STATISTIČKA ANALIZA I PREDOBRADA PODATAKA. VREDNOVANJE REZULTATA

Željka Ujević Andrijić

zujevic@fkit.unizg. hr

SADRŽAJ

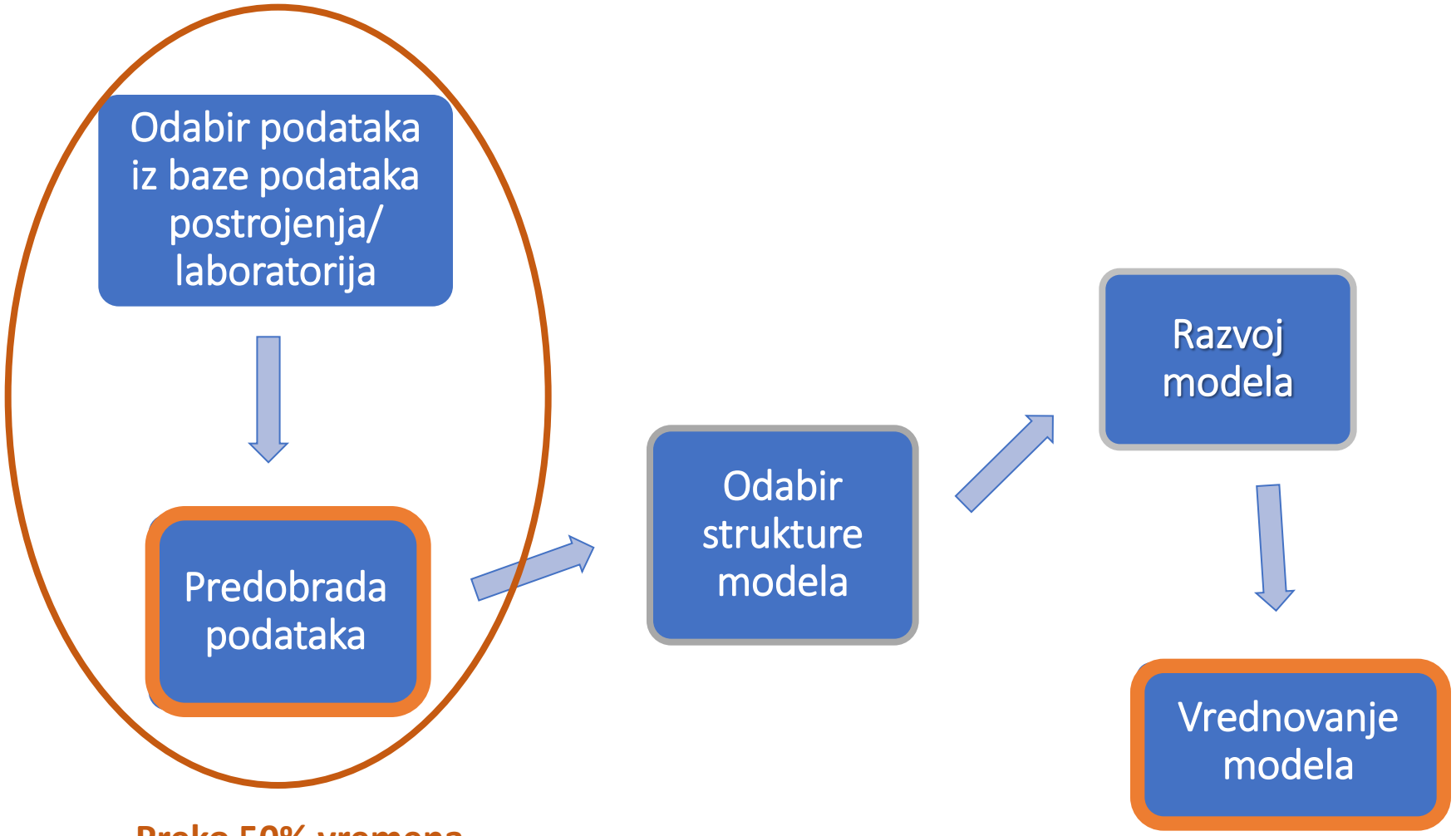
DESKRIPTIVNA STATISTIKA

PREDOBRADA PODATAKA (*outlieri*, filtriranje, skaliranje,...)

KRITERIJI VREDNOVANJA MODELA

FUNKCIJE U PYTHON-u

POSTUPAK RAZVOJA MODELA STROJNOG UČENJA



Preko 50% vremena

*"Inferring models from observations and studying their properties is **really what science is about**."*
L. Ljung

DESKRIPTIVNA STATISTIKA

Deskriptivna (opisna) statistika

- Prikupljanje, uređivanje i grupiranje podataka
- Tabelarno i grafičko prikazivanje
- Brojčani pokazatelji osnovnih karakteristika promatrane pojave
- Deskriptivna statistika analiziranog skupa podataka
- Prvi korak u statističkoj analizi ili dio složenije analize
- Može se koristiti i kod analize rezultata modela

DESKRIPTIVNA STATISTIKA

Metode (mjere) deskriptivne statistike:

- **Mjera centralne tendencije**
(aritmetička sredina, centralna vrijednost, dominantna vrijednost)
- **Kvartili**
- **Mjera raspršenja (disperzije) rezultata**
(standardna devijacija, varijanca, minimalna i maksimalna vrijednost podataka, raspon podataka, pogreška aritmetičke sredine)
- Određivanje indeksa **spljoštenosti i asimetrije** distribucije

Značaj deskriptivne statistike kod predobrade podataka

Deskriptivna statistika ima veliku ulogu u predobradi podataka pri razvoju modela strojnog učenja.

- **Razumijevanje distribucije podataka:** Analizom deskriptivne statistike, poput srednje vrijednosti, medijana, varijance i kvartila, može se dobiti uvid u to kako su podaci raspoređeni.
- **Identifikacija *outliera*:** Outlieri su ekstremni podaci koji mogu značajno utjecati na model. Deskriptivna statistika može pomoći u identifikaciji tih odstupanja.
- **Odabir značajki:** Deskriptivna statistika može pomoći u prepoznavanju značajki koje su manje informativne ili imaju malu varijancu. Omogućuje odabir najvažnijih značajki za model.
- **Donošenje odluka o normalizaciji i skaliranju:** Analiza raspona i varijance podataka pomaže u donošenju odluka o tome treba li normalizirati ili skalirati podatke kako bi model bio valjan.
- **Istraživanje korelacija:** Deskriptivna statistika pomaže u prepoznavanju korelacija između značajki. Može ukazati na potrebu za uvođenjem dodatnih značajki ili smanjenjem dimenzionalnosti.

Deskriptivna statistika omogućava bolje razumijevanje i pripremu podataka razvoja modela strojnog učenja. To može značajno utjecati na performanse modela i omogućiti bolje donošenje odluka u vezi s odabirom modela, odabirom značajki i interpretacijom rezultata.

MJERE CENTRALNE TENDENCIJE – Aritmetička sredina i medijan

- **Aritmetička sredina** - mjera „centralne tendencije" varijable

$$\bar{x} = \frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n} x_i$$

n – broj podataka

- Ako u podacima postoje ekstremne vrijednosti ili ako je distribucija asimetrična primjenjuje se **centralna vrijednost (medijan)**.

  Ako je broj podataka **neparan**, medijan je vrijednost varijable središnjeg člana niza prema veličini.

  Ako je broj podataka **paran**, medijan je jednak poluzbroju vrijednosti središnjih dvaju članova niza.

- Kod normalne raspodjele srednja vrijednost i medijan su identični.

MJERE CENTRALNE TENDENCIJE – KVANTILI, *MOD*

- Medijan se ubraja u kvantile.
- **Kvantil** - vrijednosti numeričke varijable koja uređen numerički ili redoslijedni niz dijele na jednakobrojne dijelove.

- **Kvartil** dijeli skup podataka na 4 jednaka dijela.

Gornji kvartil (*UQ*) - vrijednost od koje je **75%** podataka manje
Donji kvartil (*LQ*) - vrijednost od koje je **25%** podataka manje

- **Dominantna vrijednost (*mod*)**
najčešće postignuta vrijednost u nizu mjerenja

Primjer:

Niz: 10 14 7 12 1 5 3 7 2

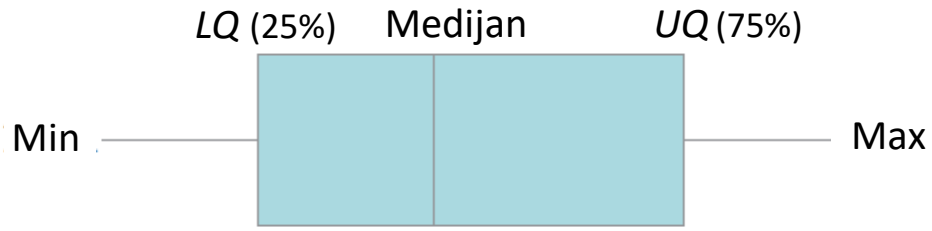
Prije određivanja gornjeg i donjeg kvartila nužno je urediti podatke prema veličini:

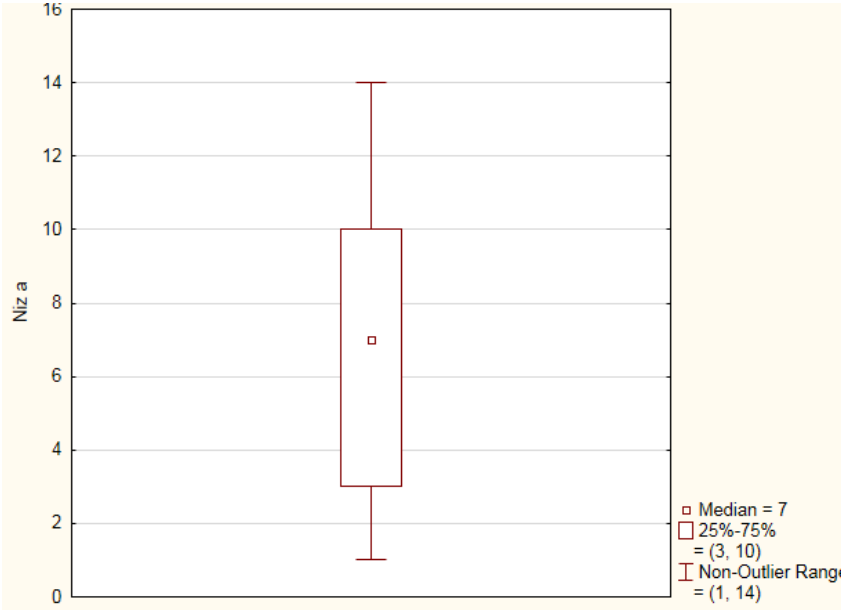
Uređeni niz: 1 2 3 5 7 7 10 12 14

UQ = 10; *LQ* = 3; *Mod* = 7

MJERE DISPERZIJE – RASPON, INTERKVARTIL

- **Raspon** rezultata
  Razlika između najvećeg i najmanjeg rezultata.
- **Interkvartil** (engl. ***interquartile range***)
  Kvartilni raspon rezultata središnjih 50% članova niza uređenih podataka po veličini.
  Razlika gornjeg i donjeg kvartila: $I_Q = UQ - LQ$
- Dijagram s pravokutnikom – **Box-Plot**





MJERE RASIPANJA (STANDARDNA DEVIJACIJA)

- **Standardna devijacija**
  govori koliko su vrijednosti uzorka raspršene oko aritmetičke sredine (prosječno kvadrirano odstupanje od aritmetičke sredine):

$$s = \sqrt{\frac{1}{n-1}\sum_{j=1}^{n}(x_i - \bar{x})^2}$$

s^2 – **Varijanca**

- **Koeficijent varijacije** (*V*) ili **relativna standardna devijacija**

  omjer standardne devijacije i aritmetičke sredine.

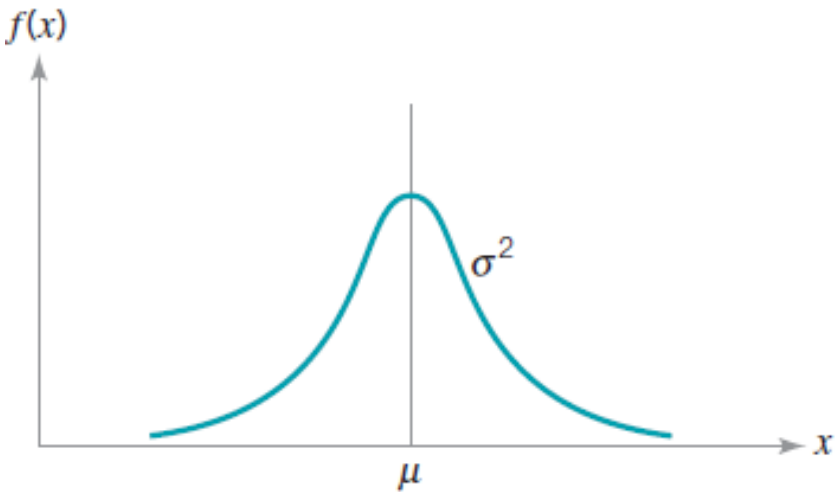
- Služi za **usporedbu varijabilnosti** mjernih rezultata čije su vrijednosti različitog reda veličine.

$$V = \frac{s}{\bar{x}} * 100\%$$

>30 % nije dobro,
10-30% prihvatljivo,
<10 % jako dobro

NORMALNA RASPODJELA (Gaussova distribucija)

- Statistička distribucija pojavljuje se kod većine pojava u prirodi i tehnici (visina učenika, težina beba, krvni tlak, itd.);
- Mjereći različite pojave i karakteristike utvrđeno je da se podaci većinom **grupiraju** oko **centralne** (**srednje**) vrijednosti;
- Kad se grafički prikažu (podaci na horizontalnoj osi, broj podataka na vertikalnoj osi) tvore krivulju zvonolikog oblika poznatiju kao **normalna razdioba**;
- Normalna raspodjela je **simetrična** s vršnom vrijednosti kod srednje vrijednosti (50% podataka je manje od srednje vrijednosti, a 50% je veće od srednje vrijednosti).

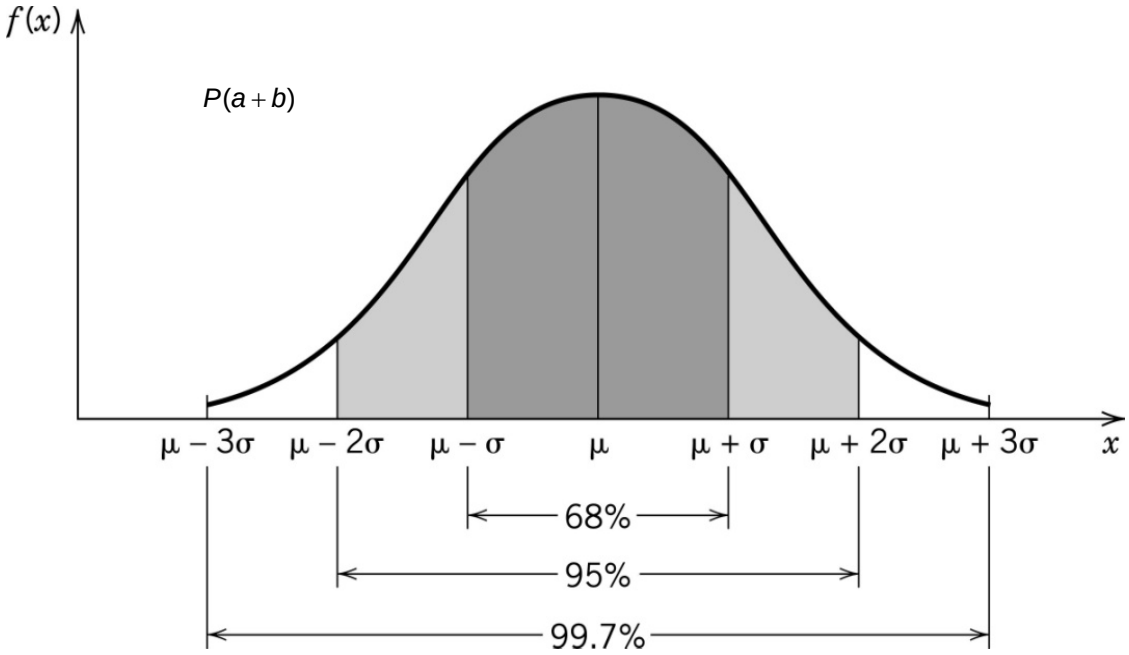


NORMALNA RASPODJELA

$$P(a < x < b) = \int_a^b f(x)dx$$

$$f(x) = \frac{1}{\sigma\sqrt{2\pi}} \exp\left[-\frac{(x-\bar{x})^2}{2\sigma^2}\right]$$

a,*b* - konstante
f(*x*) - funkcija gustoće vjerojatnosti



- Kada je zvonolika krivulja uska (podaci su koncentriraniji), σ je mala.
- Ako su podaci dosta raspršeni, a zvonolika krivulja plosnata, onda je σ relativno velika.

- Interval od **1**σ udaljene od srednje vrijednosti u oba smjera obuhvaća oko **68%** razdiobe.
- Interval od **2**σ udaljene od srednje vrijednosti obuhvaća oko **95%** razdiobe,
- Interval od **3**σ devijacije obuhvaća **99.7%** razdiobe.

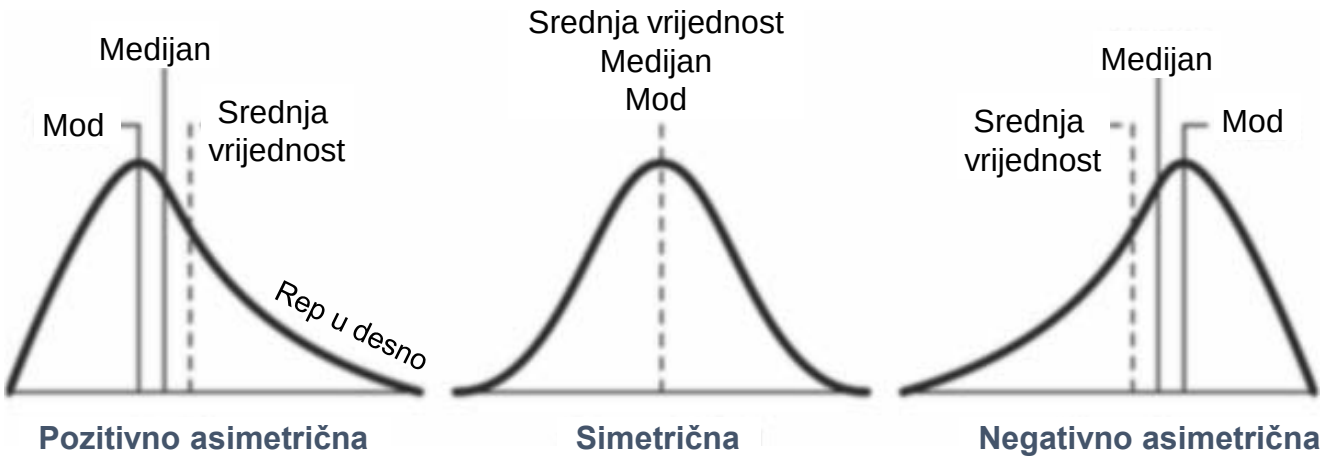
NORMALNA RASPODJELA (simetričnost)

- **Simetričnost distribucije** (engl. ***Skewness***)

Indeks asimetrije:

$$\alpha = \frac{3(\bar{x} - M)}{\sigma}$$

$\alpha = 0$ → u potpunosti simetrična distribucija



NORMALNA RASPODJELA (zakrivljenost)

- **Zakrivljenost (spljoštenost) distribucije** (engl. ***Kurtosis***)

Ako je distribucija normalna, vrijednost je bliže nuli (od -1 do +1).

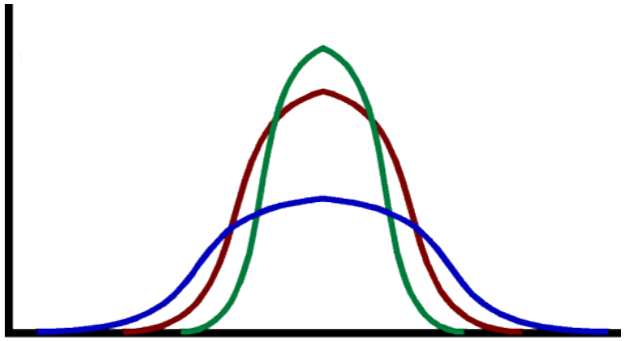
- Pozitivne vrijednosti - uska i visoka distribucija,
- Negativne - spljoštena i široka distribucija.

$$\text{Zakrivljenost} = [n*(n+1)*M_4 - 3*M_2*M_2*(n-1)] / [(n-1)*(n-2)*(n-3)*\sigma^4]$$

$M_j = \Sigma(x_i - \bar{x})^j$

n – broj mjerenja

σ^4 - standardna devijacija na 4. potenciju



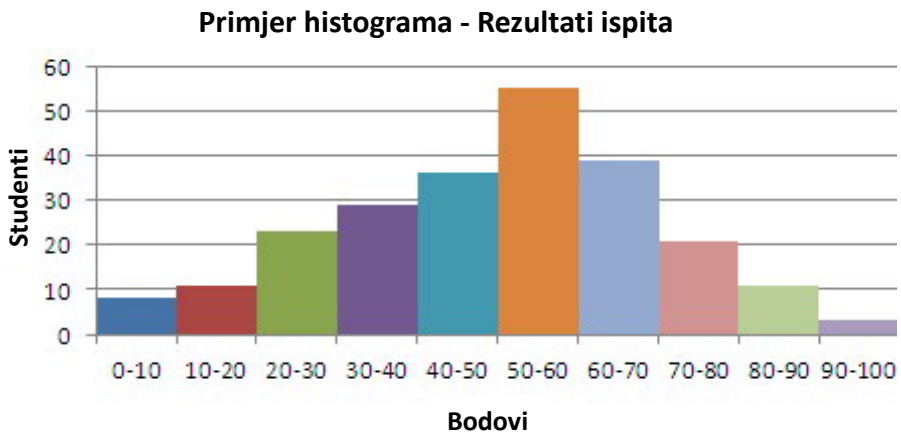
HISTOGRAMI

- Histogram prikazuje razdiobu podataka tj. učestalost pojavljivanja pojedinih vrijednosti.
- Sastoji se od frekvencija prikazanih nizom pravokutnika. Visina pravokutnika jednaka je gustoći frekvencije pojedinog intervala, odnosno frekvenciji podijeljenoj s širinom intervala.
- Ako je duljina intervala na *x*-osi jednaka 1, onda se histogram naziva **relativni prikaz frekvencija** (engl. *relative frequency plot*).

Što vidimo na histogramu?

- **Lokaciju podataka** – Jesu li podaci pravilno centrirani?
- **Širinu raspršenja podataka**
- **Oblik raspodjele podataka** (simetričan, nesimetričan, dugačak rep, dva pika)
- **Ekstremno male ili velike vrijednosti**

Na histogramu ne vidimo promjenu podataka u vremenu.



HISTOGRAMI

- Histogram prikazuje broj mjerenja svrstanih u razdvojene kategorije (razrede).
- Ako je n = ukupni broj mjerenja, a k = ukupni broj razreda, histogram m_i se matematički može definirati kao:

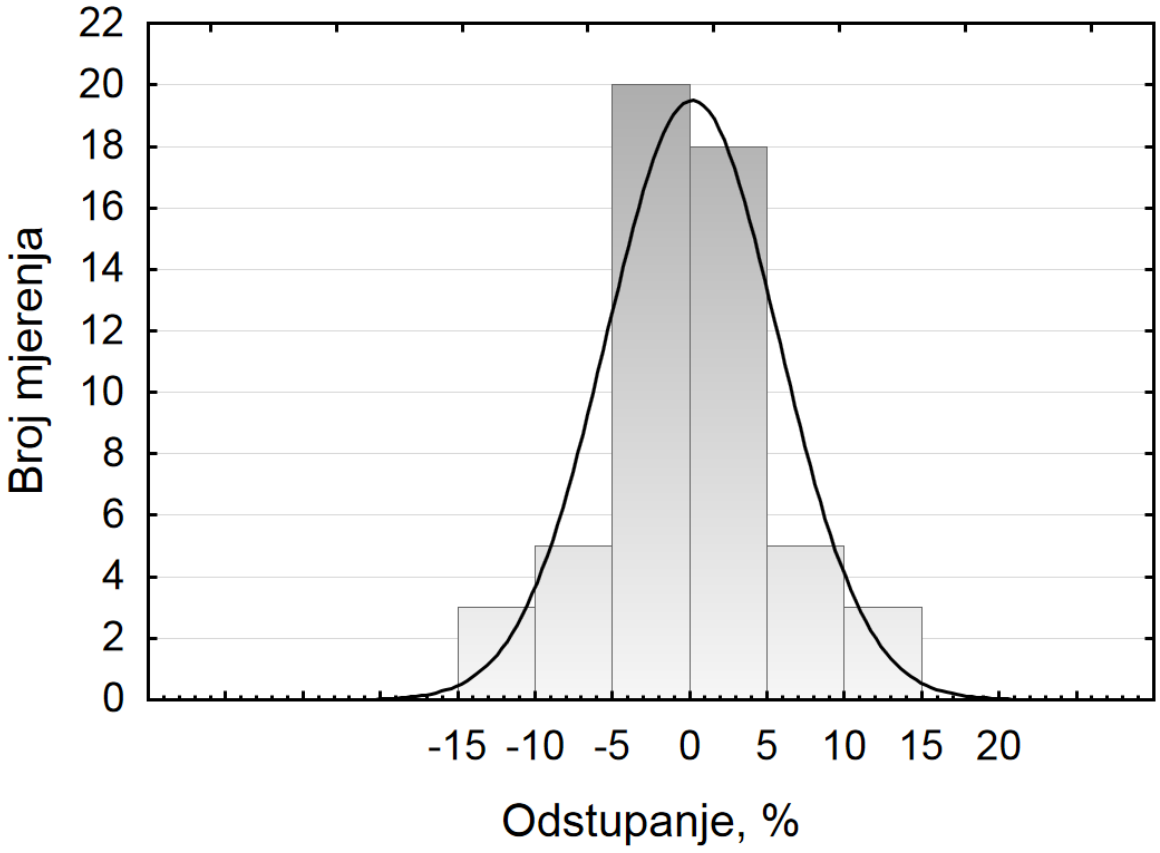
$$n = \sum_{i=1}^{k} m_i$$

- Ne postoji „najbolji” broj razreda.
- U praksi se često **broj razreda** odabire kao kvadratni korijen iz broja mjerenja.
- Ovisno o podacima distribucije i ciljevima analize uglavnom je potrebno eksperimentiranje za određivanje prikladne širine razreda h.
- Broj razreda k može se dodijeliti i direktno ili se može izračunati iz preporučene širine razreda h:

$$k = \frac{\max x - \min x}{h}$$

HISTOGRAMI – Primjer prikaza odstupanja modela od eksperimentalne vrijednosti

Odstupanje konverzije izračunate prema modelu od eksperimentalne vrijednosti



Frekvencija odstupanja

Interval	Frekvencija
0 do 5	18
5 do 10	5
10 do 15	3
0 do -5	20
-5 do -10	5
-10 do -15	3

PREDOBRADA PODATAKA

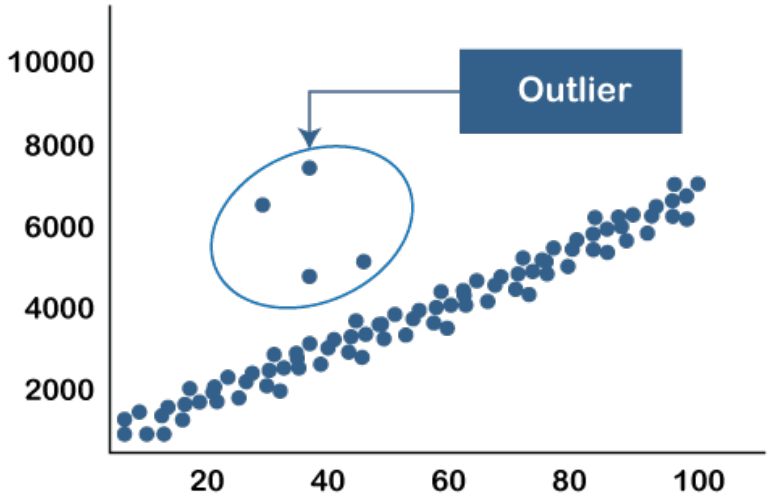
Prikupljanje podataka iz baze podataka.	• **PHD (*Process history database*)**
Određivanje vremena uzorkovanja podataka	• *Shannon-ov teorem; resempliranje*
Otkrivanje i uklanjanje *outliera*	• 3-sigma metoda; Hampel identifikator; Mahalanobis udaljenost
Zamjena nedostajućih vrijednosti	• *Spline* (kubni)
Filtriranje podataka	• Filtar Loess, Lowes, Savitzky-Golay,...
Generiranje dodatnih izlaza	• MAR *Spline* algoritam • *Spline* (kubni)
Odabir utjecajnih varijabli	• Koreliranost varijabli; PCA, PLS,... • Konzultacije s tehnolozima/operaterima
Detrendiranje	• Uklanjanje srednje vrijednosti (engl. *Remove means*) • Uklanjanje linearnog trenda (engl. *Remove trends*)
Skaliranje podataka	• Normiranje podataka u granicama od 0 do 1, ili +-1 • Skaliranje podataka tako da im je sr. vr. = 0, st. dev. =1

Ekstremne vrijednosti (engl. *Outliers*)

- Ekstremne vrijednosti znatno odstupaju od okolnih podataka.
- Izolirane ekstremne vrijednosti obično se zamjenjuju interpolacijom susjednih podataka.

Kriteriji otkrivanja ekstremnih vrijednosti

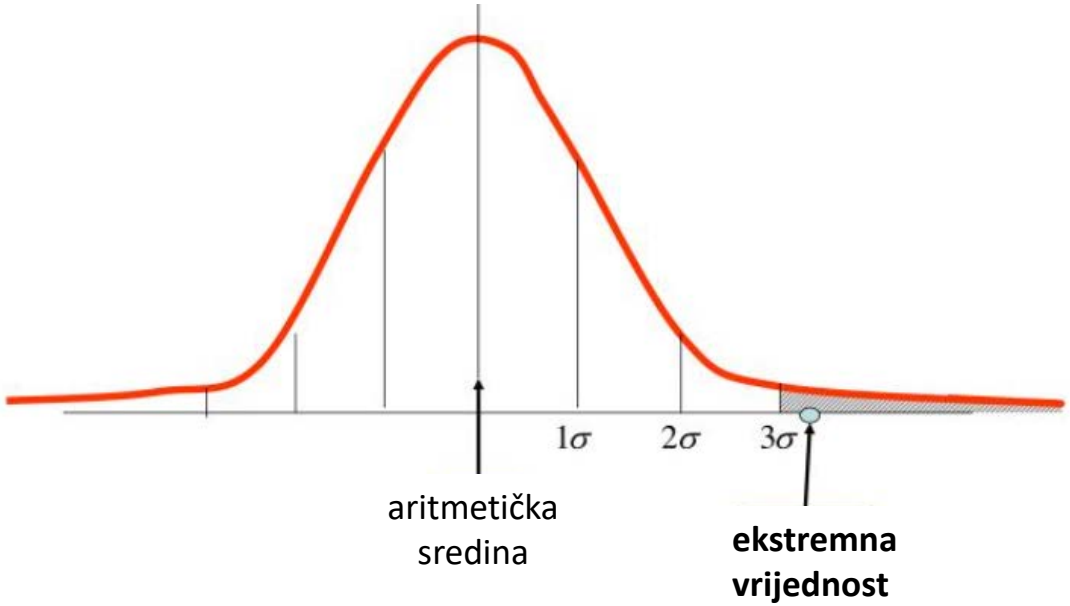
- 3σ pravilo, Hampel identifikator;
- Jolliffe metoda (preko PCA/PLS metode);
- Analiza reziduala kod linearne regresije.



Ekstremne vrijednosti

3σ pravilo

$$d_i = \frac{x_i - \overline{x}}{\sigma_x}$$



d_i - normalizirana udaljenost svakog uzorka od srednje vrijednosti

x_i - *i*-ti uzorak

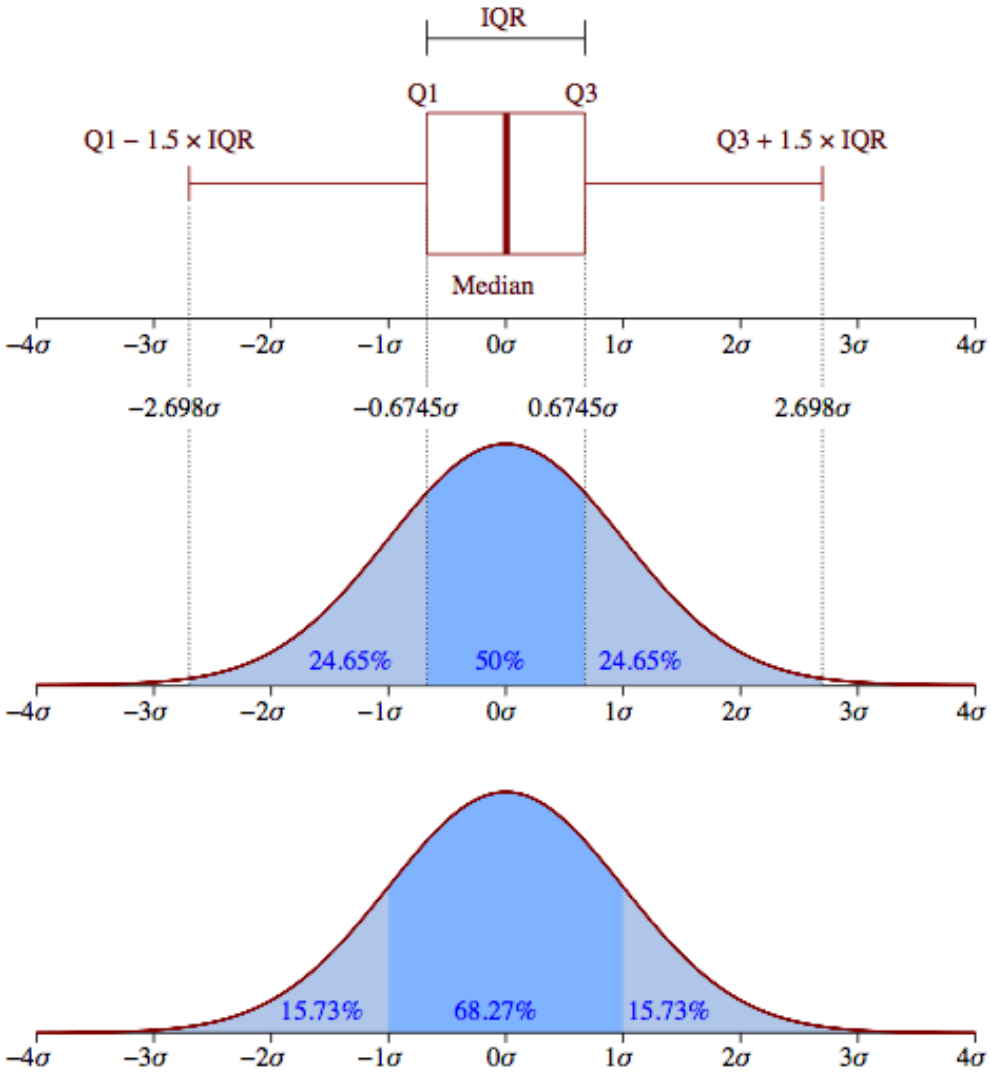
x - aritmetička sredina skupa uzoraka,

σ_x – standardna devijacija skupa uzoraka

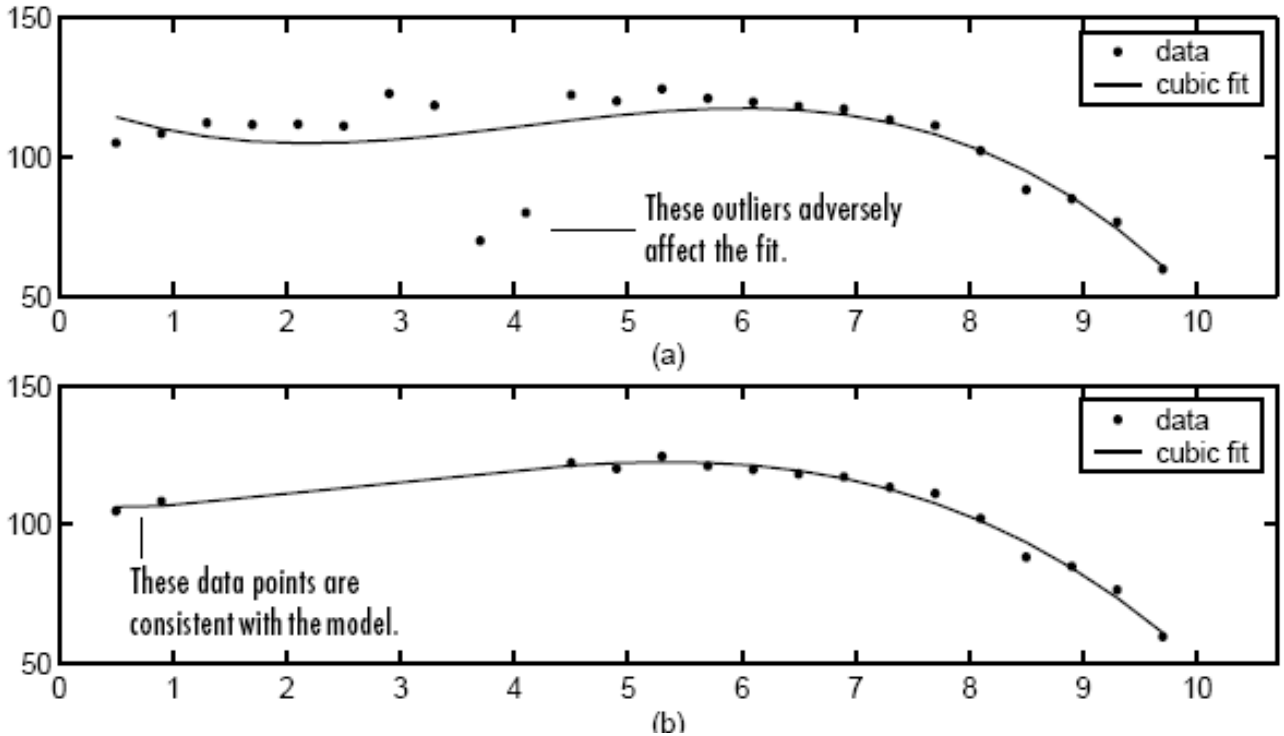
Ekstremne vrijednosti

Kada se želi smanjiti utjecaj višestrukih odstupajućih vrijednosti na procijenjenu srednju vrijednost i standardnu devijaciju varijable, srednja vrijednost se može zamijeniti **medijanom** od podataka, a standardna devijacija s medijanom apsolutnog odstupanja ulaznih podataka od njihovog medijana.

3σ pravilo s ovakvim robusnijim skaliranjem - ***Hampel identifikator***.



Ekstremne vrijednosti – utjecaj na model

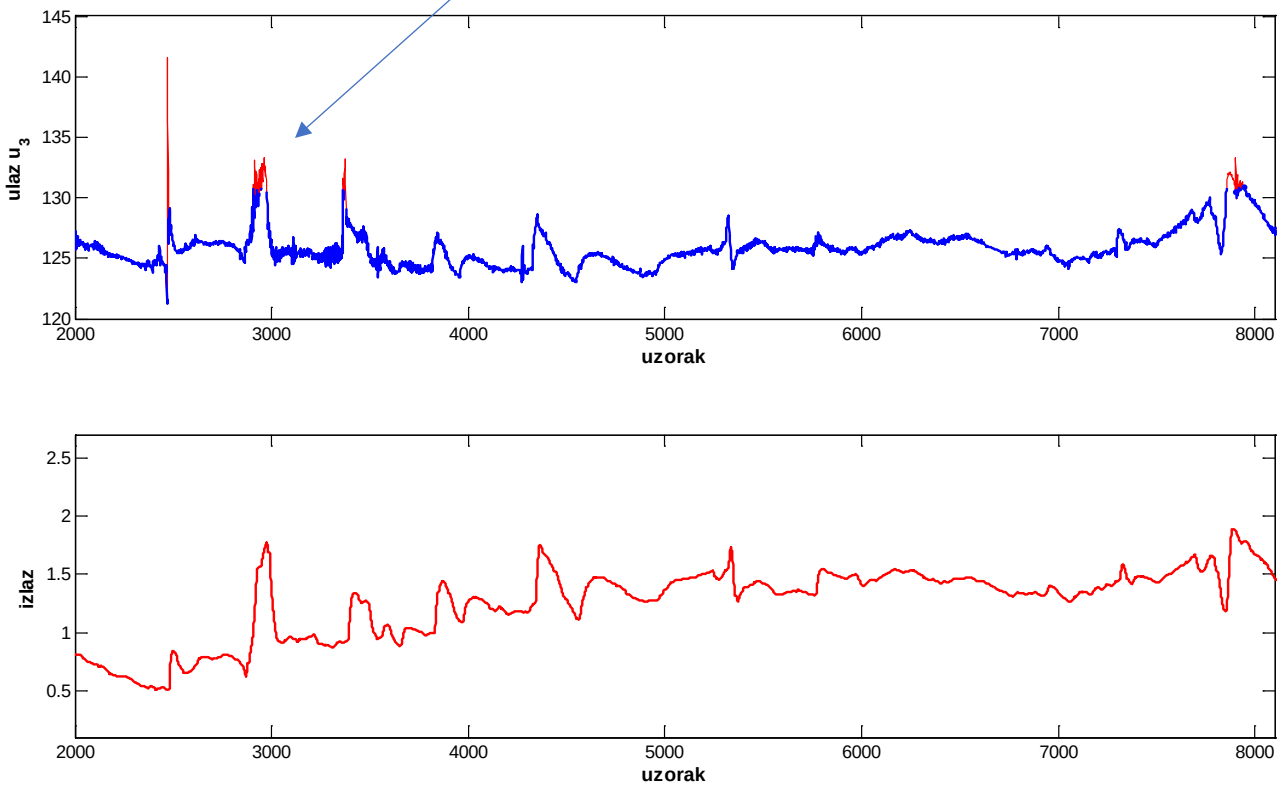


(a) dva *outlier*-a bitno utječu na razvoj modela

(b) dva podatka koja su konzistentna s modelom

Primjer ekstremnih vrijednosti

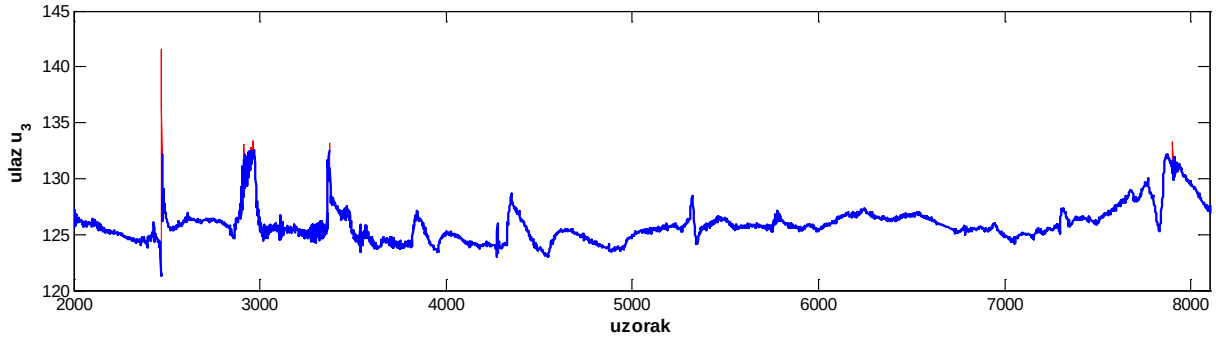
poremećaj u procesu, a ne *outlier*



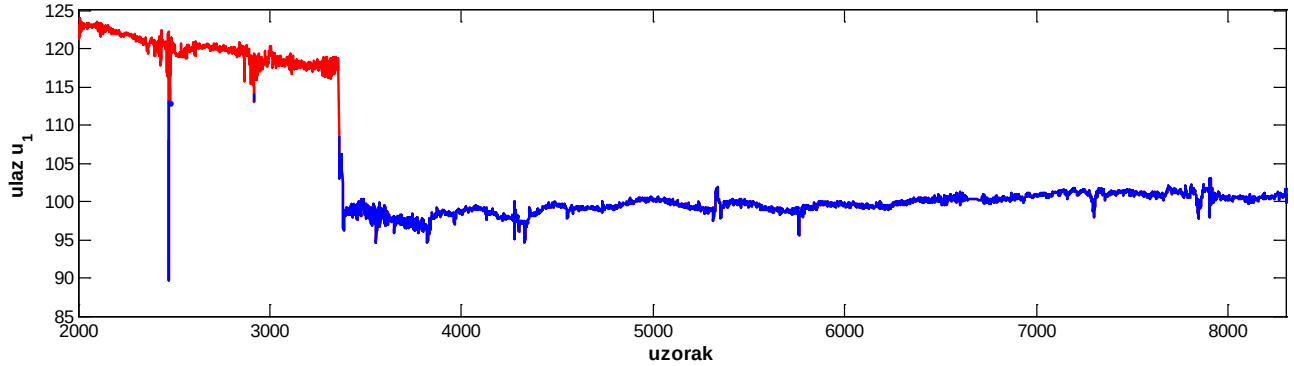
ekstremne vrijednosti crvena boja)

Prikaz ulaza s otkrivenim ekstremnim vrijednostima (gornji graf) pomoću 3-sigma metode te izlaza modela (donji graf)

Primjer ekstremnih vrijednosti



*Prikaz ulaza 3 s otkrivenim ekstremnim vrijednostima pomoću **Hampel** identifikatora*



*Prikaz ulaza 1 s otkrivenim ekstremnim vrijednostima koristeći **Hampel** identifikator → trebalo bi podijeliti podatke na dva skupa!*

FILTRIRANJE PODATAKA

- Visokofrekventne te niskofrekventne smetnje trebaju se ukloniti, jer mogu rezultirati nestabilnim i nedovoljno točnim modelom.
- **Filtriranje** je postupak kojim se nastoji **smanjiti mjerni šum** prisutan kod mjernih pretvornika. Svrha filtriranja je "izgladiti" podatke te olakšati razvoj modela, tj. onemogućiti modeliranje šuma što rezultira nepotrebnom parametrizacijom modela.
- Filtriranje treba provoditi **s mjerom** jer u obrađenim podacima treba ostaviti dovoljno informacija.

Filtriranje podataka – Izglađivanje

- Kod svake metode definira se određeni **raspon** (***span***) – područje susjednih točaka koje se uključuju u proračun nove točke;

- Ovaj raspon se **pomiče** duž podataka korak po korak za svaku novu vrijednost prediktora;

  - **Veliki raspon** povećava glatkoću, ali **smanjuje rezoluciju** izglađenih podataka;
  - **Mali raspon** smanjuje glatkost, ali **povećava rezoluciju** izglađenih podataka;

- Optimalni raspon ovisi o skupu podatka, metodi izglađivanja i obično zahtijeva ponešto eksperimentiranja.

Filtriranje podataka – Izglađivanje

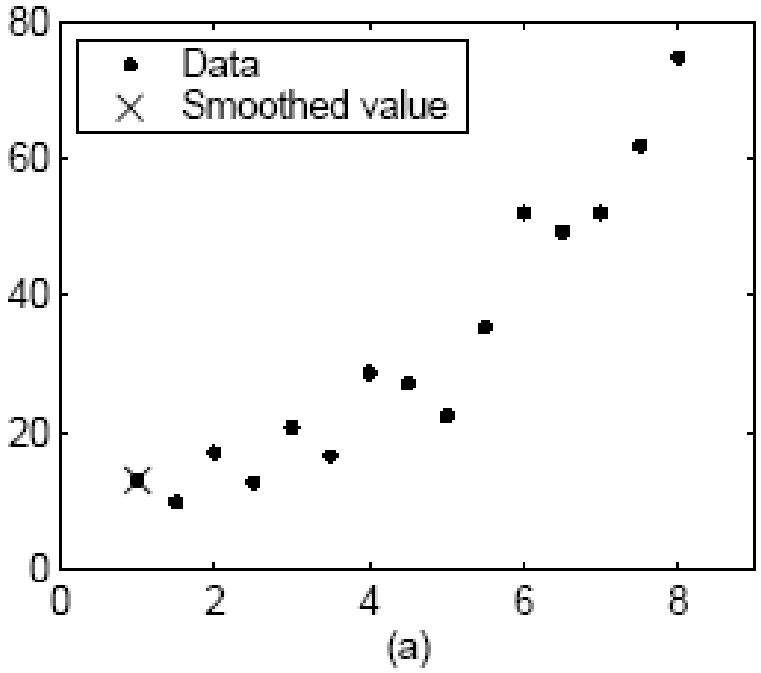
Moving average filtriranje

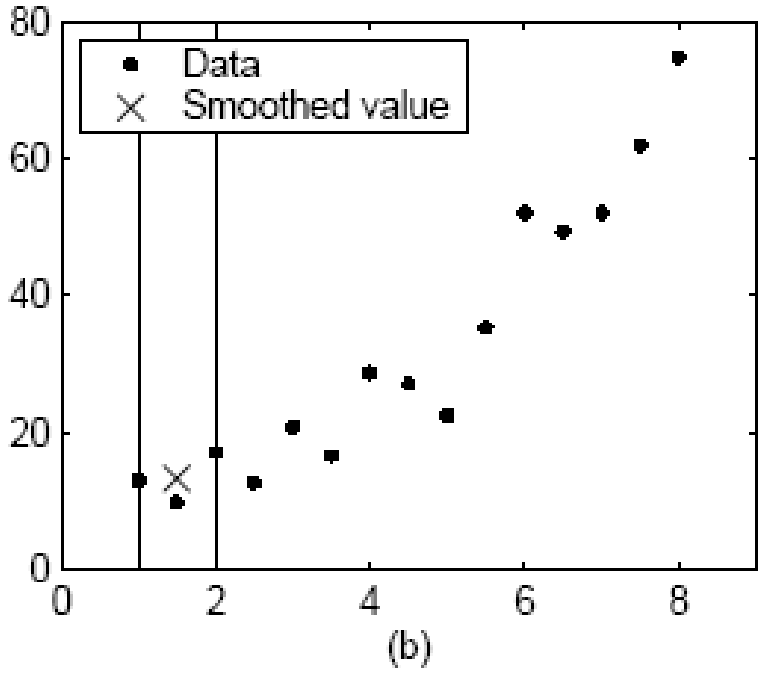
- Filtar koji uzima sredinu od susjednih podataka;
- Izglađuje podatke tako da **svaki podatak zamjenjuje sa srednjom vrijednosti susjednih točaka** definiranih rasponom;
- Proračun je definiran s jednadžbom razlika:

$$y_s(i) = \frac{1}{2N+1}(y(i+N) + y(i+N-1) + \ldots + y(i-N))$$

$y_s(i)$	izglađena vrijednost *i*-tog podatka
N	broj susjednih podataka s obje strane
$2N+1$	raspon

Moving average filtriranje



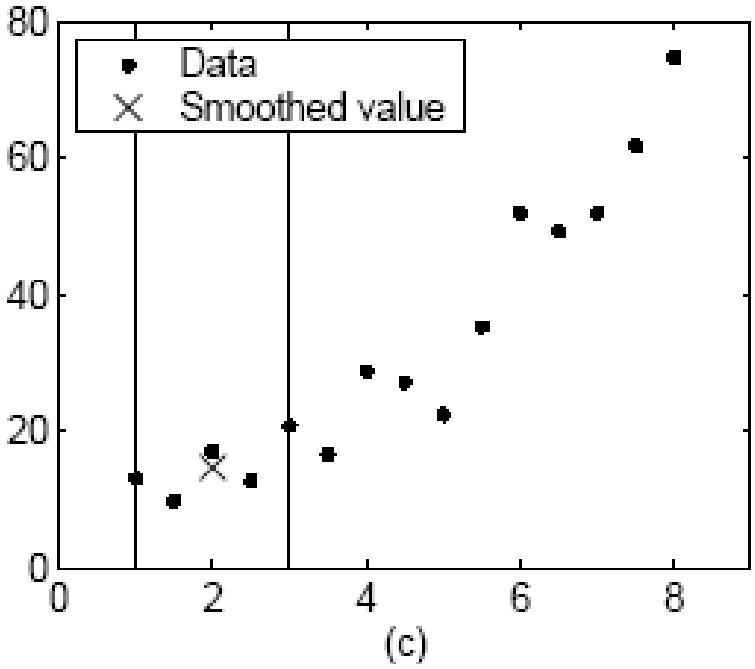


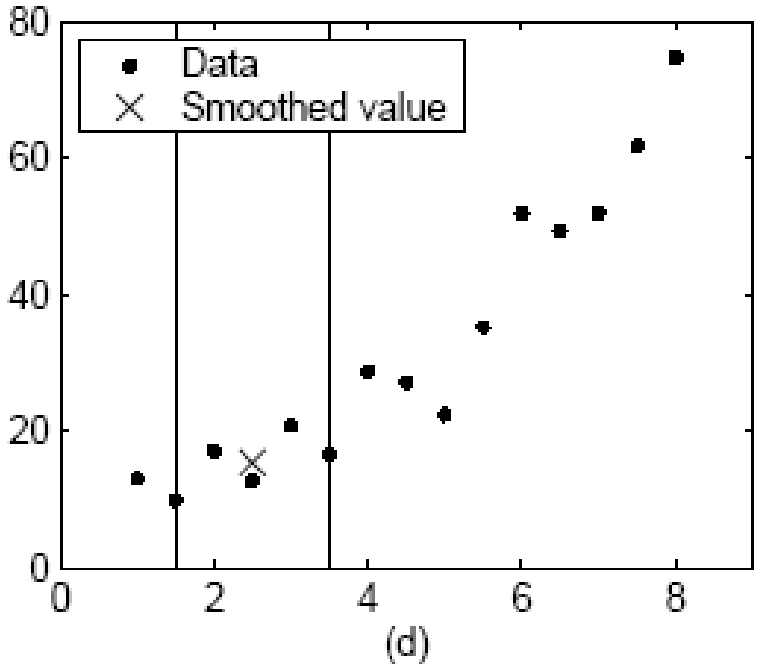
(a) Prva točka nije izglađena jer ne postoji raspon

(b) Druga točka je izglađena primjenom raspona od tri podataka

$$y_s(1) = y(1)$$
$$y_s(2) = (y(1)+y(2)+y(3))/3$$

Moving average filtriranje





(c) i **(d)** za proračun izglađene vrijednosti primjenjuje se raspon od 5 točaka

$$y_s(3) = (y(1)+y(2)+y(3)+y(4)+y(5))/5$$
$$y_s(4) = (y(2)+y(3)+y(4)+y(5)+y(6))/5$$

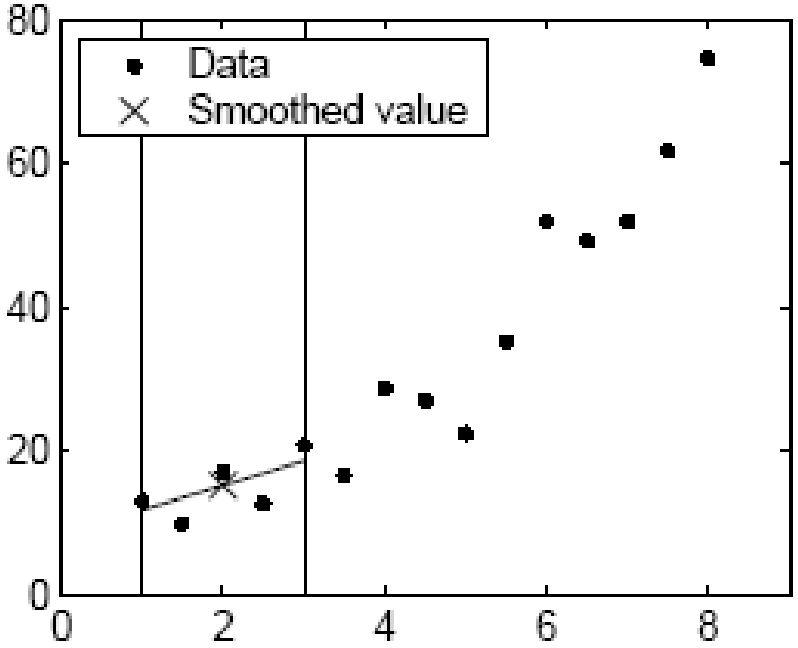
LOWESS i LOESS – izglađivanje lokalnom regresijom

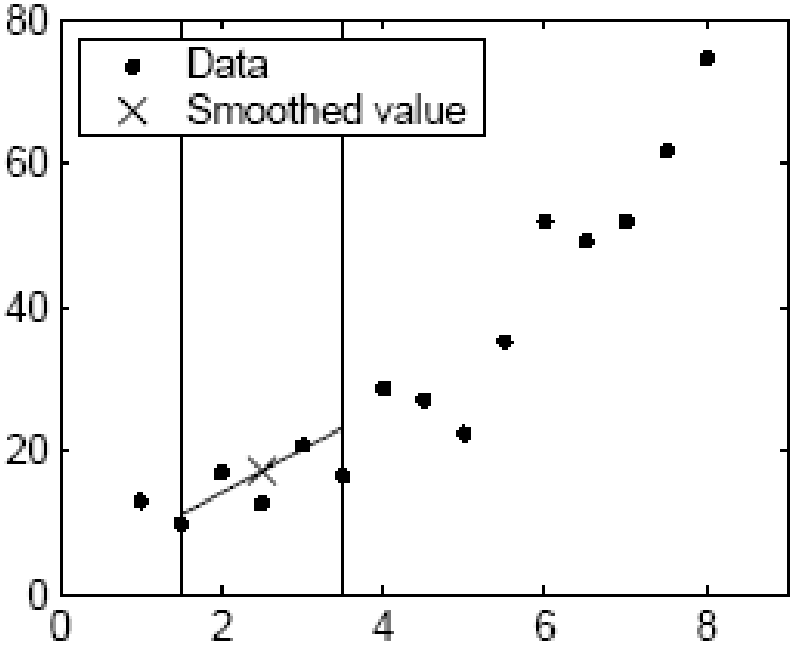
Lowess, **Loess** – "***locally weighted scatter plot smooth***"

- Obje metode primjenjuju **lokalnu težinsku** linearnu regresiju;
- Smatra se "**lokalnom**" jer se vrijednost određuje na temelju **susjednih točaka** definiranih rasponom;
- Podaci imaju svoje težinske vrijednosti, a može se primijeniti i robusna težinska funkcija kako bi se isključile ekstremne vrijednosti.
- Ovisno o izabranoj "težini" filtriranja, Loess više ili manje zanemaruje podatke koji odskaču od lokalnog trenda te tako nastaju novi podaci koji imaju manje šuma.
- **Lowess** – primjena linearnog polinoma 1. reda *(svaka izglađena vrijednost dana je ponderiranom linearnom regresijom najmanjih kvadrata kroz određeni span podataka)*

  Loess – primjena kvadratnog polinoma 2. reda *(ponderirana kvadratna regresija najmanjih kvadrata kroz određeni raspon vrijednosti)*

LOWESS i LOESS – izglađivanje lokalnom regresijom

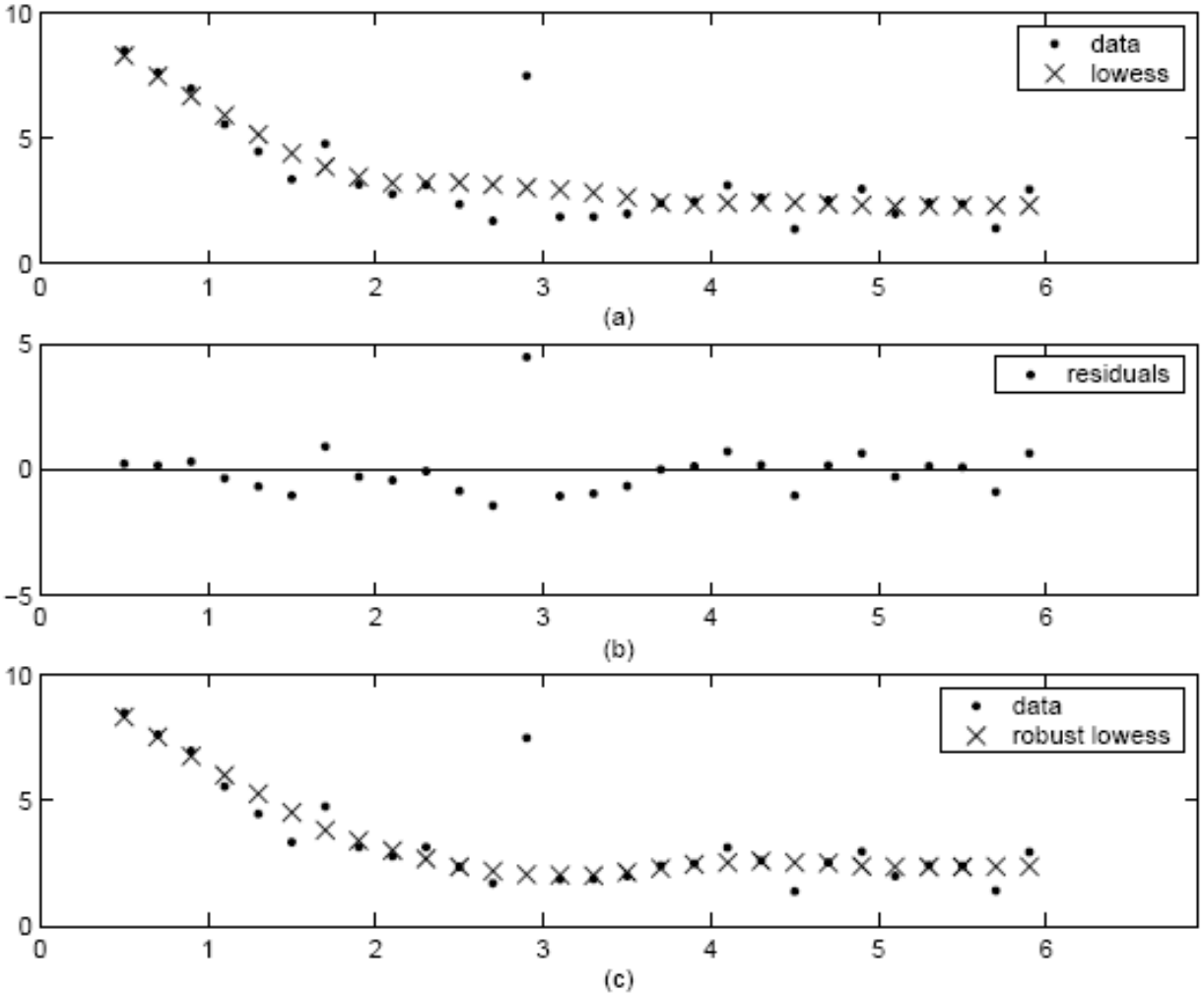




Raspon je stalan, a postupak izglađivanja provodi se od točke do točke.

Ovisno o broju najbližih susjeda, težinske funkcije mogu i ne moraju biti **simetrične** oko točke oko koje se izglađuje.

LOWESS i LOESS – izglađivanje lokalnom regresijom



(a) *Outlier* utječe na izglađenu vrijednost za nekoliko susjednih točaka

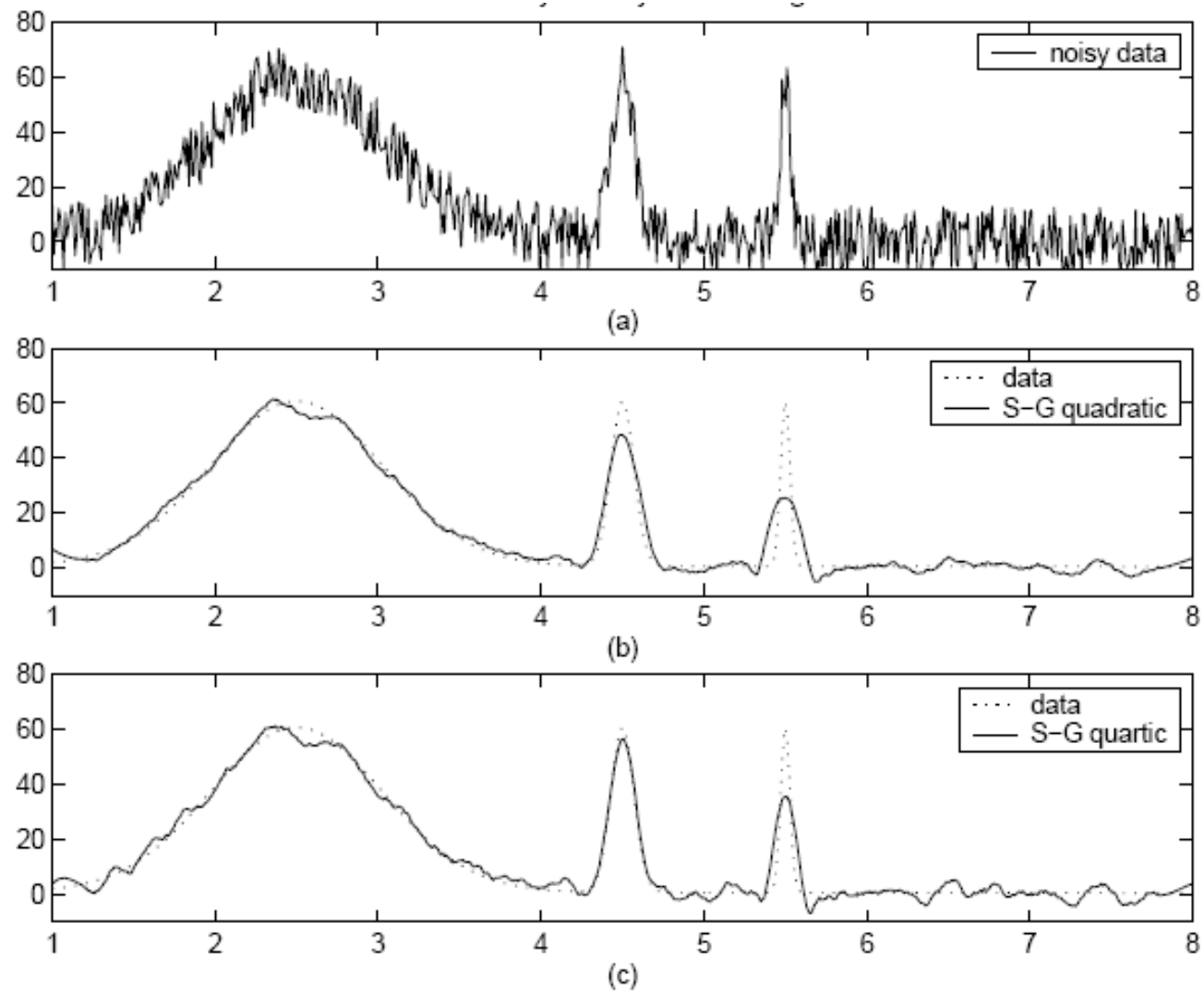
(b) Prikaz residuala

(c) Izglađene vrijednosti oko *outlier*-a odražavaju većinu podataka

SAVITZKY-GOLAY FILTAR

- Poopćeni "*moving average*" postupak pri čemu se određuje koeficijent filtra provedbom netežinskog podešavanja linearnom metodom najmanjeg kvadrata primjenom polinoma određenog stupnja (***digital smoothing polynomial filter*** ili ***least squares smoothing filter***)
- Višim redom polinoma može se postignuti visoka razina izglađivanja bez prigušenja podataka
- Često se koristi pri obradi frekvencijskih ili spektroskopskih podataka (s pikovima). U netežinskom pristupu, svi podaci imaju istu važnost pri procjeni parametara modela.
- Kod frekvencijske analize djelotvoran je za očuvanje visokofrekventnih komponenti signala
- Kod spektroskopske analize dobar je za očuvanje vrhova pikova
- Za usporedbu, MA filtrira veliki dio visokofrekventnog sadržaja, a SG je manje uspješan od MA kod skidanja šuma

SAVITZKY-GOLAY FILTAR

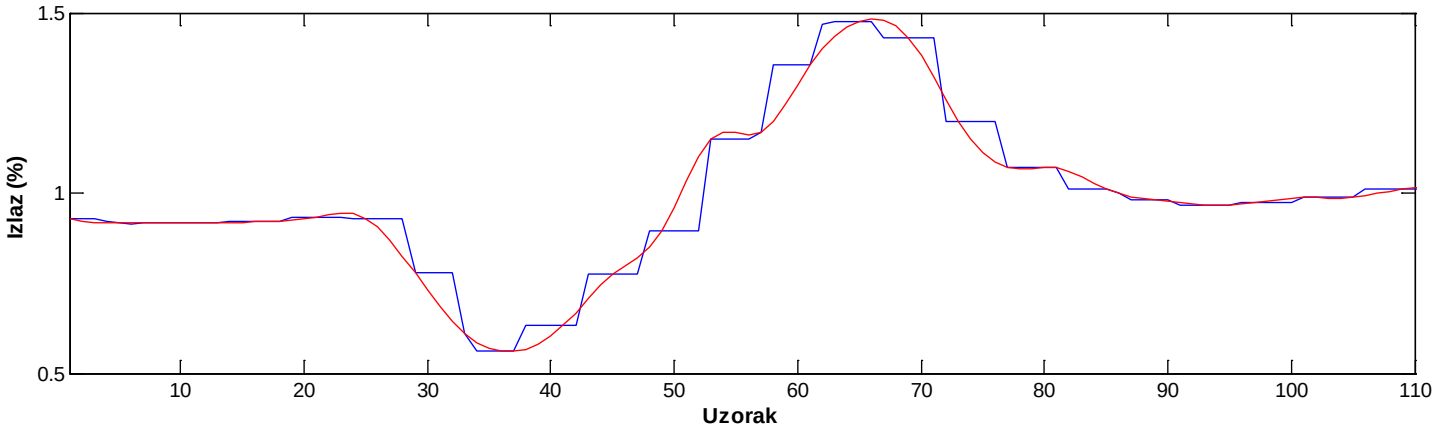


Podaci opterećeni **šumom**

Podaci **bez šuma** – izglađivanje kvadratnim polinom, ima problema s uskim pikovima

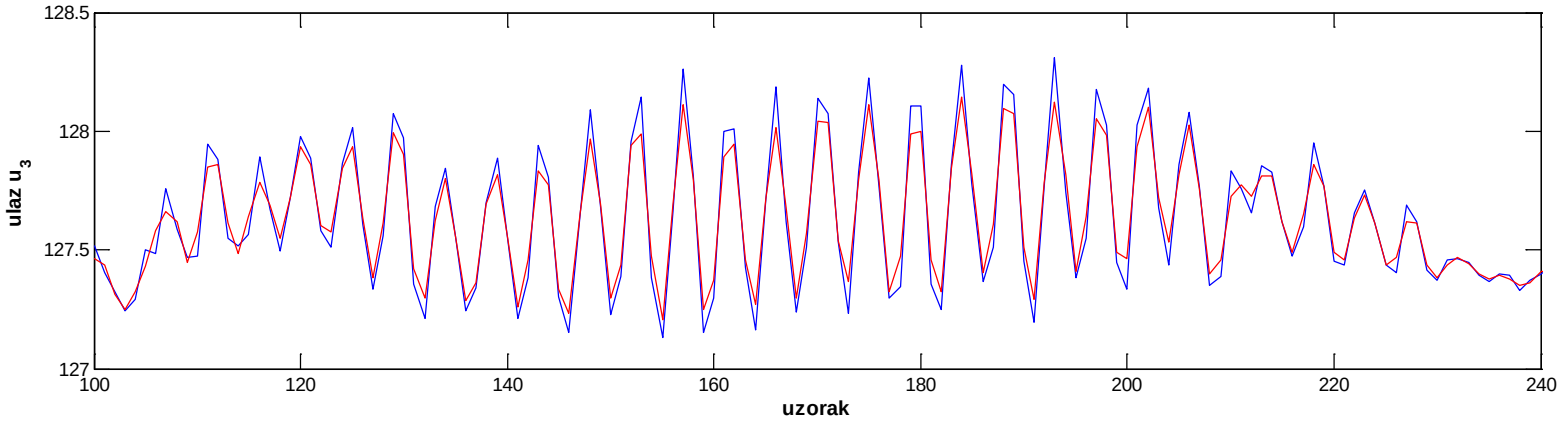
Podaci **bez šuma** – izglađivanje Savitzky-Golay polinomom; općenito, što je veći red bolje se "hvataju" uski pikovi, ali slabije širi

PRIMJERI - Nadomještanje podataka izlaza; Filtriranje podataka



crveno-interpolirani izlaz
plavo-mjereni izlaz

Prikaz interpoliranih vrijednosti dijela izlaznog signala pomoću kubnog spline-a



crveno- filtrirani
plavo- nefiltrirani

Uvećani dio usporedbe filtriranih i nefiltriranih podataka

$\overline{x}$

Skaliranje podataka

Podaci mogu imati različite iznose, ovisno o fizikalnim jedinicama i prirodi procesa. To može povećati značaj brojčano većih veličina nad manjim tijekom postupka razvoja modela. Zbog toga se provodi **skaliranje podataka**.

"*Min-max*" normalizacija:

$$x_{norm}^{i} = \frac{x^{i} - x_{\min}}{x_{\max} - x_{\min}}$$

x – neskalirana varijabla
x_{norm} – skalirana varijabla

"*Z-score*" normalizacija (standardizacija):

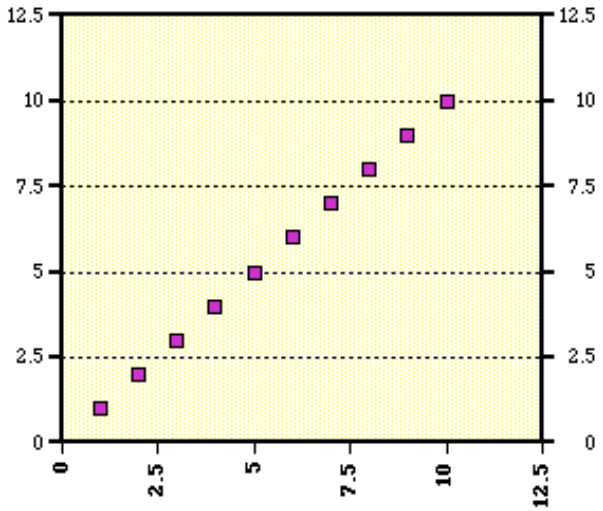
$$x' = \frac{x - \overline{x}}{\sigma_x}$$

DIJAGRAM RASPRŠENJA (engl. *Scatterplot*)

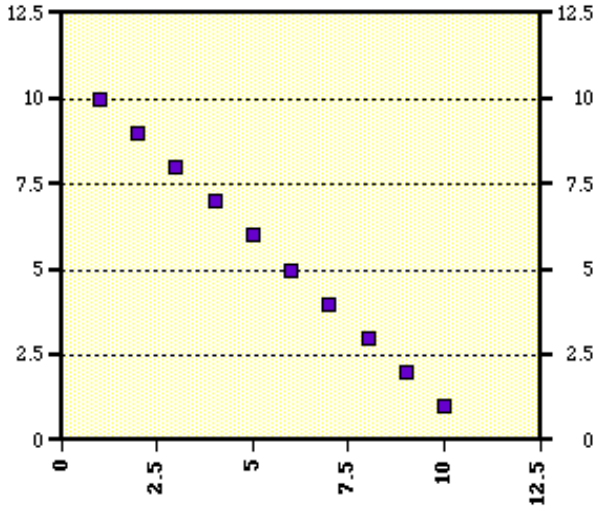
- Često opažamo kako dvije pojave pokazuju međusobnu zavisnost ili određeni stupanj povezanosti;
- Standardizirana mjera jakosti statističke veze između pojava predočenih dvjema kvantitativnim varijablama jest **koeficijent korelacije (*R*)**.
- **Dijagrami raspršenja** pokazuju koliko jedna varijabla utječe na drugu;
- Što su podaci bliže pravcu to je jača **linearna korelacija** između dvije varijable;
- Ako točke tvore pravac koji ide iz ishodišta do visoke x- i y- vrijednosti, onda varijable imaju **pozitivnu korelaciju**, a ako pravac ide od visoke vrijednosti na y-osi do visoke vrijednosti na x-osi, onda varijable imaju **negativnu korelaciju** .

DIJAGRAM RASPRŠENJA

Idealna pozitivna korelacija (*R*=1)



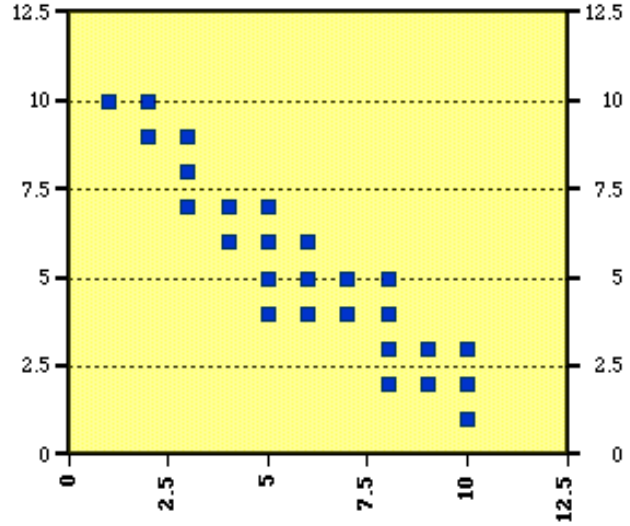
Idealna negativna korelacija (*R*=-1)



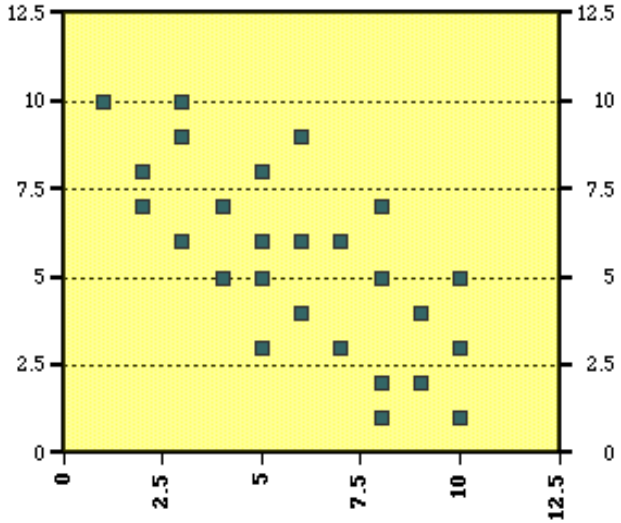
Što je korelacija bliža 1 ili -1, to je ona jača, a što je bliže 0, to je slabija korelacija.

DIJAGRAM RASPRŠENJA

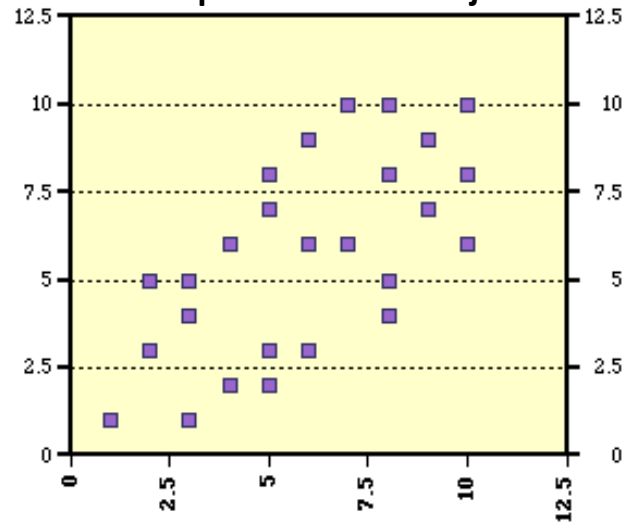
Velika negativna korelacija



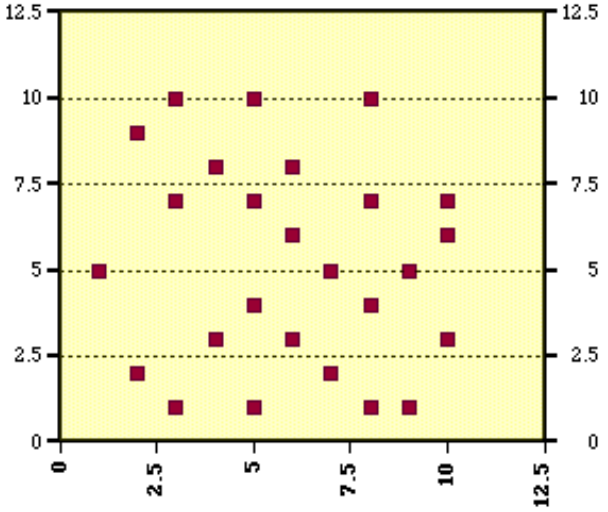
Mala negativna korelacija



Niska pozitivna korelacija



Nema korelacije (*R* = 0)



***R* od 0 do ± 0,2**
nikakva ili neznatna povezanost

***R* od ± 0,2 do ± 0,4**
manja povezanost

***R* od ± 0,4 do ± 0,7**
značajna povezanost

***R* od ± 0,7 do ± 1,0**
visoka ili vrlo visoka povezanost

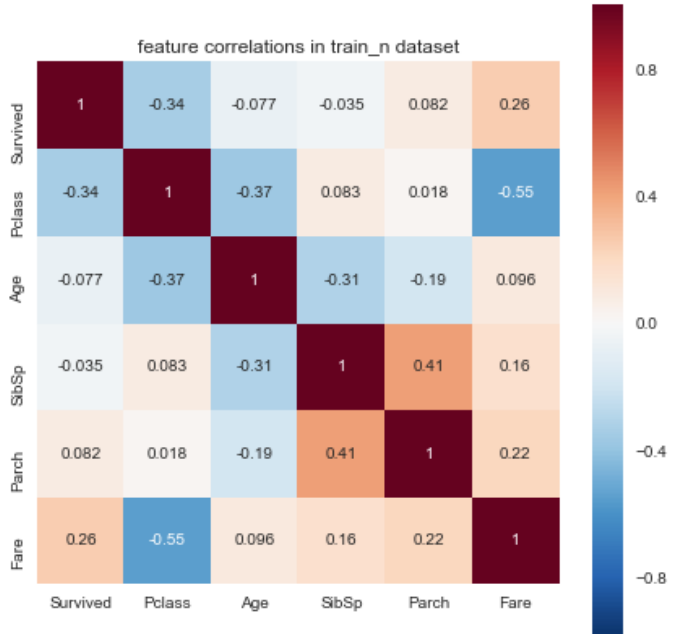
Regresijska analiza

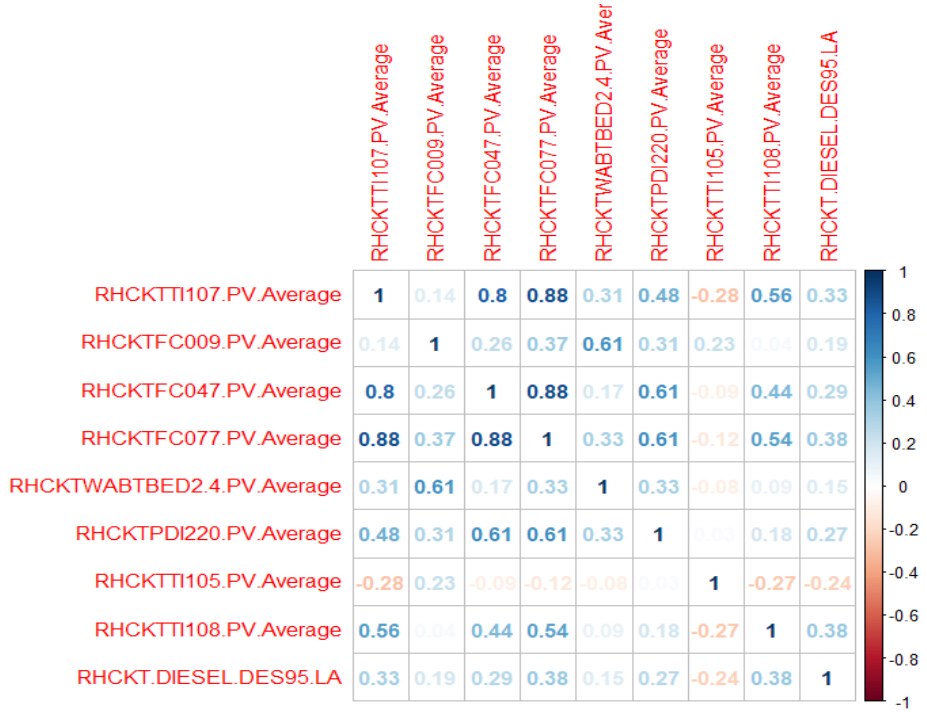
-statistička metoda određivanja jednadžbe koja najbolje prikazuje ovisnost zavisne varijable o nezavisnoj.
-Jednadžba regresije daje veličinu promjene izlaznih veličina uzrokovanih promjenama ulaznih veličina, pa može služiti za predviđanje događaja (omogućuje predviđanje jedne varijable na osnovu druge).

PEARSON-OV KOEFICIJENT KORELACIJE

- Mjera linearne povezanosti dvije normalno distribuirane varijable.
- Ako varijable ne ovise jedna o drugoj, onda je $R = 0$, a ako ovise onda se R nalazi u rasponu od minus 1 do 1.
- Koristi se kod **vrednovanja** modela te kod **odabira ulaznih varijabli** u model.

$$R = \frac{n\left(\sum_{i=1}^{n} y_{\exp,i} \cdot \hat{y}_i\right) - \left(\sum_{i=1}^{n} y_{\exp,i}\right) \cdot \left(\sum_{i=1}^{n} \hat{y}_i\right)}{\sqrt{\left[n\sum_{i=1}^{n} y_{\exp,i}^2 - \left(\sum_{i=1}^{n} y_{\exp,i}\right)^2\right] \cdot \left[n\sum_{i=1}^{n} \hat{y}_i^2 - \left(\sum_{i=1}^{n} \hat{y}_i\right)^2\right]}}$$





Kriteriji vrednovanja modela

- Ocjenjuju podudarnost vladanja modela s vladanjem stvarnog procesa unutar postavljenih radnih uvjeta na neovisnom skupu podataka
- Pored koeficijenta korelacije *R*, u svrhu ocjene valjanosti modela primjenjuju se brojni statistički kriteriji.

$$R^2 = \frac{\sum_{i=1}^{n}\left(\hat{y}_i - \bar{y}\right)^2}{\sum_{i=1}^{n}\left(y_i - \bar{y}\right)^2}, \quad 0 \le R^2 \le 1$$

Koeficijent višestruke determinacije - R^2

Omjer zbroja kvadrata odstupanja protumačenog modelom i zbroja kvadrata odstupanja eksperimentalnih podataka.

$$\bar{R}^2 = 1 - \frac{n-1}{n-(K+1)} \cdot \left(1 - R^2\right), \quad \bar{R}^2 \le R^2$$

Korigirani koeficijent determinacije

uzima u obzir broj stupnjeva slobode, koji za fiksno *n* ovisi o broju nezavisnih varijabli (*K*, prediktora) u modelu.

KRITERIJI VREDNOVANJA MODELA

- **Standardni kriteriji:**

- **Korijen iz srednje kvadratne pogreške (*Root Mean Square Error*)**

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

- **Srednja apsolutna pogreška (*Mean Absolute Error*)**

$$|\overline{e}| = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^{n} |\hat{y}_i - y_i|$$

y	izmjerene vrijednosti
$\hat{y}$	modelom procijenjena vrijednost
$\overline{y}$	srednja vrijednosti mjerene veličine
n	broj podataka

KRITERIJI VREDNOVANJA MODELA - *FIT*

- **Kriterij slaganja modela** (*FIT*)

$$FIT = \left[1 - \sqrt{\frac{\sum_{i=1}^{n}(\hat{y}_i - y_i)^2}{\sum_{i=1}^{n}(y_i - \bar{y}_i)^2}}\right] \cdot 100$$

y	Izmjerene vrijednosti
$\hat{y}$	modelom procijenjena vrijednost
$\overline{y}$	srednja vrijednosti izmjerenih vrijednosti
N	broj podataka

- Vrijednost *FIT* kriterija kreće se u rasponu od 0 do 100%.

  0% → **minimalno** slaganje izmjerene vrijednosti i procjene modela.

  100% → **savršeno** slaganje mjerenja i procjene modela.

KONAČNA POGREŠKA PREDVIĐANJA

- **Funkcija gubitka** (***V - Loss Function***)

$$V = \frac{1}{N}\sum_{k=1}^{n}(y(k) - \hat{y}(k,\Theta))^2$$

S povećanjem broja parametara smanjuje se vrijednost funkcije gubitka.
No, to nije nužno slučaj i s pogreškom procijenjenih parametara modela.

Bolji kriterij je **konačna pogreška predviđanja**
(***FPE - Final Prediction Error***)
- modificira funkciju gubitka *V* tako što **"kažnjava" kompleksnost modela** (izraženu brojem parametara modela *d*) u odnosu na vrijednost pogreške predikcije

$$FPE = V(1+\frac{2d}{N})$$

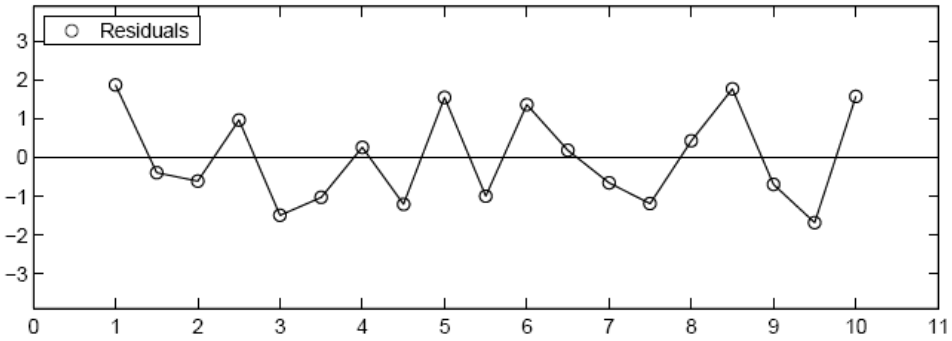
y	mjerenja veličina
$\hat{y}$	modelom procijenjena vrijednost
N	broj podataka
Θ	procjenjeni parametri
d	broj procjenjenih parametara

Rezidualna analiza

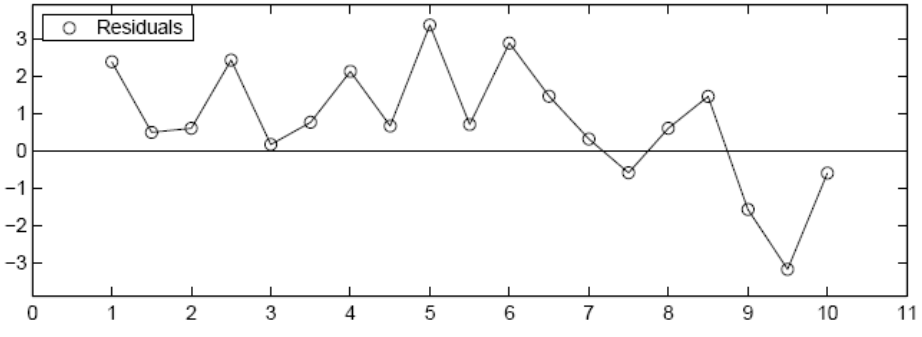
- **Praćenje trenda pogreške (reziduala)** - Reziduali se često grafički prikazuju zajedno s odgovarajućim intervalom pouzdanosti (obično 95%).
- **Histogram pogreške**

$$r = y - \hat{y}$$

Rezidual - Razlika između stvarne vrijednosti i vrijednosti modela.



Reziduali su mali i **slučajno** raspodijeljeni oko nule što znači da model dobro opisuje podatke

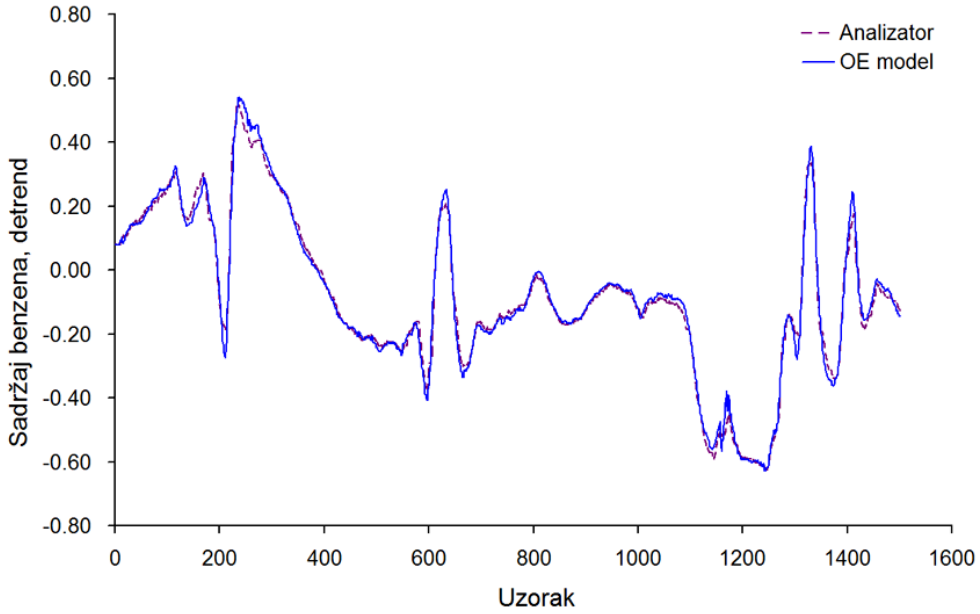


Reziduali su pozitivni za većinu podataka što znači da model ne opisuje dobro podatke (sustavna pogreška)

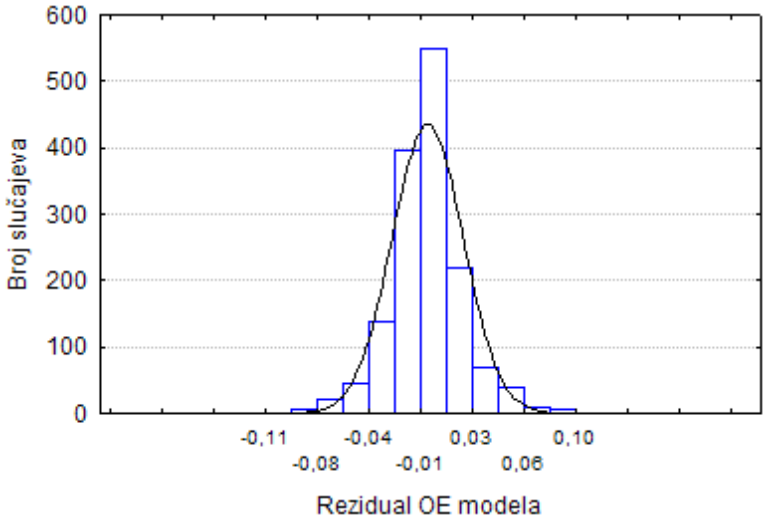
Primjer vrednovanja modela

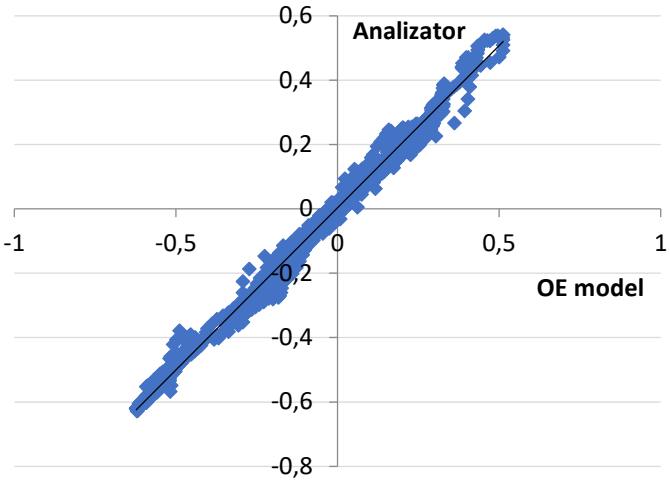
Sadržaj benzena u lakom reformatu

Output Error	
FIT	90,267
FPE	0,0023
RMS	0,0239
e_{MAE},%	0,0171



Usporedba sadržaja benzena određenog analizatorom i OE modelom





Knjižnice (*library*) za predobradu podataka u Pythonu

python™

pandas

https://pandas.pydata.org/

NumPy

https://numpy.org/

SciPy

https://www.scipy.org/

Vizualizacija podataka:

scikit learn

https://scikit-learn.org/

matplotlib

https://matplotlib.org/

Funkcije u Pythonu za predobradu podataka

python™

Aritmetička sredina

Raspon

Minimum

Maksimum

Simetričnost distribucije

Zakrivljenost distribucije

Standardna devijacija

Varijanca

```
1  from scipy import stats
2  stats.describe(Niz_podataka)
```

```
1  import pandas as pd
2  N = pd.Niz_brojeva
3  N.describe
```

Funkcije u Pythonu za predobradu podataka

Aritmetička sredina
Medijan
Mod

Kvartili
Interkvartil

Standardna devijacija

Koeficijent varijacije

Skaliranje podataka

Kubni spline

Pearsonov koef. korelacije

R^2 (*R square*)

```
1  import numpy as np
2  from scipy import stats
3
4  aritmeticka_sredina = np.mean(Niz_podataka)
5  medijan = np.median(Niz_podataka)
6  mod = stats.mode(Niz_podataka)
7
8  Q1 = np.quantile(Niz_podataka,0.25)
9  interkvartil = stats.iqr(Niz_podataka)
10
11 StandardnaDevijacija = np.std(Niz_podataka)
12
13 KoeficijentVarijacije = stats.variation(Niz_podataka)
14
15 from sklearn.preprocessing import StandardScaler, MinMaxScaler
16 scaler = StandardScaler().fit(Niz_podataka)
17 skalirani_niz = scaler.transform(Niz_podataka)
18
19 from scipy.interpolate import CubicSpline
20 CS = CubicSpline(Niz_podatakal,Niz_podataka2)
21
22 Pearsonov_kor_koef= np.corrcoef(Niz_podatakal,Niz_podataka2)
23
24 from scipy import metrics
25 R_kv = metrics.r2_score(Niz_podatakal,Niz_podataka2)
26
```

Funkcije u Pythonu za predobradu podataka

3 Sigma pravilo

Hempel filtar

Lowess smoothing filtar

Srednja kvadratna pogreška
Srednja apsolutna pogreška
Korijen iz sr.kvadratne pogreške

```
from scipy import stats
Filtr_Niz = stats.sigmaclip(Niz_podataka,3,3)

from hempel import hempel
Outlieri = hempel(Niz_podataka,window_size=5,n=3)

import numpy as np
import statsmodels.api as sm
lowess = sm.nonparametric.lowess
Filtr_Niz = lowess(Niz_podatakal, Niz_podataka2)


import numpy as np
from scipy import metrics

MSE = metrics.mean_squared_error(Niz_podatakal, Niz_podataka2)
MAE = metrics.mean_absolute_error(Niz_podatakal, Niz_podataka2)
RMSE = np.sqrt(metrics.mean_squared_error(Niz_podatakal, Niz_podataka2))

```

Funkcije u Pythonu za predobradu podataka

Histogram

Box plot dijagram

Dijagram raspršenja (x-y plot ili *scatter plot*)

```
1  import matplotlib.pyplot as plt
2
3  plt.hist(Niz_podataka)
4
5  plt.boxplot(Niz_podataka)
6
7  plt.scatter(Niz_podataka1,Niz_podataka2)
8
```