NELINEÁRNÍ REGRESNÍ MODELY

Základní úlohy:

1. Konstrukce ***kalibračních modelů***,
2. Ověření ***teoretických modelů*** fyzikálně-chemické zákonitosti,
3. Tvorba ***empirických modelů***,

Tvorba regresního modelu f(x, β) čili funkce

a) vektoru **nastavovaných proměnných** (***deterministických, kontrolovatelných, vysvětlujících, nezávislých***) x,
tj. bodů $\{\mathbf{x}_i^T, y_i\}$, i=1, ..., n,

b) vektoru **parametrů β** o rozměru (m × 1), $\boldsymbol{\beta} = (\beta_1, ..., \beta_m)^T$.

c) y je **vysvětlovaná proměnná** (závisle p., odezva, měření, pozorování) na zvolenou kombinaci nastavovaných veličin $\mathbf{x}_i$.

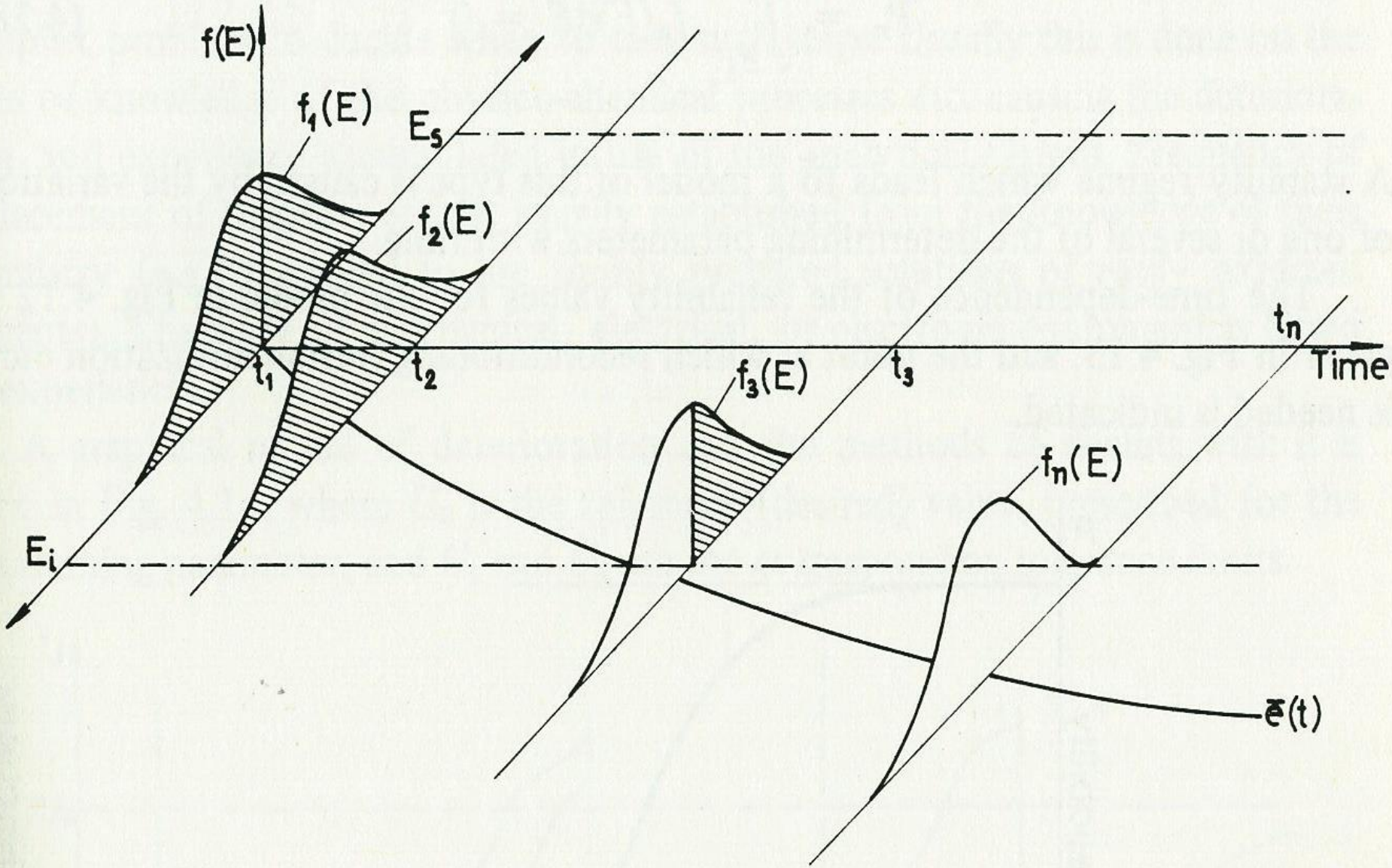


Fig. 4.12 The model of increase of analysis errors with time, for an analytical system with a time-dependent parameter.

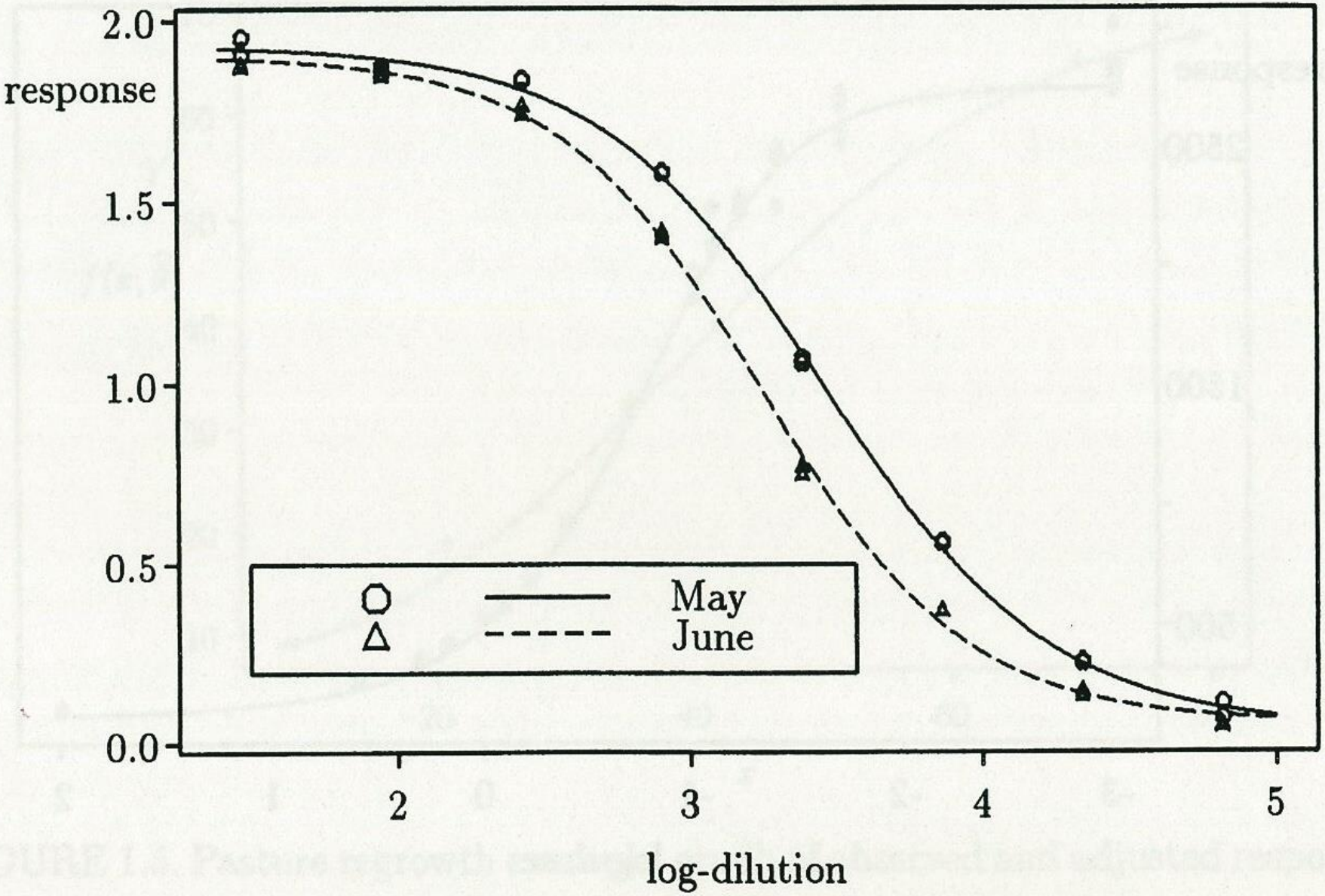


FIGURE 1.7. ELISA test example: graph of observed and adjusted curves for May and June

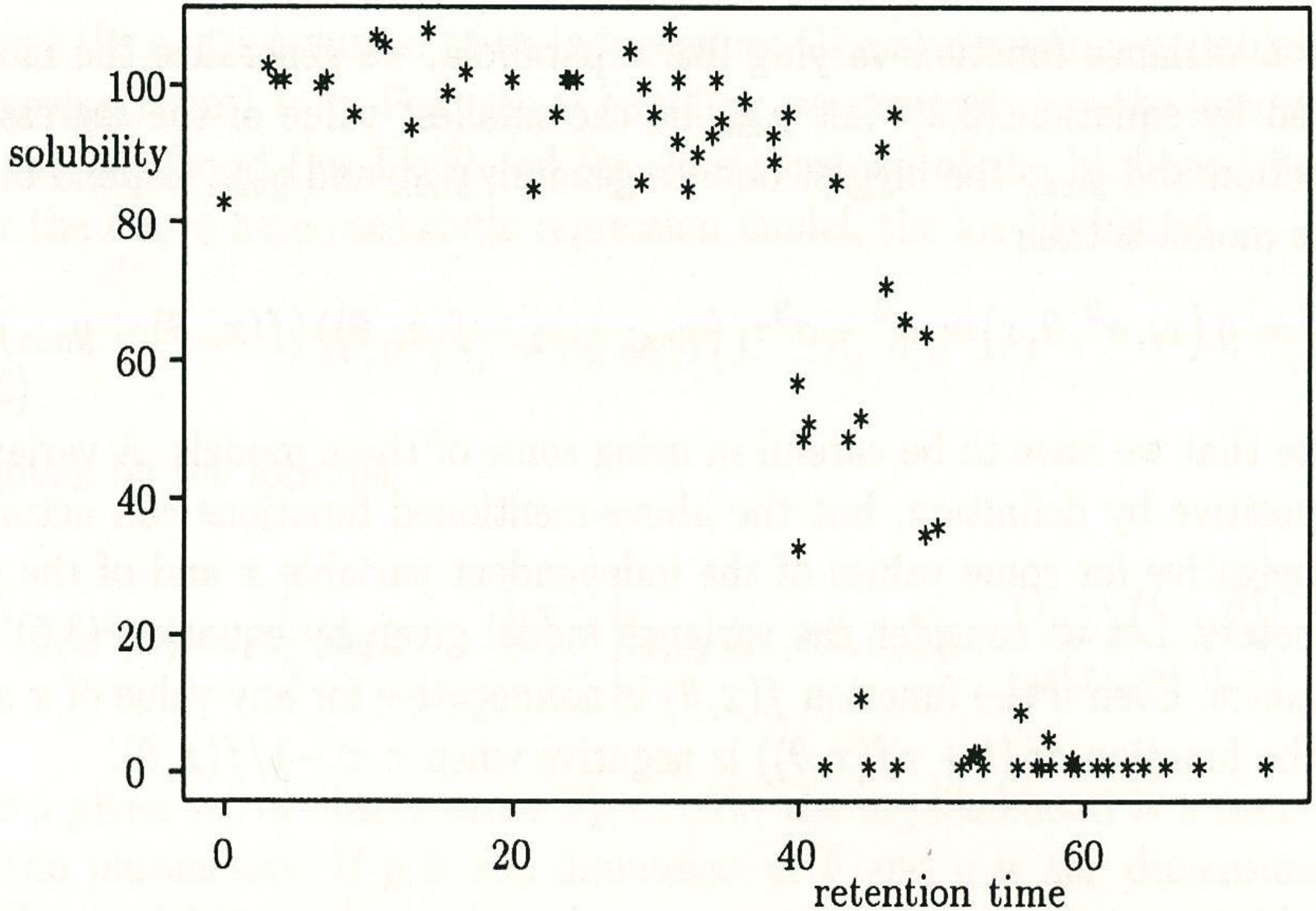


FIGURE 3.3. Peptides example: observed solubility of 75 peptides versus their RP-HPLC retention time

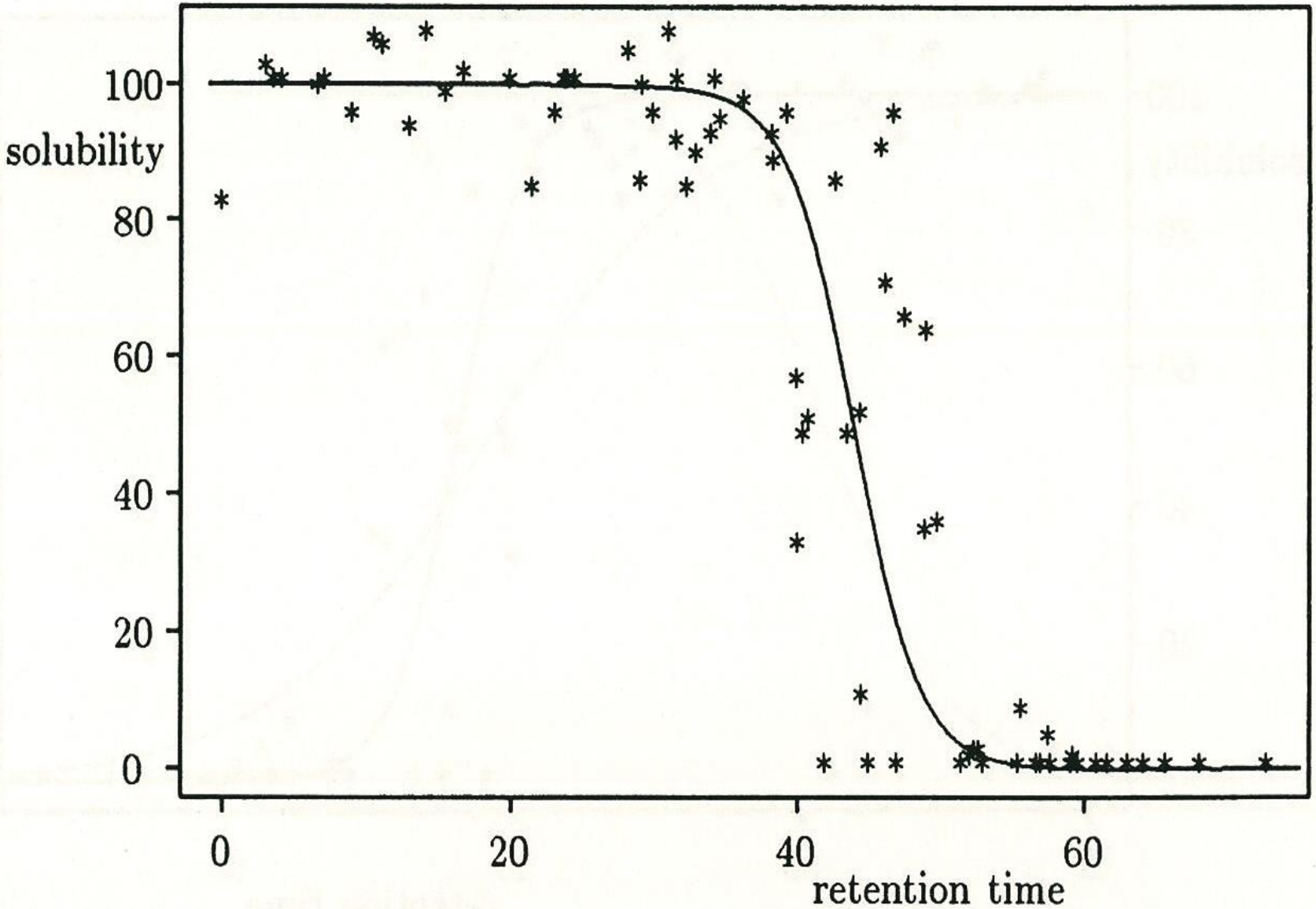


FIGURE 3.7. Peptides example: observed and adjusted solubilities of 75 peptides versus their RP-HPLC retention time

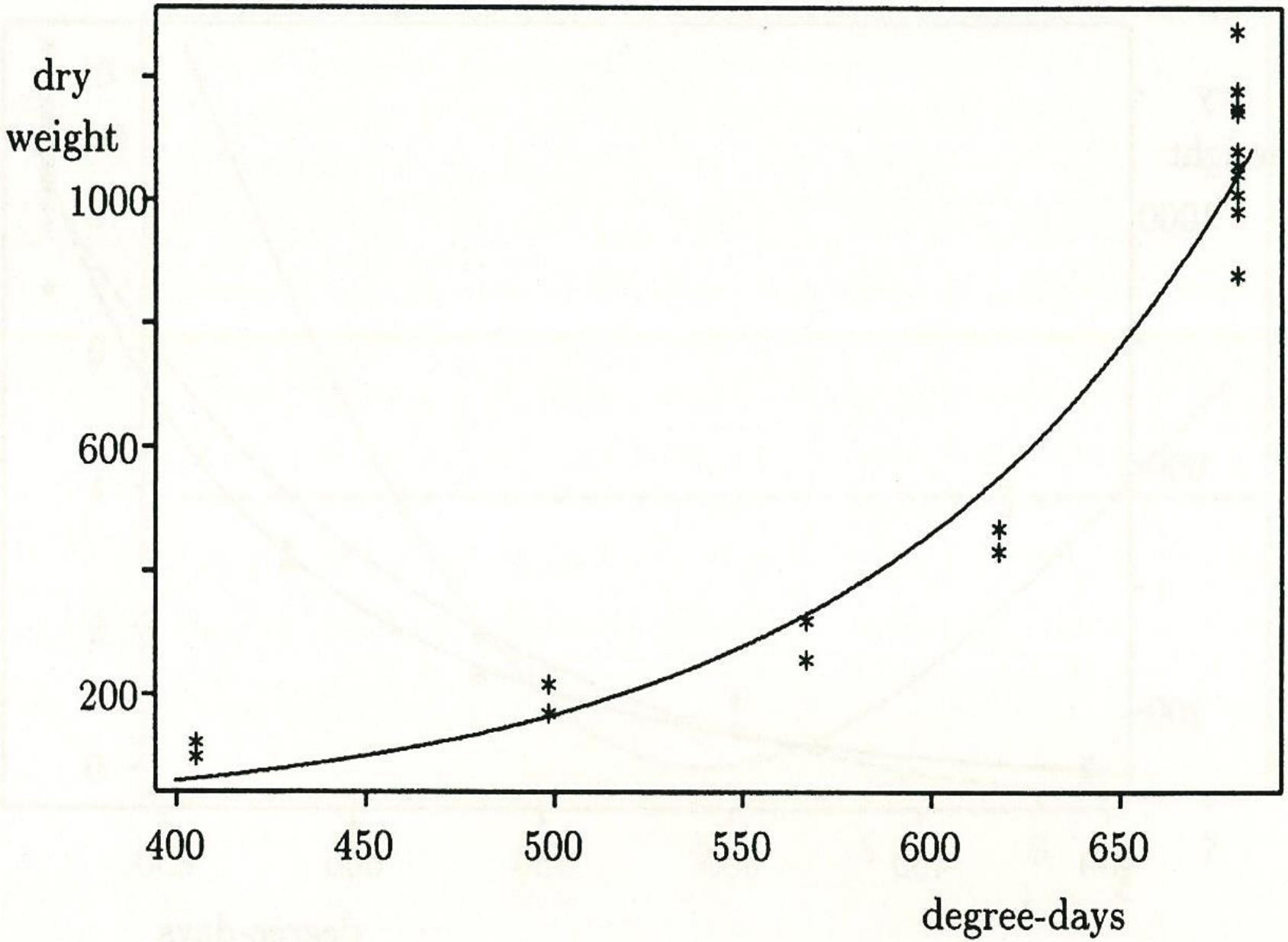


FIGURE 3.4. Weight of tillers example: graph of observed and adjusted curve

Tvorba se formuluje s ohledem na **regresní triplet**:

1. zadaná data,
2. navržený model,
3. kritérium regrese.

Dělení regresních modelů:

1. **Lineární modely:** parametry nemají fyzikální smysl (koeficienty),

2. **Nelineární modely:** parametry mají přesný fyzikální význam.
   (nepř. rovnovážné konstanty (disociační, stability, součiny rozpustnosti) reakčních produktů, rychlostní konstanty u kinetických modelů, neznámé koncentrace, atd.

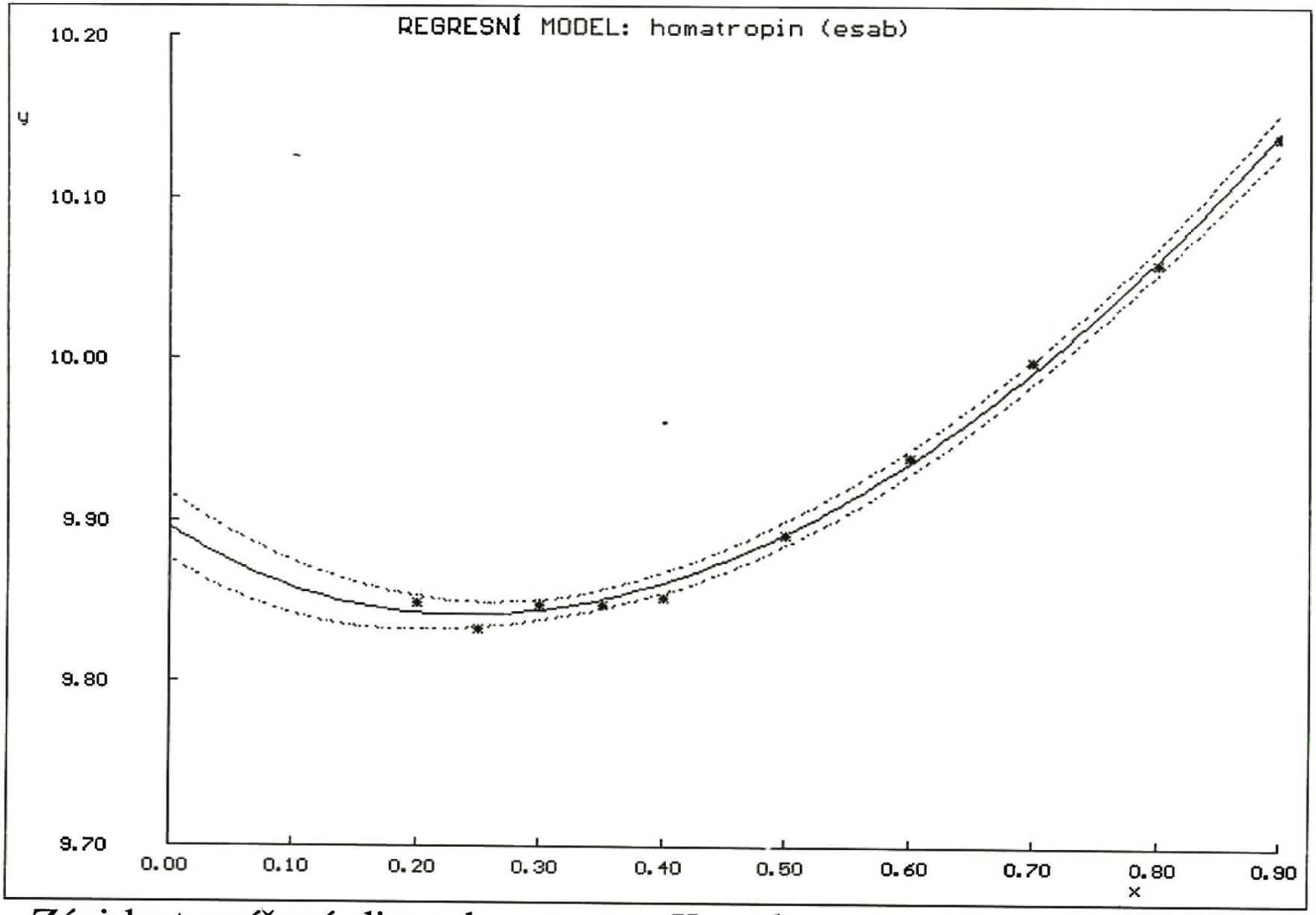
Model: rozšířený Debye-Hückelův zákon

$$pK_{a,smíš} = pK_{a,T} - \frac{0.5115\sqrt{I}}{1 + 3.29\times10^{10}\,å\sqrt{I}} + C\,I$$

Proměnné:

Závisle proměnná y: $pK_{a,\,smíš}$, Nezávisle proměnná x: I,

Neznámé parametry: β_1: $pK_{a,T}$, β_2: $å$, β_3: C



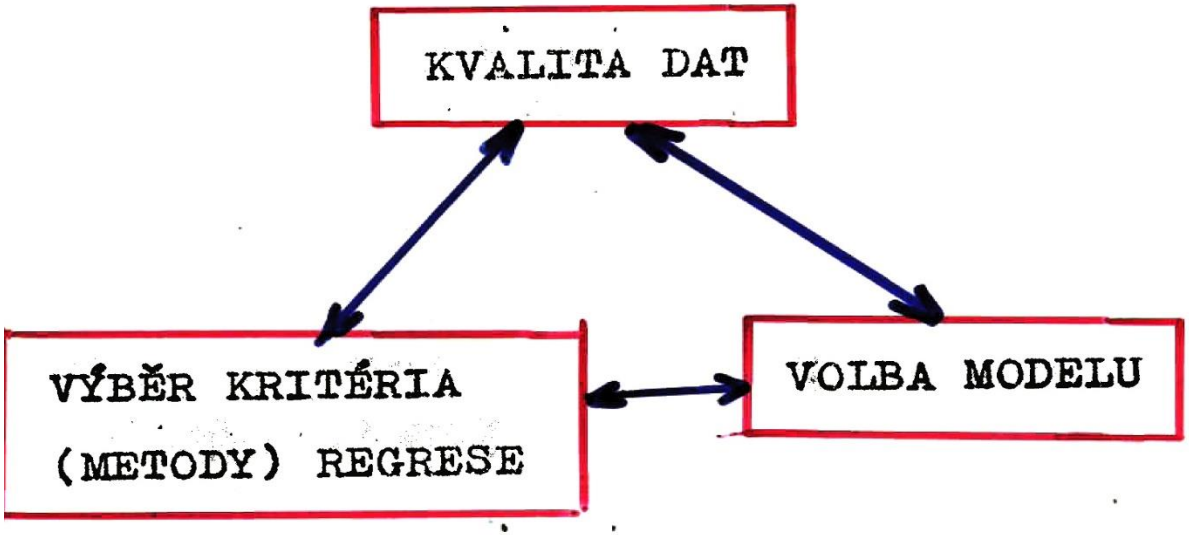
Závislost smíšené disoc. konstanty $pK_{a,smíš}$ homatropinu na iontové síle:

Nulté přiblížení: $pK_a^T = 1,\ \mathring{a} = 1$ Å, $C = 1$

Nalezeno: $pK_a^T = 9.90(1),\ \mathring{a} = 6(2)$Å a $C = 0.51(3)$

POSTUP A DIAGNOSTIKA REGRESE:

Regresní triplet:



$$U = \sum_{i=1}^{n} w_i (y_{exp,i} - y_{vyp,i})^2 = \text{minimum}$$

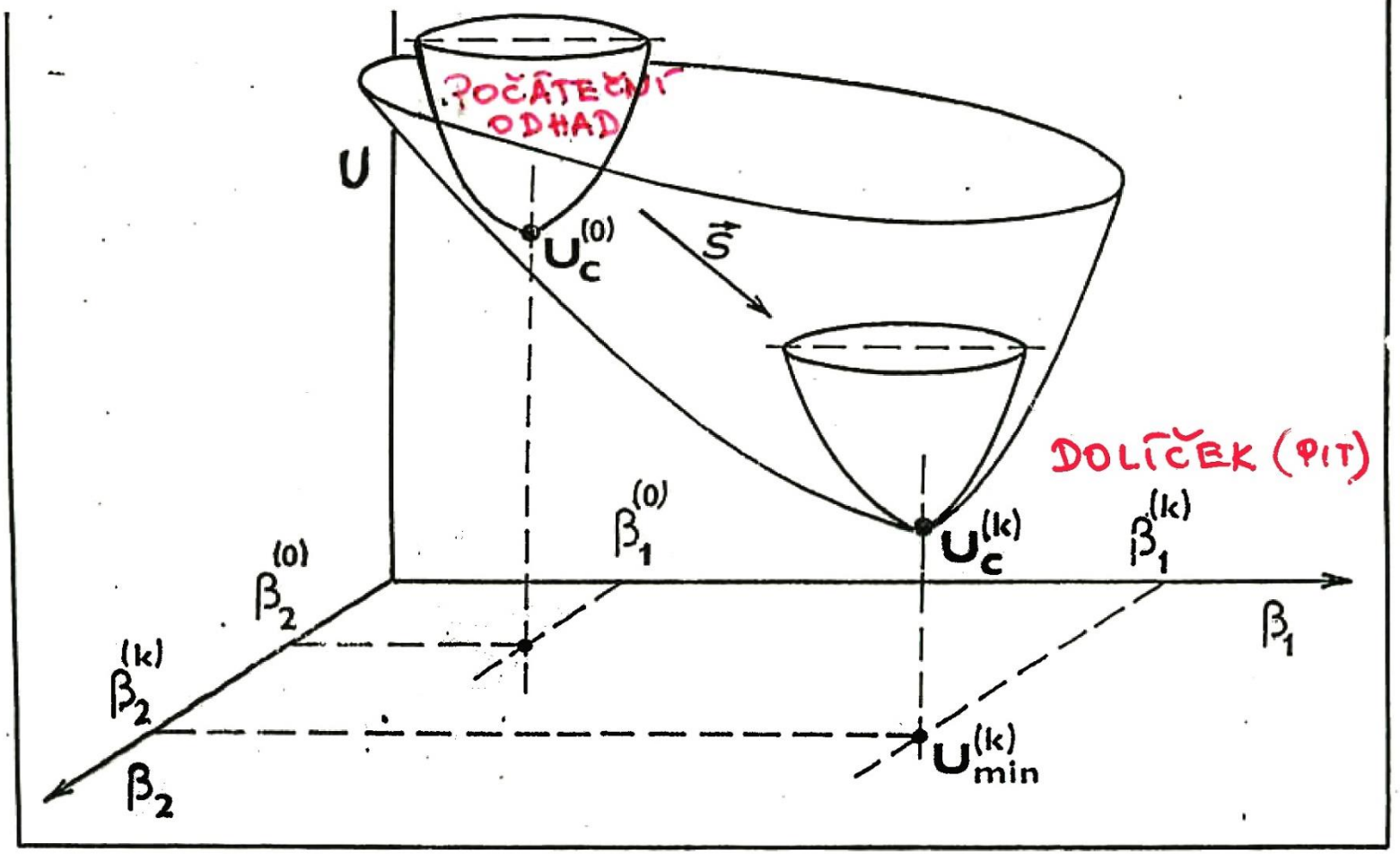
kde $y_{vyp,i} = f(x_i; b_1, \ldots, b_m)$

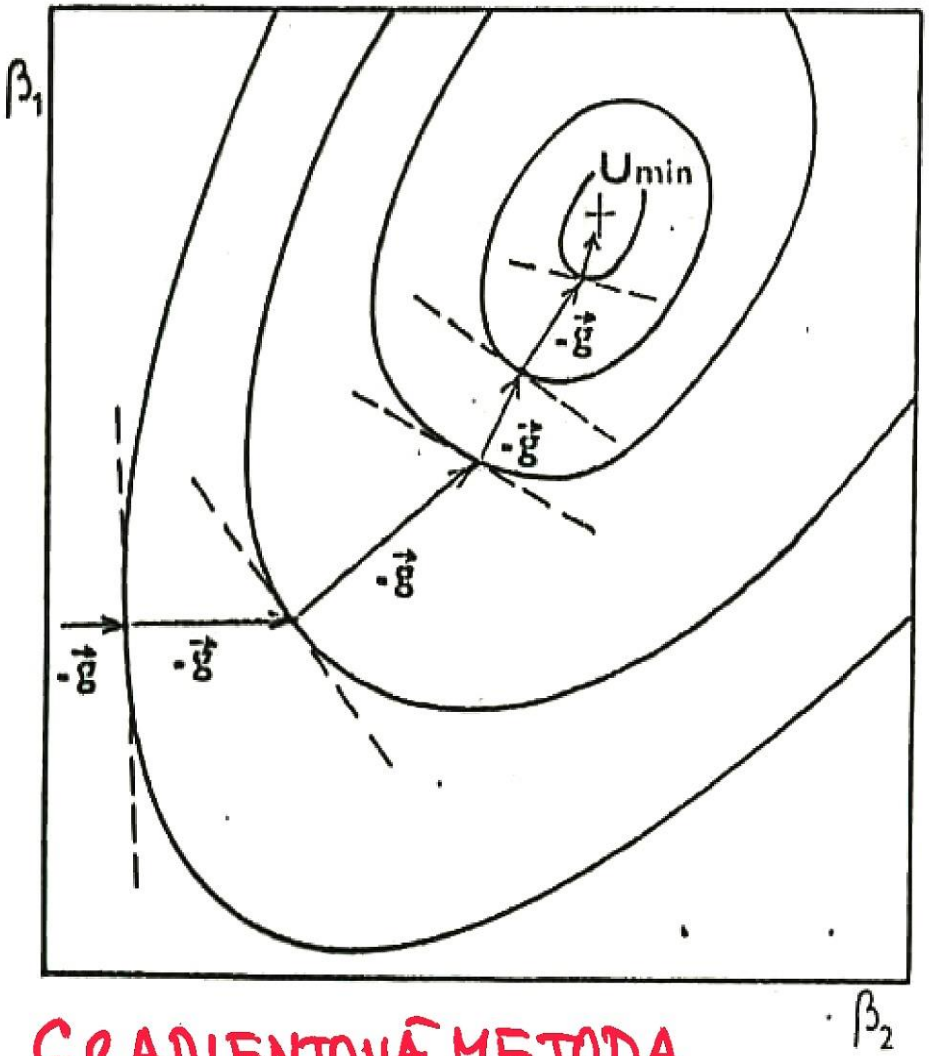
GEOMETRICKÉ ZNÁZORNĚNÍ KRITÉRIA U

$$U = \sum_{i=1}^{n} w_i \left(y_{exp,i} - y_{vyp,i} \right)^2 \approx \text{minimum}$$

$$y_{vyp,i} = f(x_i; \beta_1, \dots, \beta_m; p_1, \dots, p_l)$$

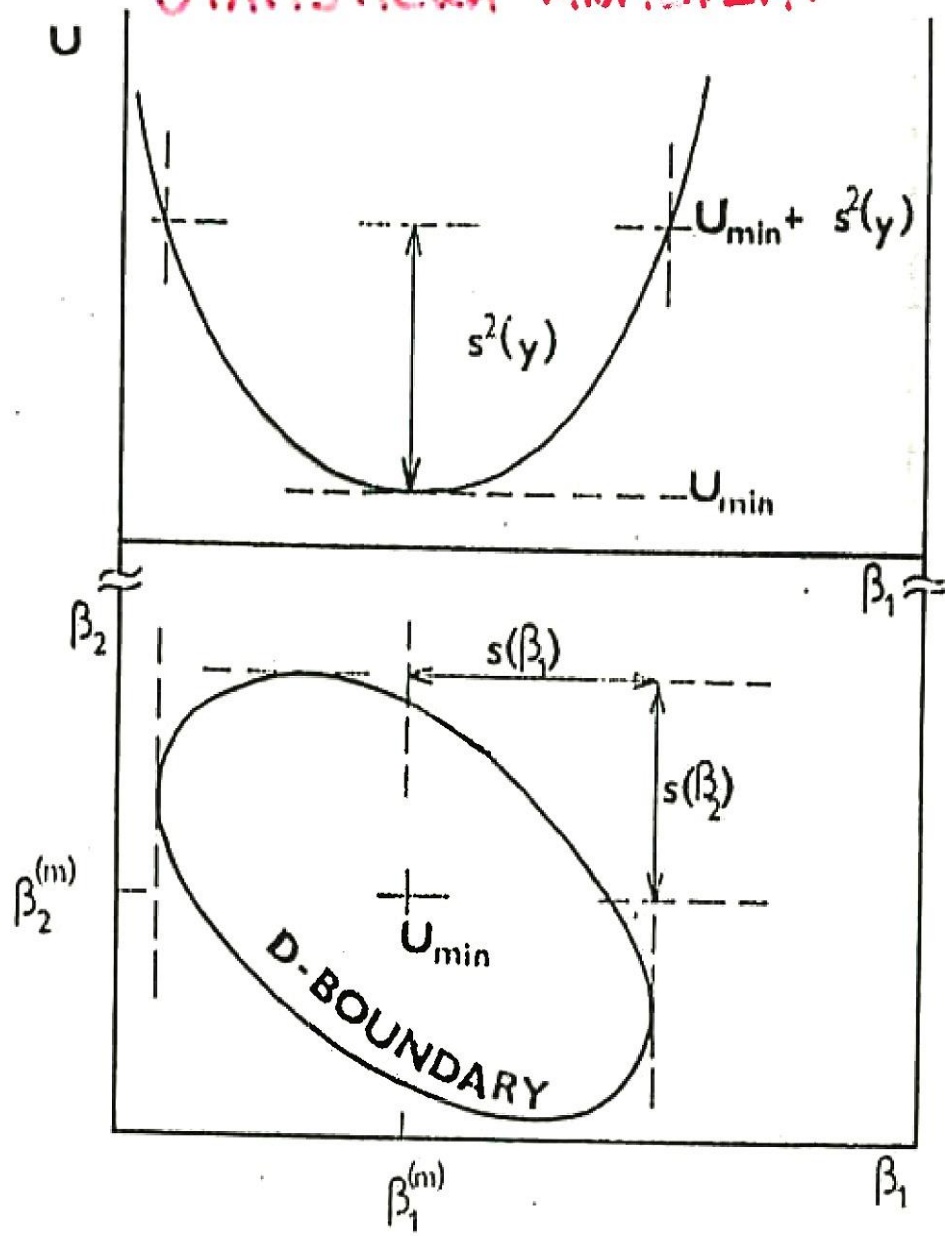
OPTIMALIZAČNÍ PROBLÉM V (m+1) ROZMĚRNÉM PROSTORU





GRADIENTOVÁ METODA HLEDÁNÍ MINIMA

STATISTICKÁ ANALÝZA:



Formulace modelu

1. **Lineární regresní model**: je lineární kombinací parametrů, např. model

$$f(\mathbf{x}, \beta) = \beta_1 + \beta_2 \sin(x)$$

Pro lineární regresní modely platí podmínka

$$g_j = \frac{\delta f(\mathbf{x}, \beta)}{\delta \beta_j} = \text{konst.} \qquad j = 1, \ldots, m$$

2. **Nelineární regresní model**: alespoň pro jeden parametr β_j je parciální derivace g_j jeho funkcí,

Dělí se:

1. ***Neseparabilní modely***, kdy podmínka parciální derivace g_j neplatí **pro žádný** parametr modelu, např.

$$f(x, \beta) = \exp(\beta_1 x) + \exp(\beta_2 x)$$

2. ***Separabilní modely***, kdy podmínka parciální derivace g_j platí alespoň **pro jeden** modelový parametr, např.

$$f(x, \beta) = \beta_1 + \beta_2 \exp(\beta_3 x)$$

který je nelineární pouze vzhledem k parametru β_3.

3. ***Vnitřně lineární modely***, jsou nelineární, ale lze je **reparametrizací** převést na lineární regresní model, např.

$$f(x, \beta) = \beta^2 x$$

který reparametrizací $\gamma = \beta^2$ přechází na lineární model.

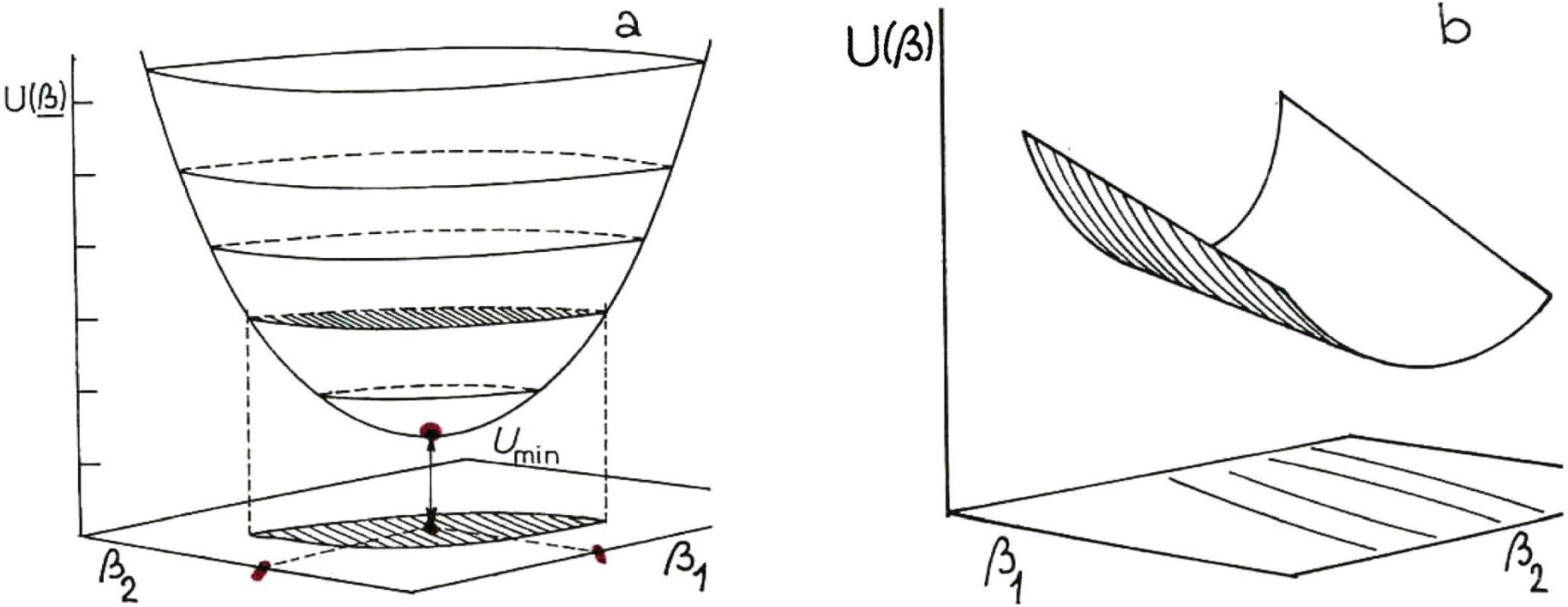
Geometrie nelineární regrese

Kritérium regrese U(β) vektorovým zápisem

$$\mathbf{U}(\beta) \quad = \quad \|\mathbf{y} - \mathbf{f}\|^2$$

kde $\mathbf{y} = (y_1, \ldots, y_n)^T$, $\mathbf{f} = (f(x_1, \beta), \ldots, f(x_n, \beta))^T$,

a symbol $\|\mathbf{x}\| = \sqrt{\mathbf{x}^T \mathbf{x}}$ označuje euklidovskou normu.



Minimum účelové funkce U(β) pro (a) lineární modely, (b) nelineární modely

Pro lineární regresní modely:

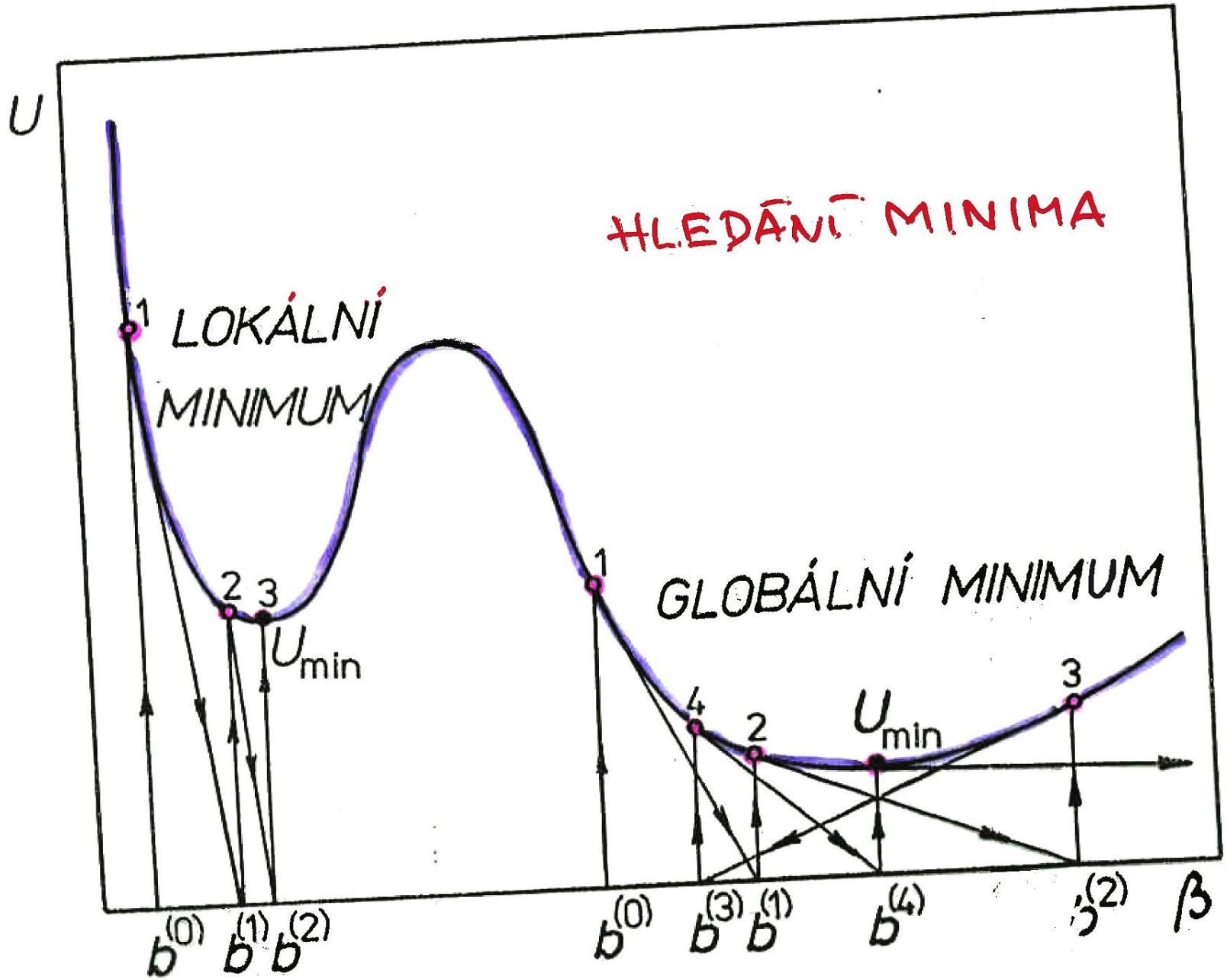
1. Útvar kritéria U(β) v prostoru odhadů je ***eliptický hyperparaboloid*** se středem v bodě [**b**, U(**b**)], kde nabývá minimální hodnoty.

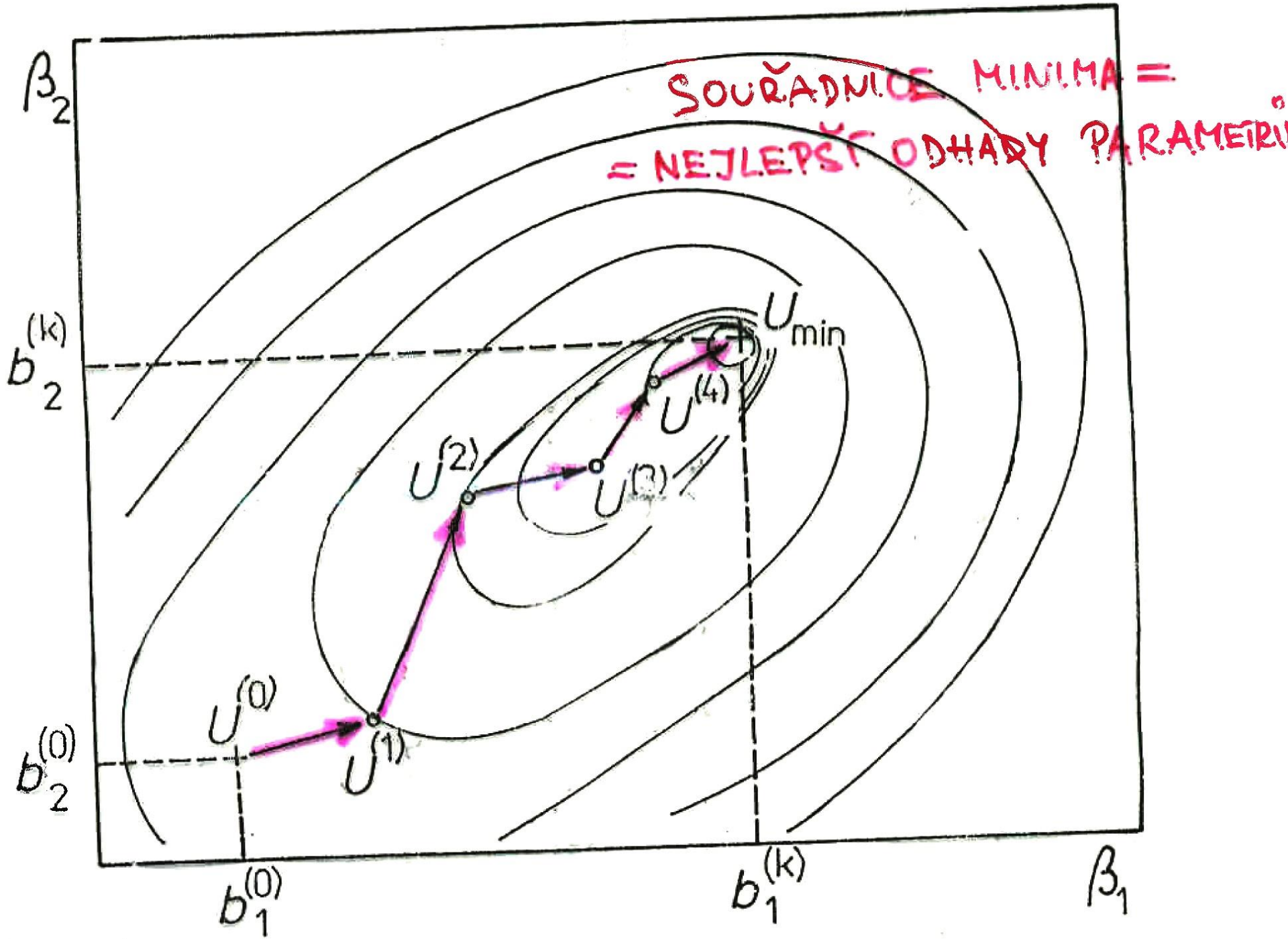
2. Účelová funkce U(β) je vzhledem k β kvadratickou formou β^T $(\mathbf{X}^T \mathbf{X})$ β a matice $\mathbf{X}^T \mathbf{X}$ je pozitivně definitní.

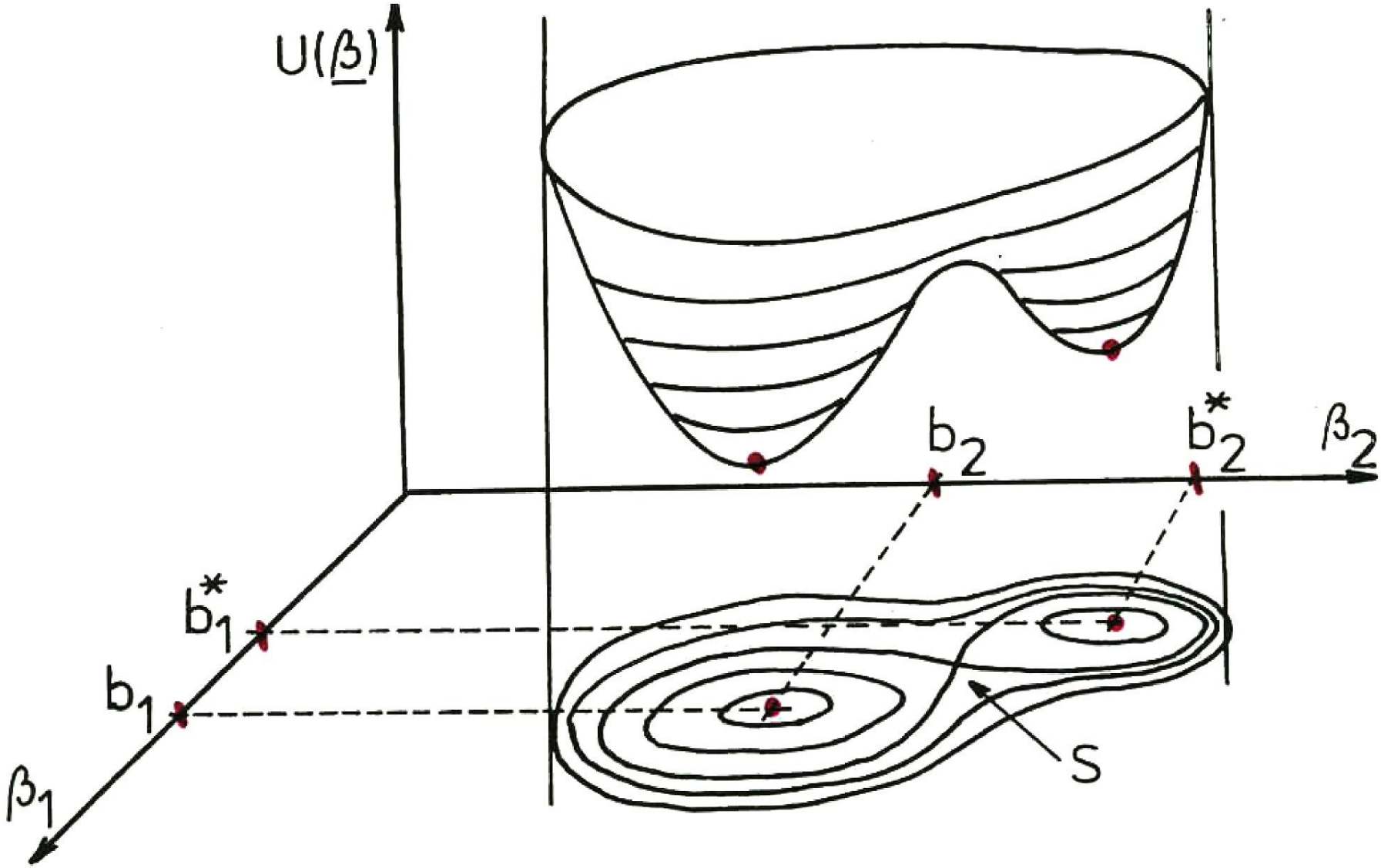
Pro nelineární regresní modely:

1. Složitější útvary vznikají u nelineárních modelů v závislosti na nelinearitě funkce f(**x**, β), počtu extrémů a sedlových bodů.

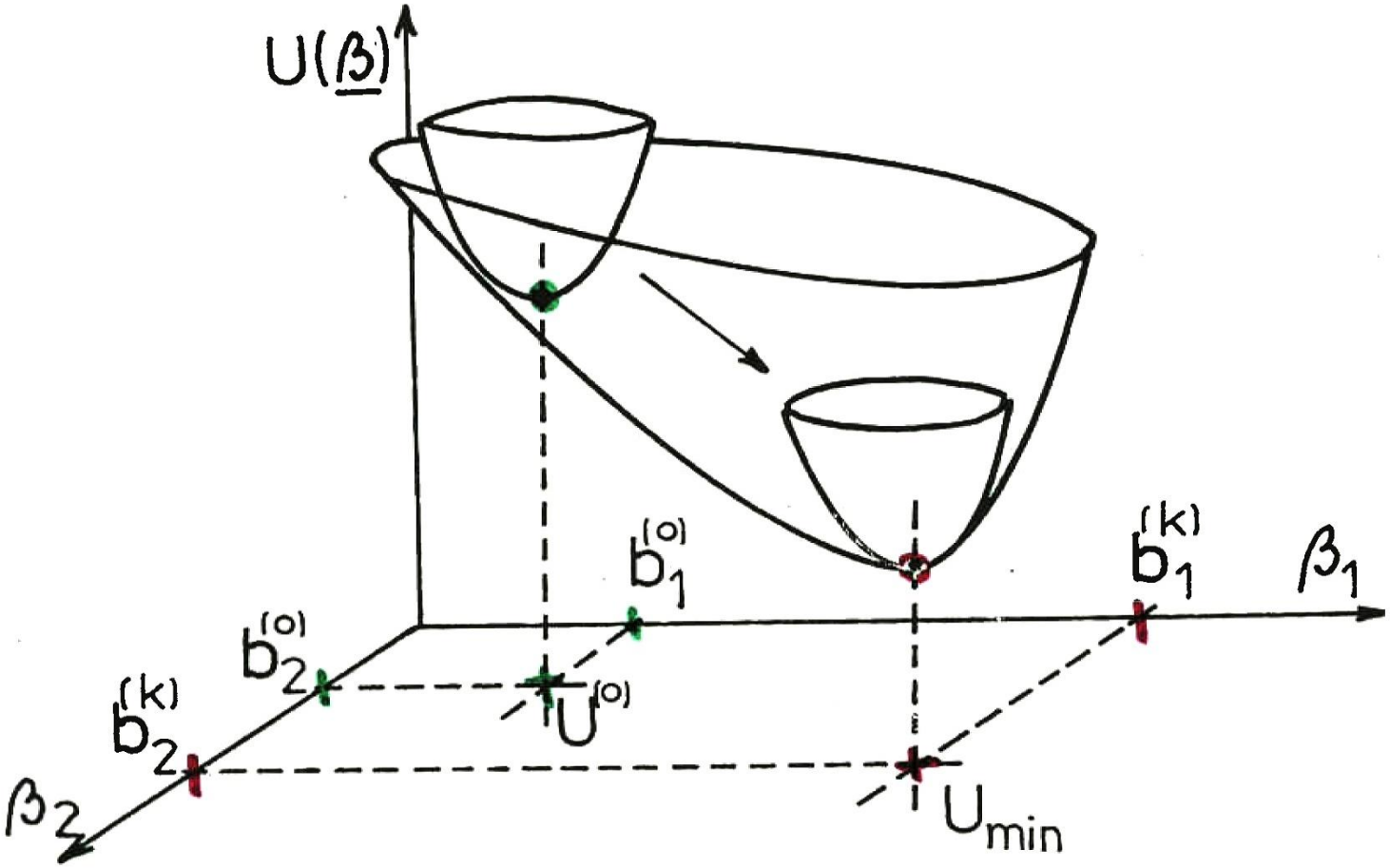
MINIMALIZAČNÍ PROCES:




SOUŘADNICE MINIMA =
= NEJLEPŠÍ ODHADY PARAMETRŮ
β_2
$b_2^{(k)}$
$b_2^{(0)}$
U_{min}
$U^{(0)}$
$U^{(1)}$
$U^{(2)}$
$U^{(3)}$
$U^{(4)}$
$b_1^{(0)}$
$b_1^{(k)}$
β_1



Případ dvou lokálních minim β a β* a sedlového bodu **S**



Geometrická interpretace hledání minima U(β)

2. O lokálním chování funkce U(β) v okolí libovolného bodu β_j lze získat kvantitativní informace z jejího Taylorova rozvoje

$$U(\beta) = U(\beta_j) + \Delta\beta_j^T \mathbf{g}_j + \frac{1}{2} \Delta\beta_j^T \mathbf{H}_j \Delta\beta_j$$

Numerické postupy

Nelineární minimalizace: model $f(x, \beta)$ je nelineární vzhledem k parametru β_r,

Nelineární maximalizace: použití maximální věrohodnosti

Extremalizace: užití libovolného kritéria regrese, kde "proměnné" jsou regresní parametry β

Optimalizační metody:

- ***hledání volného extrému***, pokud nejsou na regresní parametry kladena žádná omezení,
- ***hledání vázaného extrému***, jestliže regresní parametry musí splňovat jisté omezující podmínky.

Programy obsahují:

1. hledání extrému v zadaném směru (jednorozměrná optimalizace),
2. invertaci matic,
3. numerické derivace (u derivačních metod),
4. způsoby překonávání lokálních oblastí divergence.

Dělení programů:

a) nederivační optimalizační metody,
b) derivační metody pro kritérium metody MNČ,
c) obecné derivační metody,
d) algoritmy pro speciální případy.

Nederivační metody

Umožňují nalezení extrému $G(\beta)$ vzhledem k β:

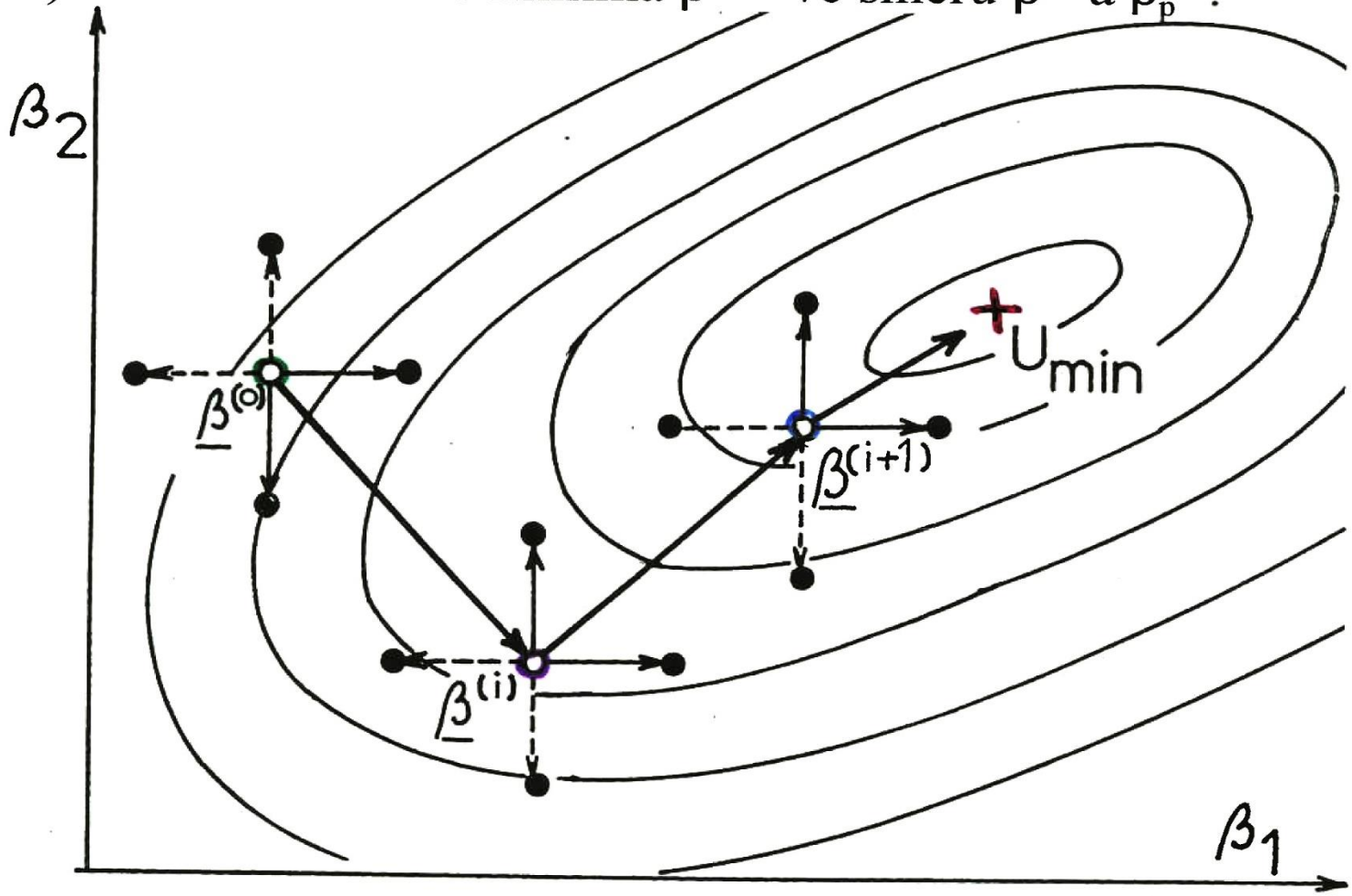
1. metody přímého hledání,
2. simplexové metody,
3. metody využívající náhodných čísel,
4. postupy speciálně vhodné pro MNČ.

1. Metody přímého hledání

Hookův-Jeevsův algoritmus:

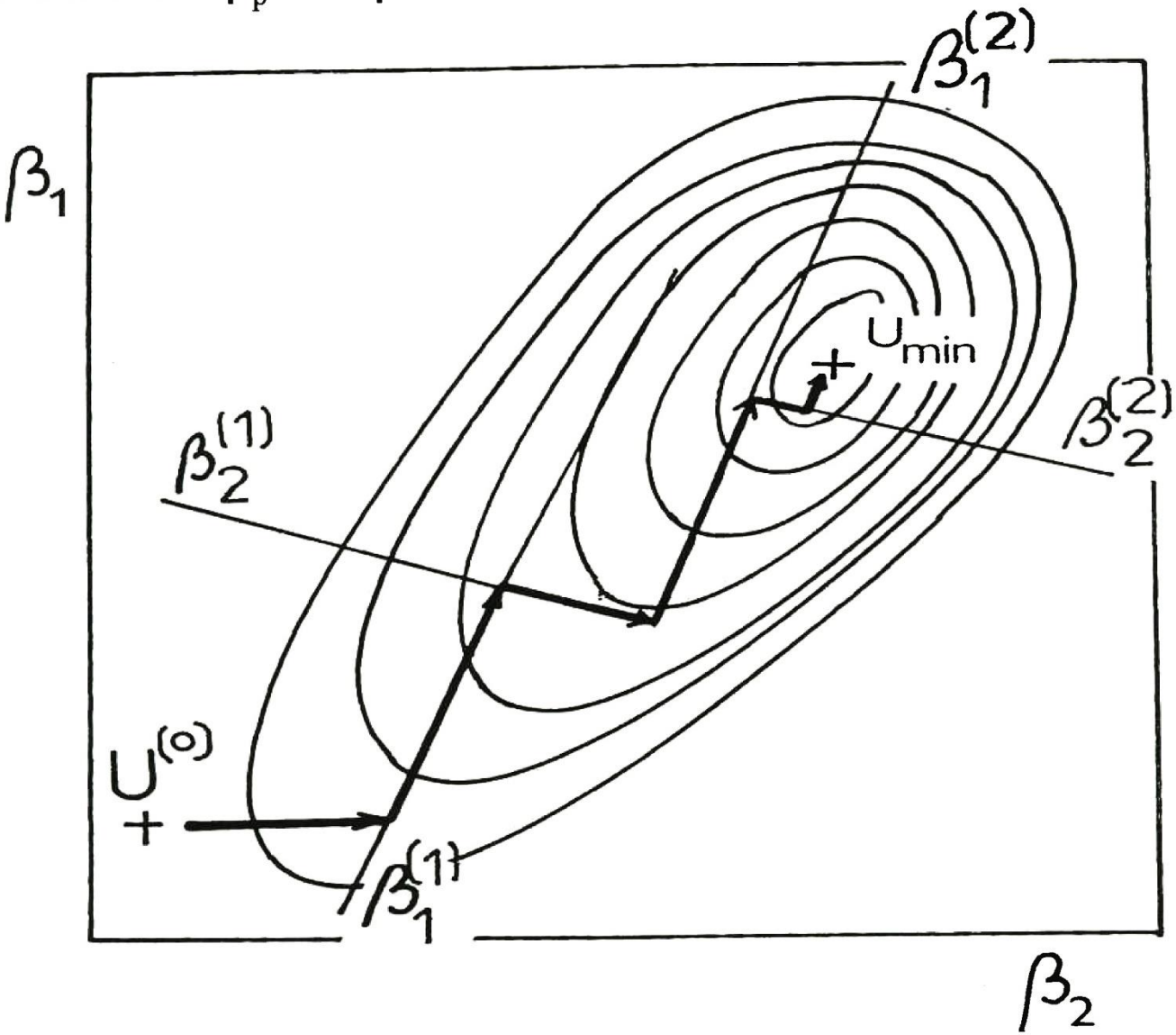
a) krokové posuny a nalezení zlepšeného odhadu $\beta_p^{(i)}$, pro který je $G(\beta_p^{(i)}) < G(\beta^{(i)})$,

b) hledání lokálního minima $\beta^{(i+1)}$ ve směru $\beta^{(i)}$ a $\beta_p^{(i)}$.



Postup koordinátního hledání (čárkovaně znázorněny neúspěšné směry)

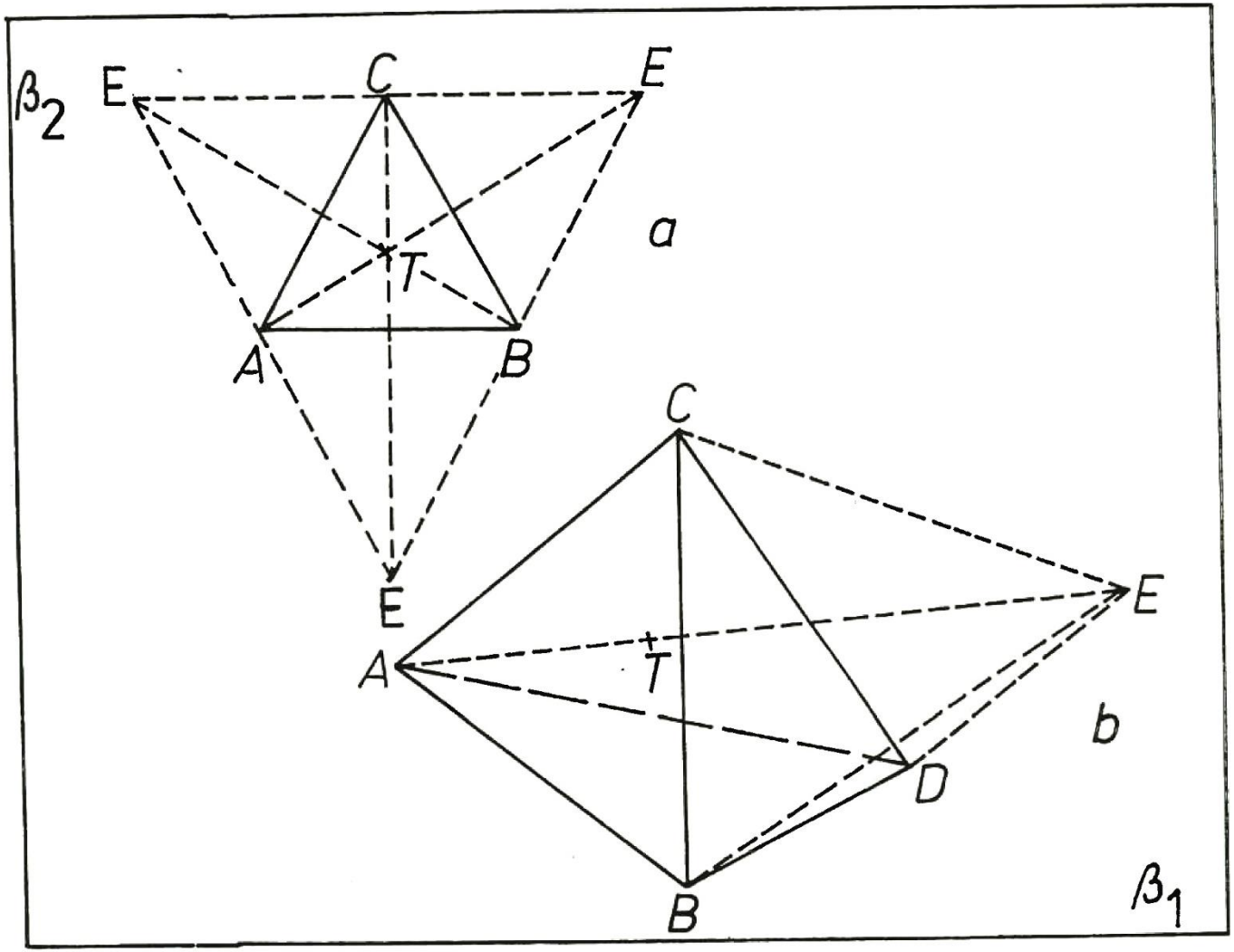
Rosenbrockova metoda: místo krokového hledání ve směru **s** rotaci souřadného systému tak, aby jedna osa splynula se směrem $\mathbf{S} = \beta_p^{(i+1)} - \beta^{(i)}$.



Postup Rosenbrockovy minimalizace

2. Simplexové metody

Postupné vytváření ***adaptivních polyedrů*** (simplexů):



Simplex pro (a) m = 2, a (b) m = 3 parametry.
Simplex A, B, C lze převrátit do tří poloh CBE, ABE, ACE

Z počátečního odhadu $\beta^{(0)}$ se postupně tvoří ***simplexy***.

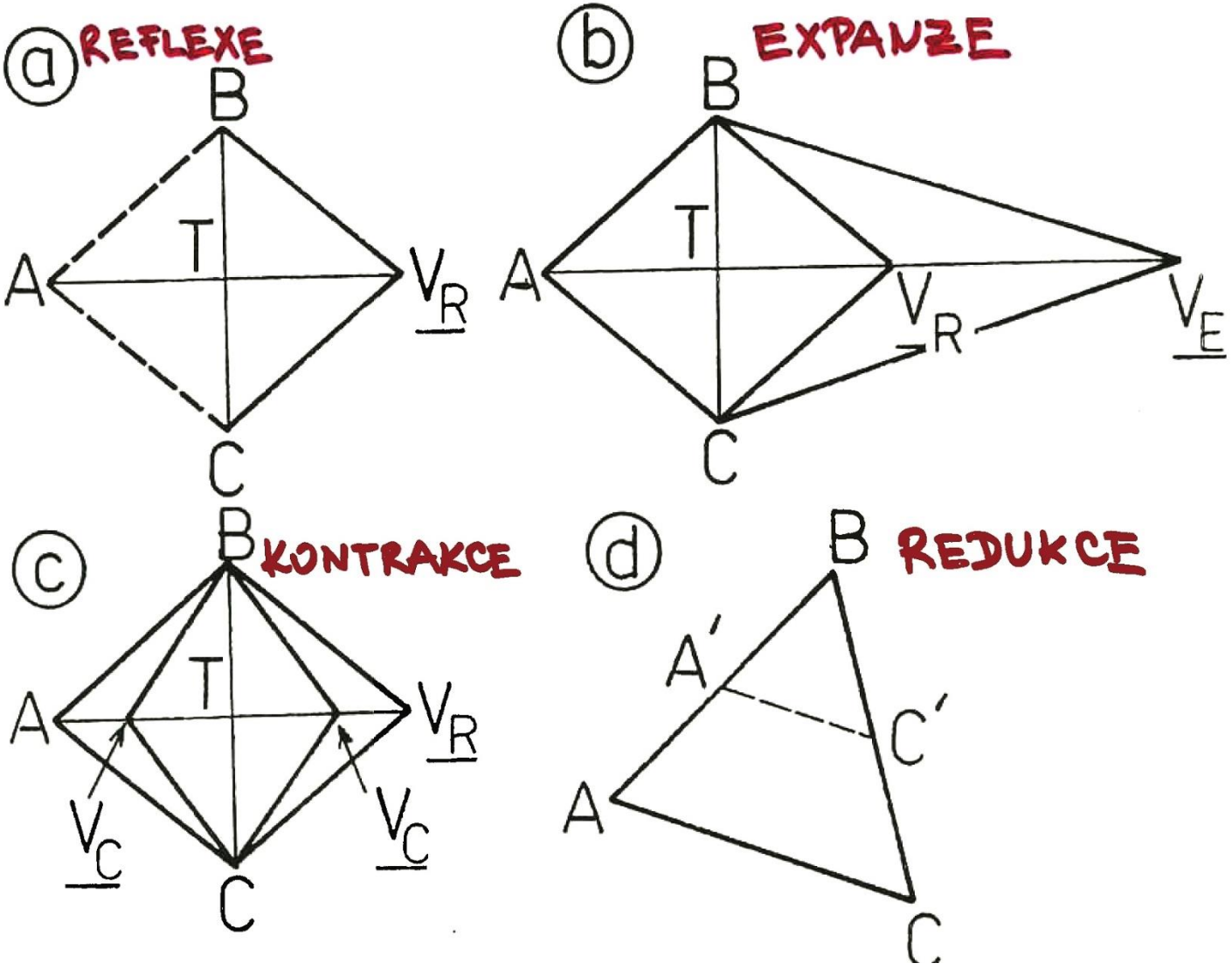
Simplex je konvexní mnohostěn v m-rozměrném prostoru parametrů právě svými (m+1) vrcholy.

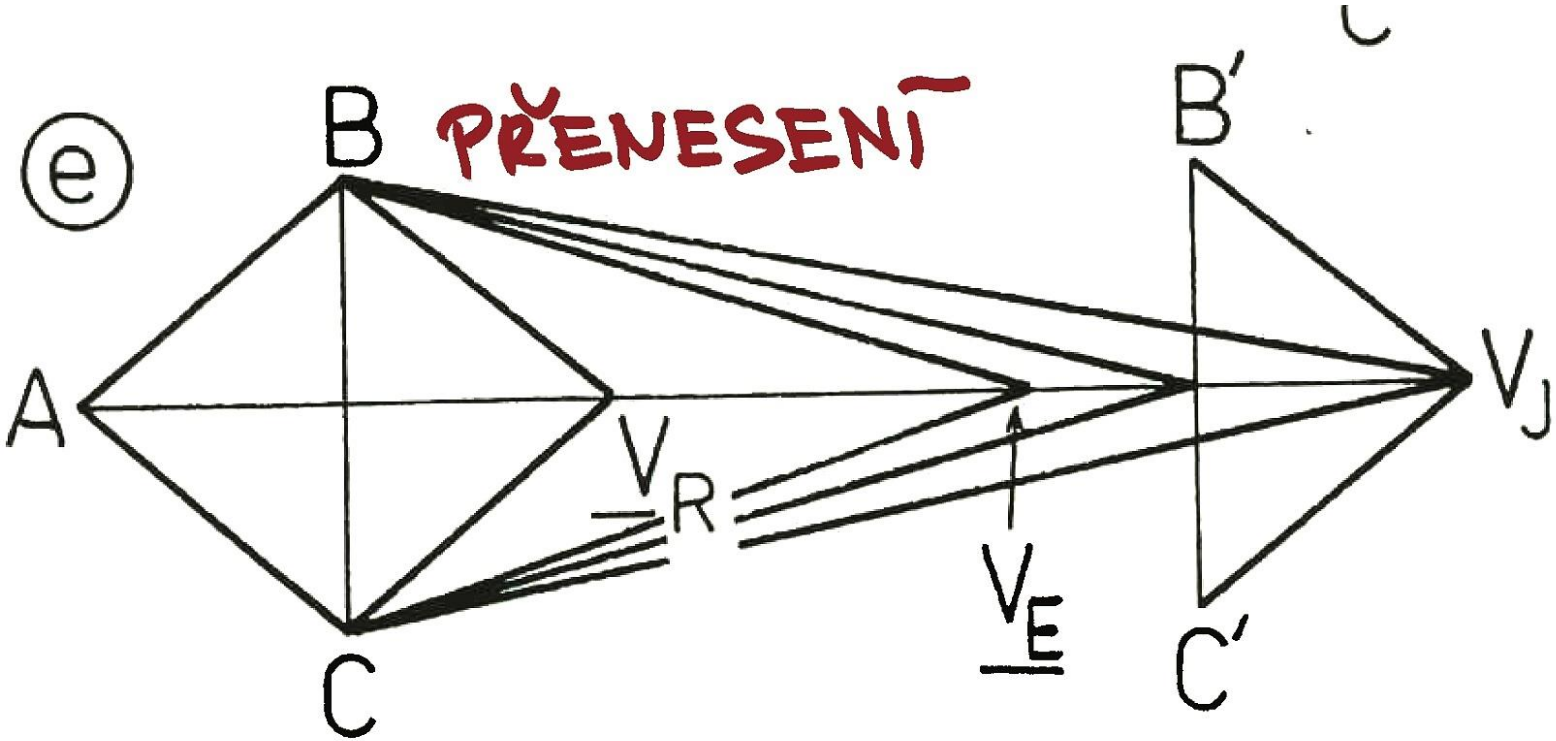
Postup minimalizace:

1. Konstrukce výchozího simplexu.
2. Iterativní postup k minimu.
3. Identifikace ukončení hledání terminace.

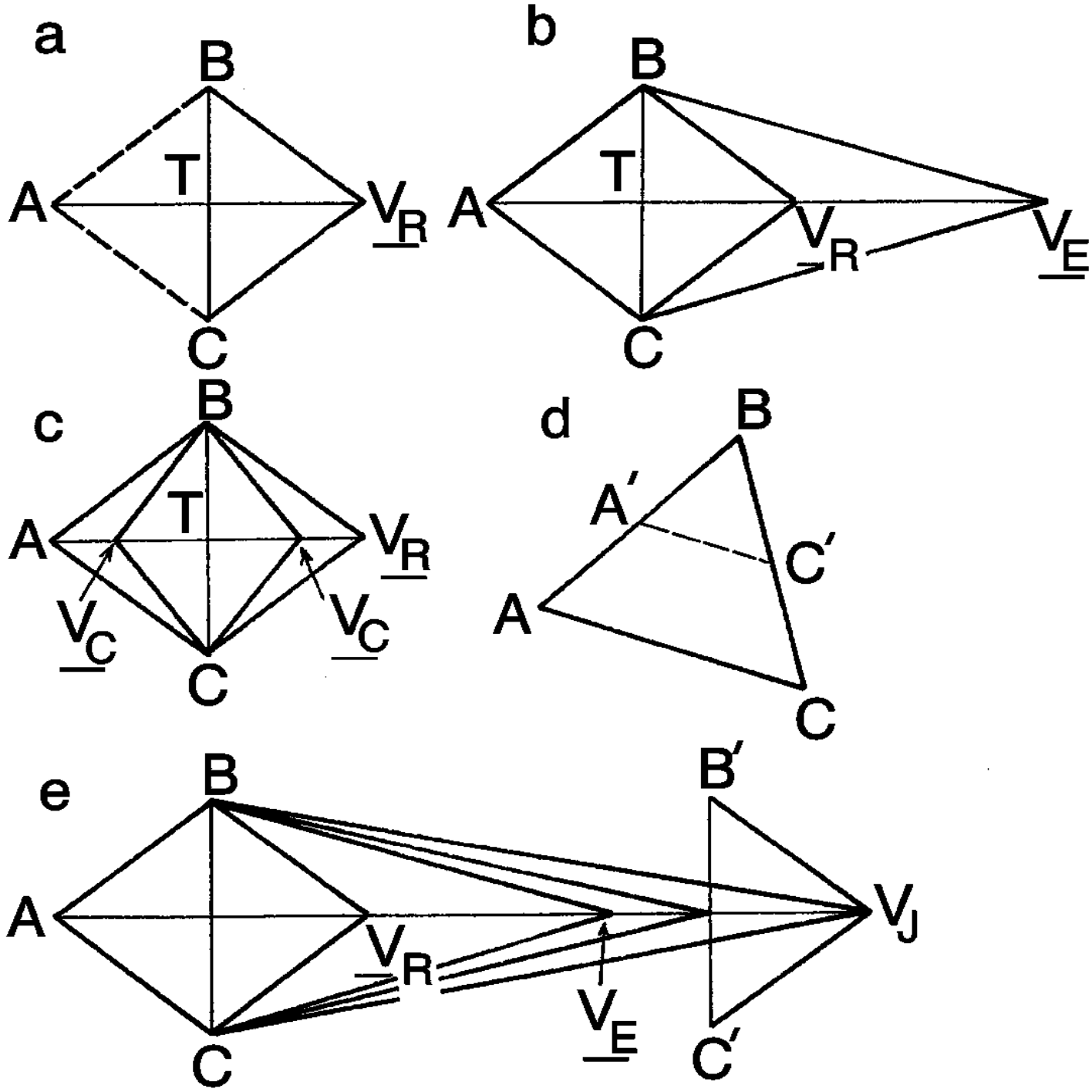
2. *Iterativní postup k minimu*

Na spojnici mezi $\mathbf{V}_H$ a jeho zrcadlovým obrazem pět operací: ***reflexe***, ***expanze***, ***kontrakce***, ***redukce*** a ***přenesení***.





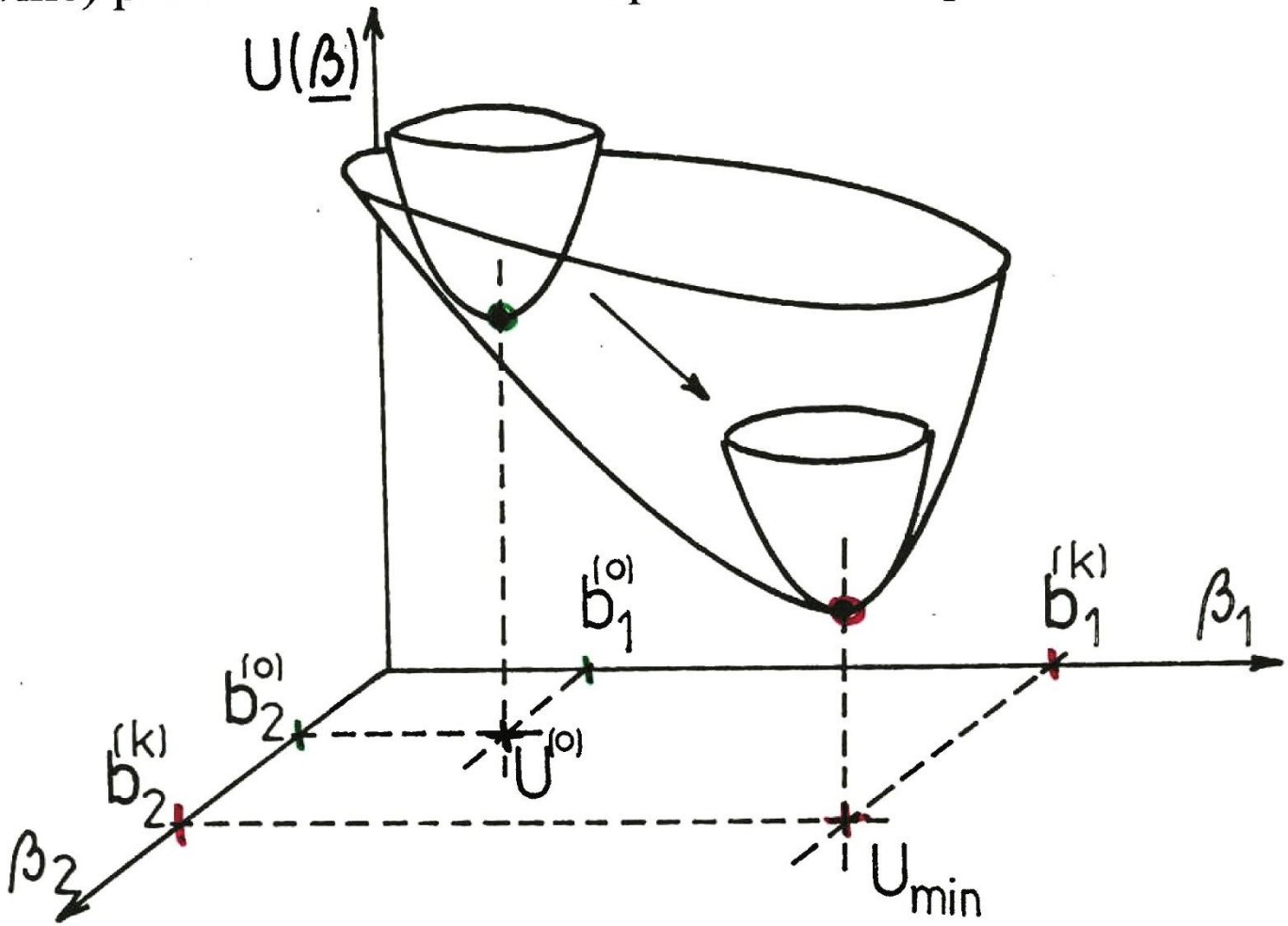
Základní operace simplexu:
a) reflexe, b) expanze, c) kontrakce, d) redukce a e) přenesení


a
B
T
A
V_R
C
b
B
T
A
V_R
V_E
C
c
B
T
A
V_R
V_C
V_C
C
d
B
A′
C′
A
C
e
B
B′
A
V_J
V_R
V_E
C
C′

4. Postupy speciálně pro MNC

Algoritmus LETAGROP: "mapování dolíčku" m-rozměrným eliptickým hyperparaboloidem.

Po dosazení vyjde (m + 1)(m + 2)/2 "nástřelů" (= lineárních rovnic) pro určení koeficientů aproximačního paraboloidu.



Geometrická interpretace hledání minima U(β) (LETAGROP)