Nichtlineare Regression mit dem ClassPad II

HOCHSCHULE FÜR TECHNIK UND WIRTSCHAFT DRESDEN UNIVERSITY OF APPLIED SCIENCES

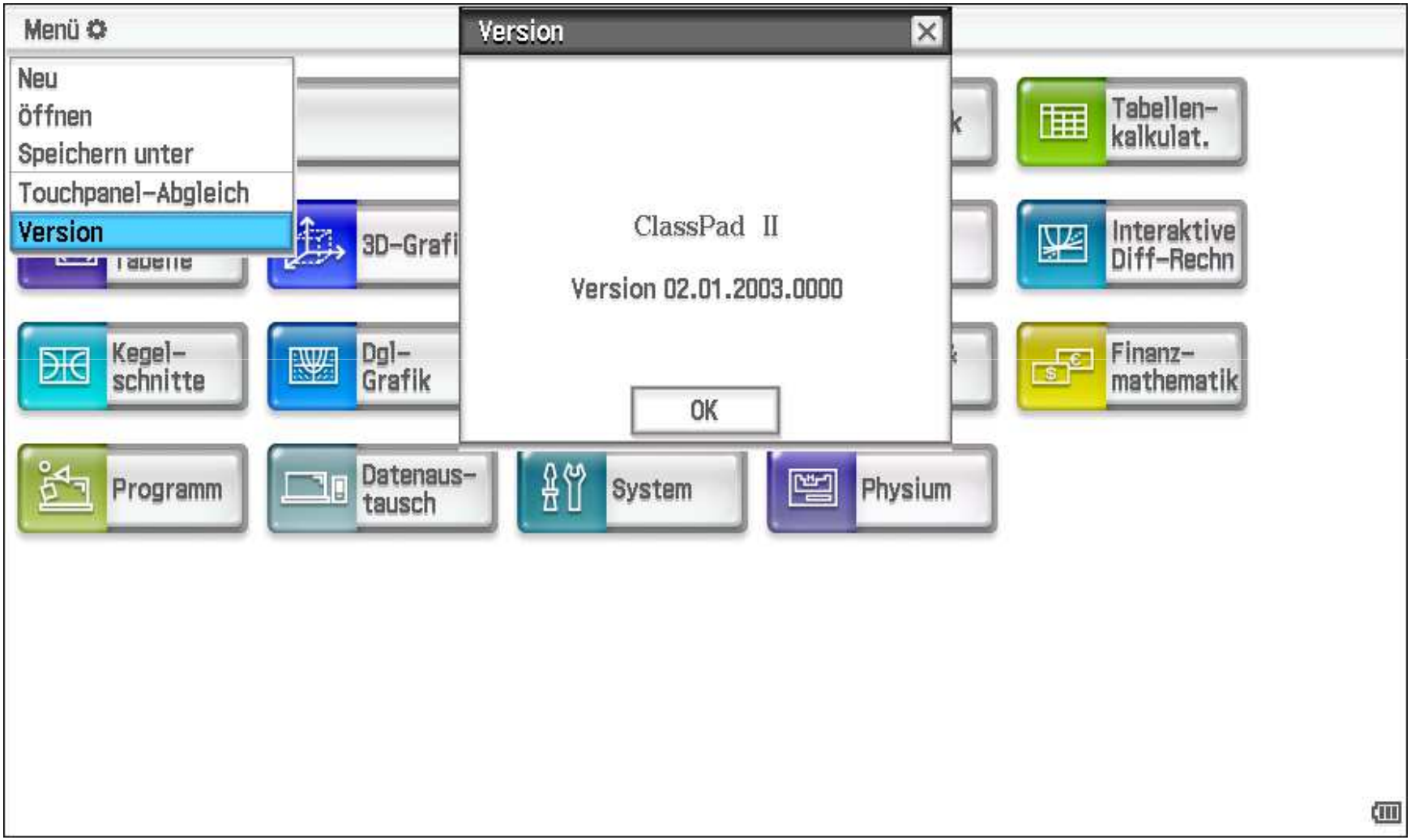
Nichtlineare Regressionsmodelle und Daten-transformation mit dem ClassPad II

(quasilin. Regression, Levenberg-Marquardt-Verfahren)

Nichtlineare Regressionsmodelle können oftmals nur näherungsweise (iterativ) an vorliegende Daten-erhebungen angepasst werden und die Parameter-schätzungen sind mehr oder weniger ungenau, wenn das **Iterationsverfahren** zu zeitig abgebrochen wird oder nicht konvergiert. Zur Vereinfachung der Rech-nung werden dann, sofern möglich, ersatzweise **quasilineare Modelle** genutzt.

HOCHSCHULE FÜR TECHNIK UND WIRTSCHAFT DRESDEN UNIVERSITY OF APPLIED SCIENCES

Aktuelle Software: Stand Sept. 2017



Nichtlineare Regressionsmodelle und Daten-transformation mit dem ClassPad II

(quasilin. Regression, Levenberg-Marquardt-Verfahren)

Im Vortrag wird zuerst erneut auf die **logistische Regression** mit dem ClassPad II eingegangen, die im betrachteten Beispiel (Abituraufgabe aus Niedersachsen) noch recht ungenaue Parameterschätzungen lieferte.

Mithilfe eines nachgeschalteten Iterationsverfahrens (**Leven-berg-Marquardt-Verfahren**) kann die Parameterschätzung mit dem ClassPad besser optimiert werden.

(T&T 2016 in München: ***Gauß-Newton-Verfahren)***

Das Beispiel:

Internationale Klimafinanzierung,

Deutsche Ausgaben seit 2005 bis 2015 (in Mio. EUR)

{471, 515, 648, 881, 1063, 1431, 1563, 1664, 1950, 2344, 2684}

Datenquelle: (aktualisierte Daten, Stand Oktober 2016)

https://www.bmz.de/de/mediathek/publikationen/reihen/infobroschueren_flyer/infobroschueren/Materialie262_klimaschutz_konkret.pdf

und (Stand April 2015: Ausgaben seit 2005 bis 2013)

https://www.bmz.de/de/mediathek/publikationen/reihen/infobroschueren_flyer/infobroschueren/Materialie263_klimaschutz_zeit_zu_handeln.pdf

Das Beispiel:

Internationale Klimafinanzierung (aktualisiert),
Deutsche Ausgaben seit 2005 bis 2015 (in Mio. EUR)

{471,515,648,881,1063,1431,1563,1664,1950,2344,2684}

vorgegeben Daten (München,T&T 2016): seit 2005 bis 2012
(nur für 8 Jahre, 2 Werte abweichend!)

{471, 515, 648, 881, 1063, 1431, 1560, 1663}

Das Ergebnis von München: T&T 2016:

```
File Edit Insert Action

Problem der Genauigkeit der logistischen Regression mit ClassPad
==================================================================

seq(x,x,0,7)⇒listx
                                                        {0,1,2,3,4,5,6,7}
{471,515,648,881,1063,1431,1560,1663}⇒listy
                                        {471,515,648,881,1063,1431,1560,1663}
LogisticReg listx,listy,y1,On
                                                                     done
DispStat
                                                                     done
=======================
Logistische Reg.
y=c/(1+a·e^(−b·x))
          a = 5.5691941
          b = 0.306091
          c = 2864.7528
        MSe = 5373.1492
=======================

Alg   Decimal   Real   Rad
```

Nichtlineare Regression mit dem ClassPad II

HOCHSCHULE FÜR TECHNIK UND WIRTSCHAFT DRESDEN UNIVERSITY OF APPLIED SCIENCES

File Edit Insert Action

```
=======================
Logistische Reg.
y=c/(1+a·e^(-b·x))
          a = 5.5691941
          b = 0.306091
          c = 2864.7528
        MSe = 5373.1492
=======================
Das CASIO-Ergebnis ist nicht optimal.

TI-Nspire CX CAS ergibt hier einen kleineren MSe-Wert:
=======================
Logistische Regression (d=0)
y=c/(1+a·e^(-b·x))
          a = 4.7921722060563
          b = 0.38637794069443
          c = 2257.1510161913
        MSe = 4281.770106
=======================
```

Alg Decimal Real Rad

Stand: T&T 2016 in München:

Das Auffinden der optimalen **Parameterschätzungen für a, b, c** wurde erreicht, indem die gefundenen Schätzungen als Startlösung für eine weitere iterative Verbesserung nach dem **Gauß-Newton-Verfahren** genutzt wurden:

Modellgleichung: **y = c / (1 + a*e^(-b*x))**

Startwerte:

a = 5.5691941 b = 0.306091 c = 2864.7528

Zielwerte (optimal nach 7 Iterationsschritten):

a=4.7921722060563 b=0.38637794069443 c=2257.1510161913

Neu: das **Levenberg-Marquardt-Verfahren** nutzen:

Quelle:

https://de.wikipedia.org/wiki/Levenberg-Marquardt-Algorithmus

$$\sum_{i=1}^{k}(f(x_{i,1},\ldots,x_{i,n})-y_i)^2 \rightarrow \min!$$

Gegeben ist die Funktion $f(x_1,\ldots,x_n) = y$ mit n Variablen $x_1,\ldots,x_n$ und p gesuchten Parametern $a_1,\ldots,a_p$. Hier n=1 und p=4.

ClassPad400: setzte A:=ln(a) aus numerischen Gründen

Define f(x,A,b,c,d)=c/(1+e^(-b*x+**A**))**+d** x… xList (die Modellfunktion)

Define F(x,y,a,b,c,d)=y-f(x,a,b,c,d) y…yList (die Residuen)

Nichtlineare Regression mit dem ClassPad II

- Der **Levenberg-Marquardt-Algorithmus**, benannt nach Kenneth Levenberg und Donald Marquardt, ist ein numerischer Optimierungsalgorithmus zur Lösung nichtlinearer Ausgleichs-Probleme mit Hilfe der Methode der kleinsten Quadrate. Das Verfahren kombiniert das Gauß-Newton-Verfahren mit einer Regularisierungstechnik, die absteigende Funktionswerte erzwingt.

- Der Levenberg-Marquardt-Algorithmus ist deutlich robuster als das Gauß-Newton-Verfahren, das heißt, er konvergiert mit einer hohen Wahrscheinlichkeit auch bei schlechten Startbedingungen, allerdings ist auch hier Konvergenz nicht garantiert. Ferner ist er bei Anfangswerten, die nahe dem Minimum liegen, oft etwas langsamer.

zum **Programm logiDReg (xList,yList,A0,b0,c0,d0,µ,I)**

Aufbau der Matrix SP:

Berechnung der partiellen Ableitungen der Residuumsfunktion **F** nach jedem Parameter a_1, ..., a_4:

Define r_1(x,a,b,c,d)=diff(F(x,y,a,b,c,d),a,1)
Define r_2(x,a,b,c,d)=diff(F(x,y,a,b,c,d),b,1)
Define r_3(x,a,b,c,d)=diff(F(x,y,a,b,c,d),c,1)
Define r_4(x,a,b,c,d)=diff(F(x,y,a,b,c,d),d,1)=-1

Berechne
SP:=trn(F'(listx,a,b,c,d))*F'(listx,a,b,c,d) +
µ^2*[[1,0,0,0],[0,1,0,0],[0,0,1,0], [0,0,0,1]]
wobei SP eine symmetrische und reguläre Matrix ist.

'Iteration nach Levenberg-Marquardt-Verfahren

```
A0⇒a
b0⇒b
c0⇒c
d0⇒d
μ0⇒μ
dim(listx)⇒D

0⇒i
do
i+1⇒i
'print i
```

Nichtlineare Regression mit dem ClassPad II

HOCHSCHULE FÜR TECHNIK UND WIRTSCHAFT DRESDEN UNIVERSITY OF APPLIED SCIENCES

approx(sum((approx(r_1(listx,a,b,c,d)))^2)+μ^2)⇒SP11

approx(sum(approx(r_1(listx,a,b,c,d))*approx(r_2(listx,a,b,c,d))))⇒SP12

approx(sum(approx(r_1(listx,a,b,c,d))*approx(r_3(listx,a,b,c,d))))⇒SP13

approx(sum(approx(r_1(listx,a,b,c,d))*(-1)))⇒SP14

approx(sum((approx(r_2(listx,a,b,c,d)))^2)+μ^2)⇒SP22

approx(sum(approx(r_2(listx,a,b,c,d))*approx(r_3(listx,a,b,c,d))))⇒SP23

approx(sum(approx(r_2(listx,a,b,c,d))*(-1)))⇒SP24

approx(sum((approx(r_3(listx,a,b,c,d)))^2)+μ^2)⇒SP33

approx(sum(approx(r_3(listx,a,b,c,d))*(-1)))⇒SP34

approx(D+μ^2)⇒SP44

approx([[SP11,SP12,SP13,SP14],[SP12,SP22,SP23,SP24],
[SP13,SP23,SP33,SP34],[SP14,SP24,SP34,SP44]])⇒SP

'Invertieren von SP und Schätzung für Korrektur der Parameter (vecs)

approx(F(listx,listy,a,b,c,d))⇒FA

approx(-SP^(-1)*[[sum(approx(r_1(listx,a,b,c,d))*FA)],
[sum(approx(r_2(listx,a,b,c,d))*FA)],
[sum(approx(r_3(listx,a,b,c,d))*FA)],
[sum((-1)*FA)]])⇒vecs

'Definiere Parametersteuerung $\rho\mu_0$= (vereinfachte Darstellung)

((‖F(a,b,c,d)‖²-‖F(a+s1,b+s2,c+s3,d+s4)‖²)/
(‖F(a,b,c,d)‖²-‖F(a,b,c,d)+F'*[[s1],[s2],[s3],[s4]]‖²))

vecs[1,1]⇒s1

vecs[2,1]⇒s2

vecs[3,1]⇒s3

vecs[4,1]⇒s4

'**Nenner** in $\rho\mu_0$

approx((sum(FA^2)-
sum((FA+s1*approx(r_1(listx,a,b,c,d))+s2*approx(r_2(listx,a,b,c,d))+
s3*approx(r_3(listx,a,b,c,d))+s4*(-1))^2)))⇒ε

If **abs(ε)<10^(-12)**

Then

print [i,μ,$\rho\mu_0$,ε]

print vecab

print MSerr

stop

Ifend

approx((sum(FA^2)-
sum(approx(F(listx,listy,a+s1,b+s2,c+s3,d+s4))^2))/ε)⇒$\rho\mu_0$

'Startparameter a,b,c,d geeignet!

'iterative Korrektur von a,b,c,d mithilfe von s1,s2,s3,s4 in Abhängigkeit von $\rho\mu_0$:

If $\rho\mu_0 \geq 0.2$

Then

approx([[a],[b],[c],[d]]+vecs)⇒vecab

vecab[1,1]⇒a : vecab[2,1]⇒b : vecab[3,1]⇒c : vecab[4,1]⇒d

Ifend

'μ-**Anpassungsheuristik halbieren, belassen, verdoppeln**

If $\rho\mu_0 > 0.8$

Then

μ/2⇒μ

ElseIf $\rho\mu_0 < 0.2$

Then

2*μ⇒μ

Ifend

Nichtlineare Regression mit dem ClassPad II

approx(sum(FA^2)/(D-2))⇒MSerr

print [i,μ,ρμ$_0$,ε]

print vecab

print MSerr

LpWhile i<I

return

Nichtlineare Regression mit dem ClassPad II

HOCHSCHULE FÜR TECHNIK UND WIRTSCHAFT DRESDEN UNIVERSITY OF APPLIED SCIENCES

Datei Edit Einfügen Aktion

Klimadaten

deutsche Ausgaben für den Klimaschutz in Millionen-EUR/Jahr

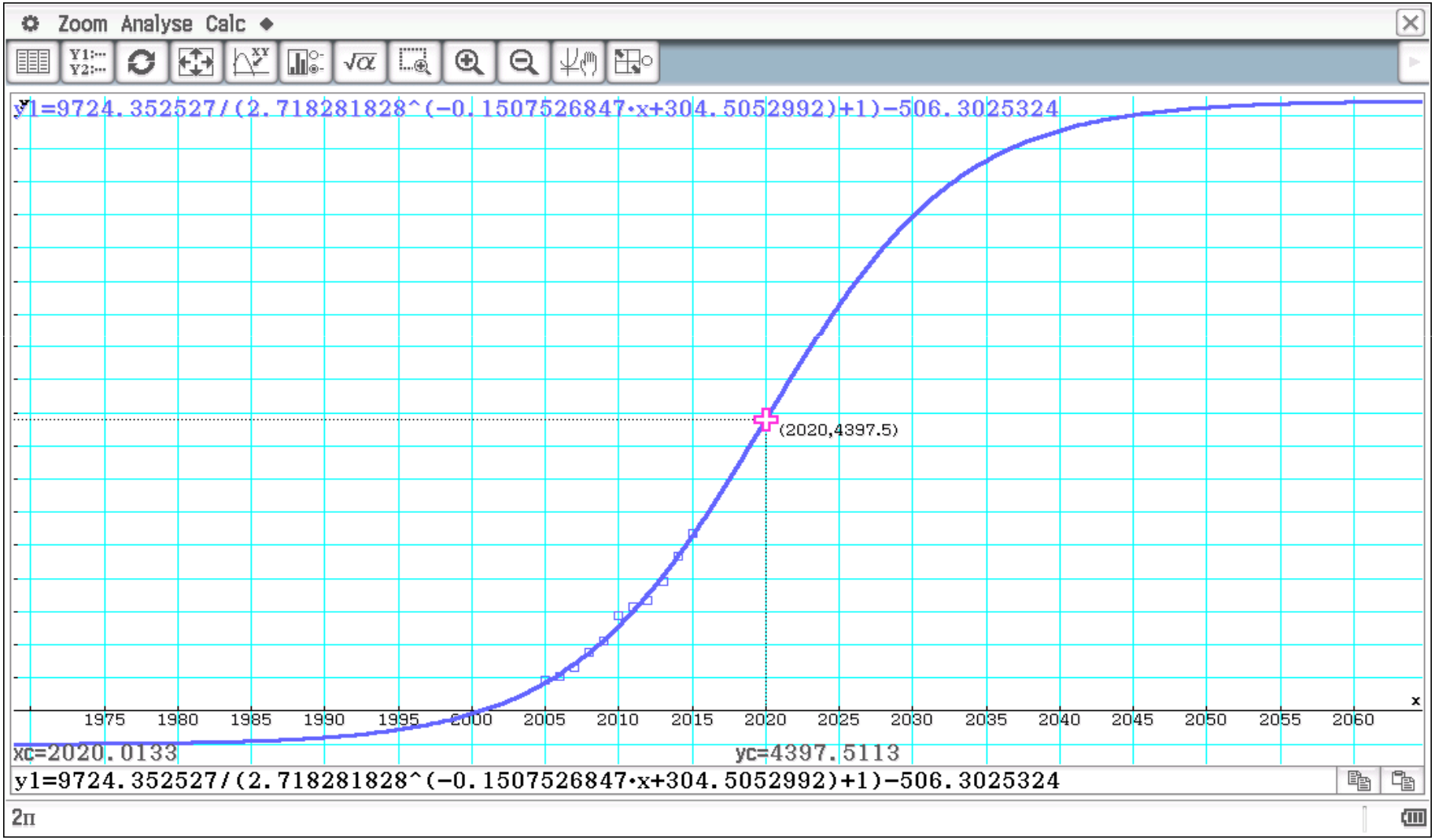
```
{5,6,7,8,9,10,11,12,13,14,15}+2000⇒listx
                                        {2005,2006,2007,2008,2009,2010,2011,2012,2013,2014,2015}
{471,515,648,881,1063,1431,1563,1664,1950,2344,2684}⇒listy
                                        {471,515,648,881,1063,1431,1563,1664,1950,2344,2684}
Define y1(x)=c/(1+e^(A-b*x))+d
                                                                                          done
```

TI-Nspire CX CAS:

```
================================
LogisticD listx,listy,51
Titel: Logistische Regression(d≠0)
RegEqn: y=c/(1+a*e^(-b*x))+d
a=1.7578068442442E132
b=0.15075268469721
c=9724.3525266945
d=-506.30253237155
MSerr=5873.1551157428
================================
Bem.: LogisticD listx,listy,N mit N>51 ergibt "Fehler: Singuläre Matrix"
================================
```

Algeb Dezimal Reell 2π

Logistische Regression mit TI-Nspire CX CAS:



HOCHSCHULE FÜR TECHNIK UND WIRTSCHAFT DRESDEN UNIVERSITY OF APPLIED SCIENCES

Verbesserung der TI-Lösung mit der CP-software:

Datei Edit Einfügen Aktion

```
A0:=ln(1.7578068442442E132)
                                                    304.5052992
b0:=0.15075268469721
                                                    0.1507526847
c0:=9724.3525266945
                                                    9724.352527
d0:=-506.30253237155
                                                    -506.3025324
μ0:=1
                                                    1
LogiDReg(listx, listy, A0, b0, c0, d0, μ0, 60)
                                                    done
[i, μ, ρμ0, ε]
                                    [60 7.8125E-3 -7.59846436 78.29119793]
vecab
                                    [241.6976853
                                     0.1191855572
                                     19287.57019
                                     -759.3202271]
MSerr
                                                    5721.316304
```

Algeb Dezimal Reell 2π

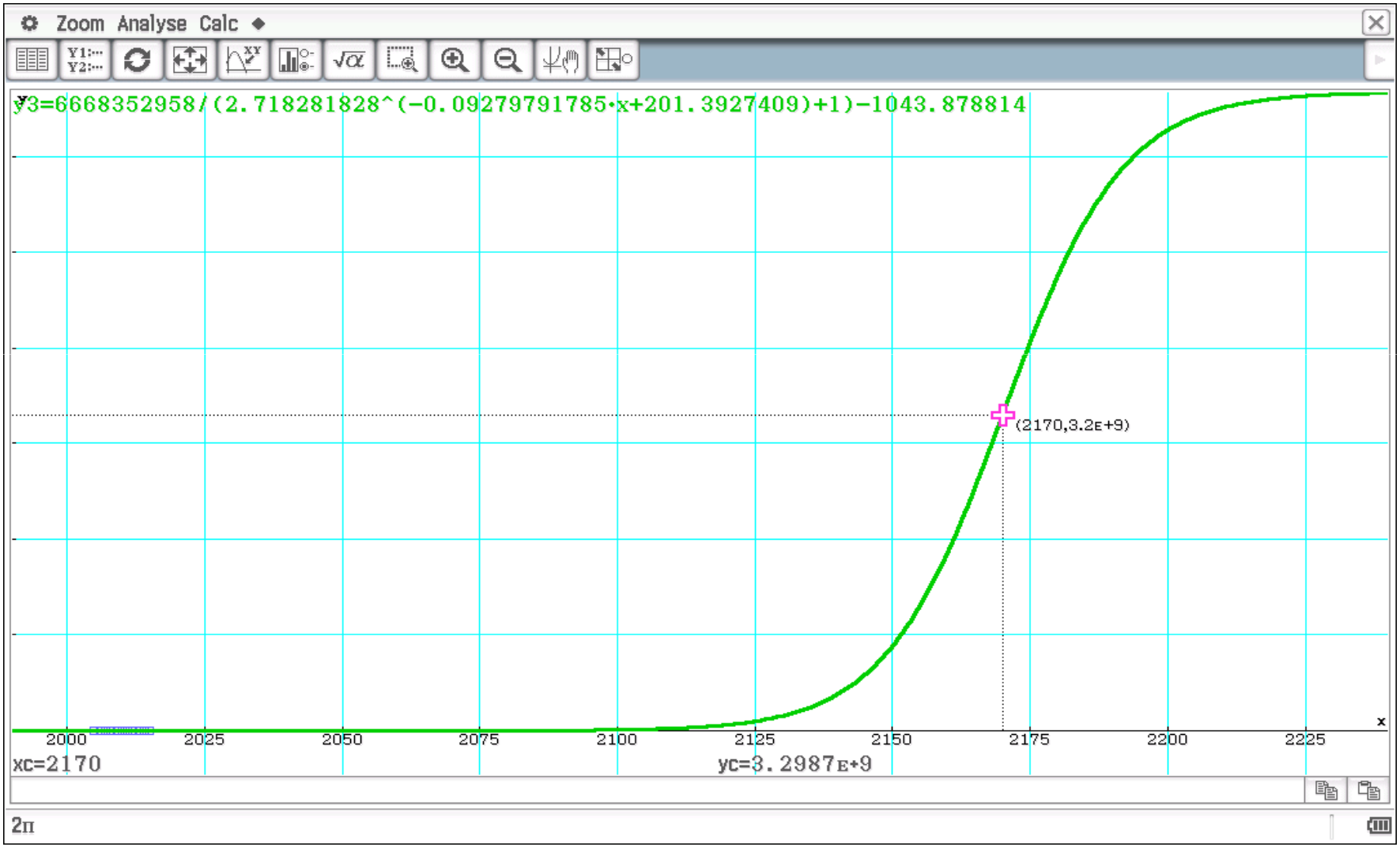
Weitere Verbesserung der logist. Regression:

Datei Edit Einfügen Aktion

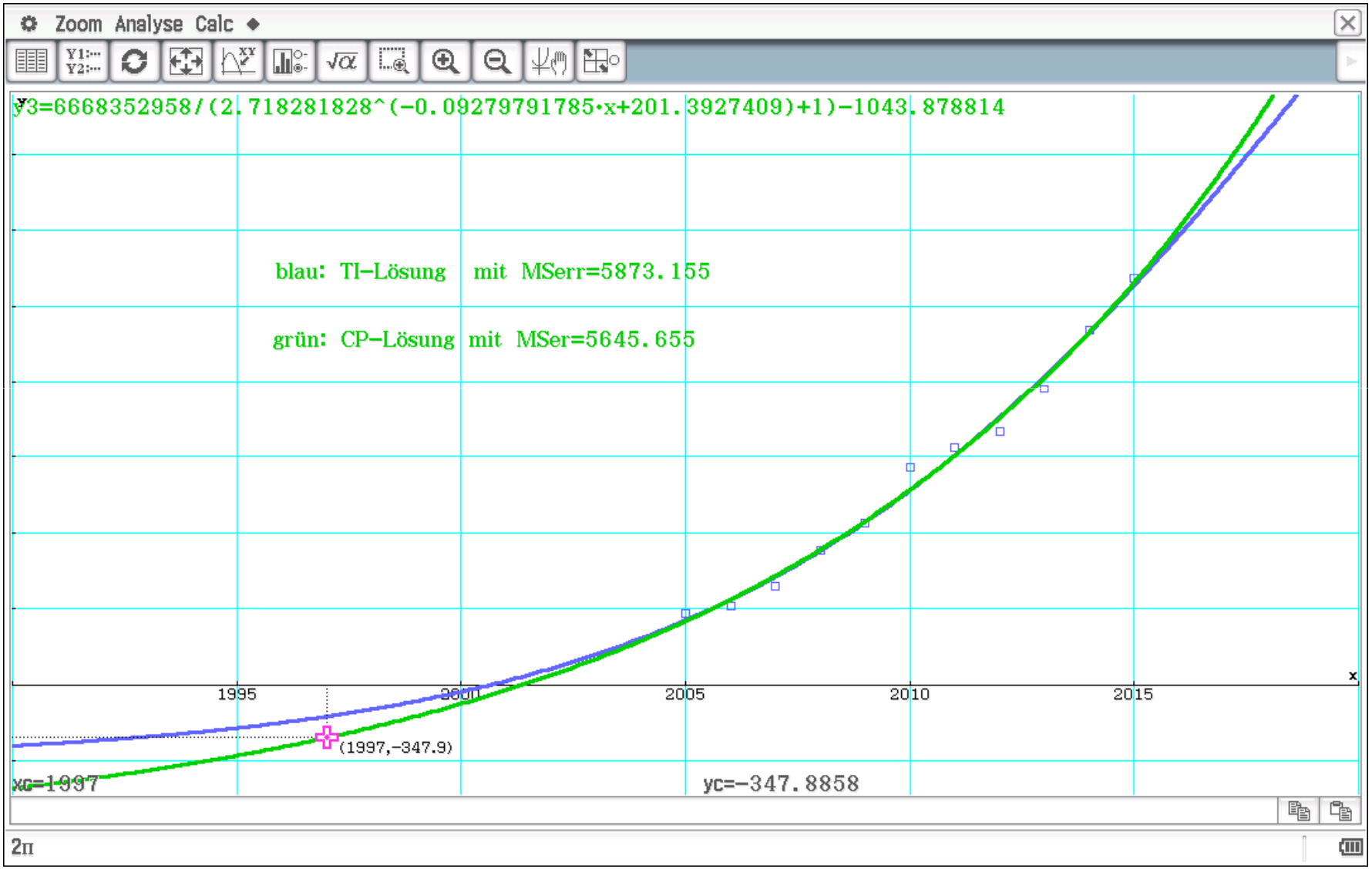
```
LogiDReg(listx, listy, A0, b0, c0, d0, μ0, 50000)
                                                                    done
[i, μ, ρμ0, ε]
                                    [28811 2.765598144E-9 -2.421383648 0]
vecab
                                    [201.3927409
                                    0.09279791785
                                    6668352958
                                    -1043.878814]
MSerr
                                    5645.655069
[[28807,3.45699768E-10,0.7972375691,1.81E-7]]
[[201.3927409],[0.09279791785],[6668352958],[-1043.878814]]
5645.655069
[[28808,6.913995359E-10,0.1994475138,1.81E-7]]
[[201.3927409],[0.09279791785],[6668352958],[-1043.878814]]
5645.655069
[[28809,1.382799072E-9,-0.8176229508,4.88E-8]]
[[201.3927409],[0.09279791785],[6668352958],[-1043.878814]]
5645.655069
[[28810,2.765598144E-9,-2.421383648,1.59E-8]]
[[201.3927409],[0.09279791785],[6668352958],[-1043.878814]]
5645.655069
[[28811,2.765598144E-9,-2.421383648,0]]
[[201.3927409],[0.09279791785],[6668352958],[-1043.878814]]
5645.655069
```

Algeb Dezimal Reell 2π

Der Wendepunkt liegt weit entfernt von dem Datensatz:



Nichtlineare Regression mit dem ClassPad II



Diskussion:

Der optimale MSe-Wert wurde erreicht: **MSe = 5645.655**

Jedoch erscheint die logistische Regression für den Datensatz von 2005 bis 2015 nicht geeignet, da sich die Daten weit links vom Wendepunkt befinden und eine andere streng monoton wachsende (konvexe?) Funktion eher passend sein sollte.

Es werden andere Kurventypen untersucht, die für den Datensatz eher als Modellfunktion dienen könnten.
Eventuell werden die Daten noch vor der Anpassung einer Koordinatentransformation unterworfen.

Nichtlineare Regression mit dem ClassPad II

HOCHSCHULE FÜR TECHNIK UND WIRTSCHAFT DRESDEN UNIVERSITY OF APPLIED SCIENCES

Datei Edit Einfügen Aktion

```
internationale Klimafinanzierung (Deutschland 2005-2015)
==================================================

deutsche Ausgaben für den internationalen Klimaschutz in Millionen-EUR/Jahr

{5,6,7,8,9,10,11,12,13,14,15}+2000⇒listx
                                {2005,2006,2007,2008,2009,2010,2011,2012,2013,2014,2015}
{471,515,648,881,1063,1431,1563,1664,1950,2344,2684}⇒listy
                                {471,515,648,881,1063,1431,1563,1664,1950,2344,2684}
================================
Jahreszählung (Datentransformation)
seq(x,x,1,11,1)⇒listx
                                {1,2,3,4,5,6,7,8,9,10,11}
deutsche Ausgaben für den internationalen Klimaschutz in Mrd-EUR/Jahr
{471,515,648,881,1063,1431,1563,1664,1950,2344,2684}/1000⇒listy
                                {0.471,0.515,0.648,0.881,1.063,1.431,1.563,1.664,1.95,2.344,2.684}
quasilineare Regression: (logarithm.Regress.)
=========================
LogReg listx,listy
                                                                                    done
```

Algeb Dezimal Reell 2π

HOCHSCHULE FÜR TECHNIK UND WIRTSCHAFT DRESDEN UNIVERSITY OF APPLIED SCIENCES

Die logarithm. Regression ist eine lineare Regression,

lediglich mit transformierten x-Daten: ln(x), MSe ist unverfälscht.

Datei Edit Einfügen Aktion

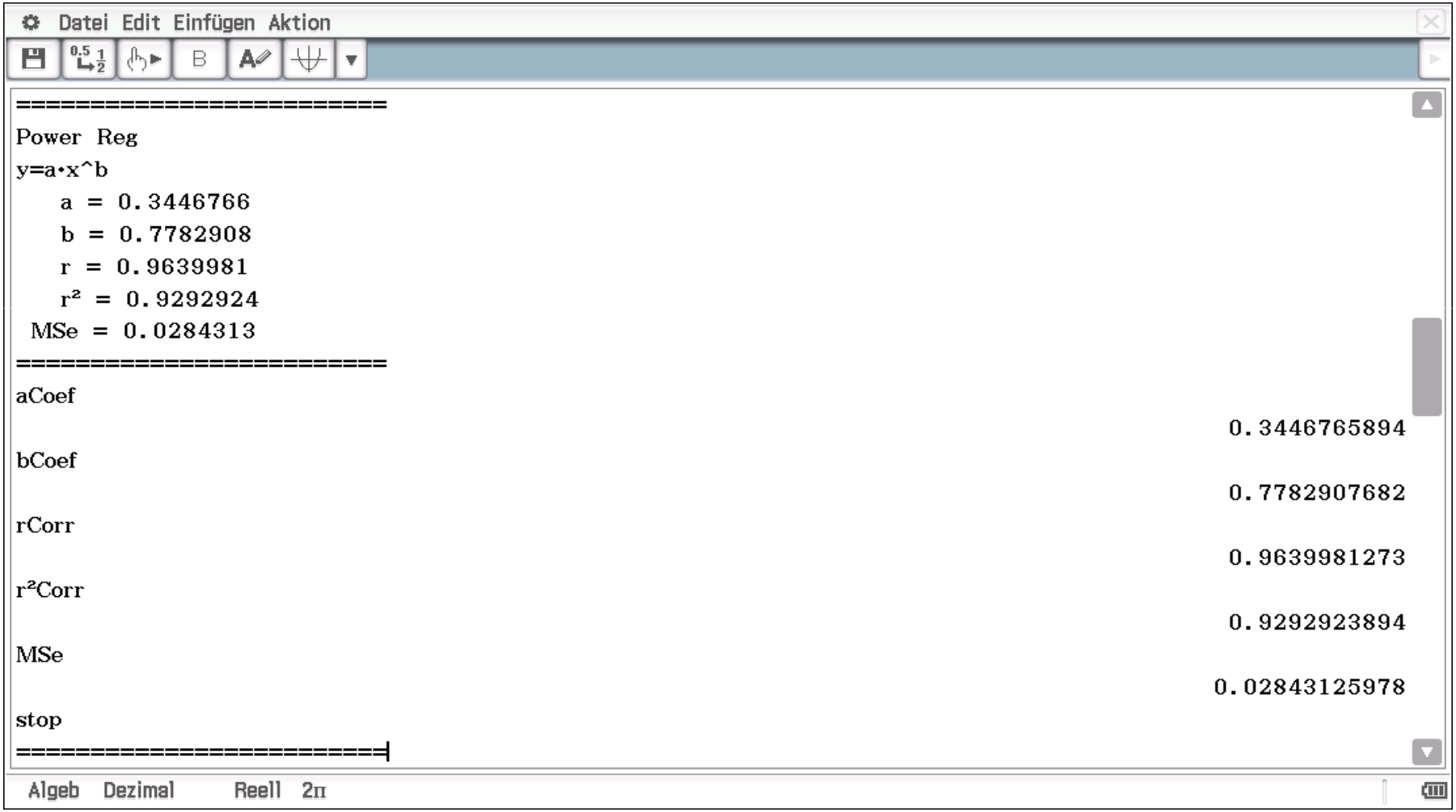
```
DispStat
                                                                done
==========================
Log.  Regression
y=a+b·ln(x)
    a = -0.043327
    b = 0.8964872
    r = 0.8981729
    r² = 0.8067145
 MSe = 0.1187862
==========================
stop

quasilineare Regression: (Potenzregression)
==========================
PowerReg listx,listy
                                                                done
DispStat
                                                                done
==========================
Power Reg
```

Algeb Dezimal Reell 2π

Nichtlineare Regression mit dem ClassPad II

HOCHSCHULE FÜR TECHNIK UND WIRTSCHAFT DRESDEN UNIVERSITY OF APPLIED SCIENCES

Die Potenzregression wurde im quasilinearen Modell optimiert: $\ln(y) = \ln(a) + b*\ln(x)$, d.h. **MSe ist verfälscht** wegen $\min \Sigma(\ln(y_k) - \ln(a) - b*\ln(x_k))^2$



Nichtlineare Regression mit dem ClassPad II

HOCHSCHULE FÜR TECHNIK UND WIRTSCHAFT DRESDEN UNIVERSITY OF APPLIED SCIENCES

Datei Edit Einfügen Aktion

```
Start der nichtlinearen Regression (Potenzregression)
(Startwerte von der quasilinearen Regression)
==============================================

listx
                                                    {1,2,3,4,5,6,7,8,9,10,11}
listy
                    {0.471,0.515,0.648,0.881,1.063,1.431,1.563,1.664,1.95,2.344,2.684}
a0:=0.3446766
                                                                    0.3446766
b0:=0.7782908
                                                                    0.7782908
μ0:=1
                                                                            1
I:=15
                                                                           15
DelVar a,b,x,y,μ
                                                                         done
PowRegLM(listx,listy,a0,b0,μ0,I)
                                                                         done
Nach 8 Iterationsschritten ist die Rechnergenauigkeit erreicht:
```

Algeb Dezimal Reell 2π

HOCHSCHULE FÜR TECHNIK UND WIRTSCHAFT DRESDEN UNIVERSITY OF APPLIED SCIENCES

Optimales MSe=0.016137695

Datei Edit Einfügen Aktion

Nach 8 Iterationsschritten ist die Rechnergenauigkeit erreicht:

[i, ρμ₀, μ, ε]

[8 1.110619469 7.8125E-3 3.15E-13]

vecs

$$\begin{bmatrix} -1.533571961E-7 \\ 3.341276212E-7 \end{bmatrix}$$

vecab

$$\begin{bmatrix} 0.2172525584 \\ 1.023999599 \end{bmatrix}$$

MSerr

0.01613769519

ε

3.15E-13

stop

==========

define y(x)=a·x^b

done

a:=0.3446766

0.3446766

b:=0.7782908

0.7782908

Algeb Dezimal Reell 2π

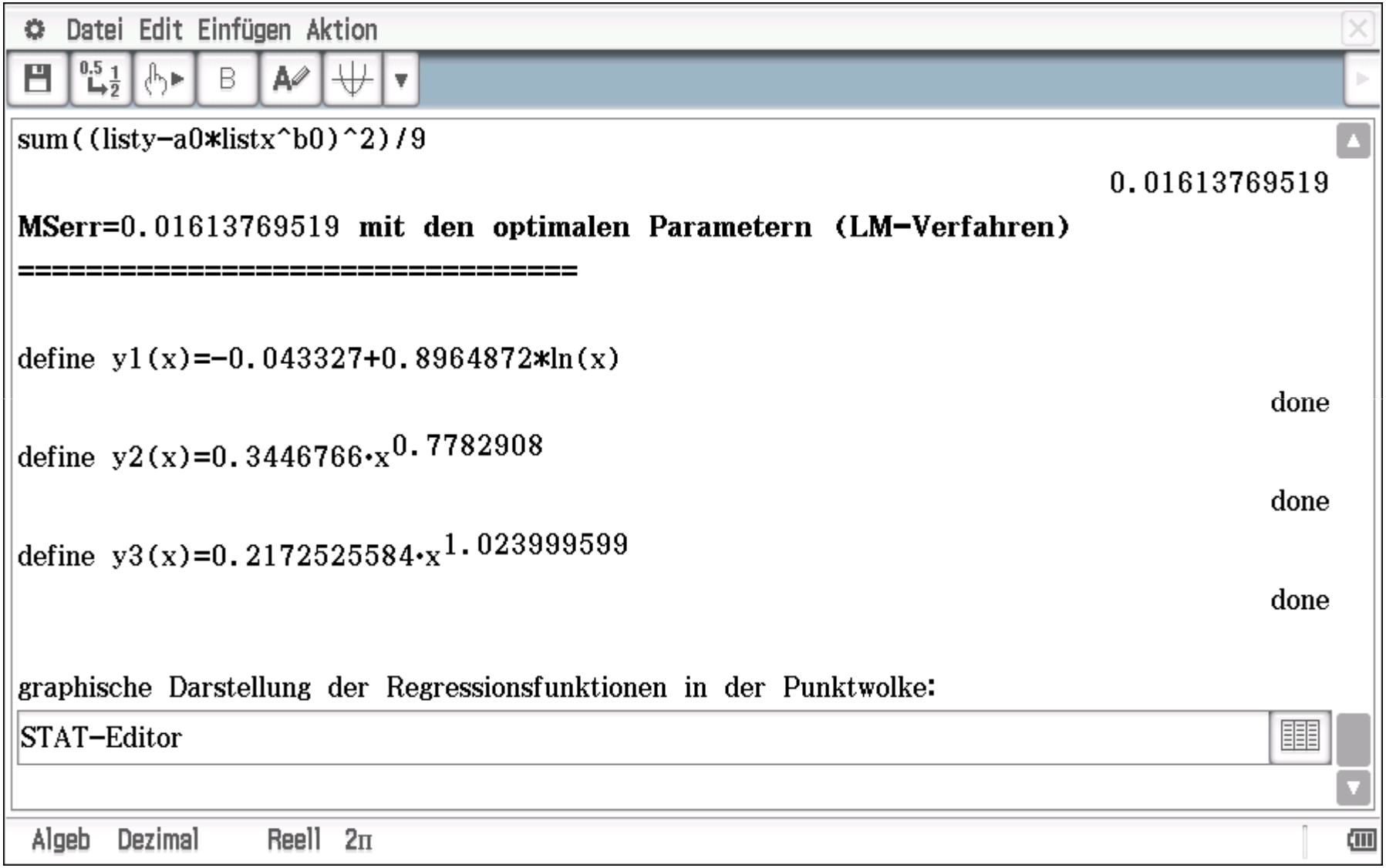
Zusammenfassung (Potenzregression)

Datei Edit Einfügen Aktion

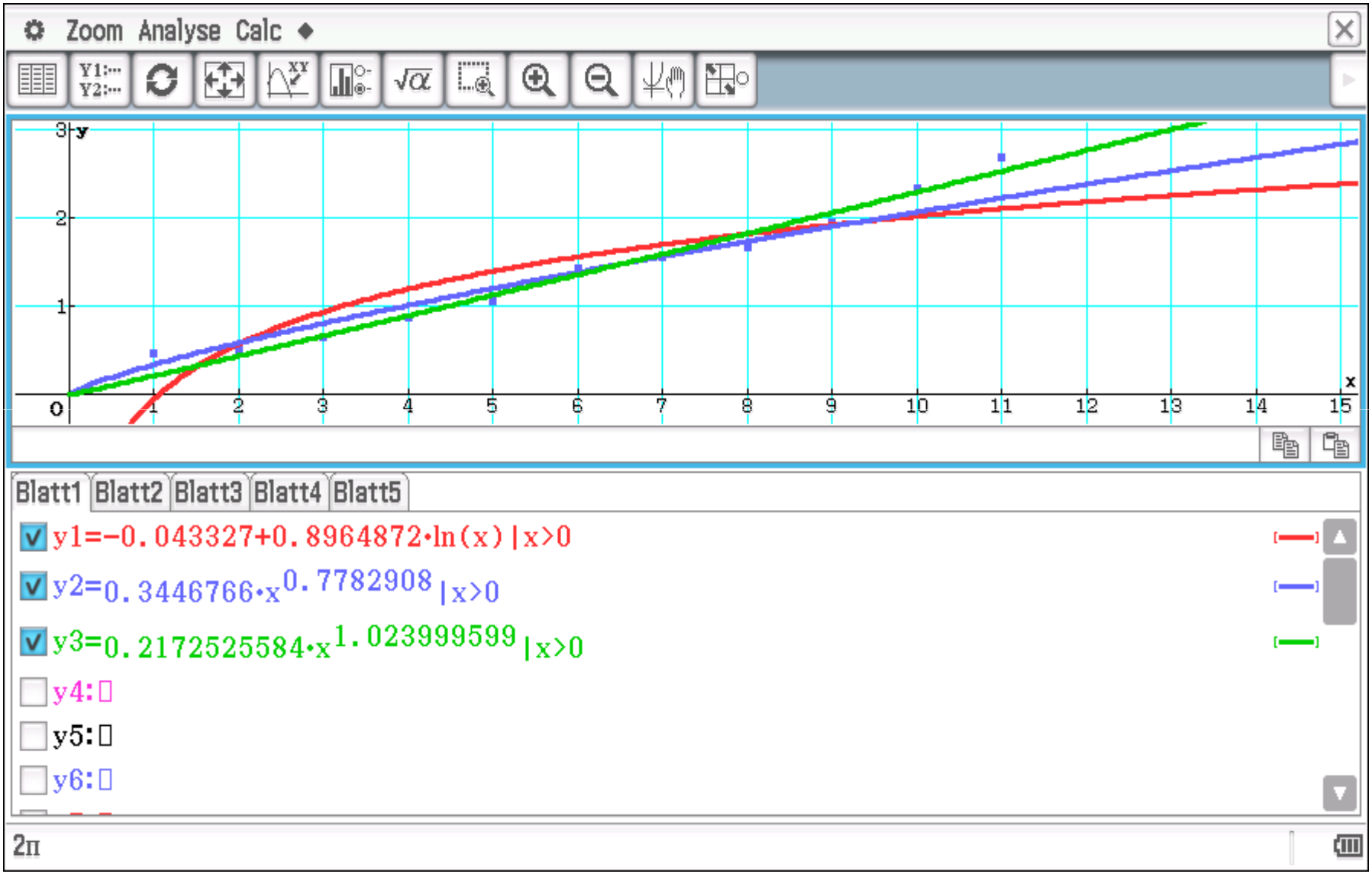
```
==========================
define y(x)=a·x^b
                                                                done
a:=0.3446766
                                                          0.3446766
b:=0.7782908
                                                          0.7782908
sum((listy-a·listx^b)^2)/9
                                                       0.0421417077
MSerr=0.0421417077 (reale nichtlin. Regress.) > MSe=0.0284313(quasilin. Regress.)
==========================
a0:=0.2172525584
                                                       0.2172525584
b0:=1.023999599
                                                        1.023999599
sum((listy-a0*listx^b0)^2)/9
                                                      0.01613769519
MSerr=0.01613769519 mit den optimalen Parametern (LM-Verfahren)
==================================
```

Algeb Dezimal Reell 2π

Nichtlineare Regression mit dem ClassPad II



Nichtlineare Regression mit dem ClassPad II



Vergleich der bisher erzielten MSe-Werte:

für untransformierte y-Werte (in Mio. EUR)

Logarithm. Regress.: **MSe = 0.1187862*10^6 = 118786.2**

Potenzregress.: **MSe = 0.0161377*10^6 = 16137.7**

Lineare Regress.: **MSe = 0.0155045*10^6 = 15504.5**

Logist. Regress.: MSe = 5645.655

Neues Modell:
Potenzregress. mit Absolutglied y = a*(x+c)^b+d

Vergleich der bisher erzielten MSe-Werte:

für untransformierte y-Werte (in Mio. EUR)

Logarithm. Regress.: **MSe = 0.1187862*10^6 = 118786.2**

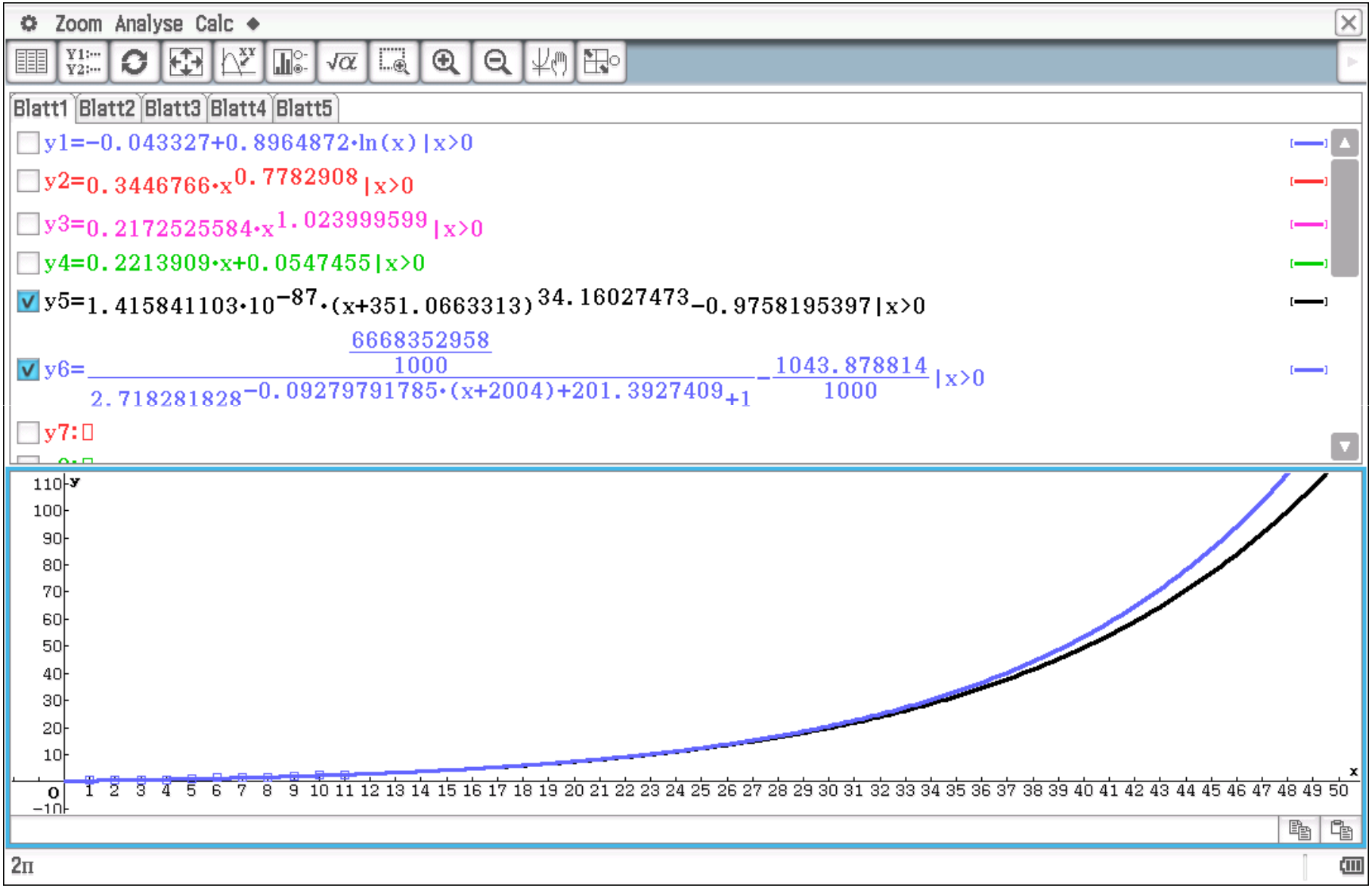
Potenzregress.: **MSe = 0.0161377*10^6 = 16137.7**

Lineare Regress.: **MSe = 0.0155045*10^6 = 15504.5**

Logist. Regress.: MSe = 5645.655

Neues Modell:
Potenzregress. mit Absolutglied y = a*(x+c)^b+d
MSe = 5650.563

Nichtlineare Regression mit dem ClassPad II



Vergleich der bisher erzielten MSe-Werte:

für untransformierte y-Werte (in Mio. EUR)

Logarithm. Regress.: **MSe = 0.1187862*10^6 = 118786.2**

Potenzregress.: **MSe = 0.0161377*10^6 = 16137.7**

Lineare Regress.: **MSe = 0.0155045*10^6 = 15504.5**

Logist. Regress.: MSe = 5645.655

Neue Modelle:

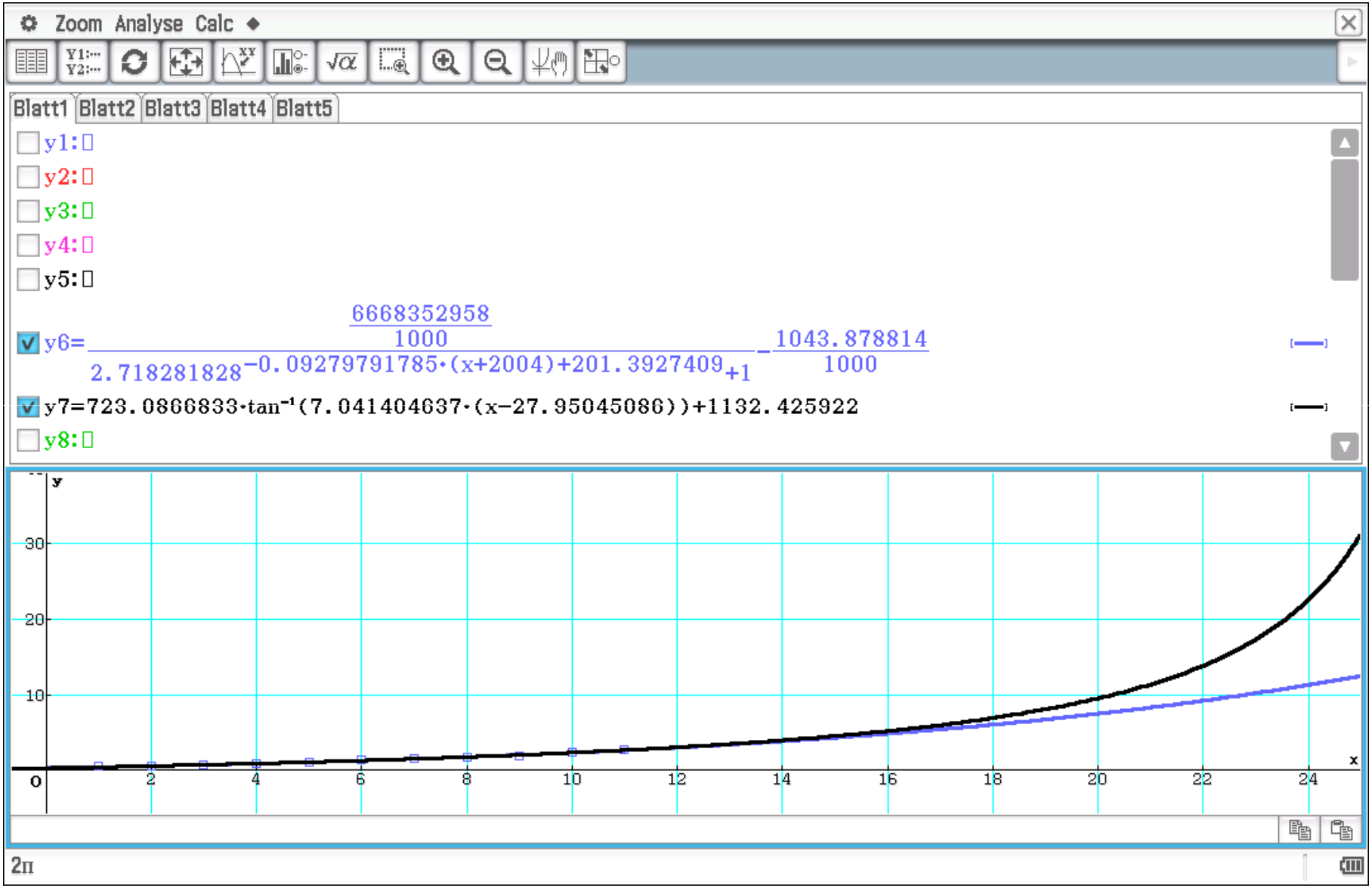
Potenzregress. mit Absolutglied y = a*(x+c)^b+d

MSe = 5650.563

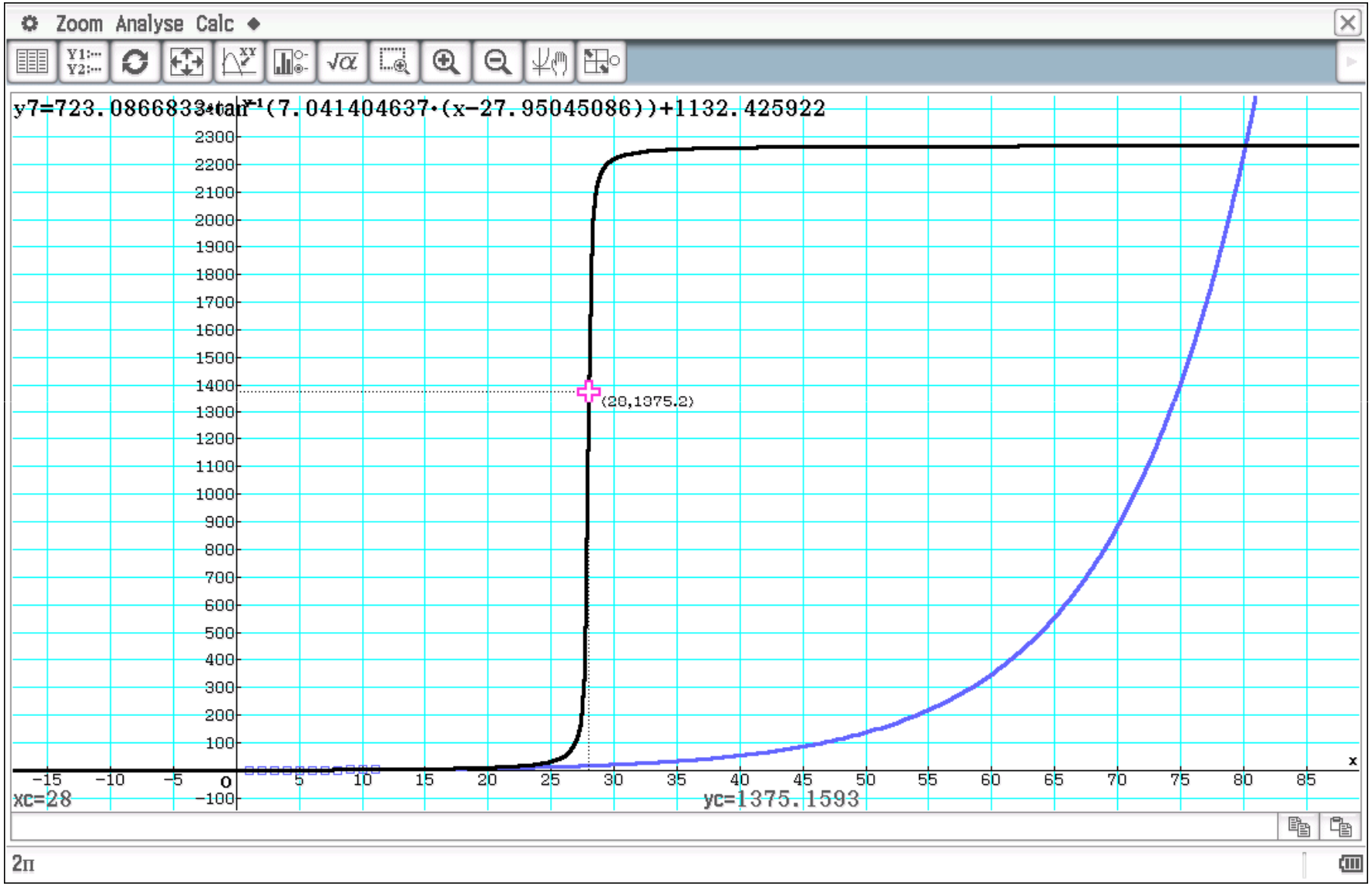
Arctan-Regression y = a*arctan(c*(x-b))+d

MSe = 5558.848

Nichtlineare Regression mit dem ClassPad II



Nichtlineare Regression mit dem ClassPad II



Vielen Dank für Ihre Aufmerksamkeit!