

UNIVERSITA PARDUBICE

Fakulta chemicko - technologická, Katedra analytické chemie

NELINEÁRNÍ REGRESE

Přednášející: Prof. Ing. Jiří Militký, CSc., Prof. RNDr. Milan Meloun, Dr.Sc.

21. NELINEÁRNÍ REGRESE

PŘÍKLAD: Rozlišení mezi dvěma nelineárními regresními modely.

Zadání: Porovnejte dva regresní modely

Model A: $p_1 + p_2 \log(x) + p_3 + (\log(x))^2$

Model B: $p_1 + p_2 \log(x) + p_3 + (\log(x))^2$, kde $p_1 = c$ (konstanta)

předpokládané pro následující data.

Citace: (Soukromé sdělení)

Program: Adstat - Nelineární regrese - Minopt

Data: KP21.dat

x	1	2	3	4	5	6	7	8	9
y	5.21	7.42	8.75	9.78	10.28	10.75	11.18	11.49	11.76

x	10	11	12	13	14	15	16	17	18
y	12.10	12.30	12.40	12.56	12.72	12.82	12.85	13.00	13.10

Názvy výstupních souborů: Kp21a.txt, Kp21c.txt, KP21.doc

ŘEŠENÍ:

Model A: $p_1 + p_2 \log(x) + p_3 + (\log(x))^2$

Jako počáteční hodnoty parametrů pro testování regresního modelu byly zvoleny $p_01 = p_02 = p_03 = 1$

1. Bodové odhady parametrů

Parametr	Bodový odhad	Směrodatná odchylka	Absolutní vychýlení	Relativní vychýlení (%)
p1	-2.5922E-01	7.0040E+00	-5.4562 E+10	2.1049E+13
p2	-2.5922E-01	7.0040E+00	-5.4562 E+10	2.1049E+13
p3	2.7722E+00	3.4479 E+00	-2.6724 E+10	-9.6402E+11

2. Intervalové odhady parametrů

Parametr	Bodový odhad	Poloviční délka konfidenčního intervalu spočtená z délky poloos maxim	
p1	-2.5922 E-01	±2.1994 E+01	±2.1996 E+01
p2	-2.5922 E-01	±2.1994 E+01	±2.1996 E+01
p3	2.7722 E+00	±1.0773 E+01	±1.0828 E+01

3. Korelační matice odhadů

	p[1,i]	p[2,i]	p[3,i]
p[1,i]	1.0000 E+00	1.0000 E+00	9.9361 E-01
p[2,i]	1.0000 E+00	1.0000 E+00	9.9361 E-01
p[3,i]	9.9361 E-01	9.9361 E-01	1.0000 E+00

4. Statistické charakteristiky regrese

Reziduální součet čtverců, RSC	: 5.7701 E-02
Regresní rabat, $D^2(\%)$	: 9,9927 E+01
Akaikeho informační kryterium, AIC	: -9,7371 E+01
Střední kvadratická chyba predikce, MEP	: 3,7206 E-16

5. Analýza klasických reziduí

Průměr absolutních hodnot reziduí, MA	: 4,7130 E-02
Průměr relativních hodnot reziduí, MR	: 5,0137 E-01
Odhad reziduálního rozptylu, $s^2(e)$	: 3,8467 E-03
Odhad reziduální směrodatné odchylky, $s(e)$	: 6,2022 E-02
Odhad šikmosti reziduí, $g1(e)$	: 6,6529 E-01
Odhad špičatosti reziduí, $g2(e)$	: 2,5746 E+00

6. Mapa citlivostní funkce

Parametr	Relativní změna	Souhrnná citlivost	Relativní změna
	CjR(-5%) (%)	Cj	CjR(+5%) (%)
p1	-9.7500 E+00	7.0849E+02	1.0250E+01
p2	-9.7500 E+00	7.0849E+02	1.0250E+01
p3	-9.7500 E+00	1,7169E+02	1.0250E+01

Závěr k bodu A: Z korelační matice odhadů parametrů je patrna velká podmíněnost (korelace) mezi parametry p_1 a p_2 . Intervaly spolehlivosti jsou široké. Parametr p_1 je nadbytečný.

Model B: $p_1 + p_2 \log(x) + p_3 + (\log(x))^2$, kde $p_1 = c$ (konstanta)

Jako počáteční hodnoty parametrů pro testování regresního modelu byly zvoleny
 $c_1 = p_{02} = p_{03} = 1$

1. Bodové odhady parametrů

Parametr	Bodový odhad	Směrodatná odchylka	Absolutní vychýlení	Relativní vychýlení (%)
p_2	-5.1844 E-01	4.7128 E-03	1.6923 E-06	-3.2643 E-04
p_3	2.7722 E+00	9.5734 E-03	-4.0653 E-06	-1.4665 E-04

2. Intervalové odhady parametrů

Parametr	Bodový odhad	Poloviční délka konfidenčního intervalu spočtená z délky poloos maxim	
p_2	-5.1844 E-01	± 1.2652 E-02	± 1.2705 E-02
p_3	2.7722 E-01	± 2.5802 E-02	± 2.5808 E-02

3. Korelační matice odhadů

	$p[2,i]$	$p[3,i]$
$p[2,i]$	1.0000 E+00	-9.9361 E-01
$p[3,i]$	-9.9361 E-01	1.0000 E+00

4. Statistické charakteristiky regrese

Reziduální součet čtverců, RSC	: 5.7701 E-02
Regresní rabat, $D^2(\%)$	: 9.9927 E+01
Akaikeho informační kryterium, AIC	: -9.9371 E+01
Střední kvadratická chyba predikce, MEP	: 4.1035 E-03

5. Analýza klasických reziduí

Průměr absolutních hodnot reziduí, MA	: 4.7133 E-02
Průměr relativních hodnot reziduí, MR	: 3.6063 E-03
Odhad reziduálního rozptylu, $s^2(e)$	: 6.0052 E -02
Odhad reziduální směrodatné odchylky, $s(e)$	: 6.6501 E-01
Odhad šikmosti reziduí, $g_1(e)$	: 2.5741 E+00
Odhad špičatosti reziduí, $g_2(e)$	: 4.1035 E-03

6. Mapa citlivostní funkce

Parametr	Relativní změna	Souhrnná citlivost	Relativní změna
	CjR(-5%) (%)	Cj	CjR(+5%) (%)
p2	-9.7500 E+00	7.0849 E+02	1.0250 E+01
p3	-9.7500 E+00	1.7169 E +01	1.0250 E+01

Závěr k bodu B: Volbou prvního odhadu parametru p1 o konstatní hodnotě $c = 1$ došlo k zúžení intervalů spolehlivosti parametrů p2 a p3 a tyto parametry tedy lépe vysvětlují zvolený regresní model. Také vzájemná korelace parametrů p2 a p3 je nízká.

Závěr: Z navržených dvou regresních modelů je vhodnější model **B**

$$c + p_2 \cdot \log(x) + p_3 + (\log(x))^2, \text{ kde } c = 1$$

Název souboru: KP21
Adresář: E:\Pom\nELIN
Šablona: D:\Šablony\Karel1.dot
Název: Nelineární regrese - Minopt
Předmět: Licenční studium chemometrie
Autor: Ing. Josef Kožený
Klíčová slova:
Komentáře: Příklad C806, str. 702
Datum vytvoření: 19.10.96 19:14
Číslo revize: 18
Poslední uložení: 22.10.96 15:13
Uložil: Karel Panuš
Celková doba úprav: 236 min.
Poslední tisk: 15.09.00 08:37
Jako poslední úplný tisk
 Počet stránek: 5
 Počet slov: 667 (přibližně)
 Počet znaků: 3 803 (přibližně)