

3.3 Tvorba nelineárních regresních modelů v analýze dat

Ing. Ján Lengyel, CSc.
Centrální analytická laboratoř
Ústav jaderného výzkumu Řež, a. s.
Husinec – Řež 130
250 68 Řež

V Řeži, únor 2010

Úloha č. 1

Navržení optimálního modelu pro jadernou přeměnu pomocí metody nelineární regrese**Zadání**

Na základě naměřených dat časové závislosti poklesu četnosti impulzů roztoku methyiodidu, značeného radionuklidem $^{131}\text{I} - \beta^-$ zářič, určete poločas jaderné přeměny ^{131}I . Experimentální data jsou uvedena v Tabulce 1.

DataTabulka 1 Hodnoty poklesu aktivity ^{131}I v závislosti na čase

doba/hodiny	0	4	7	10	15	24	30	45	60	80	120	150	180	200
imp/min	5678	5587	5549	5485	5377	5230	5080	4850	4567	4270	3685	3320	2985	2765

Program

Pro řešení byly použity statistické programy QC.Expert a ADSTAT.

Řešení

Pokles aktivity, měřený jako četnost impulzů v jednotkách imp/min, lze popsat vztahem:

$$A = A_0 e^{-\frac{\ln 2}{T_{1/2}} t} \quad (\text{rov. 1}),$$

kde A_0 představuje aktivitu v čase $t = 0$, t představuje čas v hodinách a $T_{1/2}$ značí poločas jaderné přeměny ^{131}I na stabilní ^{131}Xe a zanedbatelně na ^{131m}Xe .

Obecně tuto časovou závislost lze pro použití v programech ADSTAT a QC.Expert popsat vztahem:

$$A = p_1 \exp(-(\ln 2 / p_2)t) \quad (\text{rov. 2}),$$

ve kterém budeme odhadovat parametry p_1 a p_2 , které představují aktivitu v čase $t = 0$ a poločas jaderné přeměny ^{131}I v hodinách.

Počáteční odhady parametrů p_1 a p_2 :

Parametr p_1 představuje aktivitu v čase $t = 0$ je dán naměřenou hodnotou četnosti 5678 imp/min. Druhý parametr odhadneme z grafické závislosti četností impulzů na čase, která je znázorněná na Obr. 1 – z programu QC.Expert modul Grafy. Poločas je doba, za kterou poklesne aktivita na polovinu. Polovinu aktivity představuje četnost impulzů 2839 imp/min a tomu odpovídá doba asi $t = p_2 = 190$ hodin.

V programu **QC.Expert** v modulu Regrese→Nelineární, zadáme model podle vztahu (rov. 2) a odhady parametrů $p_1 = 5680$ a $p_2 = 190$, metodu Gauss-Newton, počet iterací 999999 a, terminační kritérium $1 \cdot 10^{-8}$ a hladinu významnosti $\alpha = 0,05$. Potom spočítáme parametry p_1 a p_2 a výsledek je na výstupu v Tabulce 2.

Z Tabulky je vidět, že po 15 iteracích je dosaženo optimálního odhadu parametrů p_1 a p_2 , bodové odhady pro $p_1 = 5680(\pm 5)$ a $p_2 = 193,21(\pm 0,72)$, intervalové odhady pro $p_1 <5669; 5691>$ a $p_2 <191,63; 194,78>$. Statistické charakteristiky regrese (predikovaný korelační koeficient, regresní rabat, střední kvadratická chyba predikce a Akaikeho informační kritérium) svědčí o velice těsném proložení dat křivkou.

Rezidua dat vykazují homoskedasticitu, odpovídají normálnímu rozdělení, nevykazují trend, ale jsou významně autokorelovaná. Jackknife rezidua nepřesahují hodnotu 3,3, takže data jsou homogenní.

Semestrální práce

Na Obr. 2 je znázorněná regresní křivka jaderné přeměny ^{131}I , na Obr. 3 je znázorněný graf reziduí, na Obr. 4 graf Jackknife reziduí, na Obr. 5 je graf predikovaných reziduí, na Obr. 6 je graf Atkinsonových vzdáleností a na Obr. 7 je graf vlivných bodů.

3

Výsledky z programu **ADSTAT**, pomocí stejných počátečních odhadů parametrů $p_1 = 5680$ a $p_2 = 190$, jsou shrnuty v Tabulce 3 – část výstupu z programu ADSTAT.

Na Obr. 8 je znázorněná regresní křivka, na Obr. 9 je graf reziduí a na Obr. 10 je graf predikovaných reziduí.

Závěry o bodových a intervalových odhadech p_1 a p_2 , statistických charakteristikách regrese jsou stejné jako z programu QC.Expert a parametry dobře podmiňují navržený model, hodnota regresního rabatu 99,987 %.

Výstupy

Tabulka 2 Výstup statistického zpracování dat z programu QC.Expert

Počáteční hodnoty parametrů :					
P1	5680				
P2	190				
Výpočet					
Počet iterací :	15				
Ukončení výpočtu :	Konvergence				
Doba výpočtu :	0,17 s				
Max. počet iterací :	1,00E+06				
Terminační kritérium :	1,00E-08				
Odhady parametrů	Parametr	Směr. odchylka	Dolní mez	Horní mez	
P1	5680,114561	4,978734248	5669,266831	5690,962291	
P2	193,2052195	0,721340612	191,6335533	194,7768857	
Korelační matice parametrů :		P1	P2		
	P1	1	-0,62521354		
	P2	-0,625213544	1		
Statistické charakteristiky regrese					
Vícenásobný korel. koef. R :	0,999936311				
Koeficient determinace R ² :	0,999872627				
Predikovaný korel. koef. R _p :	0,999838191				
Stř. kvadratická chyba predikce MEP :	158,0482444				
Akaikeho informační kritérium :	71,53050028				
Reziduální součet čtverců :	1741,782847				
Průměr absolutních reziduí :	136,1262436				
Reziduální směr. odchylka :	12,04776206				
Reziduální rozptyl :	145,1485706				

Semestrální práce

Šikmost reziduí :	0,001978928				
Špičatost reziduí :	2,056396181				
Cook-Weisbergův test heteroskedasticity					
Hodnota kritéria CW :	0,449532699				
Kvantil $\chi^2(1-\alpha,1)$:	3,841458829				
Pravděpodobnost :	0,502556952				
Závěr :	Rezidua vykazují homoskedasticitu.				
Jarque-Berrův test normality					
Hodnota kritéria JB :	0,524010596				
Kvantil $\chi^2(1-\alpha,2)$:	5,991464547				
Pravděpodobnost :	0,769506947				
Závěr :	Rezidua mají normální rozdělení.				
Waldův test autokorelace					
Hodnota kritéria WA :	13,20465087				
Kvantil $\chi^2(1-\alpha,1)$:	3,841458829				
Pravděpodobnost :	0,502556952				
Závěr :	Autokorelace je významná				
Znaménkový test reziduí					
Hodnota kritéria Sg :	1,947220241				
Kvantil $N(1-\alpha/2)$:	1,959963999				
Pravděpodobnost :	0,051508336				
Závěr :	V reziduích není trend.				
Indikace vlivných dat					
Index	Standardní	Jackknife	Predikované	Diag(Hii)	Atkins. vzdál.

Semestrální práce

1	-0,192742618	-0,184823318	-2,55004608	0,170775328	0,205451277
2	-1,099451678	-1,110037108	-14,4001337	0,153879913	1,159546277
3	0,874488237	0,865283758	11,37770009	0,142544196	0,864177738
4	0,450369853	0,434887366	5,824897437	0,132289563	0,415937231
5	-0,487909417	-0,471841333	-6,25714907	0,117452353	0,421631829
6	1,615727124	1,748818906	20,48664191	0,09716738	1,405326031
7	-1,783329614	-1,991591132	-22,4941773	0,087703985	1,512577314
8	1,442300179	1,518802119	18,07501729	0,075798572	1,065427773
9	-1,12917652	-1,143563627	-14,1607369	0,077078557	0,809506571
10	0,614305366	0,5976246	7,77080434	0,092911976	0,46850607
11	-0,725873719	-0,71075003	-9,48224722	0,149425495	0,729707288
12	0,349376446	0,336216849	4,697905599	0,197229438	0,408211512
13	0,681617366	0,665611324	9,423751524	0,240642295	0,917823358
14	-0,645031564	-0,628563657	-9,06511891	0,265100949	0,924733711

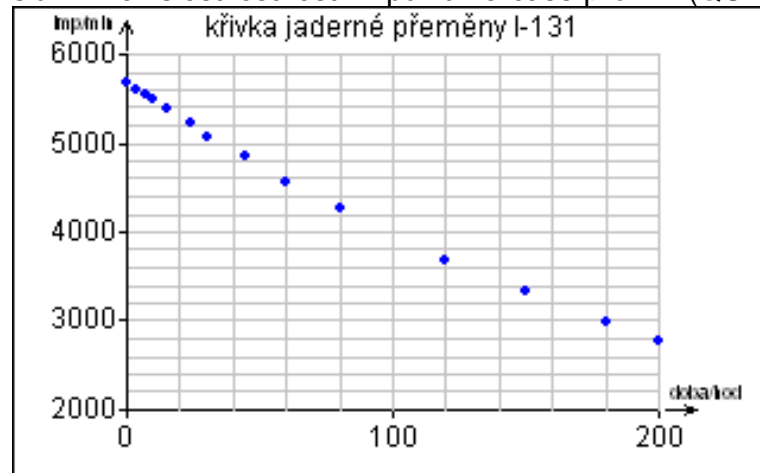
Tabulka 3 – část výstupu z programu ADSTAT

V Ý S T U P :				
(1) BODOVÉ ODHADY PARAMETRŮ:				
Parametr	Bodový odhad	Směrodatná odchylka	Absolutní vychýlení	Relativní vychýlení[%]
p[1]	5.6801E+03	4.9787E+00	1.3337E-03	2.3481E-05
p[2]	1.9321E+02	7.2136E-01	2.2683E-03	1.1740E-03
(2) INTERVALOVÉ ODHADY PARAMETRŮ:				
Parametr	Bodový odhad	Poloviční délka konfidenčního int. spočtená z délky poloos		maxim
p[1]	5.6801E+03	+- 1.3878E+01		+- 1.3879E+01
p[2]	1.9321E+02	+- 1.5563E+00		+- 2.0108E+00

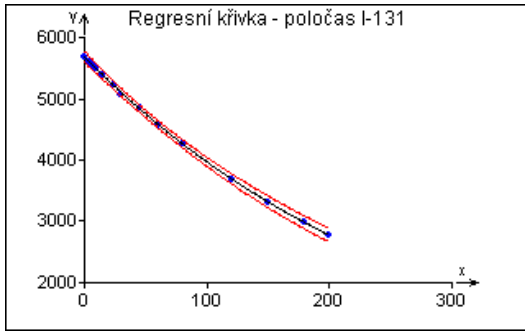
(4) STATISTICKÉ CHARAKTERISTIKY REGRESE:					
Reziduální součet čtverců, RSC				:	1.7418E+03
Regresní rabat, D^2 [%]				:	9.9987E+01
Akaikeho informační kritérium, AIC				:	7.1531E+01
(5) ANALÝZA KLASICKÝCH REZIDUÍ:					
Bod	Meřená hodnota	Predikovaná hodnota	Směrodatná odchylka	Vychýlení	Klasické reziduum
i	yexp[i]	yvyp[i]	s(yvyp[i])	hy[i]	e[i]
1	5.6780E+03	5.6801E+03	4.9787E+00	1.3337E-03	-2.1143E+00
2	5.5870E+03	5.5992E+03	4.7260E+00	9.8508E-04	-1.2184E+01
3	5.5490E+03	5.5392E+03	4.5486E+00	7.4030E-04	9.7562E+00
4	5.4850E+03	5.4799E+03	4.3820E+00	5.0945E-04	5.0547E+00
5	5.3770E+03	5.3825E+03	4.1289E+00	1.5465E-04	-5.5218E+00
6	5.2300E+03	5.2115E+03	3.7555E+00	-3.9427E-04	1.8497E+01
7	5.0800E+03	5.1005E+03	3.5679E+00	-6.9988E-04	-2.0521E+01
8	4.8500E+03	4.8333E+03	3.3169E+00	-1.2713E-03	1.6706E+01
9	4.5670E+03	4.5801E+03	3.3448E+00	-1.5971E-03	-1.3068E+01
10	4.2700E+03	4.2630E+03	3.6723E+00	-1.7072E-03	7.0499E+00
11	3.6850E+03	3.6931E+03	4.6571E+00	-1.0703E-03	-8.0640E+00
12	3.3200E+03	3.3162E+03	5.3505E+00	-6.4201E-05	3.7729E+00
13	2.9850E+03	2.9778E+03	5.9101E+00	1.2264E-03	7.1576E+00
14	2.7650E+03	2.7717E+03	6.2032E+00	2.1859E-03	-6.6603E+00
Reziduální součet čtverců, RSC				:	1.7418E+03
Průměr absolutních hodnot reziduí, MA				:	9.7234E+00
Průměr relativních hodnot reziduí, MR				:	2.1375E-01
Odhad reziduálního rozptylu, $s^2(e)$:	1.4515E+02
Odhad reziduální směrodatná odchylky, s(e)				:	1.2048E+01
Odhad šikmosti reziduí, g1(e)				:	-4.1605E-02
Odhad špičatosti reziduí, g2(e)				:	2.0562E+00
Mean error of prediction 1				:	1.5569E+02

(6) INDIKACE VLIVNÝCH BODŮ:

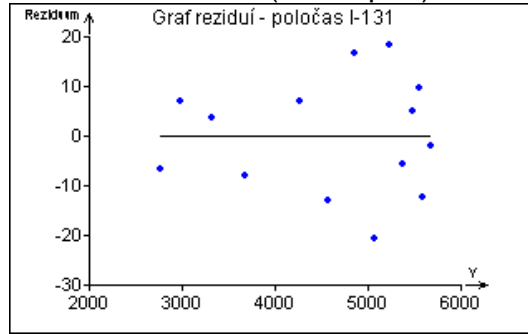
Bod	Jackknife reziduum $eJ[i]$	Cookova vzdálenost $D[i]$	Diagonální prvky $H[i, i]$	Normalizovaná vzdálenost FDA	Věrohodnostní vzdálenost LDA
1	-1.8480E-01	3.8246E-03	1.7078E-01	1.0416E-02	9.0941E-03
2	-1.1100E+00	1.0991E-01	1.5388E-01	9.6438E-02	2.3697E-02
3	8.6532E-01	6.3569E-02	1.4254E-01	-1.0167E-02	1.3351E-02
4	4.3492E-01	1.5464E-02	1.3229E-01	-1.2167E-02	6.9718E-03
5	-4.7180E-01	1.5838E-02	1.1745E-01	2.8154E-02	6.9007E-03
6	1.7489E+00	1.4049E-01	9.7167E-02	1.9306E-02	7.8944E-02
7	-1.9915E+00	1.5286E-01	8.7704E-02	1.5241E-01	1.2047E-01
8	1.5189E+00	8.5313E-02	7.5798E-02	1.8521E-02	4.3536E-02
9	-1.1435E+00	5.3235E-02	7.7078E-02	5.7994E-02	1.7283E-02
10	5.9772E-01	1.9333E-02	9.2911E-02	7.2137E-03	6.9556E-03
11	-7.1062E-01	4.6265E-02	1.4942E-01	2.0822E-02	1.0132E-02
12	3.3635E-01	1.5007E-02	1.9723E-01	1.0073E-02	6.9870E-03
13	6.6577E-01	7.3651E-02	2.4064E-01	3.4531E-02	1.0746E-02
14	-6.2840E-01	7.5008E-02	2.6510E-01	1.0309E-02	1.0060E-02

Obr. 1 Závislosti četností impulzů na čase pro ^{131}I (QC.Expert)

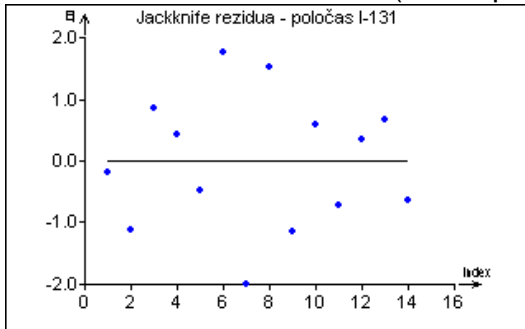
Obr. 2 Graf regresní křivky (QC.Expert)



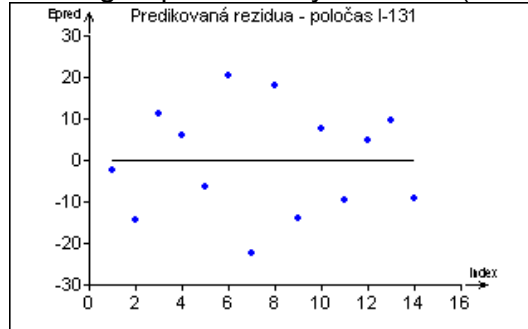
Obr. 3 Graf reziduí (QC.Expert)



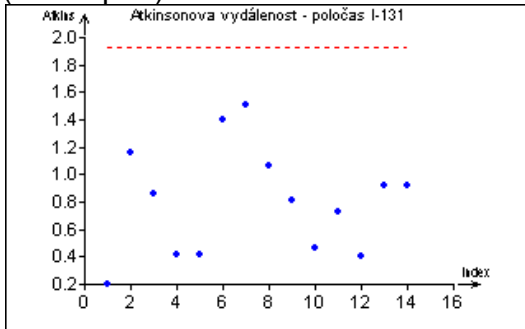
Obr. 4 Graf Jackknife reziduí(QC.Expert)



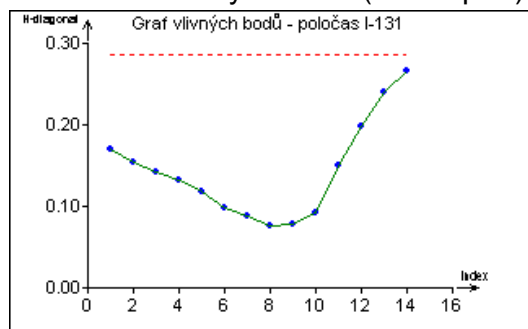
Obr. 5 graf predikovaných reziduí(QC.Expert)



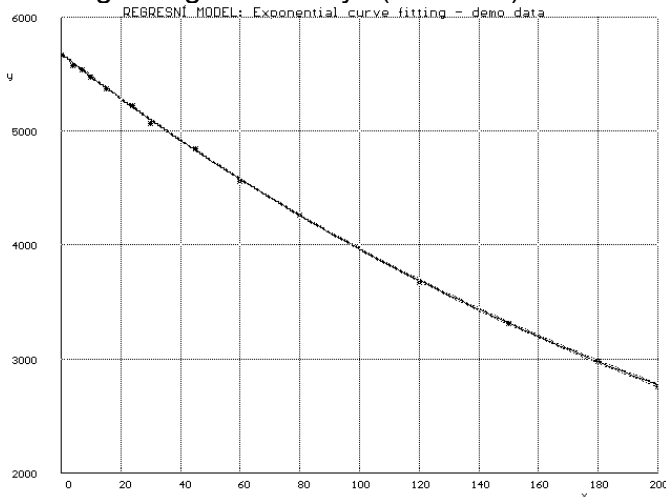
Obr. 6 Graf Atkinsonových vzdáleností (QC.Expert)



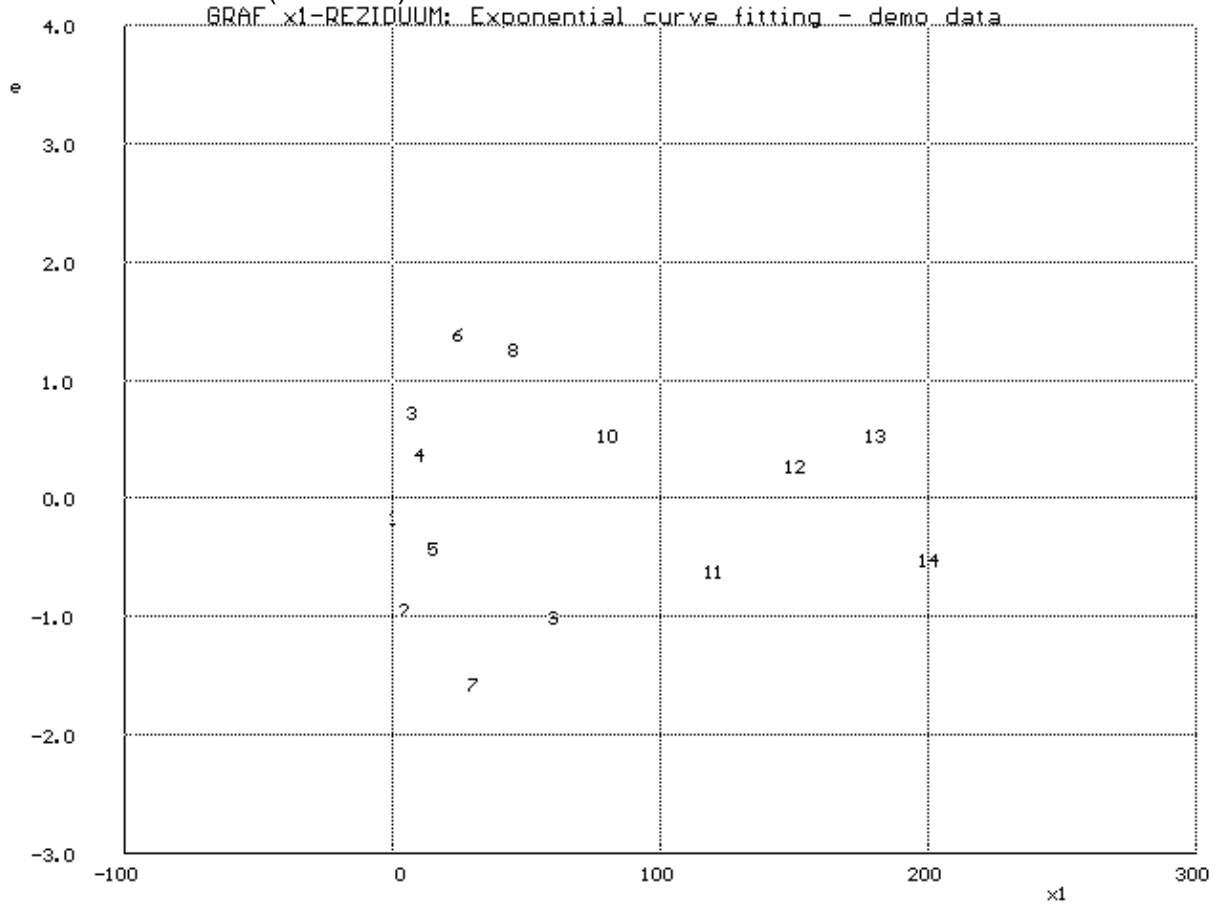
Obr. 7 Graf vlivných bodů (QC.Expert)



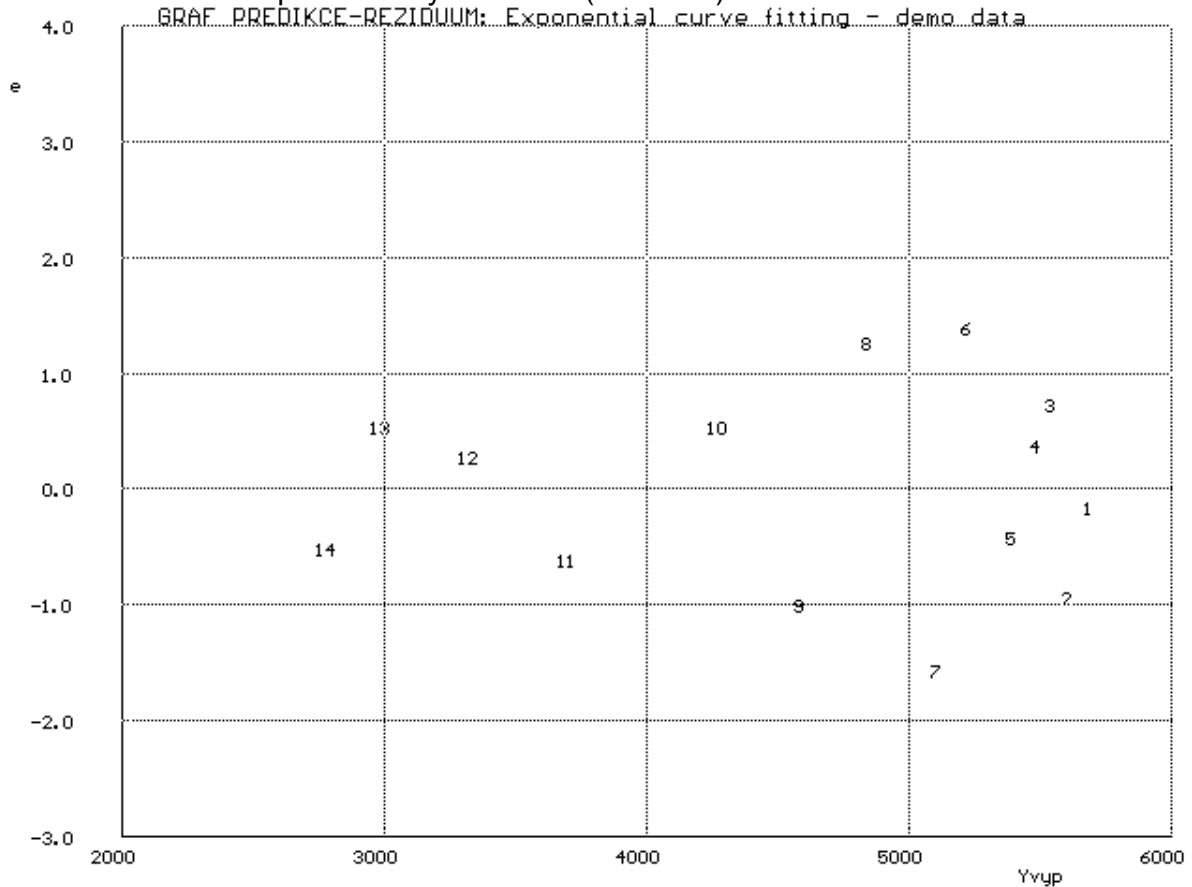
Obr. 8 graf regresní křivky (ADSTAT)



Obr. 9 Graf reziduí (ADSTAT)



Obr. 10 Graf predikovaných reziduí (ADSTAT)



Závěr

Experimentální data časové závislosti jaderné přeměny byly zpracované nelineární regresí. Pomocí reziduí byla provedena kritika vstupních dat, pomocí odhadů parametrů p_1 a p_2 kritika navrženého modelu a výsledný model má tvar:

$A = A_0 e^{-\frac{\ln 2}{193,21}t}$, kde $A_0 = 5680$ – vyjádřená v imp/min, je aktivita v čase $t = 0$, A je aktivita v čase t .

Z navrženého modelu pomocí nelineární regrese byl určen parametr $p_2 = 193,21$ hodin, který představuje poločas jaderné přeměny ^{131}I , což je 8,05 dnů.

Úloha č. 2**Navržení optimálního modelu pro teplotní závislost zářivé energie uhlíkového vlákna pomocí metody nelineární regrese****Zadání**

Metodou lineární regrese vybrat nejvhodnější dvouparametrový model teplotní závislosti zářivé energie uhlíkového vlákna.

Data

Data převzatá z http://www.itl.nist.gov/div898//strd/nls/data/daniel_wood.shtml.

Nezávislá proměnná - prediktor, je teplota v 1000 Kelvinech a závislá proměnná je energie emitovaná z cm^2 za sekundu z uhlíkového vlákna. Data jsou uvedena v Tabulce 1.

Tabulka 1 Data tepelná závislost zářivé energie C vlákna

Teplota (x)	1,309	1,471	1,490	1,565	1,611	1,680
Energie (y)	2,138	3,421	3,597	4,340	4,882	5,660

Program

Pro řešení byly použity statistické programy STATISTIKA a ADSTAT.

Řešení

Teplotní závislost zářivé energie lze vyjádřit mocninným vztahem:

$$y = p_1 x^{p_2} \quad (\text{rov. 1}),$$

kde y je zářivá energie a x teplota.

V programu **STATISTICA** za počáteční odhady parametrů zvolíme $P_1 = p_2 = 1$. Pro výpočet odhadů parametrů vybereme metodu Levenberg-Marquartovou, maximální počet iterací 50 a hodnotu konvergenčního kritéria $1 \cdot 10^{-6}$.

V Tabulce 2 jsou vypočtené bodové a intervalové odhady parametrů p_1 a p_2 . Oba parametry, podle Silenova pravidla, jsou statisticky významné.

V Tabulce 3 jsou predikované hodnoty závislé proměnné s uvedením příslušných reziduí vůči naměřeným hodnotám.

Tabulka 4 znázorňuje počet iterací – 8, potřebných k získání optimálních odhadů parametrů pomocí ztrátových funkcí.

Tabulka 5 a Tabulka 6 udávají korelační, respekt. kovariační matice odhadů parametrů.

Na Obr. 1 je znázorněná regresní křivka navrženého modelu – závislost zářivé energie uhlíkového vlákna na teplotě. Je vidět těsné proložení křivky s daty.

V programu **ADSTAT** za počáteční odhady parametrů zvolíme rovněž $p_1 = p_2 = 1$. Pro výpočet odhadů parametrů vybereme metodu nejmenších čtverců, maximální počet iterací je 150 a hodnota min. změn parametrů je $2 \cdot 10^{-8}$ %.

Výstup z programu ADSTAT je uvedený v Tabulce 8. Jsou v ní uvedeny bodové a intervalové odhady parametrů – parametry jsou statisticky významné a jejich hodnoty jsou stejné jako z programu STATISTICA. Statistické charakteristiky (residuální součet čtverců – 0,0043173, koeficient determinace – 99,943 %, Aikeho informační kritérium – -39,421, a residuální směrodatná odchylka – 0,032853) ukazují těsné proložení křivky a experimentálních dat a parametry dobře podmiňují navržený model, hodnota regresního rabatu 99,943 %.

Na Obr. 2 je znázorněná regresní závislost zářivé energie uhlíkového vlákna na teplotě. Obr. 3 a Obr. 4 znázorňují graf reziduí a respekt. predikovaných reziduí.

Výstupy

Tabulka 2. Vypočítané odhady parametrů p_1 a p_2 (STATISTICA)

Model is: energie=p1*teplota**p2 (zářivá energie C) Dep. Var. : energie Level of confidence: 95.0% (alpha=0.050)						
	Estimate	Standard error	t-value df = 4	p-level	Lo. Conf Limit	Up. Conf Limit
p1	0,768862	0,018282	42,05616	0,000002	0,718104	0,819621
p2	3,860405	0,051727	74,63087	0,000000	3,716789	4,004022

Tabulka 3 Hodnoty predikovaných reziduí (STATISTICA)

Model is: energie=p1*teplota**p2 (zářivá energie C) Dep. Var. : energie			
	Observed	Predicted	Residuals
1	2,138000	2,174118	-0,036118
2	3,421000	3,411155	0,009845
3	3,597000	3,584411	0,012589
4	4,340000	4,332642	0,007358
5	4,882000	4,845307	0,036693
6	5,660000	5,696836	-0,036836

Tabulka 4 Počet iterací (STATISTICA)

Model is: energie=p1*teplota**p2 (zářivá energie C) Dep. Var. : energie			
	Loss Function	p1	p2
1	6,570362	1,000000	1,000000
2	4,504224	1,230506	1,559380
3	1,056018	1,556789	2,328387
4	0,924021	1,011143	3,078922
5	0,483702	0,717135	3,907790
6	0,067056	0,768844	3,857598
7	0,065706	0,768854	3,860431
8	0,065706	0,768862	3,860405

Tabulka 5 Korelační matice odhadů parametrů (STATISTICA)

Model is: energie=p1*teplota**p2 (zářivá energie C)		
Dep. Var. : energie		
	p1	p2
p1	1,000000	-0,990772
p2	-0,990772	1,000000

Tabulka 6 Kovariační matice odhadů parametrů (STATISTICA)

Model is: energie=p1*teplota**p2 (zářivá energie C)		
Dep. Var. : energie		
	p1	p2
p1	0,000334	-0,000937
p2	-0,000937	0,002676

Tabulka 7 Statistické charakteristiky (STATISTICA)

Model is: energie=p1*teplota**p2 (zářivá energie C)					
Dep. Var. : energie					
	1	2	3	4	5
Effect	Sum of Squares	DF	Mean Squares	F-value	p-value
Regression	103,9135	2,000000	51,95675	48138,09	0,000000
Residual	0,0043	4,000000	0,00108		
Total	103,9178	6,000000			
Corrected Total	7,6136	5,000000			
Regression vs. Corrected Total	103,9135	2,000000	51,95675	34,12	0,001218

Tabulka 8 Výstup z programu ADSTAT

V Ý S T U P :				
(1) BODOVÉ ODHADY PARAMETRŮ:				
Parametr	Bodový odhad	Směrodatná odchylka	Absolutní vychýlení	Relativní vychýlení[%]
p[1]	7.6886E-01	1.8282E-02	1.7681E-04	2.2996E-02
p[2]	3.8604E+00	5.1727E-02	9.2946E-05	2.4077E-03
(2) INTERVALOVÉ ODHADY PARAMETRŮ:				
Parametr	Bodový odhad	Poloviční délka konfidenčního intervalu	int. spočtená z maxim	
p[1]	7.6886E-01	+ - 6.7634E-02	+ - 6.8132E-02	
p[2]	3.8604E+00	+ - 1.9275E-01	+ - 1.9277E-01	
(3) KORELAČNÍ MATICE ODHADŮ:				
	x[1, i]	x[2, i]		
x[1, i]	1.0000E+00	-9.9077E-01		
x[2, i]	-9.9077E-01	1.0000E+00		

(4) STATISTICKÉ CHARAKTERISTIKY REGRESE:

Reziduální součet čtverců, RSC	:	4.3173E-03
Regresní rabat, D^2 [%]	:	9.9943E+01
Akaikeho informační kritérium, AIC	:	-3.9421E+01

(5) ANALÝZA KLASICKÝCH REZIDUÍ:

Bod	Meřená hodnota	Predikovaná hodnota	Směrodatná odchylka	Vychýlení	Klasické reziduum
i	y _{exp} [i]	y _{vyp} [i]	s(y _{vyp} [i])	hy[i]	e[i]
1	2.1380E+00	2.1741E+00	2.2079E-02	5.1718E-05	-3.6113E-02
2	3.4210E+00	3.4112E+00	1.6470E-02	-1.7948E-05	9.8475E-03
3	3.5970E+00	3.5844E+00	1.5615E-02	-2.2323E-05	1.2591E-02
4	4.3400E+00	4.3326E+00	1.4066E-02	-2.5321E-05	7.3571E-03
5	4.8820E+00	4.8453E+00	1.6512E-02	-1.2509E-05	3.6691E-02
6	5.6600E+00	5.6968E+00	2.6184E-02	3.4951E-05	-3.6841E-02

Reziduální součet čtverců, RSC	:	4.3173E-03
Průměr absolutních hodnot reziduí, MA	:	2.3240E-02
Průměr relativních hodnot reziduí, MR	:	6.4983E-01
Odhad reziduálního rozptylu, $s^2(e)$:	1.0793E-03
Odhad reziduální směrodatná odchylky, s(e)	:	3.2853E-02
Odhad šikmosti reziduí, g1(e)	:	-2.6322E-01
Odhad špičatosti reziduí, g2(e)	:	1.6895E+00
Mean error of prediction 1	:	2.9109E-03

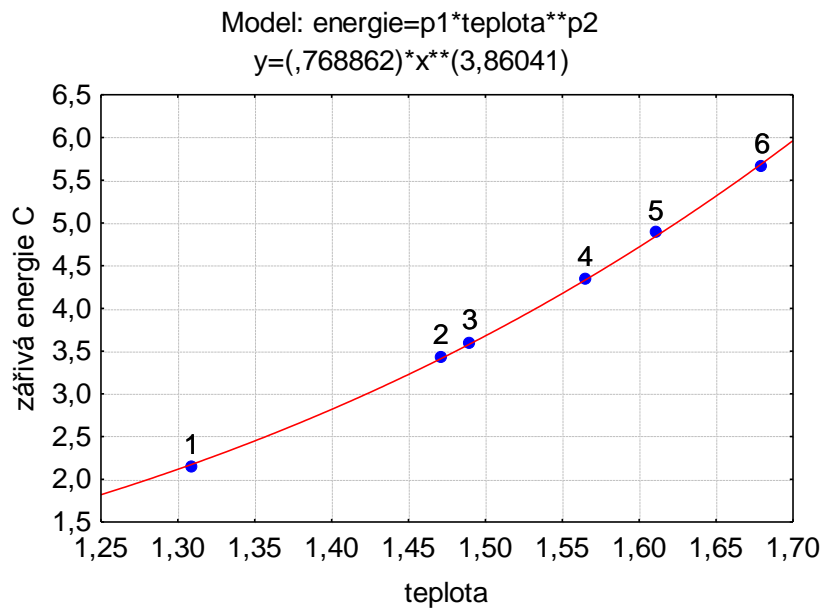
(6) INDIKACE VLIVNÝCH BODŮ:

Bod	Jackknife reziduum	Cookova vzdálenost	Diagonální prvky	Normalizovaná vzdálenost	Věřohodnostní vzdálenost
i	eJ[i]	D[i]	H[i, i]	FDA	LDA
1	-1.9183E+00	9.0751E-01	4.5165E-01	8.0555E-02	1.3973E-01
2	3.0461E-01	2.0141E-02	2.5131E-01	6.3815E-03	1.3941E-02
3	3.8651E-01	2.7687E-02	2.2592E-01	1.0041E-02	1.3193E-02
4	2.1627E-01	6.8911E-03	1.8331E-01	3.0676E-03	1.4527E-02
5	1.4655E+00	2.8203E-01	2.5261E-01	8.8098E-02	1.1918E-01
6	-4.3250E+00	3.0011E+00	6.3520E-01	5.2411E-02	1.3899E-01

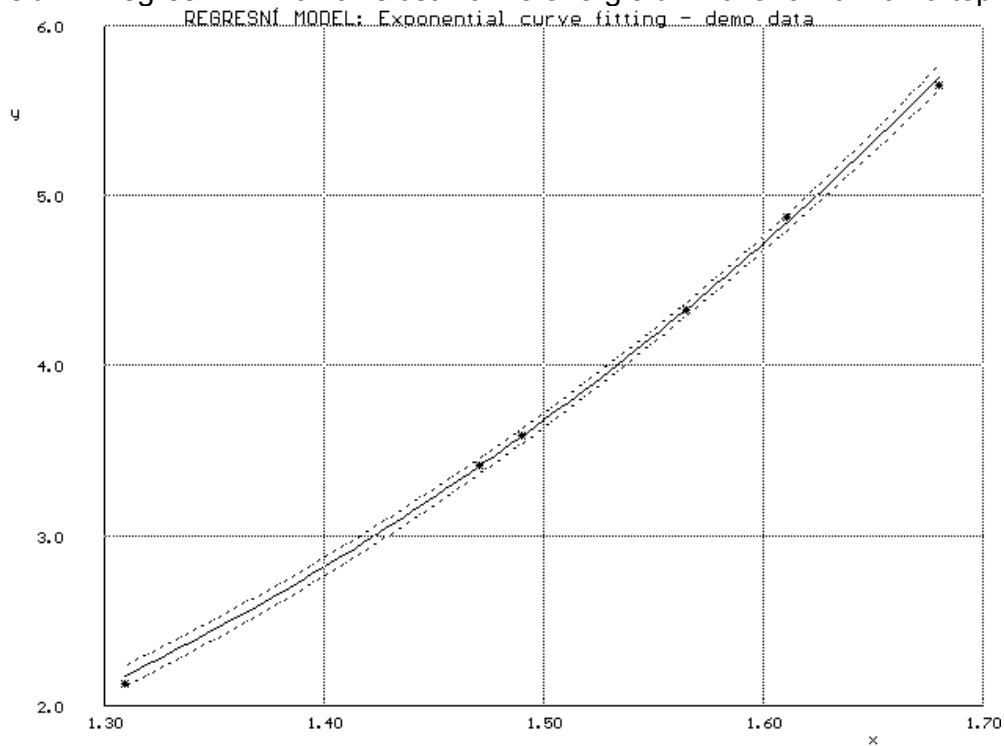
(7) MAPA CITLIVOSTNÍ FUNKCE:

Parametr	Relativní změna $C_{jR}(-5\%)$ [%]	Souhrnná citlivost C_j	Relativní změna $C_{jR}(+5\%)$ [%]
j			
1	-1.6099E+01	2.9297E+01	1.9257E+01
2	-2.4736E+01	3.6597E+00	3.2255E+01

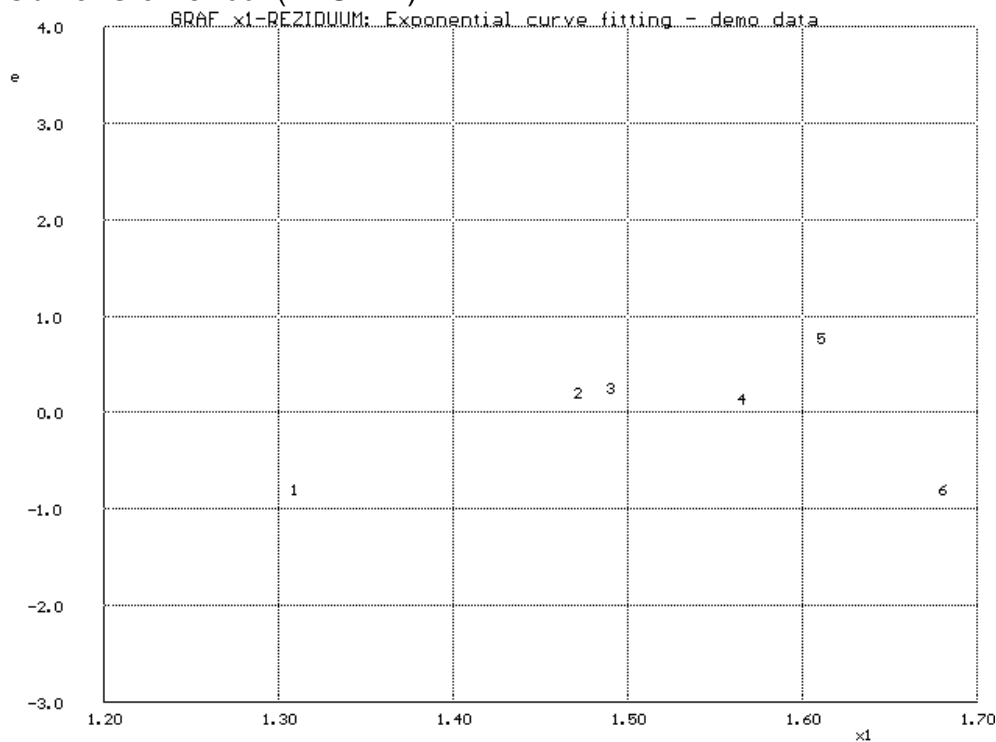
Obr. 1 regresní závislost zářivé energie uhlíkového vlákna na teplotě (STATISTICA)



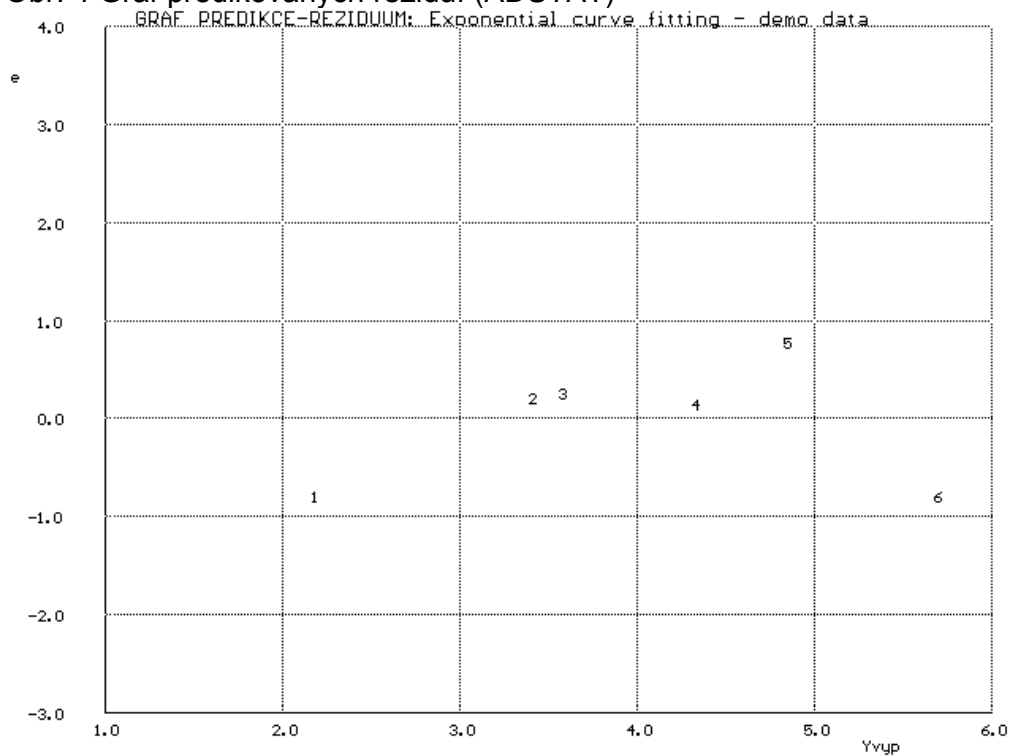
Obr. 2 Regresní křivka závislosti zářivé energie uhlíkového vlákna na teplotě (ADSTAT)



Obr. 3. Graf reziduí (ADSTAT)



Obr. 4 Graf predikovaných reziduí (ADSTAT)



Závěr

Analýzou regresního modelu byly pro závislost zářivé energie uhlíkového vlákna na teplotě získány bodové a intervalové odhady parametrů:

$$p_1 = 0,7689 (0,0183), p_1 <0,7181; 0,8196> ,$$

$$p_2 = 3,8604 (0,0517), p_2 <3,7168;4,0040>.$$

Úloha č. 3

Navržení optimálního modelu pro dosah jaderných částic – protonů, deuteronů a α , v závislosti na jejich počáteční energii ve vzduchu pomocí metody nelineární regrese

Zadání

Z experimentálních dat, uvedených v Tabulce 1, závislosti dosahu jaderných částic ve vzduchu na jejich počáteční energii určit optimální parametry navržených regresních modelů pro jednotlivé jaderné částice.

Data

Data dosahu jaderných částic – protonů, deuteronů a α částic, ve vzduchu v závislosti na jejich počáteční energii byla převzata z publikace V. Majer a kol., Základy jaderné chemie, Praha 1981 a jsou uvedeny v Tabulce 1.

Tabulka 1 Dosah jaderných částic ve vzduchu v závislosti na jejich počáteční energii

E(MeV)	R_p/cm	R_d/cm	R_α/cm
0,2	0,29	0,28	0,17
1	2,3	1,72	0,57
2	7,2	4,61	1,05
5	33,9	20,8	3,48
10	114,8	67,8	10,55
15	238,5	138,2	21,17
30		477	71

Program

Pro řešení byly použity statistické programy MS Excel a QC.Expert.

Řešení

Na základě grafické závislosti dosahu jaderných částic, lze soudit, že optimální regresní model bude v polynomickém tvaru buď:

$$R = p_1 + p_2 E + p_3 E^2 \quad (\text{rov. 1}),$$

nebo v mocninném tvaru:

$$R = p_1 E^{p_2} \quad (\text{rov. 2}),$$

Kde R je dosah v cm a E je počáteční energie částice v MeV.

Postupně pro každou jadernou částici vypočítáme optimální parametry p_1 , p_2 a p_3 podle vztahu (rov. 1) a parametry p_1 a p_2 podle vztahu (rov. 2). Za počáteční odhady parametrů regresního modelu podle obou vztahů a pro každou částici zvolíme:

$$p_1 = p_2 = p_3 = 1, \text{ resp. } p_1 = p_2 = 1.$$

V Tabulce 2 jsou uvedeny bodové a intervalové odhady parametrů p_1 , p_2 a p_3 a statistické charakteristiky regresního modelu podle vztahu (rov. 1) pro dosah protonů. Podobně v Tabulce 3 a Tabulce 4 jsou uvedeny odhady parametrů p_1 , p_2 a p_3 a statistické charakteristiky regresního modelu podle vztahu (rov. 1) pro dosah deuteronu a α částic.

Z výsledků Tabulek 2, 3 a 4 je vidět, že pro nejlepší odhad parametrů p_1 , p_2 a p_3 pro protony a deuterony bylo provedeno 14 iterací a pro α částice 15 iterací. Analýzou reziduí vyplývá, že rezidua vykazují homoskedasticitu, nejsou autokorelovaná,

v reziduích není trend a odpovídají normálnímu rozdělení. Podle reziduí Jackknife data jsou homogenní pro protony a deuterony a pro α částice se jako odlehlé jeví bod 7 (d) a body 6, 7 (α). Vzhledem ke složitosti jevů, které přispívají k dosahu jaderných částic, jako jsou ionizace, hustota, ..., a malému počtu bodů, odlehlé body se z hodnocení nebyly vyloučeny.

Na základě významnosti parametrů regresního modelu podle vztahu (rov. 1) podle Silenovho pravidla platí, že parametr p_1 je „zašuměný“ a lze ho zanedbat pro všechny jaderné částice. Parametry p_2 a p_3 jsou statisticky významné.

Regresní model má tvar $R = p_2 E + p_3 E^2$ (rov. 3).

V Tabulce 5 jsou uvedeny odhady parametrů p_1 a p_2 a statistické charakteristiky regresního modelu podle vztahu (rov. 2) pro dosah protonů. Podobně v Tabulce 6 a Tabulce 7 jsou uvedeny odhady parametrů p_1 a p_2 a statistické charakteristiky regresního modelu podle vztahu (rov. 2) pro dosah deuteronu a α částic.

Z výsledků Tabulek 5, 6 a 7 je vidět, že pro nejlepší odhad parametrů p_1 a p_2 pro protony a deuterony bylo provedeno 15 iterací a pro α částice 16 iterací. Analýzou reziduí vyplývá, že rezidua vykazují homoskedasticitu, nejsou autokorelovaná (jenom pro α částice vykazují rezidua slabou autokorelaci), v reziduích není trend a odpovídají normálnímu rozdělení. Podle reziduí Jackknife data jsou homogenní pro deuterony a α částice – pro protony se poslední 6 bod jeví jako odlehlý. Vzhledem ke složitosti jevů, které přispívají k dosahu jaderných částic, jako jsou ionizace, hustota, ..., a malému počtu bodů, odlehlé body se z hodnocení nebyly vyloučeny.

Na základě významnosti parametrů regresního modelu, podle vztahu (rov. 2), a podle Silenovho pravidla pro jaderné částice platí, že parametry p_1 a p_2 jsou statisticky významné.

Souhrn vypočtených odhadů parametrů regresních modelů a statistických charakteristik pro protony, deuterony a α částice jsou v Tabulce 8.

Tabulka 8 Vypočítané bodové odhady parametrů obou regresních modelů a statistických charakteristik pro protony, deuterony a α částice

Regresní model $R = p_1 + p_2 \cdot E + p_3 \cdot E^2$							
	P_1	P_2	P_3	D^2	AIC	MEP	s(e)
p	-0,96(0,52)	2,57(0,21)	0,89(0,01)	0,999967783	-2,522052974	4,361502047	0,695170951
d	-1,47(0,79)	2,49(0,17)	0,449(0,005)	0,999966032	5,036719808	76,44952168	1,23491503
α	-0,02(0,13)	0,42(0,03)	0,065(0,001)	0,999958289	-20,24770237	2,277432052	0,202902849
Regresní model $R = p_1 \cdot E^{P_2}$							
p	1,88(0,05)	1,79(0,01)	-	0,999969812	-4,9124106	5,148891307	0,582766709
d	1,12(0,02)	1,779(0,006)	-	0,999984031	-2,246378565	42,5826674	0,757346972
α	0,20(0,01)	1,734(0,016)	-	0,999886474	-15,23886337	2,923187973	0,299401916

Podle Aikeho informačního kritéria je pro dosah protonů a deuteronů optimálnější regresní model podle vztahu (rov. 2) a pro α částice je optimálnější model podle vztahu (rov. 1) – zápornější hodnoty AIC.

Fyzikální význam parametrů p_2 v (rov. 1) a p_1 v (rov. 2) spočívá v poměru hmotnosti jaderných částic a jejich náboje a parametr p_3 , resp. P_2 souvisí s hustotou prostředí, ve kterém se měří dosah jaderných částic.

Na Obr. 2, 3 a 4 jsou regresní křivky podle vztahu (rov. 1) a Obr. 5, 6, a 7 podle vztahu (rov. 2).

Výstupy

Tabulka 2 Odhady parametrů a statistických charakteristik regresního modelu podle (rov. 1) pro dosah protonů

Nelineární regrese					
Název úlohy :	dosah p				
Data:	Všechna				
Hladina významnosti :	0,05				
Počet stupňů volnosti :	3				
Kvantil t(1-alfa/2,n-p) :	3,182446305				
Kvantil F(1-alfa,m,p-m) :	18,51282051				
Metoda :	Nejmenší čtverce				
Počet platných řádků :	6				
Počet parametrů :	3				
Metoda optimalizace :	Gauss-Newton				
Nezávisle proměnné :	E(MEV)				
Závisle proměnná :	Rp				
Model :	$[Rp] \sim p1+p2*[E(MEV)] + p3*[E(MEV)]^2$				
Počáteční hodnoty parametrů :					
P1	1				
P2	1				
P3	1				
Výpočet					
Počet iterací :	14				
Ukončení výpočtu :	Konvergence				
Doba výpočtu :	0,16 s				
Max. počet iterací :	999999				
Terminační kritérium :	1,00E-08				
Odhady parametrů	Parametr	Směr. odchylka	Dolní mez	Horní mez	

Semestrální práce

P1	-0,959591597	0,519990579	-2,614433693	0,695250498	
P2	2,571733313	0,214381846	1,889474599	3,253992028	
P3	0,893888023	0,013985638	0,84937948	0,938396566	
Korelační matice parametrů :		P1	P2	P3	
	P1	1	-0,739371419	0,618650287	
	P2	-0,739371419	1	-0,968828517	
	P3	0,618650287	-0,968828517	1	
Analýza klasických reziduí					
Index	Y naměřené	Y vypočítané	Směr. odch. Y	Reziduum	Reziduum [%Y]
1	0,29	-0,409489414	0,489462276	0,699489414	241,2032461
2	2,3	2,506029739	0,393559109	-0,206029739	-8,957814732
3	7,2	7,75942712	0,342320726	-0,55942712	-7,769821117
4	33,9	34,24627554	0,464924415	-0,346275537	-1,021461762
5	114,8	114,1465438	0,513885836	0,653456194	0,569212712
6	238,5	238,7412132	0,676689751	-0,24121321	-0,101137614
Statistické charakteristiky regrese					
Vícenásobný korel. koef. R :	0,999983891				
Koeficient determinace R ² :	0,999967783				
Predikovaný korel. koef. Rp :	0,999418478				
Stř. kvadratická chyba predikce MEP :	4,361502047				
Akaikeho informační kritérium :	-2,522052974				
Reziduální součet čtverců :	1,449787954				
Průměr absolutních reziduí :	2,705891214				
Reziduální směr. odchylka :	0,695170951				
Reziduální rozptyl :	0,483262651				
Šikmost reziduí :	0,287169273				

Semestrální práce

Špičatost reziduí :	1,539308199				
Cook-Weisbergův test heteroskedasticity					
Hodnota kritéria CW :	0,034305535				
Kvantil $\chi^2(1-\alpha,1)$:	3,841458829				
Pravděpodobnost :	0,853058417				
Závěr :	Rezidua vykazují homoskedasticitu.				
Jarque-Berrův test normality					
Hodnota kritéria JB :	0,820574407				
Kvantil $\chi^2(1-\alpha,2)$:	5,991464547				
Pravděpodobnost :	0,663459675				
Závěr :	Rezidua mají normální rozdělení.				
Waldův test autokorelace					
Hodnota kritéria WA :	0,049713247				
Kvantil $\chi^2(1-\alpha,1)$:	3,841458829				
Pravděpodobnost :	0,853058417				
Závěr :	Autokorelace je nevýznamná				
Znaménkový test reziduí					
Hodnota kritéria Sg :	0,883883477				
Kvantil $N(1-\alpha/2)$:	1,959963999				
Pravděpodobnost :	0,376759118				
Závěr :	V reziduích není trend.				
Indikace vlivných dat					
Index	Standardní	Jackknife	Predikované	Diag(Hii)	Atkins. vzdál.
1	1,416977283	2,011794715	1,387164167	0,495741434	1,994732345

Semestrální práce

2	-0,359538672	-0,30009882	-0,303210713	0,320506399	0,206105677
3	-0,924604508	-0,892784362	-0,738502089	0,242484038	0,505117318
4	-0,67000557	-0,593239834	-0,626495919	0,447282054	0,533665661
5	1,395764201	1,924649886	1,440757417	0,546449537	2,112583883
6	-1,514889644	-2,551336563	-4,597737129	0,947536537	10,84269547

Tabulka 3 Odhady parametrů a statistických charakteristik regresního modelu podle (rov. 1) pro dosah deuteronů

Nelineární regrese					
Název úlohy :	dosah d				
Data:	Všechna				
Hladina významnosti :	0,05				
Počet stupňů volnosti :	4				
Kvantil t(1-alfa/2,n-p) :	2,776445105				
Kvantil F(1-alfa,m,p-m) :	18,51282051				
Metoda :	Nejmenší čtverce				
Počet platných řádků :	7				
Počet parametrů :	3				
Metoda optimalizace :	Gauss-Newton				
Nezávisle proměnné :	E(MEV)				
Závisle proměnná :	Rd				
Model :	$[Rd] \sim p1+p2*[E(MEV)] + p3*[E(MEV)]^2$				
Počáteční hodnoty parametrů :					
P1	1				
P2	1				
P3	1				
Výpočet					
Počet iterací :	14				
Ukončení výpočtu :	Konvergence				

Semestrální práce

Doba výpočtu :	0,16 s				
Max. počet iterací :	999999				
Terminační kritérium :	1,00E-08				
Odhady parametrů	Parametr	Směr. odchylka	Dolní mez	Horní mez	
P1	-1,47382376	0,789611196	-3,666135898	0,718488379	
P2	2,488737696	0,167393865	2,023977819	2,953497573	
P3	0,448940706	0,005447603	0,433815736	0,464065677	
Korelační matice parametrů :		P1	P2	P3	
	P1	1	-0,727264259	0,599391026	
	P2	-0,727264259	1	-0,959417735	
	P3	0,599391026	-0,959417735	1	
Analýza klasických reziduí					
Index	Y naměřené	Y vypočítané	Směr. odch. Y	Reziduum	Reziduum [%Y]
1	0,28	-0,958118592	0,76573377	1,238118592	442,1852115
2	1,72	1,463854643	0,680212562	0,256145357	14,89217193
3	4,61	5,299414458	0,59846782	-0,689414458	-14,95476047
4	20,8	22,19338238	0,539882814	-1,393382377	-6,698953736
5	67,8	68,30762382	0,752103198	-0,507623824	-0,748707705
6	138,2	136,8689006	0,895225583	1,331099419	0,9631689
7	477	477,2349427	1,228528717	-0,234942711	-0,049254237
Statistické charakteristiky regrese					
Vícenásobný korel. koef. R :	0,999983016				
Koeficient determinace R ² :	0,999966032				
Predikovaný korel. koef. Rp :	0,997020085				
Stř. kvadratická chyba predikce MEP :	76,44952168				
Akaikeho informační kritérium :	5,036719808				
Reziduální součet čtverců :	6,100060524				

Semestrální práce

Průměr absolutních reziduí :	5,650726738				
Reziduální směr. odchylka :	1,23491503				
Reziduální rozptyl :	1,525015131				
Šikmost reziduí :	0,037079145				
Špičatost reziduí :	1,798103979				
Cook-Weisbergův test heteroskedasticity					
Hodnota kritéria CW :	0,099570516				
Kvantil $\chi^2(1-\alpha,1)$:	3,841458829				
Pravděpodobnost :	0,752345642				
Závěr :	Rezidua vykazují homoskedasticitu.				
Jarque-Berrův test normality					
Hodnota kritéria JB :	0,464587266				
Kvantil $\chi^2(1-\alpha,2)$:	5,991464547				
Pravděpodobnost :	0,792713323				
Závěr :	Rezidua mají normální rozdělení.				
Waldův test autokorelace					
Hodnota kritéria WA :	0,056680083				
Kvantil $\chi^2(1-\alpha,1)$:	3,841458829				
Pravděpodobnost :	0,752345642				
Závěr :	Autokorelace je nevýznamná				
Znaménkový test reziduí					
Hodnota kritéria Sg :	0,060633906				
Kvantil $N(1-\alpha/2)$:	1,959963999				
Pravděpodobnost :	0,95165077				
Závěr :	V reziduích není trend.				

Semestrální práce

Indikace vlivných dat					
Index	Standardní	Jackknife	Predikované	Diag(Hii)	Atkins. vzdál.
1	1,2779283	1,438723138	2,011522446	0,384486813	1,313011832
2	0,248517847	0,216903811	0,367707789	0,303399698	0,165292175
3	-0,638223235	-0,583209391	-0,901029454	0,234859133	0,373101422
4	-1,254565671	-1,395091885	-1,722624574	0,191128236	0,783059512
5	-0,518265284	-0,464704394	-0,806930987	0,370920399	0,412034617
6	1,564823394	2,176076594	2,805396941	0,525521897	2,644422639
7	-1,873119784	-4,628057645	-22,7742078	0,989683825	52,34280784

Tabulka 4 Odhady parametrů a statistických charakteristik regresního modelu podle (rov. 1) pro dosah α částic

Nelineární regrese					
Název úlohy :	dosah alfa částic				
Data:	Všechna				
Hladina významnosti :	0,05				
Počet stupňů volnosti :	4				
Kvantil $t(1-\alpha/2, n-p)$:	2,776445105				
Kvantil $F(1-\alpha, m, p-m)$:	18,51282051				
Metoda :	Nejmenší čtverce				
Počet platných řádků :	7				
Počet parametrů :	3				
Metoda optimalizace :	Gauss-Newton				
Nezávisle proměnné :	E(MEV)				
Závisle proměnná :	Ralfa				
Model :	[Ralfa] $\sim p_1 + p_2 * [E(MEV)] + p_3 * [E(MEV)]^2$				
Počáteční hodnoty parametrů :					
P1	1				

Semestrální práce

P2	1				
P3	1				
Výpočet					
Počet iterací :	15				
Ukončení výpočtu :	Konvergence				
Doba výpočtu :	0,16 s				
Max. počet iterací :	999999				
Terminační kritérium :	1,00E-08				
Odhady parametrů	Parametr	Směr. odchylka	Dolní mez	Horní mez	
P1	-0,019556026	0,129737154	-0,379764111	0,340652059	
P2	0,422850059	0,027503667	0,346487637	0,499212481	
P3	0,064860696	0,000895069	0,062375587	0,067345806	
Korelační matice parametrů :		P1	P2	P3	
	P1	1	-0,727264254	0,599391014	
	P2	-0,727264254	1	-0,959417733	
	P3	0,599391014	-0,959417733	1	
Analýza klasických reziduí					
Index	Y naměřené	Y vypočítané	Směr. odch. Y	Reziduum	Reziduum [%Y]
1	0,17	0,067608413	0,125813971	0,102391587	60,23034508
2	0,57	0,468154729	0,111762399	0,101845271	17,86759138
3	1,05	1,085586877	0,098331321	-0,035586877	-3,389226426
4	3,48	3,71621168	0,088705505	-0,23621168	-6,787691943
5	10,55	10,69501421	0,123574398	-0,145014207	-1,374542248
6	21,17	20,91685156	0,147090138	0,253148444	1,195788586
7	71	71,04057253	0,201853545	-0,040572534	-0,057144414
Statistické charakteristiky regrese					
Vícenásobný korel. koef. R :	0,999979144				
Koeficient determinace R ² :	0,999958289				

Semestrální práce

Predikovaný korel. koef. Rp :	0,995962062				
Stř. kvadratická chyba predikce MEP :	2,277432052				
Akaikeho informační kritérium :	-20,24770237				
Reziduální součet čtverců :	0,164678265				
Průměr absolutních reziduí :	0,914770599				
Reziduální směr. odchylka :	0,202902849				
Reziduální rozptyl :	0,041169566				
Šikmost reziduí :	0,006342852				
Špičatost reziduí :	2,035037418				
Cook-Weisbergův test heteroskedasticity					
Hodnota kritéria CW :	0,030984248				
Kvantil $\chi^2(1-\alpha,1)$:	3,841458829				
Pravděpodobnost :	0,860275534				
Závěr :	Rezidua vykazují homoskedasticitu.				
Jarque-Berrův test normality					
Hodnota kritéria JB :	0,278986223				
Kvantil $\chi^2(1-\alpha,2)$:	5,991464547				
Pravděpodobnost :	0,869799015				
Závěr :	Rezidua mají normální rozdělení.				
Waldův test autokorelace					
Hodnota kritéria WA :	0,000707265				
Kvantil $\chi^2(1-\alpha,1)$:	3,841458829				
Pravděpodobnost :	0,860275534				
Závěr :	Autokorelace je nevýznamná				

Semestrální práce

Znaménkový test reziduí					
Hodnota kritéria Sg :	0,060633906				
Kvantil $N(1-\alpha/2)$:	1,959963999				
Pravděpodobnost :	0,95165077				
Závěr :	V reziduích není trend.				
Indikace vlivných dat					
Index	Standardní	Jackknife	Predikované	Diag(Hii)	Atkins. vzdál.
1	0,643216898	0,588296763	0,166351572	0,38448681	0,536893156
2	0,601396494	0,546098443	0,146203311	0,303399697	0,416155892
3	-0,200507692	-0,174524026	-0,04651023	0,234859133	0,111649715
4	-1,294414547	-1,470517101	-0,292026117	0,191128238	0,825395389
5	-0,901092978	-0,874115728	-0,230518057	0,370920398	0,77504311
6	1,811252631	3,698838211	0,5335303	0,525521899	4,494920616
7	-1,968723112	-9,678501006	-3,932904843	0,989683825	109,4627507

Tabulka 5 Odhady parametrů a statistických charakteristik regresního modelu podle (rov. 2) pro dosah protonů

Nelineární regrese					
Název úlohy :	dosah p				
Data:	Všechna				
Hladina významnosti :	0,05				
Počet stupňů volnosti :	4				
Kvantil $t(1-\alpha/2, n-p)$:	2,776445105				
Kvantil $F(1-\alpha, m, p-m)$:	161,4476392				
Metoda :	Nejmenší čtverce				
Počet platných řádků :	6				
Počet parametrů :	2				
Metoda optimalizace :	Gauss-Newton				
Nezávisle proměnné :	E(MEV)				
Závisle proměnná :	Rp				

Semestrální práce

Model :	$[Rp] \sim p1*[E(MEV)]^p2$				
Počáteční hodnoty parametrů :					
P1	1				
P2	1				
Výpočet					
Počet iterací :	15				
Ukončení výpočtu :	Konvergence				
Doba výpočtu :	0,16 s				
Max. počet iterací :	999999				
Terminační kritérium :	1,00E-08				
Odhady parametrů	Parametr	Směr. odchylka	Dolní mez	Horní mez	
P1	1,880944719	0,051612527	1,73764537	2,024244068	
P2	1,787896897	0,010465416	1,758840242	1,816953551	
Korelační matice parametrů :		P1	P2		
	P1	1	-0,996829678		
	P2	-0,996829678	1		
Analýza klasických reziduí					
Index	Y naměřené	Y vypočítané	Směr. odch. Y	Reziduum	Reziduum [%Y]
1	0,29	0,105849724	0,004683844	0,184150276	63,50009517
2	2,3	1,880944719	0,051612527	0,419055281	18,21979483
3	7,2	6,495111739	0,13130976	0,704888261	9,790114737
4	33,9	33,42430099	0,35875979	0,475699011	1,403241921
5	114,8	115,4178363	0,45240426	-0,617836338	-0,538184964
6	238,5	238,2900697	0,570900891	0,20993033	0,088021103
Statistické charakteristiky regrese					
Vícenásobný korel. koef. R :	0,999984906				
Koeficient determinace R ² :	0,999969812				
Predikovaný korel. koef. Rp :	0,999313494				

Semestrální práce

Stř. kvadratická chyba predikce MEP :	5,148891307				
Akaikeho informační kritérium :	-4,9124106				
Reziduální součet čtverců :	1,358468147				
Průměr absolutních reziduí :	2,611559498				
Reziduální směr. odchylka :	0,582766709				
Reziduální rozptyl :	0,339617037				
Šikmost reziduí :	0,231672937				
Špičatost reziduí :	1,553213243				
Cook-Weisbergův test heteroskedasticity					
Hodnota kritéria CW :	0,056186691				
Kvantil $\chi^2(1-\alpha,1)$:	3,841458829				
Pravděpodobnost :	0,812627838				
Závěr :	Rezidua vykazují homoskedasticitu.				
Jarque-Berrův test normality					
Hodnota kritéria JB :	0,754970917				
Kvantil $\chi^2(1-\alpha,2)$:	5,991464547				
Pravděpodobnost :	0,685583171				
Závěr :	Rezidua mají normální rozdělení.				
Waldův test autokorelace					
Hodnota kritéria WA :	0,172990013				
Kvantil $\chi^2(1-\alpha,1)$:	3,841458829				
Pravděpodobnost :	0,812627838				
Závěr :	Autokorelace je nevýznamná				
Znaménkový test reziduí					

Semestrální práce

Hodnota kritéria Sg :	1,767766953				
Kvantil $N(1-\alpha/2)$:	1,959963999				
Pravděpodobnost :	0,077099872				
Závěr :	V reziduích není trend.				
Indikace vlivných dat					
Index	Standardní	Jackknife	Predikované	Diag(Hii)	Atkins. vzdál.
1	0,316003336	0,277148218	0,184162172	6,46E-05	0,003150277
2	0,721915782	0,670393949	0,422368209	0,007843697	0,084297642
3	1,241480053	1,371340157	0,742589292	0,050769694	0,448514683
4	1,035822306	1,048646647	0,76599818	0,378981539	1,158513083
5	-1,681865072	-2,691610215	-1,554885177	0,602648255	4,687826775
6	1,794262608	3,517436985	5,208183681	0,959692218	24,2724079

Tabulka 6 Odhady parametrů a statistických charakteristik regresního modelu podle (rov. 2) pro dosah deuteronů

Nelineární regrese					
Název úlohy :	dosah d				
Data:	Všechna				
Hladina významnosti :	0,05				
Počet stupňů volnosti :	5				
Kvantil $t(1-\alpha/2, n-p)$:	2,570581836				
Kvantil $F(1-\alpha, m, p-m)$:	161,4476392				
Metoda :	Nejmenší čtverce				
Počet platných řádků :	7				
Počet parametrů :	2				
Metoda optimalizace :	Gauss-Newton				
Nezávisle proměnné :	E(MEV)				
Závisle proměnná :	Rd				

Semestrální práce

Model :	[Rd] ~ p1*[E(MEV)]^p2				
Počáteční hodnoty parametrů :					
P1	1				
P2	1				
Výpočet					
Počet iterací :	15				
Ukončení výpočtu :	Konvergence				
Doba výpočtu :	0,16 s				
Max. počet iterací :	999999				
Terminační kritérium :	1,00E-08				
Odhady parametrů	Parametr	Směr. odchylka	Dolní mez	Horní mez	
P1	1,122541524	0,023388828	1,062418629	1,182664419	
P2	1,779276339	0,006249724	1,763210911	1,795341767	
Korelační matice parametrů :		P1	P2		
	P1	1	-0,9973708		
	P2	-0,9973708	1		
Analýza klasických reziduí					
Index	Y naměřené	Y vypočítané	Směr. odch. Y	Reziduum	Reziduum [%Y]
1	0,28	0,064053317	0,001977726	0,215946683	77,12381535
2	1,72	1,122541524	0,023388828	0,597458476	34,73595789
3	4,61	3,853168167	0,063646078	0,756831833	16,41717642
4	20,8	19,67266541	0,213011682	1,127334594	5,419877856
5	67,8	67,52720186	0,443388084	0,272798139	0,402357137
6	138,2	138,9292736	0,575345961	-0,729273571	-0,527694335
7	477	476,8802248	0,754690106	0,119775222	0,025110109
Statistické charakteristiky regrese					
Vícenásobný korel. koef. R :	0,999992015				
Koeficient determinace R ² :	0,999984031				

Semestrální práce

Predikovaný korel. koef. Rp :	0,998340176				
Stř. kvadratická chyba predikce MEP :	42,5826674				
Akaikeho informační kritérium :	-2,246378565				
Reziduální součet čtverců :	2,86787218				
Průměr absolutních reziduí :	3,819418518				
Reziduální směr. odchylka :	0,757346972				
Reziduální rozptyl :	0,573574436				
Šikmost reziduí :	0,88176303				
Špičatost reziduí :	2,009801625				
Cook-Weisbergův test heteroskedasticity					
Hodnota kritéria CW :	0,266484716				
Kvantil $\chi^2(1-\alpha,1)$:	3,841458829				
Pravděpodobnost :	0,605699662				
Závěr :	Rezidua vykazují homoskedasticitu.				
Jarque-Berrův test normality					
Hodnota kritéria JB :	1,314700608				
Kvantil $\chi^2(1-\alpha,2)$:	5,991464547				
Pravděpodobnost :	0,518222649				
Závěr :	Rezidua mají normální rozdělení.				
Waldův test autokorelace					
Hodnota kritéria WA :	1,525212827				
Kvantil $\chi^2(1-\alpha,1)$:	3,841458829				
Pravděpodobnost :	0,605699662				
Závěr :	Autokorelace je nevýznamná				

Semestrální práce

Znaménkový test reziduí					
Hodnota kritéria Sg :	1,739252713				
Kvantil $N(1-\alpha/2)$:	1,959963999				
Pravděpodobnost :	0,081990321				
Závěr :	V reziduích není trend.				
Indikace vlivných dat					
Index	Standardní	Jackknife	Predikované	Diag(Hii)	Atkins. vzdál.
1	0,285136704	0,257133158	0,215948156	6,82E-06	0,001061698
2	0,78925989	0,75449843	0,598028836	0,000953734	0,036859471
3	1,002867421	1,003588139	0,762214914	0,007062419	0,133826249
4	1,551148749	1,926210225	1,224175959	0,07910739	0,892642833
5	0,444305222	0,405483818	0,415060321	0,342750619	0,462985684
6	-1,480773136	-1,767556338	-1,724552285	0,577122957	3,264903807
7	1,889735128	3,161766833	17,10112469	0,992996062	59,52541759

Tabulka 7 Odhady parametrů a statistických charakteristik regresního modelu podle (rov. 2) pro dosah α částic

Nelineární regrese					
Název úlohy :	dosah alfa částic				
Data:	Všechna				
Hladina významnosti :	0,05				
Počet stupňů volnosti :	5				
Kvantil $t(1-\alpha/2, n-p)$:	2,570581836				
Kvantil $F(1-\alpha, m, p-m)$:	161,4476392				
Metoda :	Nejmenší čtverce				
Počet platných řádků :	7				
Počet parametrů :	2				
Metoda optimalizace :	Gauss-Newton				
Nezávisle proměnné :	E(MEV)				

Semestrální práce

Závisle proměnná :	Ralfa				
Model :	[Ralfa] ~ p1*[E(MEV)]^p2				
Počáteční hodnoty parametrů :					
P1	1				
P2	1				
Výpočet					
Počet iterací :	16				
Ukončení výpočtu :	Konvergence				
Doba výpočtu :	0,16 s				
Max. počet iterací :	999999				
Terminační kritérium :	1,00E-08				
Odhady parametrů	Parametr	Směr. odchylka	Dolní mez	Horní mez	
P1	0,195121273	0,010365115	0,168476896	0,22176565	
P2	1,733601619	0,015957238	1,692582234	1,774621004	
Korelační matice parametrů :		P1	P2		
	P1	1	-0,997165588		
	P2	-0,997165588	1		
Analýza klasických reziduí					
Index	Y naměřené	Y vypočítané	Směr. odch. Y	Reziduum	Reziduum [%Y]
1	0,17	0,011983097	0,000943721	0,158016903	92,95111917
2	0,57	0,195121273	0,010365115	0,374878727	65,7681977
3	1,05	0,648889443	0,027318195	0,401110557	38,20100539
4	3,48	3,177167798	0,087623548	0,302832202	8,702074782
5	10,55	10,56589377	0,176581714	-0,015893769	-0,150651836
6	21,17	21,33920972	0,225013408	-0,169209722	-0,799290135
7	71	70,96503471	0,29822539	0,034965293	0,049246892
Statistické charakteristiky regrese					
Vícenásobný korel. koef. R :	0,999943235				

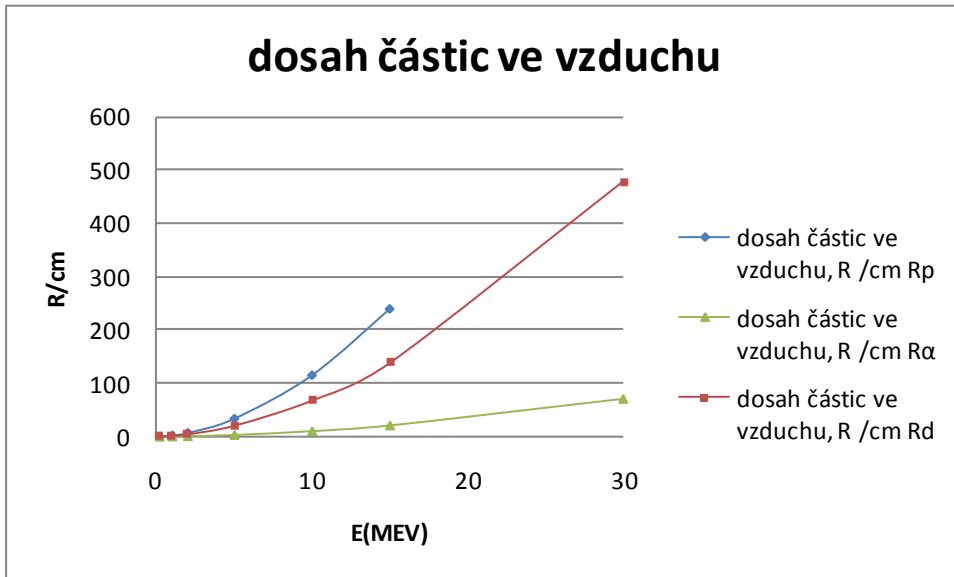
Semestrální práce

Koeficient determinace R^2 :	0,999886474				
Predikovaný korel. koef. R_p :	0,994817123				
Stř. kvadratická chyba predikce MEP :	2,923187973				
Akaikeho informační kritérium :	-15,23886337				
Reziduální součet čtverců :	0,448207536				
Průměr absolutních reziduí :	1,456907172				
Reziduální směr. odchylka :	0,299401916				
Reziduální rozptyl :	0,089641507				
Šikmost reziduí :	1,614970803				
Špičatost reziduí :	1,933558354				
Cook-Weisbergův test heteroskedasticity					
Hodnota kritéria CW :	0,524083186				
Kvantil $\chi^2(1-\alpha,1)$:	3,841458829				
Pravděpodobnost :	0,469105089				
Závěr :	Rezidua vykazují homoskedasticitu.				
Jarque-Berrův test normality					
Hodnota kritéria JB :	2,215844457				
Kvantil $\chi^2(1-\alpha,2)$:	5,991464547				
Pravděpodobnost :	0,330244421				
Závěr :	Rezidua mají normální rozdělení.				
Waldův test autokorelace					
Hodnota kritéria WA :	3,949894162				
Kvantil $\chi^2(1-\alpha,1)$:	3,841458829				
Pravděpodobnost :	0,469105089				

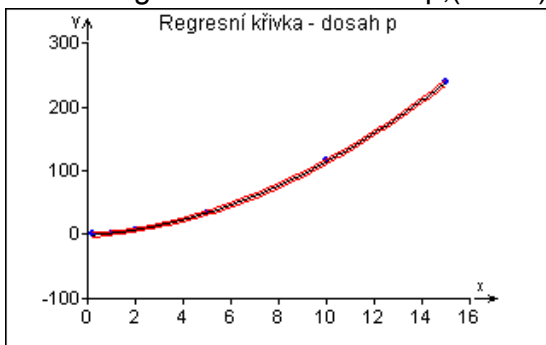
Semestrální práce

Závěr :	Autokorelace je významná				
Znaménkový test reziduí					
Hodnota kritéria Sg :	0,379777263				
Kvantil N(1-alfa/2) :	1,959963999				
Pravděpodobnost :	0,704110762				
Závěr :	V reziduích není trend.				
Indikace vlivných dat					
Index	Standardní	Jackknife	Predikované	Diag(Hii)	Atkins. vzdál.
1	0,52777781	0,485784215	0,158018473	9,94E-06	0,002421055
2	1,252842937	1,352867361	0,375328559	0,001198503	0,074097779
3	1,345317771	1,506438333	0,404477918	0,008325203	0,218239896
4	1,057770587	1,07384814	0,331199802	0,085651015	0,519664606
5	-0,065734896	-0,0588205	-0,024371049	0,34784223	0,06792248
6	-0,856711702	-0,829567971	-0,388824156	0,564816849	1,494306775
7	1,318624469	1,460361734	4,457734916	0,992156265	25,96922695

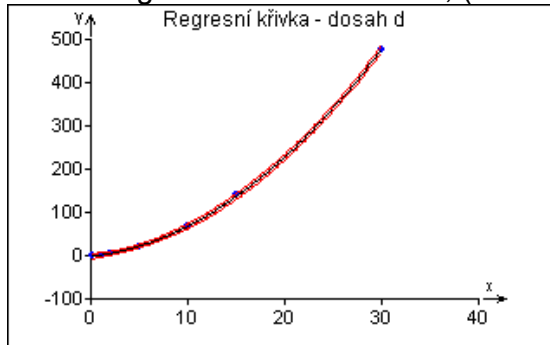
Obr. 1 Graf závislosti dosahu jaderných částic ve vzduchu na jejich počáteční energii



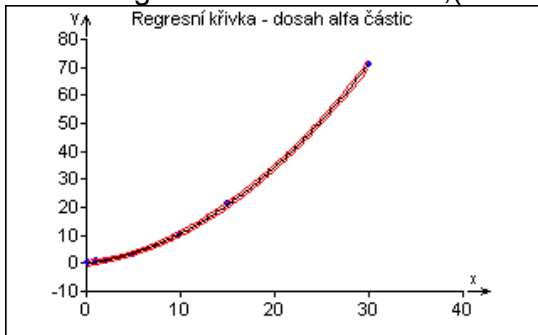
Obr. 2 Regresní křivka dosahu p,(rov. 1)



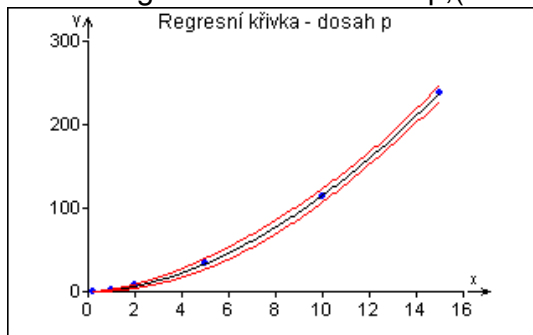
Obr. 3 Regresní křivka dosahu d,(rov. 1)

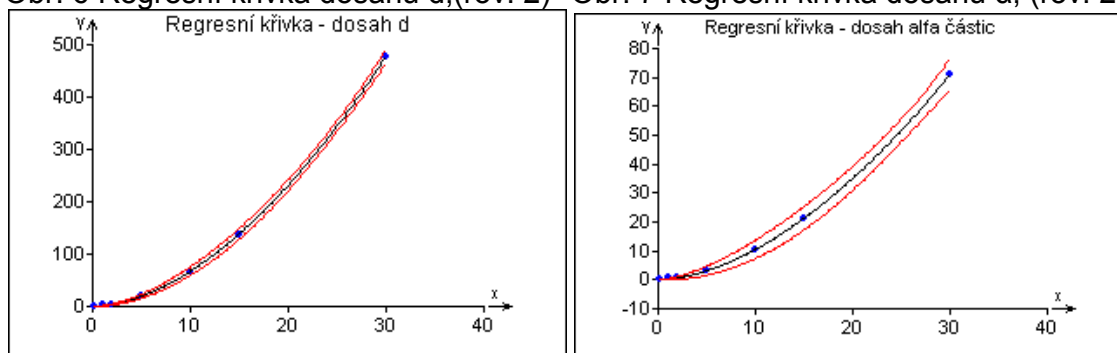


Obr. 4 Regresní křivka dosahu α,(rov. 1)



Obr. 5 Regresní křivka dosahu p,(rov. 2)



Obr. 6 Regresní křivka dosahu d,(rov. 2) Obr. 7 Regresní křivka dosahu α , (rov. 2)**Závěr**

Pro dosahy protonů, deutronů a α částic ve vzduchu (R_p , R_d a R_α), v závislosti na jejich počáteční energii (E) byly pomocí nelineární regrese vybrány tyto optimální modely popsané vztahy:

$$R_p = 1,88 \cdot E^{1,79},$$

$$R_d = 1,12 \cdot E^{1,779},$$

$$R_\alpha = 0,42 \cdot E + 0,65 \cdot E^2.$$

