

Příklad : Nelineární regresní systém

Zadání : Molární tepelná kapacita plynné síry v intervalu teplot 717.7 až 2000 K je popsána rovnicí

$$C_p = \exp (\beta_0 + \beta_1 * T + \beta_2 / T^2)$$

Určete β_0 , β_1 , β_2 .

Data :

měření	Teplota (K)	C_p (JK ⁻¹ mol ⁻¹)	měření	Teplota (K)	C_p (JK ⁻¹ mol ⁻¹)
1	720	17,96733	14	1370	18,57838
2	770	18,03665	15	1420	18,61372
3	820	18,09886	16	1470	18,64845
4	870	18,15556	17	1520	18,68265
5	920	18,20790	18	1570	18,71639
6	970	18,25677	19	1620	18,74971
7	1020	18,30282	20	1670	18,78268
8	1070	18,34657	21	1720	18,81533
9	1120	18,38842	22	1770	18,84769
10	1170	18,42870	23	1820	18,87980
11	1220	18,46764	24	1870	18,91168
12	1270	18,50546	25	1920	18,94336
13	1320	18,54233	26	1970	18,97486

Program : ADSTAT 1.2 - Nelineární regrese

Řešení : Po zadání dat do přístroje, zapsání modelu, provedeme výpočet se standardně nastavenými počátečními hodnotami odhadů parametrů „p“. Sledujeme MEP, AIC a grafické proložení bodů. Dále měníme počáteční odhady parametrů „p“ až MEP, AIC je co nejmenší a grafické proložení bodů optimální. Odečteme hodnoty β_0 , β_1 , β_2 .

počáteční	odhady	parametrů	AIC	MEP	β_0	β_1	β_2
p ₁	p ₂	p ₃					
1	1	1	divergence				
10	1	0.1	divergence				
1	0.01	0.1	-414.7	9.39*10 ⁻⁸	2.88	3.09*10 ⁻⁵	-9.6*10 ³
1	0.01	1	-414.7	9.39*10 ⁻⁸	2.88	3.09*10 ⁻⁵	-9.6*10 ³

Výstup z PC :

NELINEÁRNÍ REGRESE

Minopt

Název: Exponential curve fitting - demo data

V S T U P

(1) PODMÍNKY:

Hladina významnosti, alfa : 0.050
 Počet bodů, n : 26
 Počet parametrů, m : 3
 Počet nezávislých proměnných : 1
 Minimální změna RSC [%] : 1.000000E-01
 Minimální změna parametrů [%] : 0.000000E+00
 Maximální počet iterací : 150
 Kvantil Studentova rozdělení $t(1-\alpha/2, n-m)$: 2.069
 Kvantil Fisher-Snedecorova rozdělení $F(1-\alpha, n, n-m)$: 1.988
 Kvantil χ^2 rozdělení $\chi^2(1-\alpha, m)$: 7.815
 Jméno výstupního souboru : PRIKLAD1.TXT

(2) REGRESNÍ FUNKCE A POČÁTEČNÍ ODHADY PARAMETRU:

Regresní funkce: $\exp(p_1 + (p_2 \cdot x) + (p_3 / (x^2)))$
 $p[1] : 1.000000E+01$ $p[2] : 1.000000E-02$ $p[3] : 1.000000E+00$

(3) VSTUPNÍ DATA:

	1	2	3	4	5
x1	7.2000E+02	7.7000E+02	8.2000E+02	8.7000E+02	9.2000E+02
y	1.7967E+01	1.8037E+01	1.8099E+01	1.8156E+01	1.8208E+01
	6	7	8	9	10
x1	9.7000E+02	1.0200E+03	1.0700E+03	1.1200E+03	1.1700E+03
y	1.8257E+01	1.8303E+01	1.8347E+01	1.8388E+01	1.8429E+01
	11	12	13	14	15
x1	1.2200E+03	1.2700E+03	1.3200E+03	1.3700E+03	1.4200E+03
y	1.8468E+01	1.8505E+01	1.8542E+01	1.8578E+01	1.8614E+01
	16	17	18	19	20
x1	1.4700E+03	1.5200E+03	1.5700E+03	1.6200E+03	1.6700E+03
y	1.8648E+01	1.8683E+01	1.8716E+01	1.8750E+01	1.8783E+01
	21	22	23	24	25
x1	1.7200E+03	1.7700E+03	1.8200E+03	1.8700E+03	1.9200E+03
y	1.8815E+01	1.8848E+01	1.8880E+01	1.8912E+01	1.8943E+01

26
x1 1.9700E+03
y 1.8975E+03

V Y S T U P :

(1) BODOVÉ ODHADY PARAMETRU:

Parametr	Bodový odhad	Směrodatná odchylka	Absolutní vychýlení	Relativní vychýlení[%]
p[1]	2.8848E+00	4.2735E-05	-2.7277E-09	-9.4553E-08
p[2]	3.0871E-05	2.2314E-08	1.4382E-12	4.6588E-06
p[3]	-9.5930E+03	1.8470E+01	1.1606E-03	-1.2098E-05

(2) INTERVALOVÉ ODHADY PARAMETRU:

Parametr	Bodový odhad	Poloviční délka konfidenčního int. spočten z délky poloos	maxim
p[1]	2.8848E+00	+ - 1.2345E-04	+ - 1.2880E-04
p[2]	3.0871E-05	+ - 6.1980E-08	+ - 6.7255E-08
p[3]	-9.5930E+03	+ - 5.5669E+01	+ - 5.5669E+01

(3) KORELAČNÍ MATICE ODHADŮ:

	x[1,i]	x[2,i]	x[3,i]
x[1,i]	1.0000E+00	-9.9003E-01	-9.5844E-01
x[2,i]	-9.9003E-01	1.0000E+00	9.2157E-01
x[3,i]	-9.5844E-01	9.2157E-01	1.0000E+00

(4) STATISTICKÉ CHARAKTERISTIKY REGRESE:

Reziduální součet čtverců, RSC : 2.1607E-06
Regresní rabat, D^2 [%] : 1.0000E+02
Akaikeho informační kritérium, AIC : -4.1470E+02

(5) ANALÝZA KLASICKÝCH REZIDUÍ:

Bod i	Meřená hodnota yexp[i]	Predikovaná hodnota vyp[i]	Směrodatná odchylka s(yvyp[i])	Vychýlení hy[i]	Klasické reziduum e[i]
1	1.7967E+01	1.7967E+01	2.0544E-04	-4.1498E-10	4.9651E-04
2	1.8037E+01	1.8036E+01	1.5377E-04	-2.2196E-08	1.7151E-04
3	1.8099E+01	1.8099E+01	1.1938E-04	1.6956E-08	-6.9651E-05
4	1.8156E+01	1.8156E+01	9.9564E-05	-4.1023E-09	-2.2211E-04
5	1.8208E+01	1.8208E+01	9.0814E-05	5.3757E-09	-3.1413E-04
6	1.8257E+01	1.8257E+01	8.8781E-05	4.9827E-09	-3.4142E-04
7	1.8303E+01	1.8303E+01	8.9667E-05	2.4953E-08	-3.3063E-04
8	1.8347E+01	1.8347E+01	9.1096E-05	2.4900E-08	-2.8920E-04

9	1.8388E+01	1.8389E+01	9.1906E-05	-1.5378E-08	-2.2383E-04
10	1.8429E+01	1.8429E+01	9.1656E-05	-1.5173E-08	-1.3432E-04
11	1.8468E+01	1.8468E+01	9.0285E-05	-4.7697E-09	-4.9105E-05
12	1.8505E+01	1.8505E+01	8.7936E-05	-4.3626E-09	3.9984E-05
13	1.8542E+01	1.8542E+01	8.4866E-05	6.2259E-09	1.2853E-04
14	1.8578E+01	1.8578E+01	8.1419E-05	-3.3570E-08	2.0839E-04
15	1.8614E+01	1.8613E+01	7.8017E-05	-2.6580E-09	2.6905E-04
16	1.8648E+01	1.8648E+01	7.5158E-05	-1.2044E-08	3.1562E-04
17	1.8683E+01	1.8682E+01	7.3395E-05	-1.1279E-08	3.4224E-04
18	1.8716E+01	1.8716E+01	7.3268E-05	1.9821E-08	3.5392E-04
19	1.8750E+01	1.8749E+01	7.5207E-05	1.0607E-08	3.2799E-04
20	1.8783E+01	1.8782E+01	7.9430E-05	-1.8725E-08	2.8664E-04
21	1.8815E+01	1.8815E+01	8.5916E-05	1.2522E-08	2.1534E-04
22	1.8848E+01	1.8848E+01	9.4463E-05	3.4570E-09	1.0743E-04
23	1.8880E+01	1.8880E+01	1.0478E-04	2.4705E-08	-2.9212E-05
24	1.8912E+01	1.8912E+01	1.1659E-04	2.5818E-08	-2.0347E-04
25	1.8943E+01	1.8944E+01	1.2963E-04	-3.2896E-09	-4.0924E-04
26	1.8975E+01	1.8976E+01	1.4368E-04	-3.2361E-08	-6.4691E-04

Reziduální součet čtverců, RSC : 2.1607E-06
 Průměr absolutních hodnot reziduí, MA : 2.5101E-04
 Průměr relativních hodnot reziduí, MR : 1.3536E-03
 Odhad reziduálního rozptylu, $s^2(e)$: 9.3942E-08
 Odhad reziduální směrodatné odchylky, $s(e)$: 3.0650E-04
 Odhad šikmosti reziduí, $g1(e)$: 1.0886E+00
 Odhad špičatosti reziduí, $g2(e)$: 4.3222E+01

(6) INDIKACE VLIVNÝCH BODU:

Bod	Jackknife reziduum	Cookova vzdálenost	Diagonální prvky	Normalizovaná vzdálenost	Věrohodnostní vzdálenost
i	eJ[i]	D[i]	H[i,i]	FDA	LDA
1	4.9080E-01	1.2957E+00	4.4927E-01	1.1919E-01	1.2022E-01
2	2.8949E-01	4.6916E-02	2.5169E-01	1.4711E-02	9.1465E-03
3	-1.8124E-01	3.6291E-03	1.5171E-01	1.8792E-03	3.8964E-03
4	-3.2646E-01	2.3087E-02	1.0552E-01	1.4779E-02	8.6434E-03
5	-3.8870E-01	3.6940E-02	8.7790E-02	2.5578E-02	1.4957E-02
6	-4.0533E-01	4.1350E-02	8.3903E-02	2.9123E-02	1.7818E-02
7	-3.9884E-01	3.9703E-02	8.5586E-02	2.7758E-02	1.6644E-02
8	-3.7286E-01	3.1542E-02	8.8337E-02	2.1788E-02	1.2402E-02
9	-3.2770E-01	1.9298E-02	8.9914E-02	1.3238E-02	7.7733E-03
10	-2.5313E-01	6.9044E-03	8.9425E-02	4.7466E-03	4.5369E-03
11	-1.5116E-01	8.9020E-04	8.6771E-02	6.1916E-04	3.4264E-03
12	1.4269E-01	5.5446E-04	8.2314E-02	3.9322E-04	3.3730E-03
13	2.5137E-01	5.2711E-03	7.6667E-02	3.8311E-03	4.1547E-03
14	3.1913E-01	1.2587E-02	7.0564E-02	9.3929E-03	5.8765E-03
15	3.6222E-01	1.9027E-02	6.4791E-02	1.4555E-02	8.2305E-03
16	3.9211E-01	2.4060E-02	6.0130E-02	1.8774E-02	1.1006E-02
17	4.0821E-01	2.6818E-02	5.7341E-02	2.1176E-02	1.3092E-02
18	4.1508E-01	2.8569E-02	5.7143E-02	2.2577E-02	1.4365E-02
19	3.9967E-01	2.6021E-02	6.0208E-02	2.0298E-02	1.2160E-02
20	3.7378E-01	2.2500E-02	6.7160E-02	1.7038E-02	9.6728E-03
21	3.2434E-01	1.5227E-02	7.8576E-02	1.0976E-02	6.6438E-03
22	2.3013E-01	4.7489E-03	9.4986E-02	3.1858E-03	4.1231E-03
23	-1.1520E-01	4.5376E-04	1.1688E-01	2.7600E-04	3.3670E-03
24	-3.1240E-01	2.9058E-02	1.4470E-01	1.5551E-02	9.2539E-03
25	-4.4409E-01	1.5765E-01	1.7887E-01	7.1671E-02	5.0366E-02

26 -5.5883E-01 5.3603E-01 2.1976E-01 1.9866E-01 2.7182E-01

(7) MAPA CITLIVOSTNÍ FUNKCE:

Parametr	Relativní změna CjR(-5%) [%]	Souhrná citlivost Cj	Relativní změna CjR(+5%) [%]
j			
1	-2.5322E+01	3.4355E+02	3.3909E+01
2	-2.5381E+01	6.8047E+08	3.4014E+01
3	-2.5191E+01	2.4203E-10	3.3674E+01

Závěr : Jako neoptimálnější počáteční odhady parametrů byl určeny: $p_1=p_3=1$, $p_2=0,01$.
Na základě těchto parametrů (nejnižší MEP, AIC) byly určeny :

$$\beta_0 = 2.88$$

$$\beta_1 = 3.09 \cdot 10^{-5}$$

$$\beta_2 = -9.6 \cdot 10^3.$$

Graf regresní křivky viz příloha.

Název souboru: PRIKLAD1
Adresář: E:\Pom\nELIN
Šablona: D:\Program Files\Microsoft Office\Sablony\Normal.dot
Název: Příklad 1 : Jednoduchý lineární systém
Předmět:
Autor: OI
Klíčová slova:
Komentáře:
Datum vytvoření: 15.05.96 13:02
Číslo revize: 14
Poslední uložení: 04.10.96 12:46
Uložil: OI
Celková doba úprav: 187 min.
Poslední tisk: 15.09.00 08:38
Jako poslední úplný tisk
Počet stránek: 5
Počet slov: 1 932 (přibližně)
Počet znaků: 11 013 (přibližně)