NELINEÁRNÍ REGRESNÍ MODELY

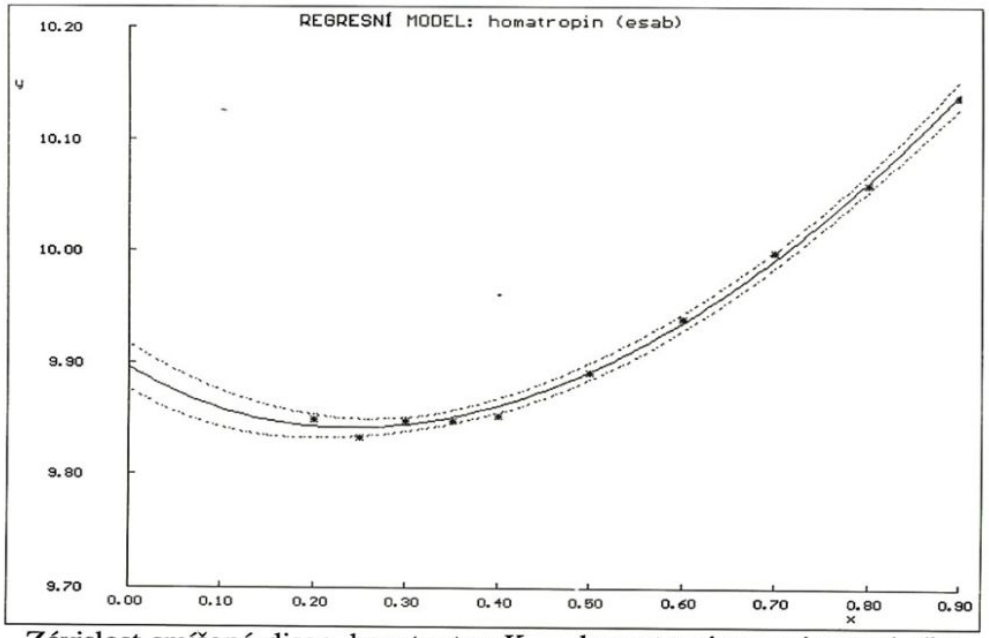
Základní úlohy:
1. Konstrukce ***kalibračních modelů***,
2. Ověření ***teoretických modelů*** fyzikálně-chemické zákonitosti,
3. Tvorba ***empirických modelů***,

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), $\beta = (\beta_1, ..., \beta_m)^T$.

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



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

Nulté přiblížení: $pK_a^T = 1$, $å = 1$ Å, $C = 1$

Nalezeno: $pK_a^T = 9.90(1)$, $å = 6(2)$Å a $C = 0.51(3)$

Model: rozšířený Debye-Hückelův zákon

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

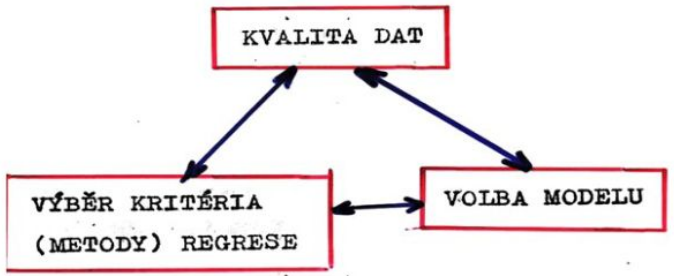
Proměnné:

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

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

POSTUP A DIAGNOSTIKA REGRESE:

Regresní triplet:



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

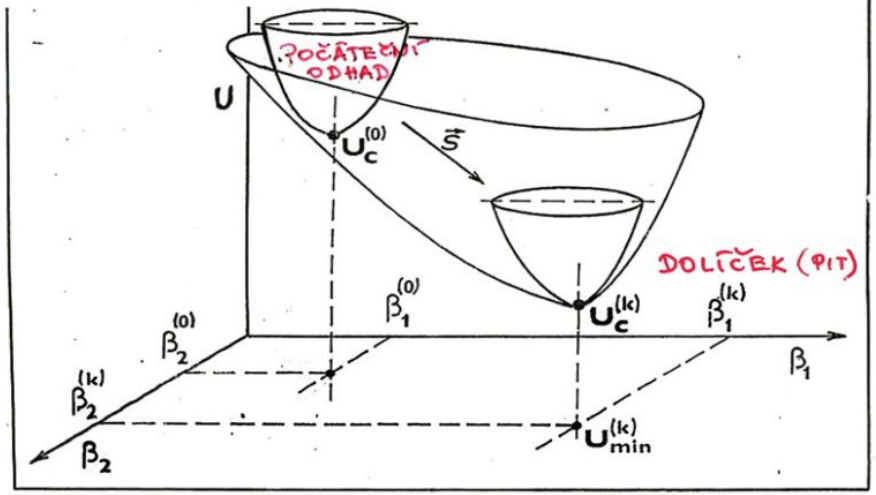
kde $y_{vyp,i} = f(x_i; b_1, ..., b_m)$

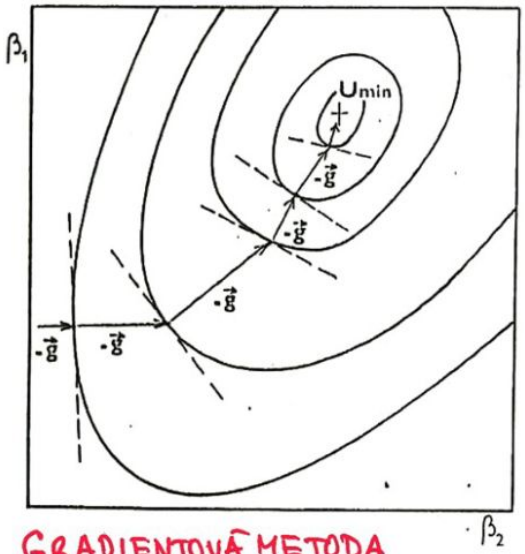
GEOMETRICKÉ ZNÁZORNĚNÍ KRITÉRIA U

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

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

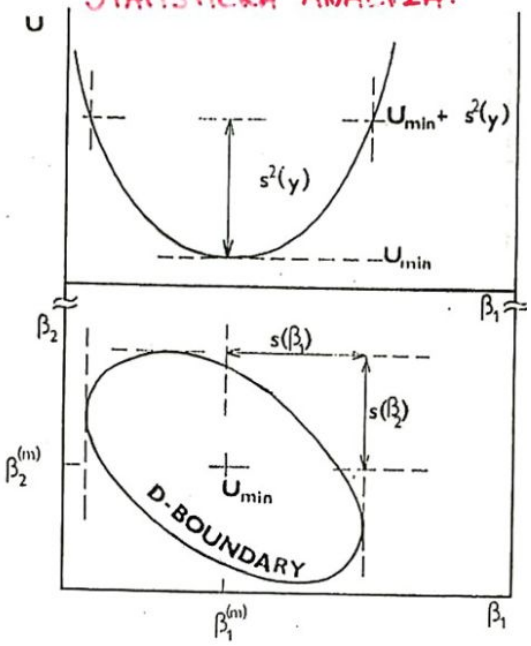
OPTIMALIZAČNÍ PROBLÉM V (m+1) ROZMĚRNÉM PROSTORU





GRADIENTOVÁ METODA HLEDÁNÍ MINIMA

STATISTICKÁ ANALÝZA:



Intervaly spolehlivosti parametrů

1. Vyčíslí se 100(1 - α)%ní interval spolehlivosti parametru β_j

$$b_j - \hat{\sigma}\sqrt{V_{jj}}\, t_{1-\alpha/2}(n-m) \le \beta_j \le b_j + \hat{\sigma}\sqrt{V_{jj}}\, t_{1-\alpha/2}(n-m)$$

2. Vhodnější je určovat intervaly spolehlivosti parametru β_k na základě maximální délky Δ_k průmětu Δ_{jk} do osy parametru β_k:

$$b_k - \Delta_k \le \beta_k \le b_k + \Delta_k$$

Pro intervaly spolehlivosti pak platí

$$b_k - p\sqrt{V_{kk}} \le \beta_k \le b_k + p\sqrt{V_{kk}}$$

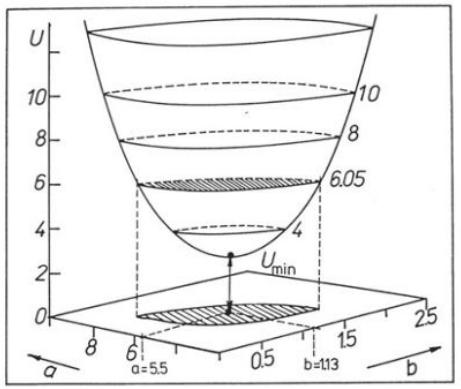
Pro m = 1 jsou všechny tyto intervaly totožné.

Lineární regresní model:

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

kde $y_{vyp,i} = f(\boldsymbol{x}; \beta_1, \ldots, \beta_m)$

Symetrický paraboloid v (m + 1)-rozměrném prostoru

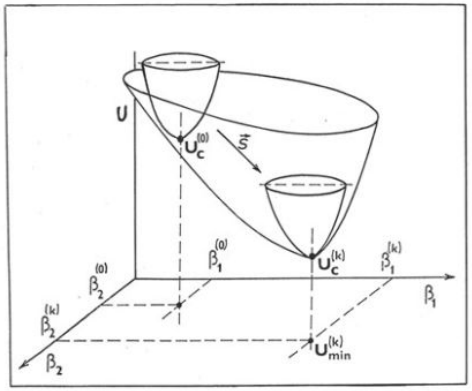


Nelineární regresní model:

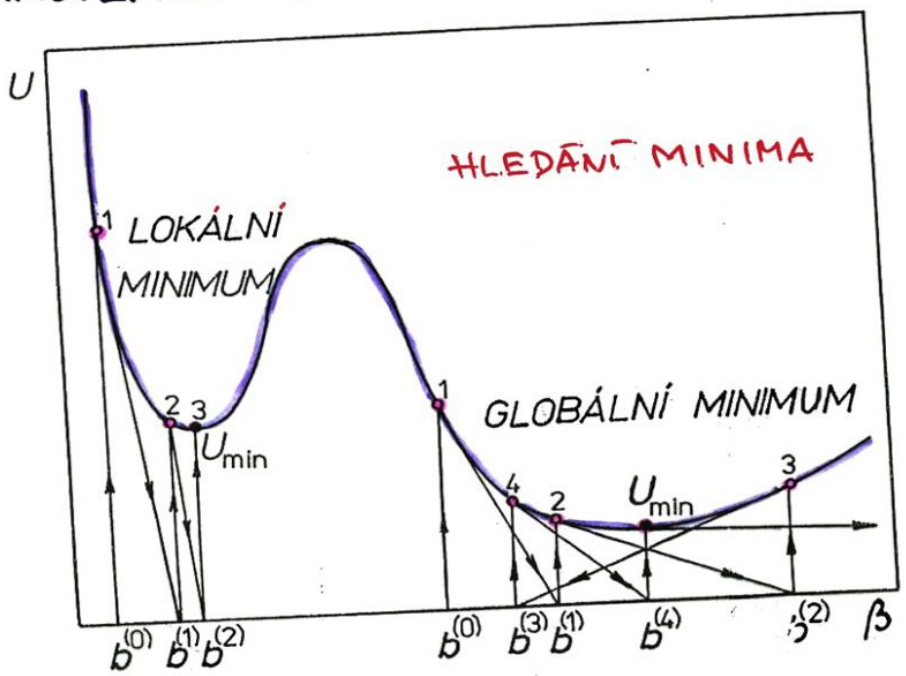
$$U = \sum_{i=1}^{n} W_i (y_{\exp,i} - y_{vyp,i})^2 \approx \text{minimum}$$

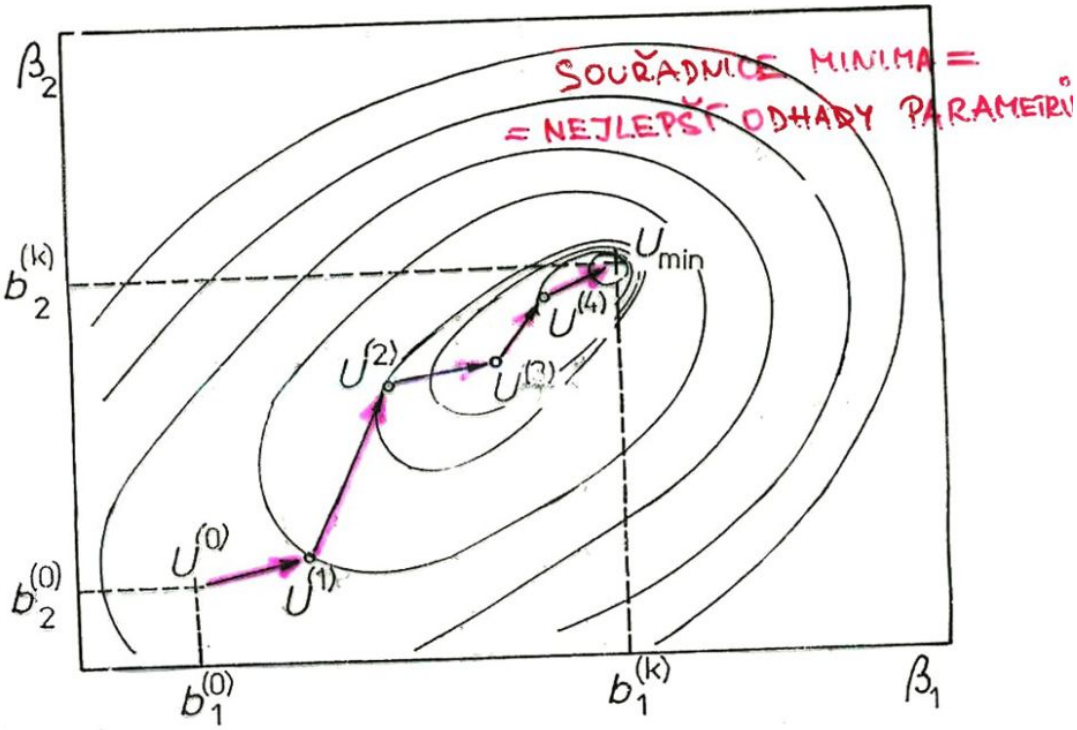
kde $y_{vyp,i} = f(\boldsymbol{x}; \beta_1, \ldots, \beta_m)$

Eliptický hyperparaboloid v (m + 1)-rozměrném Eukleidovském prostoru



MINIMALIZAČNÍ PROCES:



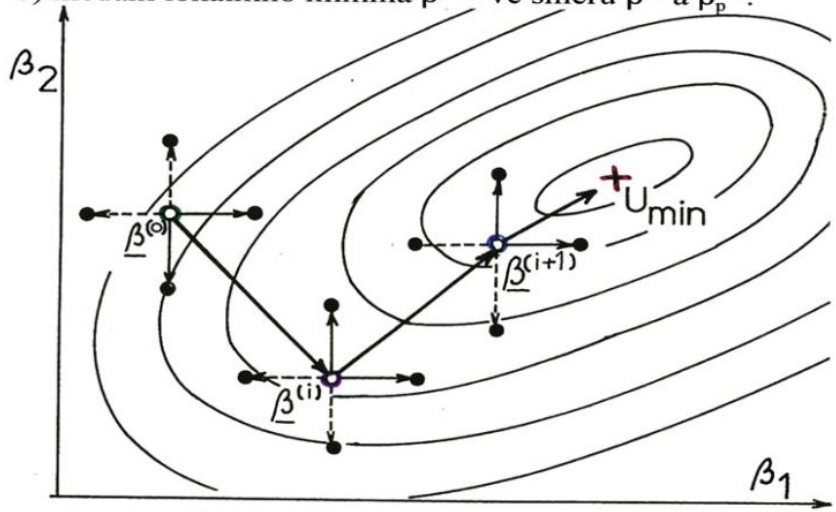


1. Metody přímého hledání

Hookův-Jeevsův algoritmus:

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

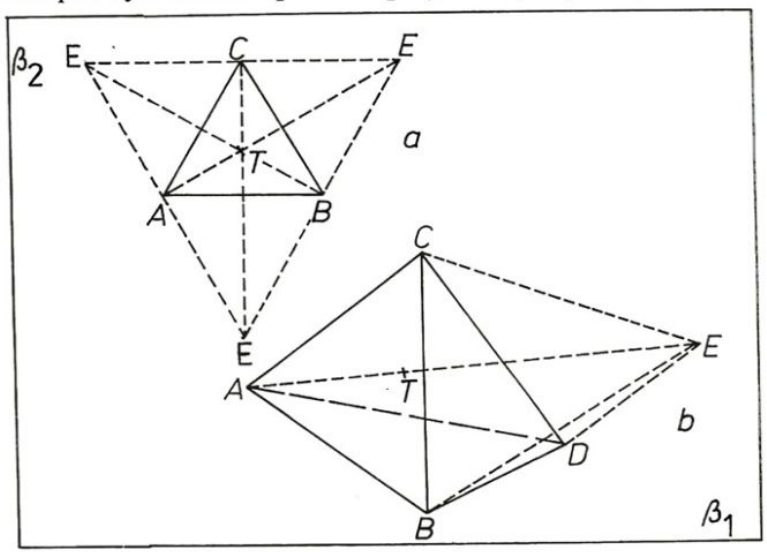
b) hledání lokálního minima $\beta^{(i+1)}$ ve směru $\beta^{(i)}$ a $\beta_p^{(i)}$.



Postup koordinátního hledání (čárkovaně znázorněny neúspěšné směry)

2. Simplexové metody

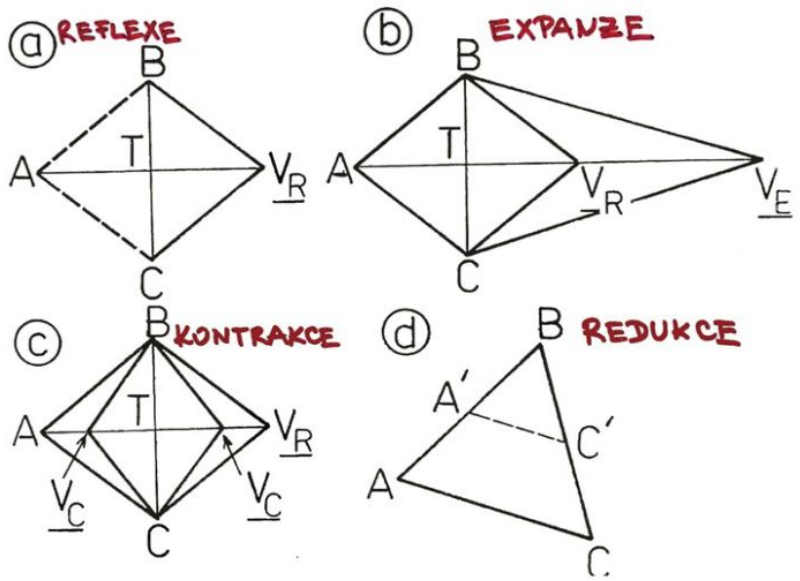
Postupné vytváření ***adaptivních polyedrů*** (simplexů):



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

2. Iterativní postup k minimu

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



Těsnost proložení

Statistická analýza reziduí

Pro aditivní modely měření:

$$\hat{e}_i = y_i - f(x_i, \mathbf{b})$$

vektor reziduí $\hat{\mathbf{e}}$ souvisí s vektorem chyb ε podle

$$\hat{\mathbf{e}} \approx (\mathbf{E} - \mathbf{P})\,\varepsilon$$

kde a P_{ik} jsou prvky projekční matice $\mathbf{P}$,

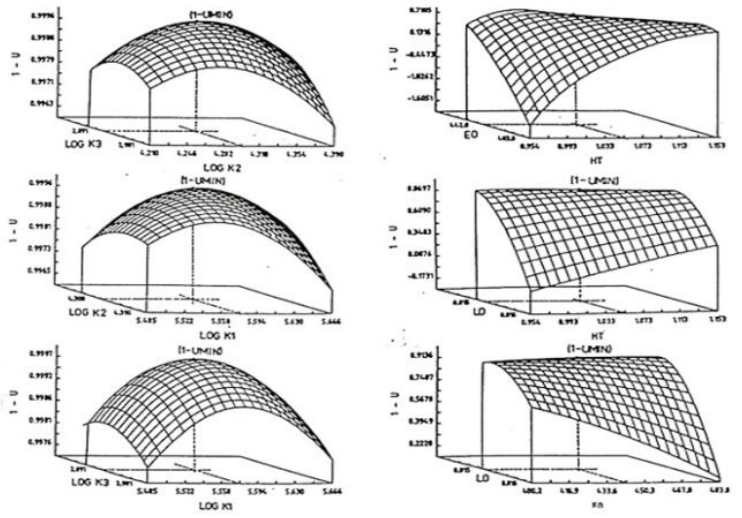
Každé reziduum je přibližně lineární kombinací všech chyb

$$\hat{e}_i = \varepsilon_i - \sum_{k=1}^{q} P_{ik}\,\varepsilon_k$$

ale u malých výběrů je rušivý ***efekt supernormality***,

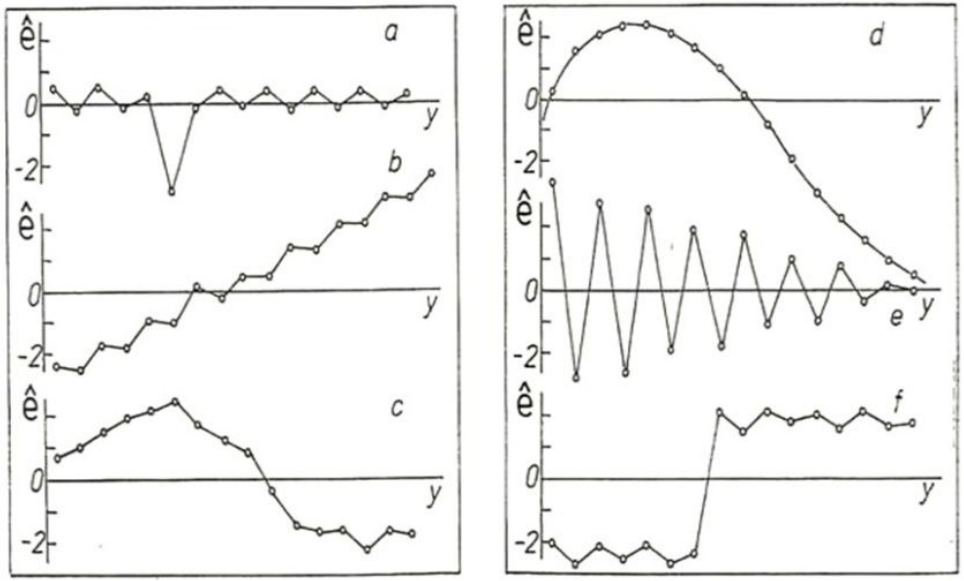
Citlivost parametrů ovlivňuje kvalitu odhadu, a proto jsou **parametry v modelu**

dobře podmíněny **špatně podmíněny**



1. Grafická analýza reziduí

a) odlehlé (extrémní) hodnoty v souboru reziduí,
b) trend v reziduích,
c) nedostatečné střídání znaménka u reziduí,
d) chybný model nebo vzájemnou závislost reziduí,
e) heteroskedasticitu (nekonstantnost rozptylu) závisle proměnné (měřené) veličiny **y**,
f) náhlou změnu podmínek při měření hodnot y.



a) odlehlá hodnota v datech;
b) trend v reziduích;
c) nedostatečné střídání znaménka reziduí;
d) chybný model;
e) heteroskedasticita;
f) náhlá změna podmínek

Obecné testační charakteristiky:

$$T_{p,q} = \sum_{i=1}^{n} \hat{e}_i^{\,p} \, [f(x_i, \mathbf{b})]^q$$

a) ***Testační charakteristika*** $T_{1,1}$ by měla být (přibližně) rovna nule, protože obyčejně platí, že $\hat{\mathbf{e}}^T f(x_i, \mathbf{b}) = 0$.

b) ***Testační charakteristika*** $T_{2,1}$ ukazuje na heteroskedasticitu.

c) ***Testační charakteristika*** $T_{1,2}$ ukazuje na chybně navržený model,

d) ***Testační charakteristika*** $T_{1,0}$ by měla být přibližně rovna nule,

2. Numerická analýza reziduí

1. ***Střední hodnota reziduí***, E(ê), by se měla rovnat nule,
2. ***Průměrné reziduum*** $|\bar{e}| = \frac{1}{n} \sum_{i-1}^{n} |\hat{e}_i|$ by se mělo rovnat náhodné chybě.
3. ***Směrodatná odchylka střední hodnoty reziduí*** s(ê) by se měla rovnat náhodné chybě.
4. ***Koeficient šikmosti*** $g_1(\hat{e})$ se pro Gaussovo rozdělení rovná nule.
5. ***Koeficient špičatosti*** $g_2(\hat{e})$ se pro Gaussovo rozdělení rovná třem.

3. Analýza vlivných bodů

Vychází se z jednokrokové aproximace odhadu $\mathbf{b}_{(i)}$

$$\mathbf{b}_{(i)}^{1} = \mathbf{b} - \frac{(\mathbf{J}^T \mathbf{J})^{-1} \mathbf{J}_i \hat{\mathbf{e}}_i}{1 - P_{ii}}$$

kde P_{ii} jsou prvky projekční matice,

a) ***Charakteristika*** DFS_{ij} vyjadřuje vliv i-tého bodu na odhad j-tého parametru

$$DFS_{ij} = \frac{b_j - b_{j(i)}^{1}}{\hat{s}_{(i)} \sqrt{V_{ii}}}$$

kde $\hat{s}^2_{(i)}$ je odhad rozptylu vyčíslený při vynechání i-tého bodu podle vztahu

$$\hat{s}^2_{(i)} = \frac{U(\mathbf{b}) - \frac{\hat{e}_i^2}{1 - P_{ii}}}{n - m - 1}$$

a symbol V_{ii} značí prvky matice $\mathbf{V} = (\mathbf{J}^T \mathbf{J})^{-1}$.
Test: i-tý bod se považuje za vlivný, pokud je $DFS_{ij} > 2/\sqrt{n}$.

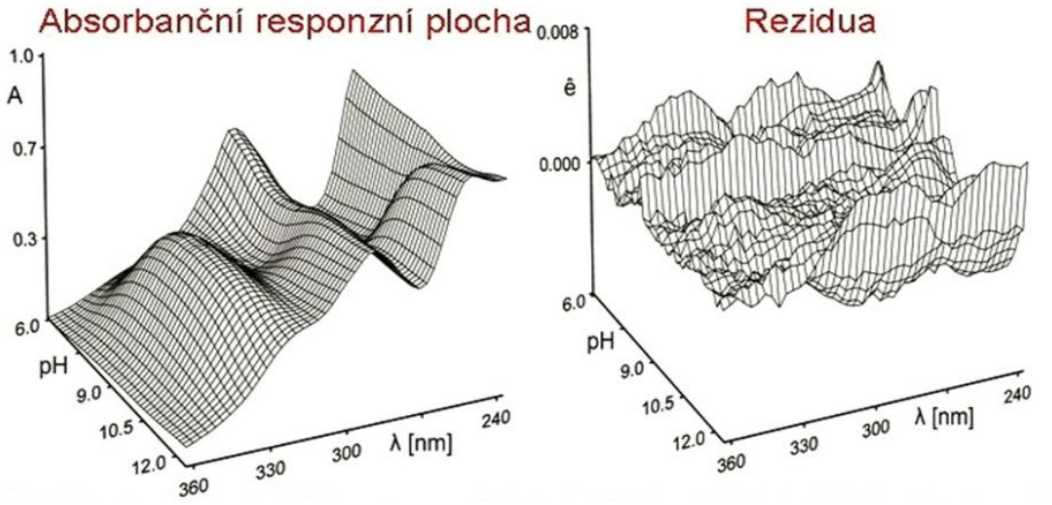
b) ***Jackknife rezidua*** $\hat{e}_{Ji}$

$$\hat{e}_{Ji} = \frac{\hat{e}_i}{\hat{s}_{(i)}\sqrt{1 - P_{ii}}}$$

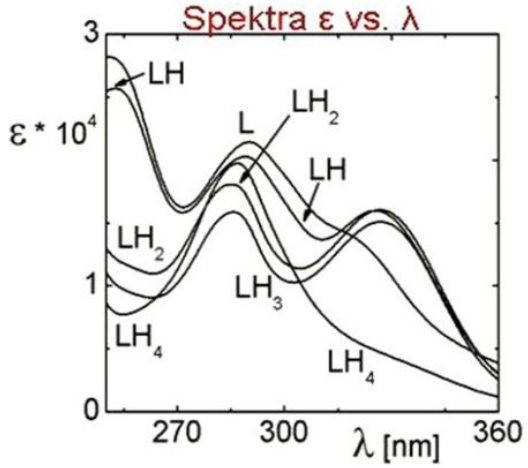
Test: silně vlivné body mají $\hat{e}_{Ji}^2 > 10$.

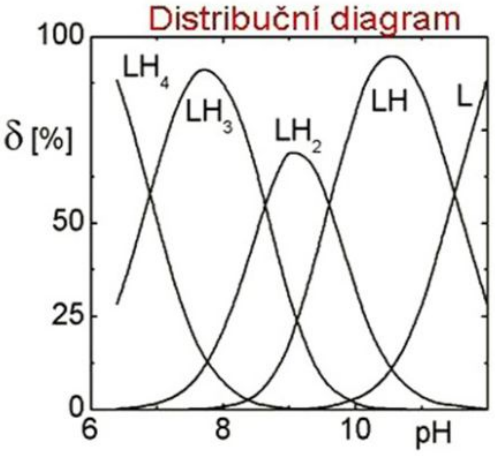
Input dat

Grafická analýza reziduí

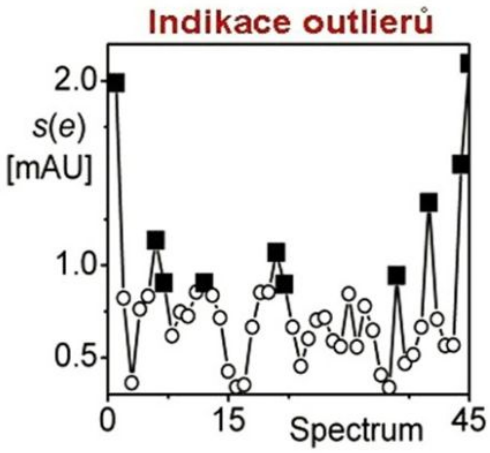


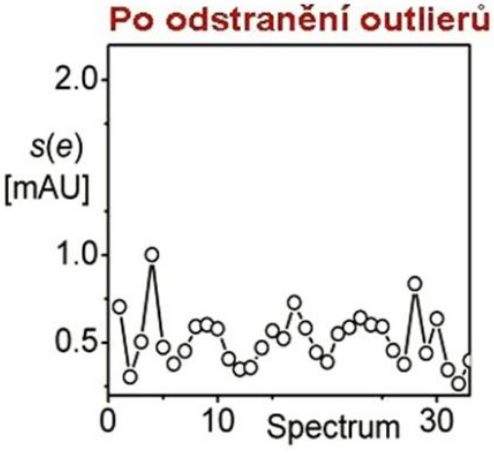
Grafické závěry o nalezených odhadech parametrů z postaveného chemického (=nelineárního regresního) modelu



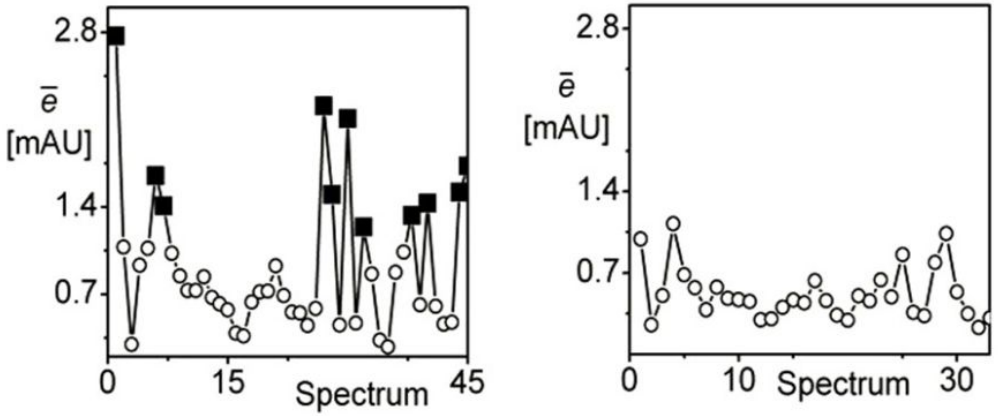


Mírou věrohodnosti nalezených odhadů regresního modelu je vždy míra těsnosti proložení experimentálních bodů vypočtenou regresní křivkou čili statistická analýza reziduí před a po odstranění outlierů.

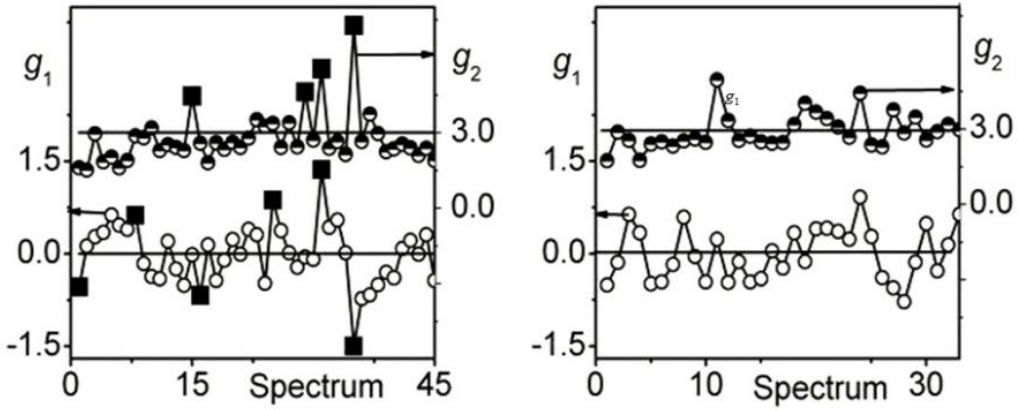




Míru těsnosti proložení je vhodné posuzovat dle velikosti reziduí a jejich rozdělení, a to především dle střední hodnoty reziduí a symetrie rozdělení (vyjádřené koeficientem šikmosti a špičatosti).



Symetrii a tvar rozdělení vystihuje koeficient šikmosti g_1 a špičatosti g_2) před a po odstranění outlierů.



Postup tvorby nelineárního regresního modelu

1. Návrh regresního modelu.

Obvykle se používá nějaká fyzikální nebo empirická závislost.

2. Odhadování parametrů.

K hledání minima kritéria regrese se užívá iterativních algoritmů, kritérium minima součtu čtverců reziduí.

3. Posouzení kvality odhadů.

Kvalita nalezených odhadů se posuzuje dle jejich intervalů spolehlivosti nebo pouze jejich rozptylů $D(b_j)$.

Příčinou vysokých rozptylů parametrů bývá také předčasné ukončení minimalizačního procesu před dosažením minima.

4. Grafické posouzení vhodnosti modelu.

Grafická analýza reziduí využívá rozptylového grafu reziduí vs. predikce a odhalí:

a) odlehlé hodnoty,
b) trend v reziduích,
c) nedostatečné střídání znaménka u reziduí,
d) heteroskedasticitu.

K ověření normality rozdělení reziduí se užijí rankitové grafy a vyčíslení koeficientu šikmosti $g_1(\hat{e})$ a špičatosti $g_2(\hat{e})$.

5. Základní statistické charakteristiky.

O přiblížení modelu experimentálním datům informuje suma čtverců reziduí v minimu $U(\boldsymbol{b})$, ze které se vyčíslí *reziduální rozptyl* $\hat{\sigma}^2 = U(\boldsymbol{b})/(n - m)$.

Z $U(\boldsymbol{b})$ je odvozen ***koeficient determinace D*** a ***regresní rabat***, 100 D [%].

$$D = 1 - \frac{U(\boldsymbol{b})}{\sum_{i=1}^{n} (y_i - \bar{y})^2}, \quad kde\ \bar{y} = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^{n} y_i ,$$

Hamiltonův R-faktor je definován $R\text{-}faktor = \sqrt{\frac{U(\boldsymbol{b})}{\sum_{i=1}^{n} y_i^2}}$,

a pro $\bar{y} = 0$ platí, že $R^2\text{-}faktor = 1 - D$ a pro $\bar{y} \neq 0$ pak platí vztah

$$R\text{-}faktor = \sqrt{(1 - D) - \frac{(1 - D)\, n\, \bar{y}^2}{\sum_{i=1}^{n} y_i^2}} .$$

Hamiltonův R-faktor ukazuje na rozdíl mezi modelem $y = f(x, \beta)$ a modelem $y = 0$.

Mezi modely rozliší ***Akaikovo informační kritérium***

$$AIC = - L(\boldsymbol{b}) + 2\, m.$$

Optimální je model, pro který je AIC minimální. Platí přitom

$$AIC = n \ln\left[\frac{U(\boldsymbol{b})}{n}\right] + 2\, m .$$

6. Regresní diagnostika.

Obsahuje **pomůcky analýzy regresního tripletu**, tj. pro ***kritiku dat, kritiku modelu*** a ***kritiku metody.***

Analýzou vlivných bodů (vybočující pozorování a extrémy) se identifikují body, které silně ovlivňují odhadované parametry v modelu.

Pro aditivní modely měření a MNČ jsou rezidua definována vztahem $\hat{e}_i = y_i - f(x_i, \mathbf{b})$.

B. Analýza vlivných bodů:

U lineárních regresních modelů: je odhalení vlivných bodů VB pomocí reziduí $\hat{e}_i$ a prvků P_{ii} projekční matice

$$\boldsymbol{P} = \boldsymbol{X}\, (\boldsymbol{X}^{\mathrm{T}}\, \boldsymbol{X})^{-1}\, \boldsymbol{X}^{\mathrm{T}}.$$

U nelineárních regresních modelů: je proto třeba konstruovat matici $\boldsymbol{P}$ vztahem

$$\boldsymbol{P} = \boldsymbol{J}\, (\boldsymbol{J}^{\mathrm{T}}\, \boldsymbol{J})^{-1}\, \boldsymbol{J}^{\mathrm{T}}$$

kde $\boldsymbol{J}$ je Jakobián čili derivaci modelové funkce podle jednotlivých parametrů v daných bodech. Komplikace je v tom, že již nelze vyjádřit odhady parametrů a rezidua jako lineární kombinaci experimentálních dat.

Vychází se proto z jednokrokové aproximace odhadu $\boldsymbol{b}_{(i)}$

$$\boldsymbol{b}_{(i)}^{1} = \boldsymbol{b} - \frac{(\boldsymbol{J}^{T}\, \boldsymbol{J})^{-1}\, \boldsymbol{J}_i\, \hat{e}_i}{1 - P_{ii}} ,$$

kde P_{ii} jsou prvky projekční matice $\boldsymbol{P}$.

Charakteristika DFS_{ij} vyjadřuje vliv i-tého bodu na odhad j-tého parametru dle vztahu $$DFS_{ij} = \frac{b_j - b^1_{j(i)}}{\hat{s}_{(i)}\sqrt{V_{ii}}},$$

kde $\hat{s}^2_{(i)}$ je odhad rozptylu vyčíslený při vynechání i-tého bodu

$$\hat{s}^2_{(i)} = \frac{U(\boldsymbol{b}) - \frac{\hat{e}_i^2}{1 - P_{ii}}}{n - m - 1},$$ kde V_{ii} značí prvky matice $\boldsymbol{V} = (\boldsymbol{J}^T \boldsymbol{J})^{-1}$.

Test: i-tý bod je vlivný, když je $DFS_{ii} > 2/\sqrt{n}$.

Vlivné body VB lze identifikovat jednokrokovou aproximací ***Jackknife reziduí*** dle vztahu $$\hat{e}_{Ji} = \frac{\hat{e}_i}{\hat{s}_{(i)}\sqrt{1 - P_{ii}}}.$$

K vyjádření vlivu jednotlivých bodů na odhady parametrů lze použít změny vektoru vychýlení $\boldsymbol{h}_{(i)}$ při vynechání i-tého bodu nebo změny střední hodnoty i-tého rezidua při vynechání i-tého bodu:

Mezi nelineární míry vlivu i-tého bodu na odhady parametrů patří ***věrohodnostní vzdálenost***

$$LD_i = 2\,[\ln L(\boldsymbol{b}) - \ln L(\boldsymbol{b}_{(i)})]$$

a pro MNČ je ve tvaru $$LD_i = n \ln\left[\frac{U(\boldsymbol{b}_{(i)})}{U(\boldsymbol{b})}\right].$$

Do obou vztahů lze dosadit buď odhady $\boldsymbol{b}_{(i)}$, určené regresí při vynechání i-tého bodu, nebo $\boldsymbol{b}^1_{(i)}$, určené z jednokrokové aproximace.

Test: Je-li $LD_i > \chi^2_{1-\alpha}(2)$, je daný bod silně vlivný a $\alpha = 0.05$.

(a) VB ovlivňují odhady parametrů a relativní vychýlení $\boldsymbol{h}_R$.

(b) Charakteristiky založené na aproximaci nelineárního modelu neindikují vždy správně přítomnost VB.

(c) Nejlepší indikaci VB poskytuje LD_i, protože umožňuje indikaci celé skupiny vlivných bodů, kde může dojít k jejich vzájemnému "maskování".

7. Mapa citlivostní funkce.

U nelineárních modelů existuje řada komplikací:

-neodhadnutelnost některých parametrů,
-existence minima funkce $U(\beta)$ jen pro některé regresní modely,
-výskyt lokálních minim,
-existence sedlových bodů, ovlivňujících kriteriální funkci $U(\beta)$ a
-špatná podmíněnost parametrů v regresním modelu.

Problémy lze indikovat analýzou ***normalizovaných citlivostních koeficientů*** $$C_{j(i)} = \beta_j \frac{\delta f(x_i, \beta)}{\delta \beta_j} \qquad \begin{matrix} j = 1, \ldots, m \\ i = 1, \ldots, n \end{matrix}.$$

Pro vizuální posouzení špatné podmíněnosti např. multikolinearitou mezi parametry β_j, β_h, se konstruují ***citlivostní grafy závislosti*** $C_{j(i)}$ a $C_{h(i)}$ na x_i, $i = 1, \ldots, n$ nebo závislost normalizovaných citlivostních koeficientů přímo na indexu i.

Citlivost regresních modelů na změnu parametru β_j vyjadřuje

celková citlivostní funkce $C_{cj} = \frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n}\left[\frac{\delta f(x_i, \beta)}{\delta \beta_j}\right]^2$,

která je nekonstantní pro nelineární parametry β_j, v modelu $f(x, \beta)$.

Interpretace citlivostních grafů parametrů: když jsou závislosti C_{cj} na β_j v okolí bodů $\beta_j^{(0)}$ nebo b_j přibližně konstantní, indikuje to malou citlivost regresního modelu ke změnám j-tého parametru, nebo je model $f(x, \beta)$ vzhledem k parametru β_j *lineární*.

Kritérium ***střední kvadratická chyba predikce***

$$MEP = \frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n}(y_i - f(x_i, \boldsymbol{b}_{(i)}))^2 .$$

Test: Čím je *MEP* nižší, tím je model věrohodnější a má lepší predikční schopnost.

9. Souhlas s požadavky fyzikálního smyslu.

Na odhady parametrů jsou kladena omezení, vycházející z fyzikálního smyslu. Odhady musí ležet v jisté předpokládané oblasti (např. koncentrace v oblasti kladných čísel, molární absorpční koeficienty ε v oboru čísel 10 až 10^6, konstanty stability $\log \beta_{pqr}$ v oboru čísel 0 až 50 atd.).

8. Predikční schopnost modelu "cross-validation":

Data se rozdělí na dvě podskupiny M_1 (s indexy $i = 1, ..., \text{int}(n/2)$) a M_2 (s indexy $i = \text{int}(n/2) + 1, ..., n$).

Označí se:

odhady parametrů z bodů podskupiny M_1 jako $\boldsymbol{b}(M_1)$ a

odhady parametrů z bodů podskupiny M_2 jako $\boldsymbol{b}(M_2)$.

Predikční schopnost modelu se vyjádří ***kritériem K***

$$K = \frac{U(\boldsymbol{b})}{\sum_{i \in M_1}[y_i - f(x_i, \boldsymbol{b}(M_2))]^2 + \sum_{i \in M_2}[y_i - f(x_i, \boldsymbol{b}(M_1))]^2} .$$

Test: Predikční schopnost modelu je tím vyšší, čím víc se K blíží k 1.