

**Univerzita Pardubice**

**Fakulta chemicko – technologická**

**Katedra analytické chemie**

**Licenční studium chemometrie**

**Statistické zpracování dat**

**Tvorba nelineárních regresních  
modelů v analýze dat**

**Zdravotní ústav se sídlem v Ostravě  
Odbor hygienických laboratoří Karviná**

**V Karviné dne 20.8.2006**

**Ing. Miluše Galuszková**

*Předmět:*

## **3.3 Tvorba nelineárních regresních modelů v analýze dat**

*Přednášející: Prof. RNDr. Milan Meloun, DrSc a Prof. Ing. Jiří Militký, C.Sc.*

### Obsah

#### **Úloha 1. Vhodnost navržených regresních modelů a odhady parametrů při atomizaci molybdenu**

Zadání a vstupní data	3
Nelineární regresní model 1	3
Nelineární regresní model 2	8
Porovnání statistických charakteristik regrese	11
Závěr	11

#### **Úloha 2. Model časové závislosti růstu plodiny (Růstové křivky)**

Zadání a vstupní data	12
Model 1a (Schnuteho model)	12
Model 2a (Mitscherlichův model)	13
Model 3a (Gompertzův model)	14
Model 4a (Logistický model)	15
Porovnání statistických charakteristik regrese	16
Závěr	16

#### **Úloha 3. Odhad parametrů regresního modelu**

Zadání a vstupní data	17
Nelineární regresní model	17
Odhady parametrů	19
Závěr	21

# Úloha 1. Vhodnost navržených regresních modelů a odhady parametrů při atomizaci molybdenu

## Zadání

Mineralizací zeminy lučavkou královskou jsme získali vzorek, který byl podroben elektrotermické atomizaci rozmezí atomizačních teplot od 2660 do 2880 °C. Na výstupu AAS byl sledován signál. Rozhodněte, který z uvedených regresních modelů lépe popisuje závislost výstupního signálu na teplotě elektrotermické atomizace. Stanovte 95%intervalové odhady neznámých parametrů.

## Data:

x.....teplota atomizace °C

y...výstupní signál z AAS

	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11
x	2880	2840	2820	2800	2780	2760	2740	2720	2700	2680	2660
y <sub>1</sub>	0,1271	0,1094	0,0980	0,0895	0,0805	0,0708	0,0632	0,0578	0,0521	0,0482	0,0448

## Řešení:

Program: **ADSTAT 1.25**  
Modul: **Nelineární regrese**

### Nelineární regresní model 1

$$y = \exp(\beta_1 + \beta_2/x + \beta_3 \ln x)$$

### Nelineární regresní model 2

$$y = \beta_1 + \beta_2 x + \beta_3/x^2$$

### 1. Nelineární regresní model 1

Program: ADSTAT  
Modul: NELINEÁRNÍ REGRESE  
Název: Molybden

V S T U P

PODMÍNKY:

Hladina významnosti, alfa	0.050
Počet bodů, n	11
Počet parametrů, m	3
Počet nezávislých proměnných	1
Minimální změna RSC [%]	1.000000E-05
Minimální změna parametrů [%]	1.000000E-05
Maximální počet iterací	1500
Kvantil Studentova rozdělení t(1-alfa/2,n-m)	2.306
Kvantil Fisher-Snedecorova rozdělení F(1-alfa,n,n-m):	3.313
Kvantil Chi <sup>2</sup> rozdělení Chi <sup>2</sup> (1-alfa,m)	7.815
Jméno výstupního souboru	MOLYBD1A.TXT

## REGRESNÍ FUNKCE A POČÁTEČNÍ ODHADY PARAMETRŮ:

Název: **Molybden\_1a**

Regresní model:

$$\text{Exp} ( p_1+(p_2/x)+(p_3*\ln(x)) )$$

## POČÁTEČNÍ ODHADY PARAMETRŮ:

p[ 1] 1.000000E+00

p[ 2] 1.000000E+00

p[ 3] 1.000000E+00

## BODOVÉ ODHADY PARAMETRŮ:

Parametr	Bodový odhad	Směrodatná odchylka	Absolutní vychýlení	Relativní vychýlení [%]
<b>p[ 1]</b>	8.4537E+01	4.7648E-04	-1.6289E-04	-1.9268E-04
<b>p[ 2]</b>	-6.1235E+04	1.7004E-07	-5.8111E-08	9.4900E-11
<b>p[ 3]</b>	-8.2009E+00	3.7825E-03	-1.2931E-03	1.5768E-02

## STATISTICKÉ CHARAKTERISTIKY REGRESE:

Reziduální součet čtverců, RSC	2.5375E-05
Regresní rabat, D <sup>2</sup> [%]	9.9650E+01
Akaikeho informační kritérium, AIC	-1.3678E+02

## ANALÝZA KLASICKÝCH REZIDUÍ:

Reziduální součet čtverců, RSC	2.5375E-05
Průměr absolutních hodnot reziduí, MA	1.3673E-03
Průměr relativních hodnot reziduí, MR	1.9811E+00
Odhad reziduálního rozptylu, s <sup>2</sup> (e)	3.1719E-06
Odhad reziduální směrodatné odchylky, s(e)	1.7810E-03
Odhad šikmosti reziduí, g1(e)	1.2478E-01
Odhad špičatosti reziduí, g2(e)	1.6959E+00
Mean error of prediction 1	1.0836E-03

## UPŘESNĚNÍ POČÁTEČNÍCH ODHADŮ PARAMETRŮ:

Název: **Molybden\_1b**

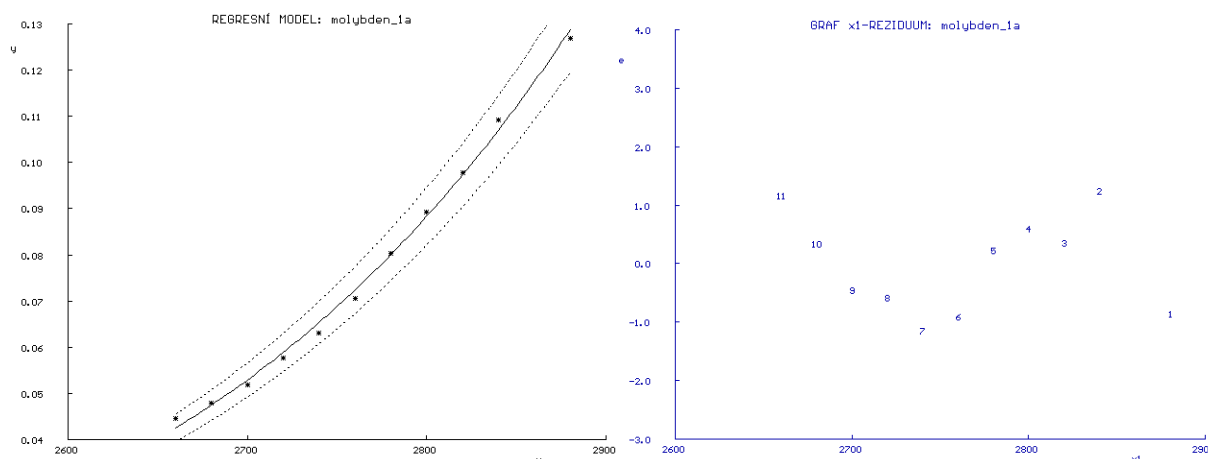
Počáteční odhady parametrů:

p[ 1] 8.45E+01

p[ 2] -6.12E+04

p[ 3] -8.2E+00

## GRAFICKÉ POSOUZENÍ VHODNOSTI MODELU



Regresní model přijatelně popisuje závislost velikosti výstupního signálu na teplotě atomizace.

### BODOVÉ ODHADY PARAMETRŮ:

Parametr	Bodový odhad	Směrodatná odchylka	Absolutní vychýlení	Relativní vychýlení [%]
<b>p[ 1 ]</b>	8.4465E+01	4.7649E-04	-1.6289E-04	-1.9285E-04
<b>p[ 2 ]</b>	-6.1200E+04	1.7004E-07	-5.8114E-08	9.4957E-11
<b>p[ 3 ]</b>	-8.1934E+00	3.7826E-03	-1.2932E-03	1.5783E-02

Regresní model 1  $y = \exp(\beta_1 + \beta_2/x + \beta_3 \ln x)$ :

$$y = \exp(8.4465E+01(4.7649E-04) + -6.1200E+04(1.7004E-07)/x + -8.1934E+00(3.7826E-03).\ln x)$$

### INTERVALOVÉ ODHADY PARAMETRŮ:

Parametr	Bodový odhad	Poloviční délka konfidenčního intervalu spočtená z délky:	
		poloos	maxim
<b>p[ 1 ]</b>	8.4465E+01	+ 1.6642E-03	+ 1.6642E-03
<b>p[ 2 ]</b>	-6.1200E+04	+ 5.9372E-07	+ 5.9390E-07
<b>p[ 3 ]</b>	-8.1934E+00	+ 1.3211E-02	+ 1.3211E-02

Interval spolehlivosti parametru p[ 1], p[ 2], p[ 3] neobsahuje 0. Parametry jsou významné.

### KORELAČNÍ MATICE ODHADŮ:

	x[1,i]	x[2,i]	x[3,i]
x[1,i]	1.0000E+00	9.9975E-01	1.0000E+00
x[2,i]	9.9975E-01	1.0000E+00	9.9969E-01
x[3,i]	1.0000E+00	9.9969E-01	1.0000E+00

Korelační koeficienty jsou >0,9, parametry nejsou snadno stanovitelné.

## STATISTICKÉ CHARAKTERISTIKY REGRESE:

Reziduální součet čtverců, RSC	2.5376E-05
Regresní rabat, D <sup>2</sup> [%]	9.9650E+01
Akaikeho informační kritérium, AIC	-1.3678E+02

99,65% bodů vyhovuje navrženému modelu.

## ANALÝZA KLASICKÝCH REZIDUÍ:

Reziduální součet čtverců, RSC	2.5376E-05
Průměr absolutních hodnot reziduí, MA	1.3672E-03
Průměr relativních hodnot reziduí, MR	1.9808E+00
Odhad reziduálního rozptylu, s <sup>2</sup> (e)	3.1720E-06
Odhad reziduální směrodatné odchylky, s(e)	1.7810E-03
Odhad šikmosti reziduí, g1(e)	1.2654E-01
Odhad špičatosti reziduí, g2(e)	1.6979E+00
Mean error of prediction 1	1.0319E-03

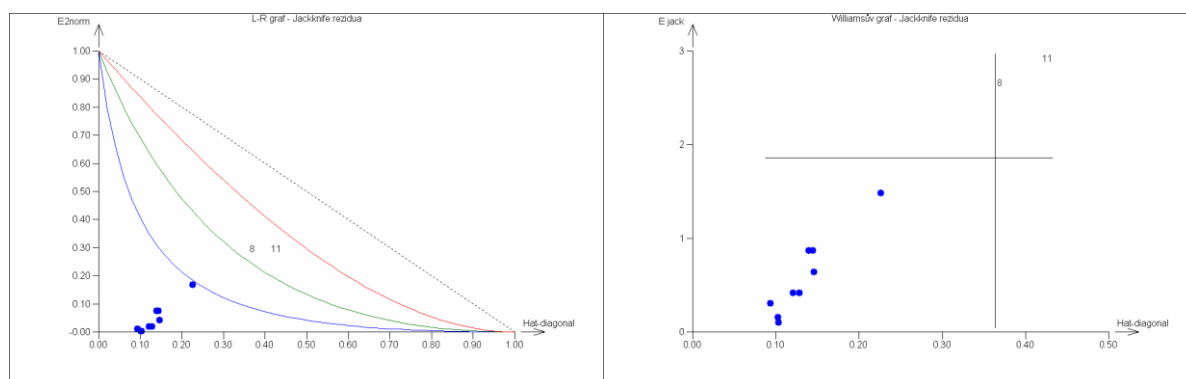
## INDIKACE VLIVNÝCH BODŮ

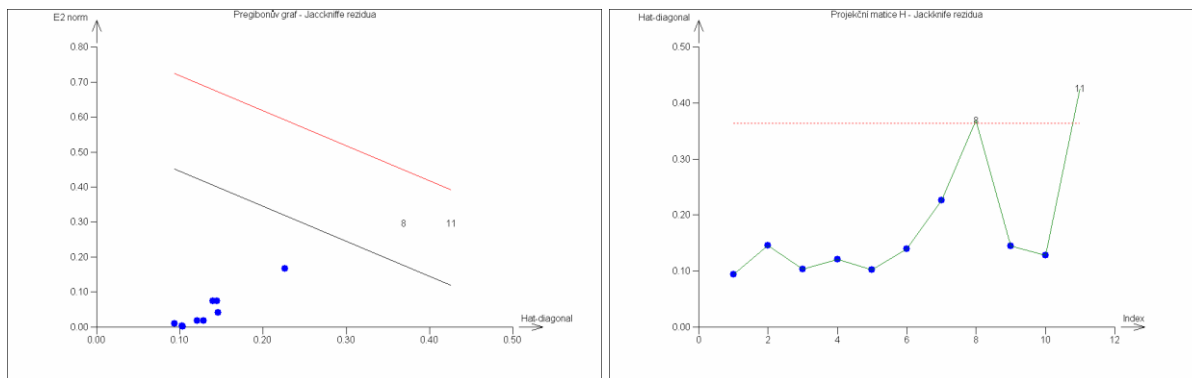
Bod	Jackknife reziduum eJ[i]	Cookova vzdálenost D[i]	Diagonální prvky H[i,i]	Normalizovaná vzdálenost FDA	Věrohodnostní vzdálenost LDA
1	-4.2512E-01	8.8824E-02	4.8936E+00	3.3923E+02	8.9183E+00
2	7.7909E-01	3.5999E-01	3.3705E+00	2.8599E+02	8.5925E+00
3	2.6645E-01	4.2647E-02	2.7828E+00	9.3668E+00	2.7651E+00
4	5.2184E-01	1.9165E-01	2.2894E+00	1.1562E+01	3.0743E+00
5	2.4536E-01	4.9519E-02	1.8767E+00	6.1973E-01	3.9174E-01
6	-1.1187E+00	1.6707E+00	1.5326E+00	2.7688E+00	1.3126E+00
7	-1.7359E+00	1.0180E+01	1.2469E+00	7.8575E-01	4.7317E-01
8	-2.3986E+00	1.1906E+03	1.0104E+00	2.9763E-04	2.1720E-03
9	-1.1639E+00	1.9124E+00	8.1559E-01	4.6555E-02	3.4817E-02
10	6.0884E-01	2.5532E-01	6.5562E-01	7.5167E-02	5.4966E-02
11	2.2140E+00	1.2131E+00	5.2483E-01	1.2816E+00	7.3625E-01

$eJ[i]^2 < 10$ , není indikován vlivný bod.

## GRAFICKÁ ANALÝZA REZIDUÍ

Program QC expert 2.5





Byly odhaleny 2 vlivné a/nebo body odlehlé 8,11. Vzhledem k informaci, kterou obsahují, nebudou ze souboru dat odstraněny.

### STATISTICKÁ ANALÝZA REZIDUÍ:

Program QC expert 2.5

Počet vybočujících bodů : 0

Rezidua vykazují homoskedasticitu.

Rezidua mají normální rozdělení.

Waldův test autokorelace: Autokorelace je nevýznamná.

### MAPA CITLIVOSTNÍ FUNKCE:

Parametr	Relativní změna CjR(-5%) [%]	Souhrnná citlivost Cj	Relativní změna CjR(+5%) [%]
1	2.7375E+01	6.5071E-03	-2.1419E+01
2	2.7551E+01	8.2871E-10	-2.1525E+01
3	2.7353E+01	4.1008E-01	-2.1406E+01

Pokud se parametr změní o  $\pm 5\%$ , nastane největší změna u parametru P2. Parametr P2 je dobře podmíněn v modelu.

## 2. Nelineární regresní model 2

Program: ADSTAT  
Modul: NELINEÁRNÍ REGRESE  
Název: Molybden

### VSTUP

#### PODMÍNKY:

Hladina významnosti, alfa	0.050
Počet bodů, n	11
Počet parametrů, m	3
Počet nezávislých proměnných	1
Minimální změna RSC [%]	1.000000E-05
Minimální změna parametrů [%]	1.000000E-05
Maximální počet iterací	1500
Kvantil Studentova rozdělení $t(1-\alpha/2, n-m)$	2.306
Kvantil Fisher-Snedecorova rozdělení $F(1-\alpha, n, n-m)$	3.313
Kvantil $\chi^2$ rozdělení $\chi^2(1-\alpha, m)$	7.815

Jméno výstupního souboru MOLYBD2.TXT

#### REGRESNÍ FUNKCE A POČÁTEČNÍ ODHADY PARAMETRŮ:

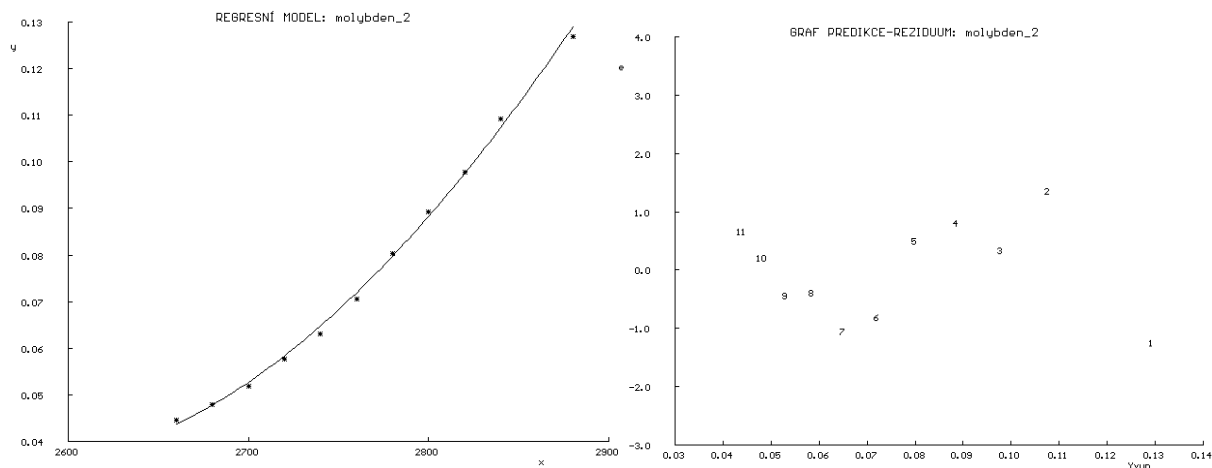
Název: Molybden\_2

Regresní model:  
 $p_1 + (p_2 \cdot x) + (p_3 / (x \cdot x))$

#### Počáteční odhady parametrů:

$p[1]$	8.000000E+01
$p[2]$	-6.000000E+04
$p[3]$	-8.000000E+00

#### GRAFICKÉ POSOUZENÍ VHODNOSTI MODELU



Regresní model popisuje dostatečně závislost velikosti výstupního signálu na teplotě atomizace.



BODOVÉ ODHADY PARAMETRŮ:

Parametr	Bodový odhad	Směrodatná odchylka	Absolutní vychýlení	Relativní vychýlení [%]
p[ 1]	-7.7427E+00	4.6508E-03	1.6718E+06	-2.1592E+07
p[ 2]	2.0124E-03	1.2848E+01	4.6199E+09	2.2957E+14
p[ 3]	1.7218E+07	6.1148E-10	2.1930E-01	1.2737E-06

Regresní model 2  $y = \beta_1 + \beta_2 x + \beta_3 / x^2$

$$y = -7.7427E+00(4.6508E-03) + 2.0124E-03(1.2848E+01)*x + 1.7218E+07(6.1148E-10)/x^2$$

INTERVALOVÉ ODHADY PARAMETRŮ:

Parametr	Bodový odhad	Poloviční délka konfidenčního intervalu spočtená z délky:	
		poloos	maxim
p[ 1]	-7.7427E+00	+ 1.6239E-02	+ 1.6244E-02
p[ 2]	2.0124E-03	+ 4.4875E+01	+ 4.4875E+01
p[ 3]	1.7218E+07	+ 2.1302E-09	+ 2.1357E-09

Interval spolehlivosti parametru p[ 1], p[ 3] neobsahuje 0. Parametry jsou významné.  
Interval spolehlivosti parametru p[ 2] obsahuje 0. Parametr je nevýznamný.

KORELAČNÍ MATICE ODHADŮ:

	x[1,i]	x[2,i]	x[3,i]
x[1,i]	1.0000E+00	9.9971E-01	9.9886E-01
x[2,i]	9.9971E-01	1.0000E+00	9.9743E-01
x[3,i]	9.9886E-01	9.9743E-01	1.0000E+00

Korelační koeficienty jsou >0,9, parametry nejsou snadno stanovitelné.

STATISTICKÉ CHARAKTERISTIKY REGRESE:

Reziduální součet čtverců, RSC	1.5731E-05
Regresní rabat, D <sup>2</sup> [%]	9.9783E+01
Akaikeho informační kritérium, AIC	-1.4204E+02

99,78% bodů vyhovuje navrženému modelu.

## ANALÝZA KLASICKÝCH REZIDUÍ:

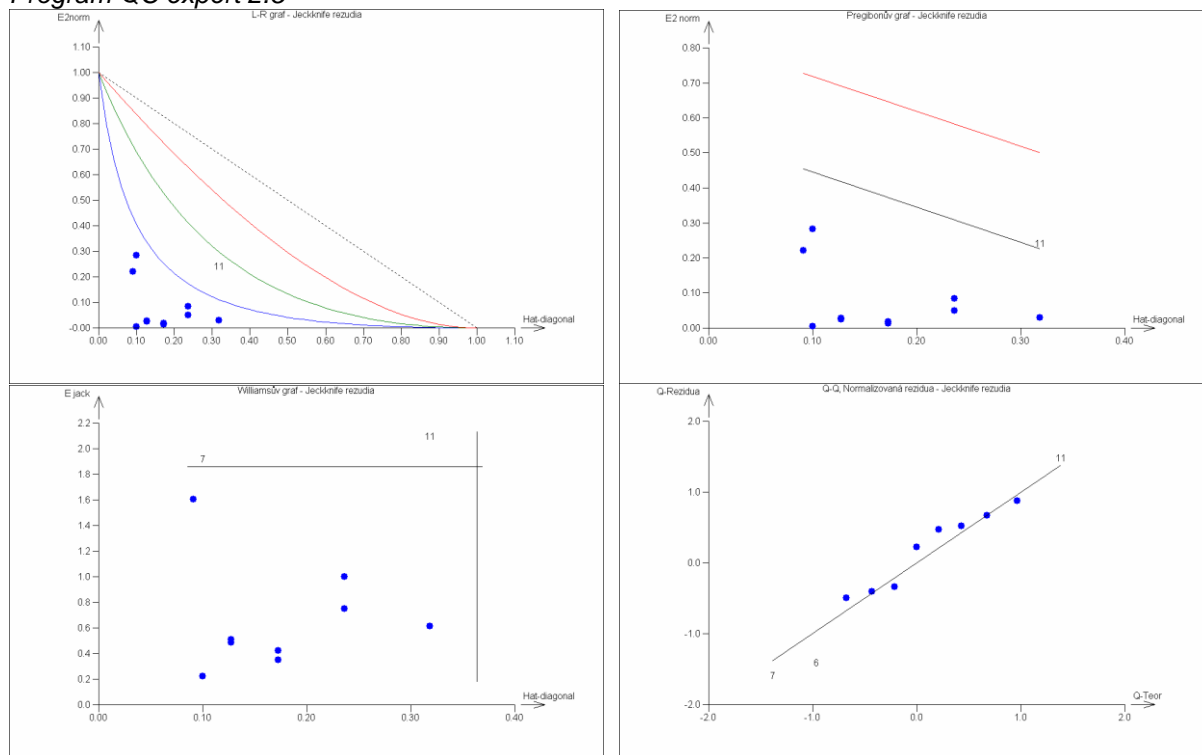
Reziduální součet čtverců, RSC	1.5731E-05
Průměr absolutních hodnot reziduí, MA	1.0639E-03
Průměr relativních hodnot reziduí, MR	1.4064E+00
Odhad reziduálního rozptylu, $s^2(e)$	1.9664E-06
Odhad reziduální směrodatné odchylky, $s(e)$	1.4023E-03
Odhad šikmosti reziduí, $g_1(e)$	3.3401E-02
Odhad špičatosti reziduí, $g_2(e)$	1.8540E+00
Mean error of prediction 1	3.3157E-36

## INDIKACE VLIVNÝCH BODŮ

Bod	Jackknife reziduum $eJ[i]$	Cookova vzdálenost $D[i]$	Diagonální prvky $H[i,i]$	Normalizovaná vzdálenost FDA	Věrohodnostní vzdálenost LDA
1	-4.7138E-08	8.4647E-16	6.9633E+14	1.4026E+60	2.5219E+02
2	5.2457E-08	1.0483E-15	6.7713E+14	1.5532E+60	2.5238E+02
3	1.3107E-08	6.5441E-17	6.6762E+14	9.1631E+58	2.4719E+02
4	3.1607E-08	3.8058E-16	6.5819E+14	5.0339E+59	2.5031E+02
5	1.9672E-08	1.4742E-16	6.4882E+14	1.8412E+59	2.4847E+02
6	-3.1791E-08	3.8501E-16	6.3952E+14	4.5389E+59	2.5012E+02
7	-4.1815E-08	6.6609E-16	6.3028E+14	7.4086E+59	2.5102E+02
8	-1.5402E-08	9.0376E-17	6.2111E+14	9.4799E+58	2.4725E+02
9	-1.7047E-08	1.1070E-16	6.1201E+14	1.0946E+59	2.4751E+02
10	9.0581E-09	3.1257E-17	6.0298E+14	2.9122E+58	2.4508E+02
11	2.7314E-08	2.8421E-16	5.9401E+14	2.4940E+59	2.4902E+02

$eJ[i]^2 < 10$ , není indikován vlivný bod.

## GRAFICKÁ ANALÝZA REZIDUÍ Program QC expert 2.5



Byl odhalen vlivný bod 11. Vzhledem k informaci, kterou obsahuje, nebude ze souboru dat odstraněn.

## STATISTICKÁ ANALÝZA REZIDUÍ:

Program QC expert 2.5

Počet vybočujících bodů : 0  
Rezidua vykazují homoskedasticitu.  
Rezidua mají normální rozdělení.  
Waldův test autokorelace: Autokorelace je nevýznamná.

### MAPA CITLIVOSTNÍ FUNKCE:

Parametr j	Relativní změna CjR(-5%) [%]	Souhrnná citlivost Cj	Relativní změna CjR(+5%) [%]
1	-1.2075E-08	1.0000E+00	1.0925E-08
2	-1.3264E-08	7.6320E+06	-7.3048E-09
3	9.1041E-09	1.7287E-14	-1.5485E-08

Pokud se parametr změní o  $\pm 5\%$  nastane největší změna u parametru P3.

### Porovnání statistických charakteristik regrese

Kritérium	Model 1	Model 2
Reziduální součet čtverců, RSC	2.5375E-05	1.5731E-05
Regresní rabat, D <sup>2</sup> [%]	9.9650E+01	9.9783E+01
Akaikeho inform. kritérium, AIC	-1.3678E+02	-1.4204E+02
Mean error of prediction 1, MEP	1.0319E-03	3.3157E-36

RSC, D<sup>2</sup> [%], AIC se u modelů znatelně neliší. Největší je řádový rozdíl kritéria MEP. Nejmenší hodnotu MEP má regresní model 2.

### FYZIKÁLNÍ SMYSL:

Nalezený regresní model závislosti velikosti výstupního signálu AAS na atomizační teplotě molybdenu lze použít pouze v rozmezí teplot elektrotermické atomizace od 2650 °C do 2850 °C. Pod 2600 °C nelze molybden a nad 2850 °C dochází k rychlé likvidaci grafitové květy. Výsledky se vztahují pouze k danému vzorku, prvku a přístroji.

### Závěr:

Byly stanoveny 95% intervalové odhady neznámých parametrů:

Parametr	Bodový odhad	Směrodatná odchylka
p[ 1]	-7.7427E+00	4.6508E-03
p[ 2]	2.0124E-03	1.2848E+01
p[ 3]	1.7218E+07	6.1148E-10

Na základě porovnání statistických charakteristik regrese byl zvolen model 2, který nejlépe popisuje závislost výstupního signálu na teplotě elektrotermické atomizace.

Nelineární regresní model 2 ( $y = \beta_1 + \beta_2 x + \beta_3/x^2$ ):

$$y = -7.7427E+00(4.6508E-03) + 2.0124E-03(1.2848E+01)*x + 1.7218E+07(6.1148E-10)/x^2$$

## Úloha 2. Model časové závislosti růstu plodiny (Růstové křivky)

### Zadání

V časovém období 1-10 měsíců byl sledován růst popínavé rostliny (cm). Na základě analýzy regresního tripletu rozhodněte, který z růstových modelů (Schnuteho model, Mitscherlichův model, Gompertzův model a Logistický model) nejlépe odpovídá naměřeným datům.

### Data:

x.....časové období (měsíce)

y.....nárůst popínavé rostliny (cm)

x	1	2	3	4	5	6	7	8	9
y	40	49	63	78	100	121	144	154	160

### Řešení:

Program: **ADSTAT 1.25**  
Modul: **RŮSTOVÉ KŘIVKY**

### 1. Nelineární regresní model 1a (Schnuteho model)

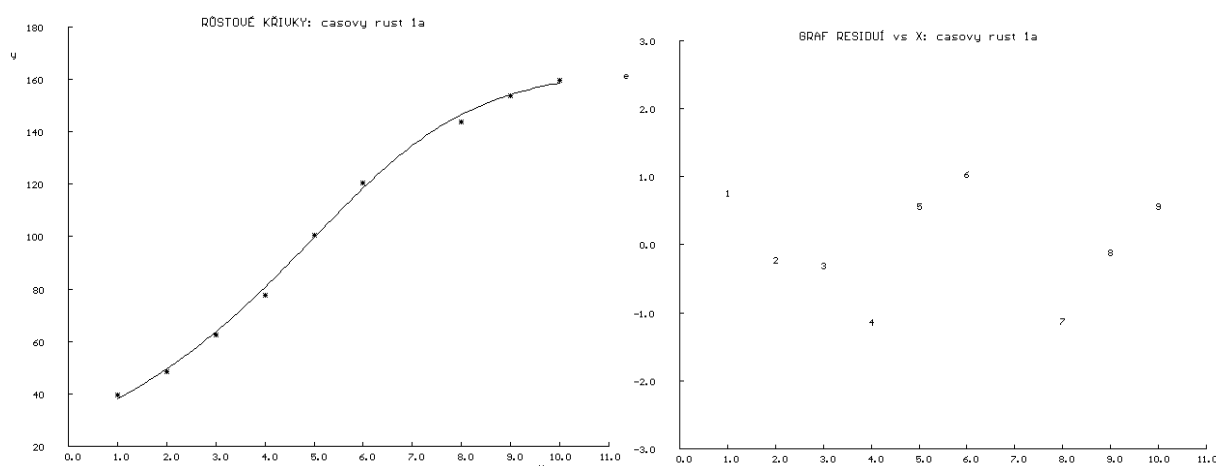
Program: ADSTAT  
Modul: RŮSTOVÉ KŘIVKY  
Název: casovy rust 1a

MODELOVÁ FUNKCE:

Schnuteho model:

$$Y := p[1]*[1+p[4]*\exp(-p[3]*(x-p[2]))]^{(-1/p[4])} \quad \text{pro } p[4]>1$$

GRAFICKÉ POSOUZENÍ VHODNOSTI MODELU



Schnuteho model dostatečně popisuje závislost délky rostliny na době růstu.

### BODOVÉ ODHADY PARAMETRŮ:

Parametr	Bodový odhad	Směrodatná odchylka	Absolutní vychýlení	Relativní vychýlení [%]
p[ 1]	1.6350E+02	5.1100E+00	8.6664E-01	5.3007E-01
p[ 2]	4.9975E+00	3.4148E-01	-6.0485E-03	-1.2103E-01
p[ 3]	6.9175E-01	1.8128E-01	2.5777E-02	3.7263E+00
p[ 4]	2.5639E+00	9.8241E-01	1.2390E-01	4.8326E+00

### STATISTICKÉ CHARAKTERISTIKY REGRESE:

Průměr absolutních hodnot reziduí, MA	1.5424E+00
Reziduální součet čtverců, RSC	2.8479E+01
Regresní rabat, D^2 [%]	9.9832E+01

99,83% bodů vyhovuje navrženému modelu.

## 2. Nelineární regresní model 2a (Mitscherlichův model)

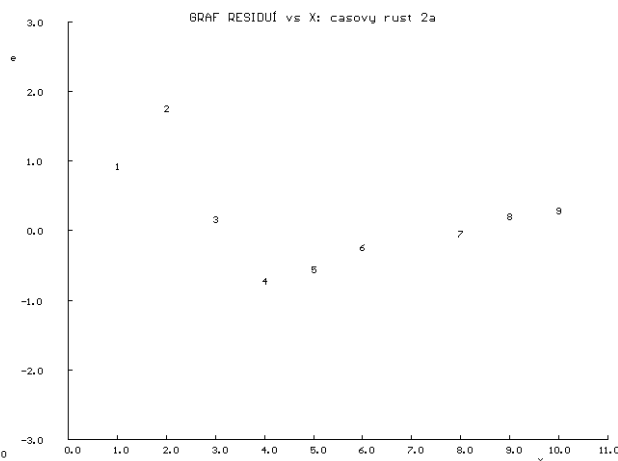
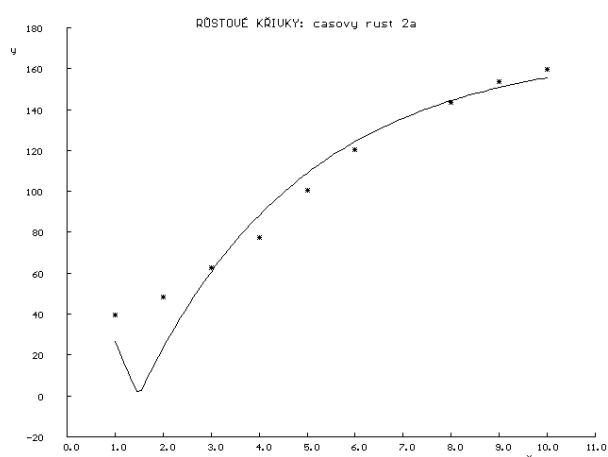
Program: ADSTAT  
 Modul: RŮSTOVÉ KŘIVKY  
 Název: casovy rust 2a

MODELOVÁ FUNKCE:

**Mitscherlichův model:**

$$y := p[1] * [1 + p[4] * \exp(-p[3] * (x - p[2]))]^{-1/p[4]} \quad \text{pro } p[4] = -1$$

GRAFICKÉ POSOUZENÍ VHODNOSTI MODELU



Mitscherlichův model není vhodný pro vyjádření závislosti délky popínavé rostliny na době růstu.

### BODOVÉ ODHADY PARAMETRŮ:

Parametr	Bodový odhad	Směrodatná odchylna	Absolutní vychýlení	Relativní vychýlení [%]
<b>p[ 1]</b>	1.6958E+02	1.6847E+01	3.3307E+00	1.9642E+00
<b>p[ 2]</b>	1.4946E+00	1.6972E-01	-1.5318E-02	-1.0249E+00
<b>p[ 3]</b>	2.9350E-01	6.9828E-02	2.7764E-03	9.4596E-01

### STATISTICKÉ CHARAKTERISTIKY REGRESE:

Průměr absolutních hodnot reziduí, MA	7.9119E+00
Reziduální součet čtverců, RSC	1.0552E+03
Regresní rabat, D <sup>2</sup> [%]	9.3770E+01

93,77% bodů vyhovuje navrženému modelu.

### 3. Nelineární regresní model 3a (Gompertzův model)

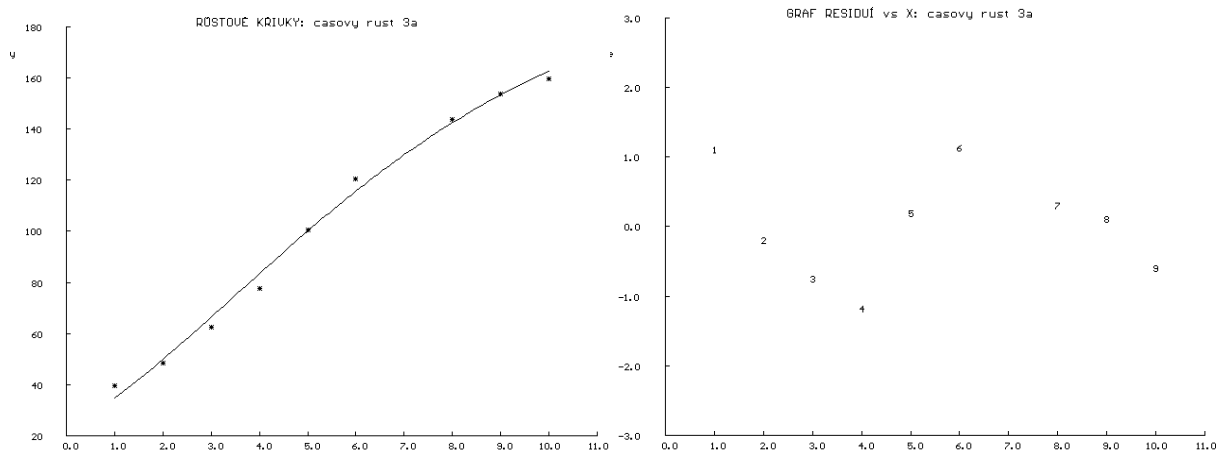
Program: ADSTAT  
Modul: RŮSTOVÉ KŘIVKY  
Název: casovy rust 3a

MODELOVÁ FUNKCE:

**Gompertzův model:**

$$y := p[1] * \exp(-\exp(-p[2] * (x - p[3])))$$

GRAFICKÉ POSOUZENÍ VHODNOSTI MODELU



Gompertzův model částečně dobře popisuje závislost délky rostliny na době růstu.

BODOVÉ ODHADY PARAMETRŮ:

Parametr	Bodový odhad	Směrodatná odchylka	Absolutní vychýlení	Relativní vychýlení [%]
<b>p[ 1]</b>	2.0527E+02	1.6711E+01	2.8302E+00	1.3788E+00
<b>p[ 2]</b>	2.2592E-01	3.1368E-02	5.3561E-04	2.3708E-01
<b>p[ 3]</b>	3.5352E+00	4.1735E-01	7.9142E-02	2.2387E+00

STATISTICKÉ CHARAKTERISTIKY REGRESE:

Průměr absolutních hodnot reziduí, MA	2.8667E+00
Reziduální součet čtverců, RSC	1.0688E+02
Regresní rabat, D^2 [%]	9.9369E+01

99,36% bodů vyhovuje navrženému modelu.

#### 4. Nelineární regresní model 4a (Logistický model)

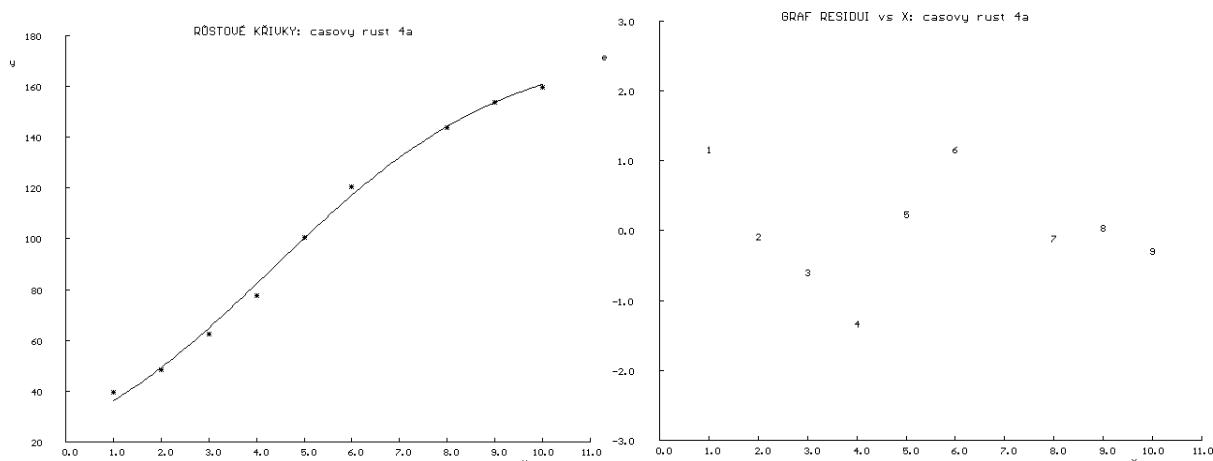
Program: ADSTAT  
 Modul: RŮSTOVÉ KŘIVKY  
 Název: casovy rust 4a

MODELOVÁ FUNKCE:

**Logistický model:**

$$y := p[1] * [1 + p[4] * \exp(-p[3] * (x - p[2]))]^{-1/p[4]} \quad \text{pro } p[4]=1$$

GRAFICKÉ POSOUZENÍ VHODNOSTI MODELU



Logistický model dobře popisuje závislost délky rostliny na době růstu.

### BODOVÉ ODHADY PARAMETRŮ:

Parametr	Bodový odhad	Směrodatná odchylka	Absolutní vychýlení	Relativní vychýlení [%]
p[ 1]	1.7716E+02	5.5890E+00	4.7903E-01	2.7040E-01
p[ 2]	4.3502E+00	2.1011E-01	1.7821E-02	4.0966E-01
p[ 3]	4.0595E-01	2.7305E-02	5.4066E-04	1.3318E-01

### STATISTICKÉ CHARAKTERISTIKY REGRESE:

Průměr absolutních hodnot reziduí, MA	1.8117E+00
Reziduální součet čtverců, RSC	5.2889E+01
Regresní rabat, D <sup>2</sup> [%]	9.9688E+01

99,67% bodů vyhovuje navrženému modelu.

### Porovnání statistických charakteristik regrese

Kritérium	Schnuteho model	Mitscherlichův model	Gompertzův model	Logistický model
Průměr absolutních hodnot reziduí, MA	<b>1.5424E+00</b>	7.9119E+00	2.8667E+00	1.8117E+00
Reziduální součet čtverců, RSC	<b>2.8479E+01</b>	1.0552E+03	1.0688E+02	5.2889E+01
Regresní rabat, D <sup>2</sup> [%]	<b>9.9832E+01</b>	9.3770E+01	9.9369E+01	9.9688E+01

Nejnižší hodnota MA, RSC a nejvyšší hodnota D<sup>2</sup> [%] je pro model 1 (Schnuteho model). Model Schnuteho je lepší než Mitscherlichův model, Gompertzův model a Logistický model.

### Závěr:

Na základě analýzy regresního tripletu bylo rozhodnuto, že Schnuteho model  $Y := p[1] * [1 + p[4] * \exp(-p[3] * (x - p[2]))]^{-1/p[4]}$  pro  $p[4] > 1$  nejlépe odpovídá naměřeným datům.

Byly nalezeny odhady parametrů:

Parametr	Bodový odhad	Směrodatná odchylka
p[ 1]	1.6350E+02	5.1100E+00
p[ 2]	4.9975E+00	3.4148E-01
p[ 3]	6.9175E-01	1.8128E-01
p[ 4]	2.5639E+00	9.8241E-01

Schnuteho model  $y := p[1] * [1 + p[4] * \exp(-p[3] * (x - p[2]))]^{-1/p[4]}$  pro  $p[4] > 1$

Pro závislost délky popínavé rostliny na době růstu lze Schnuteho model vyjádřit:

$$y = 163,50 (5.11) * [1 + 2.564(0,982) * \exp(-0,6918(0,1813) * (x - 4.997(0,3415)))]^{-1/2.564(0,982)}$$



### Úloha 3. Odhad parametrů regresního modelu

#### Zadání

V publikaci byly pro regresní model  $y = \beta_1 + \beta_2/(x + \beta_3x)$  uvedeny odhady parametrů:

$\beta_1$	0,56
$\beta_2$	17,25
$\beta_3$	0,32

Vyšetřete regresní triplet pomocí programu QC expert a nalezněte odhady parametrů. Vyčíslíte regresní model  $y = \beta_1 + \beta_2/(x + \beta_3x)$ . Jsou parametry nalezené dostatečně spolehlivé?

#### Data:

x(A)	25	50	75	100	125	150	175	200
y(B)	2,477	1,575	1,250	1,083	0,981	0,912	0,863	0,825
x(A)	225	250	275	300	325	350	375	400
y(B)	0,796	0,773	0,754	0,738	0,724	0,713	0,703	0,694

#### Řešení:

Program: **QC expert 2.5**  
Modul: **Nelineární regrese**  
Název: **regresní model**

REGRESNÍ FUNKCE A POČÁTEČNÍ ODHADY PARAMETRŮ:

#### Nelineární regresní model

$$y = \beta_1 + \beta_2/(x + \beta_3x)$$

#### Počáteční odhady parametrů a podmínky:

Název úlohy: regresní model

Model: Model ...

[B] ~ p1+(p2/(1+(p3^4[A])))

Metoda: Gauss-Newton

Max. počet iterací: 999999

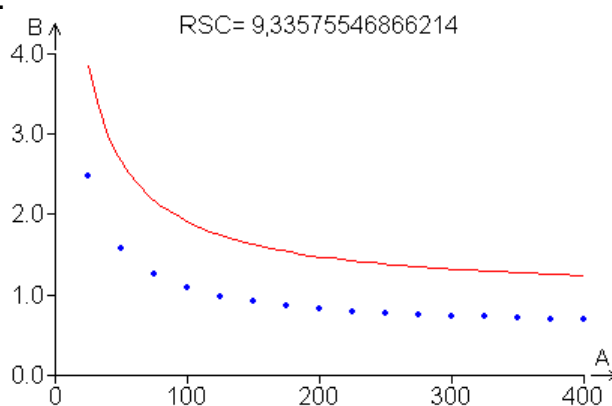
Terminační kritérium: 1E-8

Alfa (0-1): 0,05

Odhady parametrů

P1	1
P2	10
P3	0,1
P4	
P5	
P6	

Počítej parametry



## UPŘESNĚNÍ POČÁTEČNÍCH ODHADŮ PARAMETRŮ:

Název úlohy: regresní model

Model:  $[B] \sim p1 + (p2 / (1 + (p3 * [A])))$

Metoda: Gauss-Newton

Max. počet iterací: 999999

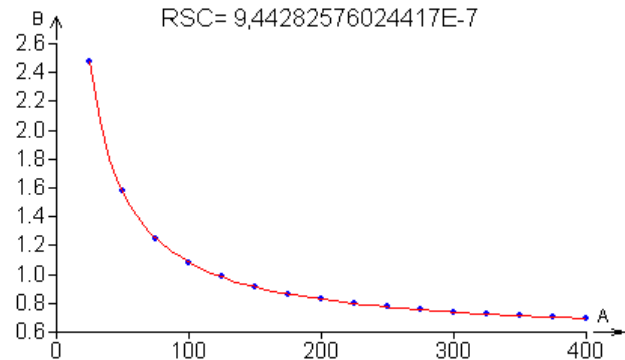
Terminální kritérium:  $1E-8$

Alfa (0-1): 0,05

Odhady parametrů:

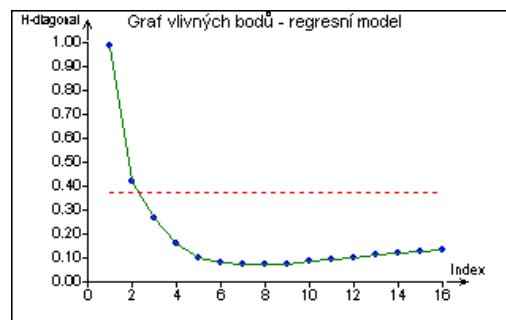
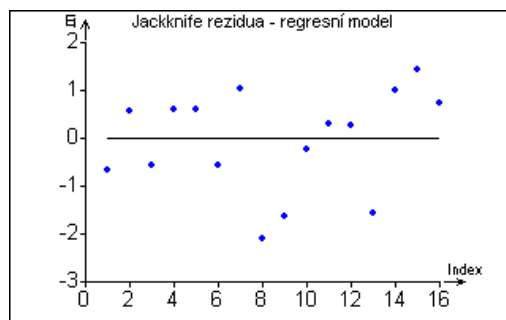
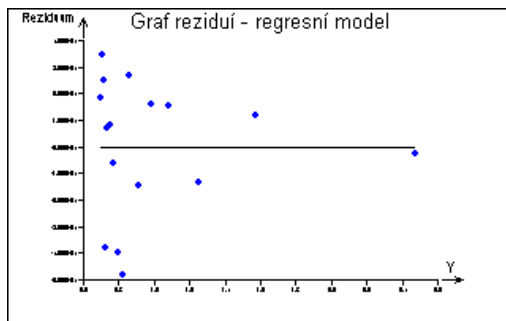
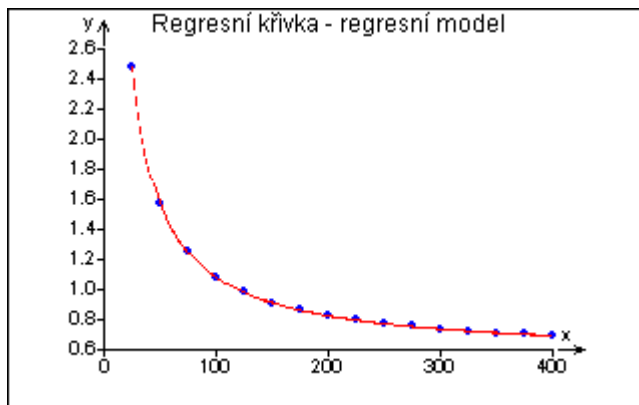
P1	0,56008876
P2	17,26801586
P3	0,320325657
P4	
P5	
P6	

Počítej parametry



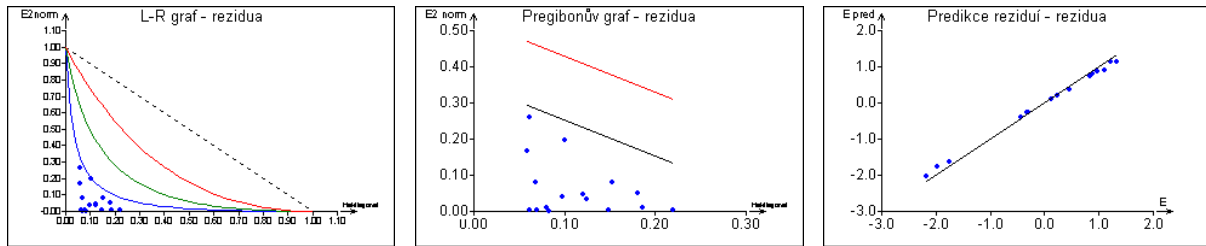
RSC je dostatečně malé ( $9,44E-7$ )

## GRAFICKÉ POSOUZENÍ MODELU



Rezidua mají normální rozložení, vykazují homoskedasticitu. V reziduích není trend. Regresní křivka dobře

## Grafická analýza reziduí



Vlivné a/nebo odlehlé body nejsou indikovány.

### Nelineární regrese

Název úlohy :	<b>regresní model</b>
Hladina významnosti :	0,05
Počet stupňů volnosti :	13
Kvantil t(1-alfa/2,n-p) :	2,160368656
Kvantil F(1-alfa,m,p-m) :	18,51282051
Metoda :	Nejmenší čtverce
Počet platných řádků :	16
Počet parametrů :	3
Metoda optimalizace :	Gauss-Newton
Nezávisle proměnné :	A
Závisle proměnná :	B

**Model :** [B] ~ p1+(p2/(1+(p3\*[A])))

#### Počáteční hodnoty parametrů :

P1	1
P2	10
P3	0,1

#### Výpočet

Počet iterací :	17
Ukončení výpočtu :	Konvergence
Doba výpočtu :	0,09 s
Max. počet iterací :	999999
Terminační kritérium :	1,00E-08

Odhady parametrů	Parametr	Směr. odchylka	Dolní mez	Horní mez
P1	<b>0,560088767</b>	0,000156531	0,559750603	0,560426931
P2	<b>17,26801587</b>	0,076121381	17,10356562	17,43246611
P3	<b>0,320325658</b>	0,001586696	0,316897809	0,323753506

Interval spolehlivosti parametru P1, P2, P3 neobsahuje 0. Parametry jsou významné.

#### Korelační matice parametrů :

	P1	P2	P3
P1	1	0,78688631	0,801538189
P2	0,78688631	1	0,999415869
P3	0,801538189	0,999415869	1

Korelační koeficienty < 0,9, parametry jsou dobře stanovitelné. Korelační koeficienty jsou >0,9, parametry jsou nsnadno stanovitelné.

### Analýza klasických reziduí

Index	Y naměřené	Y vypočítané	Směr. odch. Y	Reziduum	Reziduum [%Y]
1	2,477	2,47702313	0,000267281	-2,31E-05	-0,000933795
2	1,575	1,574882421	0,000174578	0,000117579	0,007465351
3	1,25	1,250135246	0,000139608	-0,000135246	-0,010819641
4	1,083	1,082846097	0,000107379	0,000153903	0,014210799
5	0,981	0,980842138	8,65E-05	0,000157862	0,016091995
6	0,912	0,912146284	7,55E-05	-0,000146284	-0,016039961
7	0,863	0,862733822	7,15E-05	0,000266178	0,030843363
8	0,825	0,825484617	7,19E-05	-0,000484617	-0,058741464
9	0,796	0,796399735	7,45E-05	-0,000399735	-0,050218007
10	0,773	0,773060088	7,81E-05	-6,01E-05	-0,007773289
11	0,754	0,753916379	8,20E-05	8,36E-05	0,011090267
12	0,738	0,737930429	8,59E-05	6,96E-05	0,009426911
13	0,724	0,724380457	8,96E-05	-0,000380457	-0,052549348
14	0,713	0,712749083	9,30E-05	0,000250917	0,035191789
15	0,703	0,702655754	9,62E-05	0,000344246	0,048968171
16	0,694	0,693814321	9,92E-05	0,000185679	0,02675496

### Statistické charakteristiky regrese

Vícenásobný korel. koef. R :	0,999999853
Koeficient determinace R <sup>2</sup> :	0,999999705
Predikovaný korel. koef. Rp :	0,999999013
Stř. kvadratická chyba predikce MEP :	1,97E-07
Akaikeho informační kritérium :	-260,3268656
Reziduální součet čtverců :	9,44E-07
Průměr absolutních reziduí :	-2,62E-14
Reziduální směr. odchylka :	0,000269513
Reziduální rozptyl :	7,26E-08
Šikmost reziduí :	0,408459704
Špičatost reziduí :	2,298748755

### Cook-Weisbergův test heteroskedasticity

Hodnota kritéria CW :	0,852743985
Kvantil Chi <sup>2</sup> (1-alfa,1) :	3,841458829
Pravděpodobnost :	0,355777235
Závěr :	<b>Rezidua vykazují homoskedasticitu.</b>

### Jarque-Berrův test normality

Hodnota kritéria JB :	1,417061415
Kvantil Chi <sup>2</sup> (1-alfa,2) :	5,991464547
Pravděpodobnost :	0,492367098
Závěr :	<b>Rezidua mají normální rozdělení.</b>

### Waldův test autokorelace

Hodnota kritéria WA :	0,022389602
Kvantil Chi <sup>2</sup> (1-alfa,1) :	3,841458829
Pravděpodobnost :	0,355777235
Závěr :	<b>Autokorelace je nevýznamná</b>

### Znaménkový test reziduí

Hodnota kritéria Sg :	0,855337203
Kvantil N(1-alfa/2) :	1,959963999
Pravděpodobnost :	0,392364497
Závěr :	<b>V reziduích není trend.</b>

### Indikace vlivných dat

Index	Standardní	Jackknife	Predikované	Diag(Hii)	Atkins. vzdál.
1	-0,66832443	-0,653428803	-0,001402671	0,98350996	10,50480158
2	0,572641952	0,557249659	0,000202579	0,419587626	0,986288262
3	-0,58665744	-0,571254766	-0,000184844	0,26832546	0,720133236
4	0,622589628	0,607286943	0,000182943	0,158737466	0,549134767
5	0,61844204	0,603118241	0,000175986	0,102982027	0,42539625
6	-0,5653852	-0,550008771	-0,000158726	0,078386559	0,333908185
7	1,024327665	1,026436041	0,000286328	0,070373219	0,587884945
8	-1,86566366	-2,094698342	-0,000521707	0,071093286	1,206315143
9	-1,54327795	-1,640617794	-0,000432787	0,076369742	0,982041976
10	-0,23293968	-0,224269739	-6,56E-05	0,083941854	0,141321906
11	0,325706069	0,314212938	9,22E-05	0,092563228	0,208903719
12	0,272330771	0,262396489	7,74E-05	0,101538511	0,183626235
13	-1,49674775	-1,580659131	-0,000427711	0,110479537	1,159610725
14	0,99198772	0,99132869	0,000284866	0,119173177	0,759054077
15	1,367442567	1,419875183	0,000394555	0,127507694	1,129922377
16	0,74094258	0,727399484	0,000214765	0,135430654	0,599297697

### Závěr:

Vyšetřením regresního modelu pomocí programu QC expert 2.5 byly nalezeny odhady parametrů:

Parametr	Uváděné odhady parametrů	Nalezené odhady	
		Parametr	Směr. odchylka
P1	0,56	<b>0,560088767</b>	0,000156531
P2	17,25	<b>17,26801587</b>	0,076121381
P3	0,32	<b>0,320325658</b>	0,001586696

Odhady parametrů uvedené v zadání úlohy jsou dostatečně spolehlivé.

Vyčíslení regresního modelu  $y = \beta_1 + \beta_2 / (x + \beta_3 x)$ :

$$y = 0,56009(0,0001565) + 17,26802 (0,07612) / ( x + 0,320326(0,0015867)*x)$$