

Dvouleté licenční studium chemometrie
Počítačové zpracování dat při kontrole jakosti

Nelineární regrese

Přednášející - Prof. RNDr. Milan Meloun, DrSc.

Příklad 1

Zadání :

Najděte vhodný model, který popisuje naměřená data. Mezi jednotlivými modely rozlište pomocí kritérií MEP, AIC, RSC, D^2 . U vhodného modelu určete parametry β_1 , β_2 , β_3 .

model A $\beta_1 - \beta_2 e^{-\beta_3 x}$

model B $\beta_1 + \beta_2 e^{\beta_3 x}$

model C $\beta_1 + \beta_2 x^{1/\beta_3}$

Data : Tlak nasycené páry v závislosti na teplotě

Teplota t (° C)	Tlak nasycené páry (kPa)
31	4,492
43	8,639
55	15,73
62	21,84
76	40,18
87	62,49
94	81,46
33	5,03
49	11,74
56	16,51
65	25,00
82	51,33
51	12,96
45	9,583
90	70,11

Řešení

Data

Modul : Kalibrace

Jméno souboru : Hana.dat

Jméno výstupního souboru : Hanacal.txt

V modulu Kalibrace byl nalezen odpovídající graf dané závislosti. Stejný nebo podobný graf bude hledán v modulu Nelineární regrese.

Modul : Nelineární regrese

Model A

Zápis regresní funkce $p_1 - (p_2 * (e^{(-p_3 * x)}))$

Výstup	počáteční odhady			RSC	D ²	AIC	MEP
Hananra.txt	1	1	1	9108,3	$1,7309 \cdot 10^{-14}$	102,13	3,0981
Hananra1.txt	-1	1	-1	13354	-46,617	107,87	$1,1586 \cdot 10^7$
Hananra2.txt	10^{-5}	10^{-3}	10^{-4}	1,1394	99,987	-32,663	0,18516

Výstup	p ₁	p ₂	p ₃	graf
Hananra.txt	29,14	1	1	špatný
Hananra1.txt	0,25133	$-6,778 \cdot 10^{-20}$	$-5,1692 \cdot 10^{-1}$	špatný
Hananra2.txt	-4,2583	-2,6256	$-3,7140 \cdot 10^{-2}$	výborný

Model B

Zápis regresní funkce $p_1 + (p_2 * (e^{(p_3 * x)}))$

Výstup	poč.odhady			RSC	D ²	AIC	MEP
Hananrb.txt	1	1	1	9108,3	$1,7309 \cdot 10^{-14}$	102,13	3,0981
Hananrb1.txt	-1	1	-1	9108,3	$-2,2633 \cdot 10^{-14}$	102,13	3,0981
Hananrb2.txt	10^{-5}	10^{-3}	10^{-4}	1,1394	99,987	-32,663	0,18516

Výstup	p ₁	p ₂	p ₃	graf
Hananrb.txt	29,14	1	1	špatný
Hananrb1.txt	29,14	1	-1	špatný
Hananrb2.txt	-4,2583	-2,6256	$-3,7140 \cdot 10^{-2}$	výborný

Model C

Zápis regresní funkce $p_1 + (p_2 * (x ^ (1 / p_3)))$

Výstup	poč.odhady			RSC	D ²	AIC	MEP
Hananrc.txt	1	1	1	1,3133	99,986	-30,532	0,19097
Hananrc1.txt	-1	1	-1	91,083	-3,8643*10 ⁻¹⁰	102,13	3,0981
Hananrc2.txt	10 ⁻⁵	10 ⁻³	10 ⁻⁴	9108,3	-2,6621*10 ⁻¹⁵	102,13	3,0981

Výstup	p ₁	p ₂	p ₃	graf
Hananrc.txt	3,3361	1,147*10 ⁻⁵	0,28887	výborný
Hananrc1.txt	29,14	16,003	-0,14054	špatný
Hananrc2.txt	29,14	-0,001	-0,0001	špatný

Závěr :

V tomto případě stejně dobře popisují data tyto dva modely :

model A $\beta_1 - \beta_2 e^{-\beta_3 x}$
zápis regresní funkce $p_1 - (p_2 * (e ^ (- p_3 * x)))$
s počátečními odhady $-1*10^{-5}, -1*10^{-3}, -1*10^{-4}$ a

model B $\beta_1 + \beta_2 e^{\beta_3 x}$
zápis regresní funkce $p_1 + (p_2 * (e ^ (p_3 * x)))$
s počátečními odhady $-1*10^{-5}, -1*10^{-3}, -1*10^{-4}$.

Příklad 2

Zadání :

Pro vhodný model, který odpovídá naměřené závislosti, určete těsnost proložení.

model A $\beta_1 - \beta_2 e^{-\beta_3 x}$

model B $\beta_1 + \beta_2 e^{\beta_3 x}$

Data :

V laboratoři byla naměřena následující závislost

x	y
18	0,03034
22	0,13600
26	0,60790
16	0,01740
20	0,05690
21	0,08890
23	0,23000
25	0,44400
17	0,01722
19	0,03773

Řešení

Data

Modul : Kalibrace

Jméno souboru : Hana2.dat

Jméno výstupního souboru : Hanacal2.txt

V modulu Kalibrace byl nalezen odpovídající graf dané závislosti. Stejný nebo podobný graf bude hledán v modulu Nelineární regrese.

Modul : Nelineární regrese

Model A

Zápis regresní funkce $p1 - (p2 * (e^{(p3 * x)}))$

Název výstupního souboru : prikl2a

Počáteční odhady parametrů : 1, 1, 1

Graf : pěkné proložení dat

Poslední vrstevnice

Mapa citlivostní funkce

parametr j	relativní změna (%) CjR (-5 %)	relativní změna (%) CjR (+5 %)
1	$2,9427 * 10^{-8}$	$1,0868 * 10^{-7}$
2	-57,342	135,01
3	-61,721	160,42

Z této tabulky vyplývá, že uvedená funkce je nesymetrická, poslední vrstevnice je také nesymetrická.

Směrodatné odchylky parametrů

parametr	bodový odhad	směrodatná odchylka
p_1	$-1,5141 * 10^{-2}$	$1,0614 * 10^{-2}$
p_2	$9,2120 * 10^{-5}$	$4,8220 * 10^{-5}$
p_3	$3,3967 * 10^{-1}$	$1,9872 * 10^{-2}$

Pro parametr p_1 je špatné proložení - bodový odhad a směrodatná odchylka jsou stejného řádu.

Pro parametr p_2 je špatné proložení - směrodatná odchylka je zhruba 50 % číselné hodnoty bodového odhadu.

Pro parametr p_3 je dobré proložení - směrodatná odchylka je menší než 10 % číselné hodnoty bodového odhadu.

$$\begin{aligned} \text{RSC} &= 1,002 * 10^{-3} \\ D^2 &= 99,732 \\ \text{AIC} &= -8,6084 * 10^1 \\ \text{MEP} &= 3,8062 * 10^{-4} \end{aligned}$$

Indikace vlivných bodů

Jackknifovo reziduum není větší než deset, z toho vyplývá, že žádný bod není třeba vyloučit.

Klasické reziduum

dobré proložení experimentálními daty.

Model B

Zápis regresní funkce $p2 * (e^{(p3 * x)}) + p1$

Název výstupního souboru : prikl2b.txt

Počáteční odhady parametrů : 1, 1, 1

Graf : pěkné proložení dat

Poslední vrstevnice

Mapa citlivostní funkce

parametr j	relativní změna (%) CjR (-5 %)	relativní změna (%) CjR (+5 %)
1	$1,254 * 10^{-8}$	$1,0614 * 10^{-4}$
2	-57,342	$1,3500 * 10^2$
3	-61,721	$1,6042 * 10^2$

Z této tabulky vyplývá, že uvedená funkce je nesymetrická, poslední vrstevnice je také nesymetrická.

Směrodatné odchylky parametrů

parametr	bodový odhad	směrodatná odchylka
p_1	$-1,5144 * 10^{-2}$	$1,0614 * 10^{-4}$
p_2	$9,2135 * 10^{-5}$	$4,8224 * 10^{-5}$
p_3	$3,3966 * 10^{-1}$	$1,9870 * 10^{-2}$

Pro parametr p_1 je dobré proložení - směrodatná odchylka je o dva řády nižší než číselná hodnota bodového odhadu.

Pro parametr p_2 je špatné proložení - směrodatná odchylka je zhruba 50 % číselné hodnoty bodového odhadu.

Pro parametr p_3 je dobré proložení - směrodatná odchylka je menší než 10 % číselné hodnoty bodového odhadu.

$$\begin{aligned}
 \text{RSC} &= 1,002 * 10^{-3} \\
 D^2 &= 99,732 \\
 \text{AIC} &= -8,6064 * 10^1 \\
 \text{MEP} &= 3,8248 * 10^{-4}
 \end{aligned}$$

Indikace vlivných bodů

Jackknifovo reziduum není větší než deset, z toho vyplývá, že žádný bod není třeba vyloučit.

Klasická rezidua

Znaménko se střídá, z čehož plyne, dobré proložení experimentálními daty.

Závěr

Model A i model B popisují dobře danou závislost s počátečními odhady parametrů 1, 1, 1. Podle vypočítaných parametrů p_1 , p_2 , p_3 a jejich směrodatných odchylek je lepší model B s počátečními odhady parametrů 1, 1, 1. Kriteria MEP a AIC jsou menší u modelu A. RSC a D^2 jsou u obou modelů stejné.

Lze tedy říci, že model A i model B popisují dobře naměřená data, což je patrné i z grafů.

Název souboru:	UKOL
Adresář:	E:\Pom\nELIN
Šablona:	D:\Program Files\Microsoft Office\Sablony\Normal.dot
Název:	Příklad 1
Předmět:	
Autor:	Havlů Václav
Klíčová slova:	
Komentáře:	
Datum vytvoření:	09.09.96 13:01
Číslo revize:	16
Poslední uložení:	18.09.96 08:28
Uložil:	Marková Helena
Celková doba úprav:	317 min.
Poslední tisk:	15.09.00 08:39
Jako poslední úplný tisk	
Počet stránek:	8
Počet slov:	873 (přibližně)
Počet znaků:	4 978 (přibližně)