογισμός / εκτίμηση παραμέτρων (μέθοδος ελαχίστων τετραγώνων)

Στοχαστική εγγενή γραμμική συνάρτηση: συνάρτηση + ή * θόρυβο.

$y = \alpha e^{\beta x} + \epsilon$: μη εγγενής γραμμική

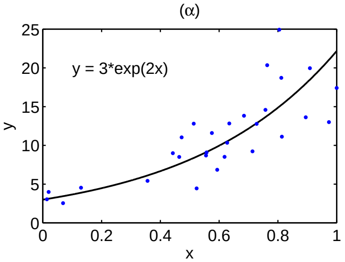
$y = \alpha x^{\beta} + \epsilon$: μη εγγενής γραμμική

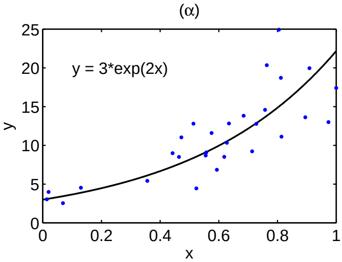
$y = \alpha e^{\beta x} \cdot \epsilon$: εγγενής γραμμική

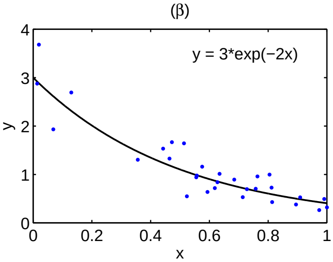
$y = \alpha x^{\beta} \cdot \epsilon$: εγγενής γραμμική

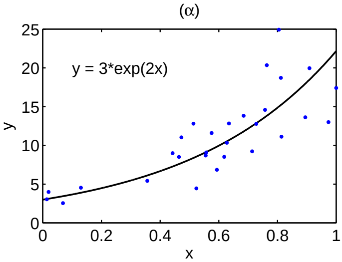
Αν $\epsilon \sim$ λογαριθμική κανονική $\Longrightarrow$ $\epsilon' = \ln \epsilon \sim$ κανονική κατανομή.

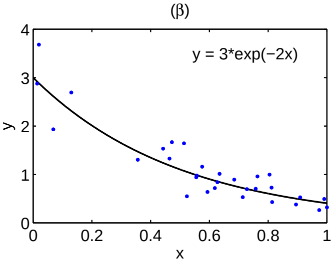
$y = \alpha + \beta \log(x) + \epsilon$ και $y = \alpha + \beta \frac{1}{x} + \epsilon$: εγγενείς γραμμικές

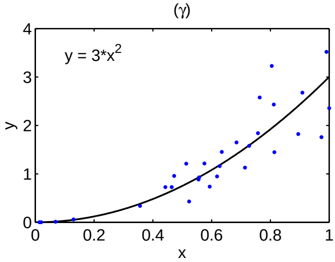

(α)
y = 3*exp(2x)
y
x
25
20
15
10
5
0
0
0.2
0.4
0.6
0.8
1

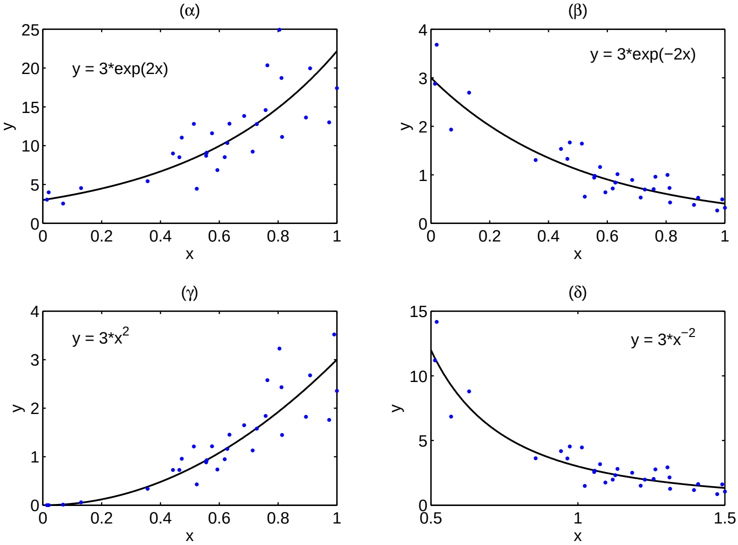

(α)
y = 3*exp(2x)
y
x
0
5
10
15
20
25
0.2
0.4
0.6
0.8
1

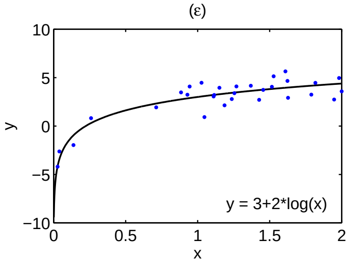

(β)
y = 3*exp(−2x)
y
x
0
1
2
3
4
0.2
0.4
0.6
0.8
1

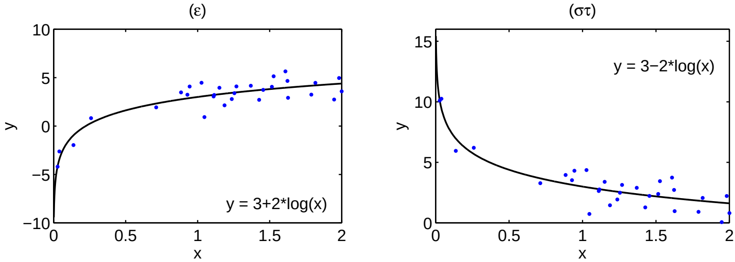

(α)
y = 3*exp(2x)
y
x
0
5
10
15
20
25
0
0.2
0.4
0.6
0.8
1

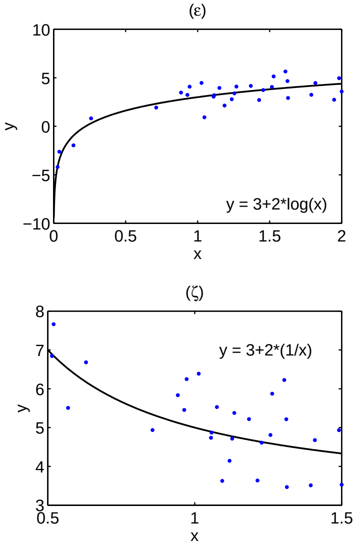

(β)
y = 3*exp(−2x)
y
x
0
1
2
3
4
0
0.2
0.4
0.6
0.8
1

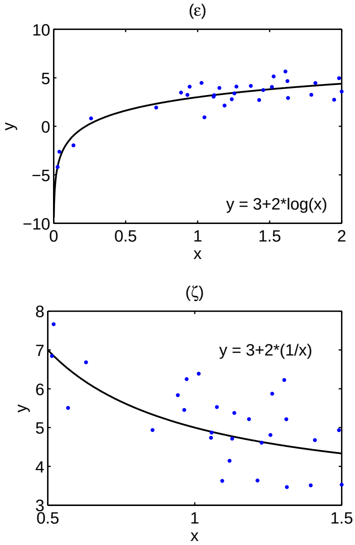

(γ)
y = 3*x^2
y
x
0
1
2
3
4
0
0.2
0.4
0.6
0.8
1


(α)
y = 3*exp(2x)
(β)
y = 3*exp(−2x)
(γ)
y = 3*x^2
(δ)
y = 3*x^−2
x
y


(ε)
10
5
0
−5
−10
y
y = 3+2*log(x)
0
0.5
1
1.5
2
x


(ε)
y = 3+2*log(x)
x
y
(στ)
y = 3−2*log(x)
x
y


(ε)
y = 3+2*log(x)
(στ)
y = 3−2*log(x)
(ζ)
y = 3+2*(1/x)
x
y


(ε)
y = 3+2*log(x)
(στ)
y = 3−2*log(x)
(ζ)
y = 3+2*(1/x)
(η)
y = 3−2*(1/x)
x
y

Παράδειγμα: πίεση και όγκος ιδανικού αερίου

Ισχύει $pV^\gamma = C$;

- C: σταθερά,
- p: απόλυτη πίεση του αερίου,
- V: ο όγκος του
- γ είναι ένας εκθέτης χαρακτηριστικός για το ιδανικό αέριο

Παράδειγμα: πίεση και όγκος ιδανικού αερίου

Ισχύει $pV^{\gamma} = C$;

- C: σταθερά,
- p: απόλυτη πίεση του αερίου,
- V: ο όγκος του
- γ είναι ένας εκθέτης χαρακτηριστικός για το ιδανικό αέριο

Πρόβλημα:

1. Εκτίμηση του γ και της σταθεράς C
2. Πρόβλεψη απόλυτης πίεσης για όγκο 25 in.^{3}

Παράδειγμα: πίεση και όγκος ιδανικού αερίου

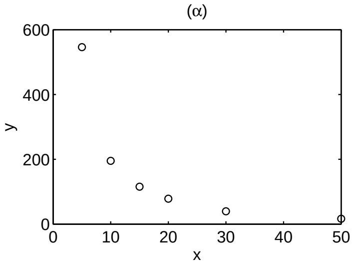
Ισχύει $pV^{\gamma} = C$;

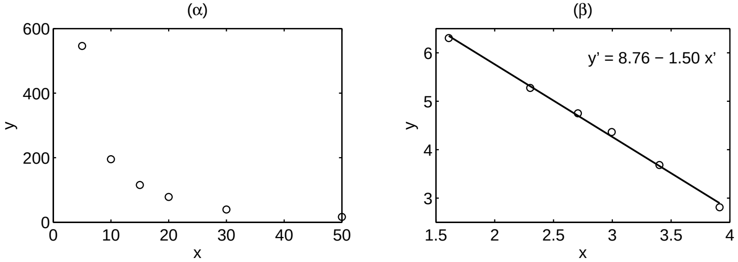
- C: σταθερά,
- p: απόλυτη πίεση του αερίου,
- V: ο όγκος του
- γ είναι ένας εκθέτης χαρακτηριστικός για το ιδανικό αέριο

Πρόβλημα:

1. Εκτίμηση του γ και της σταθεράς C
2. Πρόβλεψη απόλυτης πίεσης για όγκο 25 in.^{3}

A/A	p [psi]	V [in.^{3}]
1	16.6	50
2	39.7	30
3	78.5	20
4	115.5	15
5	195.3	10
6	546.1	5

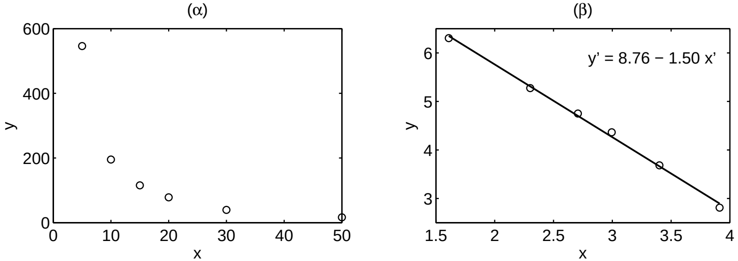

(α)
600
400
200
0
y
0
10
20
30
40
50
x



Εγγενή γραμμική συνάρτηση της μορφής δύναμης

$$pV^{\gamma} = C \quad \Leftrightarrow \quad y = \alpha x^{\beta},$$

$y = p$, $x = V$, $\alpha = C$ και $\beta = -\gamma$.



Εγγενή γραμμική συνάρτηση της μορφής δύναμης

$$pV^{\gamma} = C \quad \Leftrightarrow \quad y = \alpha x^{\beta},$$

$y = p$, $x = V$, $\alpha = C$ και $\beta = -\gamma$.

$y' = \ln(y) = \ln(p)$ και $x' = \ln(x) = \ln(V) \implies$

$$y' = \ln(\alpha) + \beta x' \quad \Leftrightarrow \quad \ln(p) = \ln(C) - \gamma \ln(V).$$

Θεωρώντας πολλαπλασιαστικό θόρυβο στο αρχικό μοντέλο:

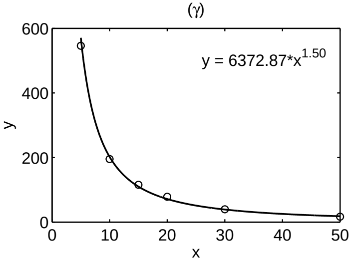
$$pV^\gamma = C \cdot \epsilon \quad \Leftrightarrow \quad y = \alpha x^\beta \cdot \epsilon,$$

και θέτοντας $\epsilon' = \ln(\epsilon)$

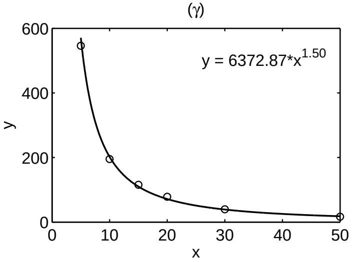
$$y' = \ln(\alpha) + \beta x' + \epsilon' \quad \Leftrightarrow \quad \ln(p) = \ln(C) - \gamma \ln(V) + \ln(\epsilon).$$

A/A	x'	y'
1	1.609	6.303
2	2.303	5.275
3	2.708	4.749
4	2.996	4.363
5	3.401	3.681
6	3.912	2.809

Εκτίμηση παραμέτρων

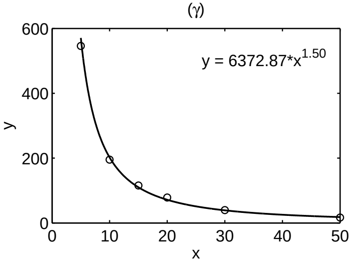


Εκτίμηση παραμέτρων



$\bar{x} = 2.82$, $\bar{y} = 4.53$, $s_X^2 = 0.6614$ και $s_{XY} = -0.9915$,

Εκτίμηση παραμέτρων



$\bar{x} = 2.82$, $\bar{y} = 4.53$, $s_X^2 = 0.6614$ και $s_{XY} = -0.9915$,

$$b_1 = \frac{-0.9915}{0.6614} = -1.4991, \qquad b_0 = 4.53 + 1.4991 \cdot 2.82 = 8.7598$$

$$s_Y^2 = 1.4908 \implies s_\epsilon^2 = \tfrac{6}{5}(1.4908 + 1.4991^2 \cdot 0.6614) = 0.00554$$

και $s_\epsilon = 0.07442$.

Σημειακή πρόβλεψη

Για όγκο 25 in.^{3}, $x' = \ln(25) = 3.219$

Σημειακή πρόβλεψη

Για όγκο 25 in.^{3}, $x' = \ln(25) = 3.219$

$$\ln(p) = y' = 8.7598 - 1.4991 \cdot 3.219 = 3.9344.$$

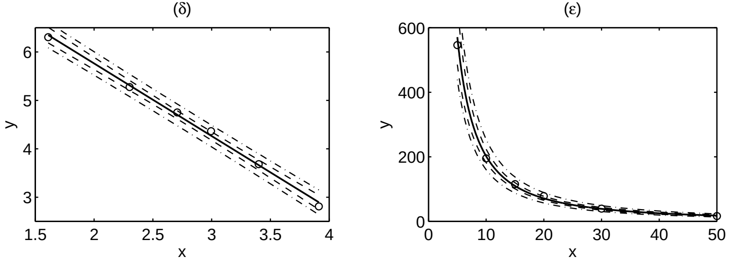
Πρόβλεψη της απόλυτης πίεσης: $p = \exp(3.9344) = 51.13$ psi

Σημειακή πρόβλεψη

Για όγκο 25 in.^{3}, $x' = \ln(25) = 3.219$

$$\ln(p) = y' = 8.7598 - 1.4991 \cdot 3.219 = 3.9344.$$

Πρόβλεψη της απόλυτης πίεσης: $p = \exp(3.9344) = 51.13$ psi



Διαστήματα πρόβλεψης

Διαστήματα πρόβλεψης για το μετασχηματισμένο γραμμικό μοντέλο

Για $x' = \ln(25) = 3.219$, 95% διάστημα πρόβλεψης της μέσης y' $[3.839, 4.030]$

Αντίστροφος μετασχηματισμός στα άκρα: το 95% διάστημα πρόβλεψης της μέσης απόλυτης πίεσης για όγκο ιδανικού αερίου 25 in.^{3}: $[46.465, 56.264]$

Διαστήματα πρόβλεψης

Διαστήματα πρόβλεψης για το μετασχηματισμένο γραμμικό μοντέλο

Για $x' = \ln(25) = 3.219$, 95% διάστημα πρόβλεψης της μέσης y' $[3.839, 4.030]$

Αντίστροφος μετασχηματισμός στα άκρα: το 95% διάστημα πρόβλεψης της μέσης απόλυτης πίεσης για όγκο ιδανικού αερίου 25 in.^{3}: $[46.465, 56.264]$

95% διαστήματος πρόβλεψης για μια τιμή του y' όταν $x' = \ln(25) = 3.219$: $[3.707, 4.162]$
Αντίστοιχα όρια: $[40.718, 64.205]$

Πολυωνυμική παλινδρόμηση

Οι εγγενείς γραμμικές συναρτήσεις είναι μονότονες.
Μη-μονοτονία;

Πολυωνυμική παλινδρόμηση

Οι εγγενείς γραμμικές συναρτήσεις είναι μονότονες.
Μη-μονοτονία;

Μοντέλο πολυωνυμικής γραμμικής παλινδρόμησης βαθμού k

$$y = \beta_0 + \beta_1 x + \beta_2 x^2 + \cdots + \beta_k x^k + \epsilon.$$

Συνάρτηση μη-γραμμική ως προς το x
Συνάρτηση γραμμική ως προς τους συντελεστές $\beta_0, \beta_1, \ldots, \beta_k$

Πολυωνυμική παλινδρόμηση

Οι εγγενείς γραμμικές συναρτήσεις είναι μονότονες.
Μη-μονοτονία;

Μοντέλο πολυωνυμικής γραμμικής παλινδρόμησης βαθμού k

$$y = \beta_0 + \beta_1 x + \beta_2 x^2 + \cdots + \beta_k x^k + \epsilon.$$

Συνάρτηση μη-γραμμική ως προς το x
Συνάρτηση γραμμική ως προς τους συντελεστές $\beta_0, \beta_1, \ldots, \beta_k$

Άθροισμα ελαχίστων τετραγώνων:

$$f(\beta_0, \beta_1, \ldots, \beta_k) = \sum_{i=1}^{n} \left(y_i - (\beta_0 + \beta_1 x + \beta_2 x^2 + \cdots + \beta_k x^k) \right)^2.$$

Η παραγώγιση ως προς κάθε παράμετρο δίνει το σύστημα **κανονικών εξισώσεων**

$$
\begin{aligned}
b_0 n + b_1 \sum x_i + b_2 \sum x_i^2 + \cdots b_k \sum x_i^k &= \sum y_i \\
b_0 \sum x_i + b_1 \sum x_i^2 + b_2 \sum x_i^3 + \cdots b_k \sum x_i^{k+1} &= \sum x_i y_i \\
\vdots \qquad\qquad \vdots \qquad\qquad \vdots \qquad\qquad \vdots \qquad\qquad & \qquad\quad \vdots \\
b_0 \sum x_i^k + b_1 \sum x_i^{k+1} + b_2 \sum x_i^{k+2} + \cdots b_k \sum x_i^{2k} &= \sum x_i^k y_i
\end{aligned}
$$

Τα σφάλματα προσαρμογής: $e_i = y_i - \hat{y}_i$, όπου

$$\hat{y}_i = b_0 + b_1 x + b_2 x^2 + \cdots + b_k x^k.$$

και η διασπορά εκτιμάται

$$s_e^2 = \frac{1}{n-(k+1)} \sum_{i=1}^{n} (y_i - \hat{y}_i)^2,$$

Τα σφάλματα προσαρμογής: $e_i = y_i - \hat{y}_i$, όπου

$$\hat{y}_i = b_0 + b_1 x + b_2 x^2 + \cdots + b_k x^k.$$

και η διασπορά εκτιμάται

$$s_e^2 = \frac{1}{n-(k+1)} \sum_{i=1}^{n} (y_i - \hat{y}_i)^2,$$

R^2: συντελεστής του πολλαπλού προσδιορισμού

$$R^2 = 1 - \frac{\sum_{i=1}^{n}(y_i - \hat{y}_i)^2}{\sum_{i=1}^{n}(y_i - \bar{y})^2}$$

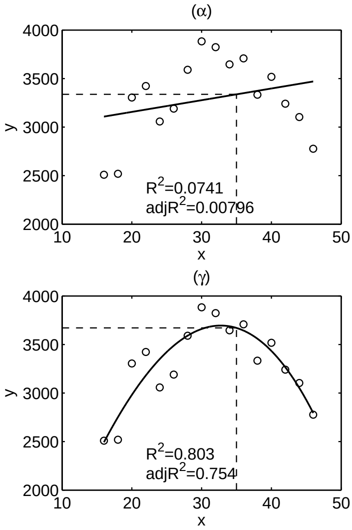
Προσαρμοσμένος συντελεστής του πολλαπλού προσδιορισμού

$$\mathrm{adj}R^2 = 1 - \frac{n-1}{n-(k+1)} \frac{\sum_{i=1}^{n}(y_i - \hat{y}_i)^2}{\sum_{i=1}^{n}(y_i - \bar{y})^2}$$

Διαστήματα εμπιστοσύνης και στατιστικοί έλεγχοι για $\beta_0, \beta_1, \ldots, \beta_k$: όπως για απλή γραμμική παλινδρόμηση.

Συγκομιδή του paddy

A/A	*Ημέρες*	*Σοδειά*
1	16	2508
2	18	2518
3	20	3304
4	22	3423
5	24	3057
6	26	3190
7	28	3590
8	30	3883
9	32	3823
10	34	3646
11	36	3708
12	38	3333
13	40	3517
14	42	3241
15	44	3103
16	46	2776



$$y = -1.1242 + 0.2979x - 0.0046x^2$$