

第十章 统计回归模型

10.1 牙膏的销售量

10.2 软件开发人员的薪金

10.3 酶促反应

数学建模的基本方法

机理分析

测试分析

由于客观事物内部规律的复杂及人们认识程度的限制，无法分析实际对象内在的因果关系，建立合乎机理规律的数学模型。

通过对数据的统计分析，找出与数据拟合最好的模型

回归模型是用统计分析方法建立的最常用的一类模型

- 不涉及回归分析的数学原理和方法
- 通过实例讨论如何选择不同类型的模型
- 对软件得到的结果进行分析，对模型进行改进



多项式回归

设变量 x 、 Y 的回归模型为

$$Y = \beta_0 + \beta_1 x + \beta_2 x^2 + \dots + \beta_p x^p + \varepsilon$$

其中 p 是已知的, $\beta_i (i = 1, 2, \dots, p)$ 是未知参数, ε 服从正态分布 $N(0, \sigma^2)$.

$$Y = \beta_0 + \beta_1 x + \beta_2 x^2 + \dots + \beta_k x^k$$

称为**回归多项式**. 上面的回归模型称为**多项式回归**.

令 $x^i = x_i$, $i=1, 2, \dots, k$, 多项式回归模型变为**多元线性回归模型**.

多元线性回归

$$y = \beta_0 + \beta_1 x_1 + \dots + \beta_p x_p$$

1、确定回归系数的点估计值：

$$\mathbf{b} = \text{regress}(\mathbf{Y}, \mathbf{X})$$

$$\mathbf{b} = \begin{bmatrix} \hat{\beta}_0 \\ \hat{\beta}_1 \\ \vdots \\ \hat{\beta}_p \end{bmatrix}$$

$$\mathbf{Y} = \begin{bmatrix} Y_1 \\ Y_2 \\ \vdots \\ Y_n \end{bmatrix}$$

$$\mathbf{X} = \begin{bmatrix} 1 & x_{11} & x_{12} & \dots & x_{1p} \\ 1 & x_{21} & x_{22} & \dots & x_{2p} \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ 1 & x_{n1} & x_{n2} & \dots & x_{np} \end{bmatrix}$$

对一元线性回归，取 $p=1$ 即可

2、求回归系数的点估计和区间估计、并检验回归模型：

`[b, bint, r, rint, stats] = regress(Y, X, alpha)`

回归系数的区间估计

残差

置信区间

用于检验回归模型的统计量，
有三个数值：相关系数 R^2 、
F值、与F对应的概率 p

显著性水平
(缺省时为 0.05)

相关系数 R^2 越接近 1，说明回归方程越显著；

F 越大，说明回归方程越显著；

与 F 对应的概率 $p < \alpha$ 时，回归模型成立。

3、画出残差及其置信区间：

`rcoplot (r, rint)`



多项式回归

(一) 一元多项式回归 $y=a_1x^m+a_2x^{m-1}+\dots+a_mx+a_{m+1}$

1、回归:

(1) 确定多项式系数的命令: $[p, S]=\text{polyfit}(x, y, m)$

其中 $x=(x_1, x_2, \dots, x_n)$, $y=(y_1, y_2, \dots, y_n)$;

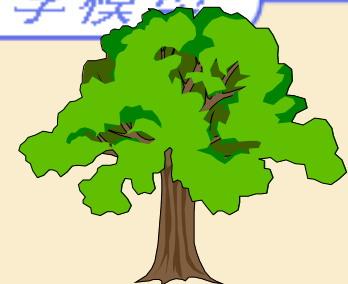
$p=(a_1, a_2, \dots, a_{m+1})$ 是多项式 $y=a_1x^m+a_2x^{m-1}+\dots+a_mx+a_{m+1}$ 的系数; S 是一个矩阵, 用来估计预测误差.

(2) 一元多项式回归命令: $\text{polytool}(x, y, m)$

2、预测和预测误差估计:

(1) $Y=\text{polyval}(p, x)$ 求polyfit所得的回归多项式在x处的预测值Y;

(2) $[Y, \text{DELTA}]=\text{polyconf}(p, x, S, \alpha)$ 求polyfit所得的回归多项式在x处的预测值Y及预测值的显著性为1-alpha的置信区间 $Y \pm \text{DELTA}$; alpha缺省时为0.05.



(二) 多元二项式回归

命令: `rstool (x, y, 'model', alpha)`

$n \times m$ 矩阵

n 维列向量

显著性水平
(缺省时为0.05)

由下列 4 个模型中选择 1 个 (用字符串输入, 缺省时为线性模型):

linear (线性): $y = \beta_0 + \beta_1 x_1 + \cdots + \beta_m x_m$

purequadratic (纯二次): $y = \beta_0 + \beta_1 x_1 + \cdots + \beta_m x_m + \sum_{j=1}^n \beta_{jj} x_j^2$

interaction (交叉): $y = \beta_0 + \beta_1 x_1 + \cdots + \beta_m x_m + \sum_{1 \leq j \neq k \leq m} \beta_{jk} x_j x_k$

quadratic (完全二次): $y = \beta_0 + \beta_1 x_1 + \cdots + \beta_m x_m + \sum_{1 \leq j, k \leq m} \beta_{jk} x_j x_k$

10.1 牙膏的销售量

问题

建立牙膏销售量与价格、广告投入之间的模型
预测在不同价格和广告费用下的牙膏销售量
收集了30个销售周期本公司牙膏销售量、价格、
广告费用，及同期其它厂家同类牙膏的平均售价

销售 周期	本公司价 格(元)	其它厂家 价格(元)	广告费用 (百万元)	价格差 (元)	销售量 (百万支)
1	3.85	3.80	5.50	-0.05	7.38
2	3.75	4.00	6.75	0.25	8.51
...
29	3.80	3.85	5.80	0.05	7.93
30	3.70	4.25	6.80	0.55	9.26

基本模型

y ~ 公司牙膏销售量

x_1 ~ 其它厂家与本公司价格差

x_2 ~ 公司广告费用

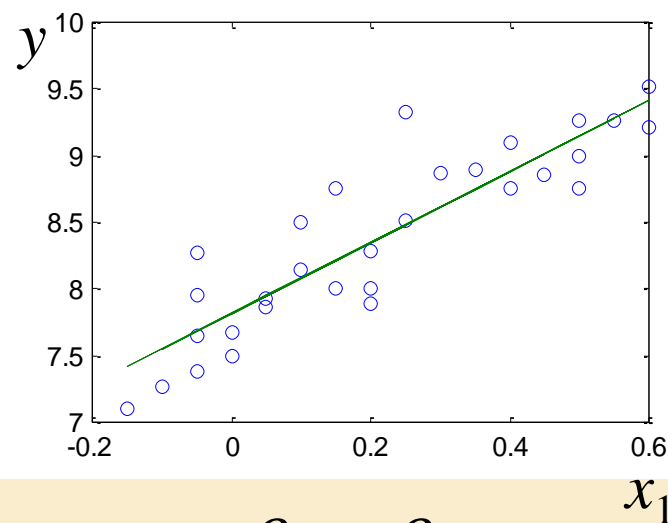
$$y = \beta_0 + \beta_1 x_1 + \beta_2 x_2 + \beta_3 x_2^2 + \varepsilon$$

y ~ 被解释变量（因变量）

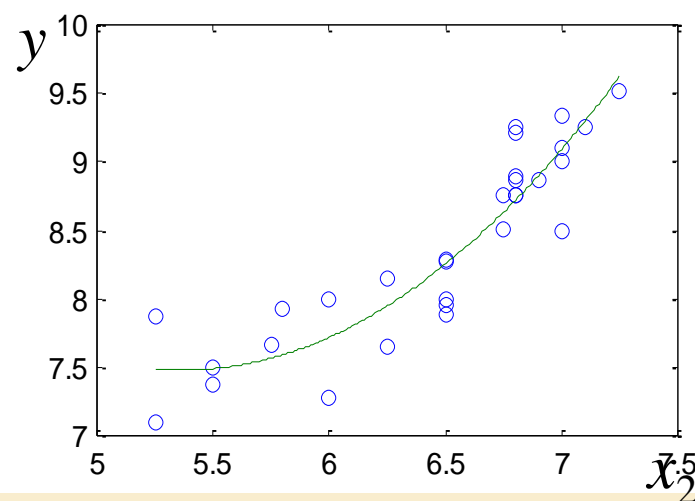
x_1, x_2 ~ 解释变量（回归变量, 自变量）

$\beta_0, \beta_1, \beta_2, \beta_3$ ~ 回归系数

ε ~ 随机误差（均值为零的正态分布随机变量）



$$y = \beta_0 + \beta_1 x_1 + \varepsilon$$



$$y = \beta_0 + \beta_1 x_2 + \beta_2 x_2^2 + \varepsilon$$

模型求解

MATLAB 统计工具箱

$y = \beta_0 + \beta_1 x_1 + \beta_2 x_2 + \beta_3 x_2^2 + \varepsilon$ 由数据 y, x_1, x_2 估计 β

[b,bint,r,rint,stats]=regress(y,x,alpha)

输入 $y \sim n$ 维数据向量

$\mathbf{x} = [1 \ x_1 \ x_2 \ x_2^2] \sim n \times 4$ 数据矩阵, 第1列为全1向量

alpha (置信水平, 0.05)

输出 $\mathbf{b} \sim \beta$ 的估计值

$\mathbf{bint} \sim \mathbf{b}$ 的置信区间

$\mathbf{r} \sim$ 残差向量 $\mathbf{y} - \mathbf{x}\mathbf{b}$

$\mathbf{rint} \sim \mathbf{r}$ 的置信区间

Stats ~
检验统计量
 R^2, F, p

参数	参数估计值	置信区间
β_0	17.3244	[5.7282 28.9206]
β_1	1.3070	[0.6829 1.9311]
β_2	-3.6956	[-7.4989 0.1077]
β_3	0.3486	[0.0379 0.6594]
$R^2=0.9054 \quad F=82.9409 \quad p=0.0000$		

结果分析

$$y = \beta_0 + \beta_1 x_1 + \beta_2 x_2 + \beta_3 x_2^2 + \varepsilon$$

参数	参数估计值	置信区间
β_0	17.3244	[5.7282 28.9206]
β_1	1.3070	[0.6829 1.9311]
β_2	-3.6956	[-7.4989 0.1077]
β_3	0.3486	[0.0379 0.6594]
$R^2=0.9054 \quad F=82.9409 \quad p=0.0000$		

y 的90.54%可由模型确定

F 远超过 F 检验的临界值

p 远小于 $\alpha=0.05$

模型从整体上看成立

β_2 的置信区间包含零点
(右端点距零点很近)

x_2 对因变量 y 的
影响不太显著

x_2^2 项显著

可将 x_2 保留在模型中

销售量预测

$$\hat{y} = \hat{\beta}_0 + \hat{\beta}_1 x_1 + \hat{\beta}_2 x_2 + \hat{\beta}_3 x_2^2$$

价格差 x_1 =其它厂家价格 x_3 -本公司价格 x_4

估计 x_3 调整 x_4 \Rightarrow 控制 x_1 \Rightarrow 通过 x_1, x_2 预测 y

控制价格差 $x_1=0.2$ 元, 投入广告费 $x_2=6.5$ 百万元

$$\hat{y} = \hat{\beta}_0 + \hat{\beta}_1 x_1 + \hat{\beta}_2 x_2 + \hat{\beta}_3 x_2^2 = 8.2933 \text{ (百万支)}$$

销售量预测区间为 $[7.8320, 8.7636]$ (置信度95%)

上限用作库存管理的目标值 下限用来把握公司的现金流

若估计 $x_3=3.9$, 设定 $x_4=3.7$, 则可以95%的把握

知道销售额在 $7.8320 \times 3.7 \approx 29$ (百万元) 以上

模型改进

x_1 和 x_2 对 y 的影响独立



x_1 和 x_2 对 y 的影响有交互作用

$$y = \beta_0 + \beta_1 x_1 + \beta_2 x_2 + \beta_3 x_2^2 + \varepsilon$$

参数	参数估计值	置信区间
β_0	17.3244	[5.7282 28.9206]
β_1	1.3070	[0.6829 1.9311]
β_2	-3.6956	[-7.4989 0.1077]
β_3	0.3486	[0.0379 0.6594]
$R^2=0.9054 \quad F=82.9409 \quad p=0.0000$		

$$y = \beta_0 + \beta_1 x_1 + \beta_2 x_2 + \beta_3 x_2^2 + \beta_4 x_1 x_2 + \varepsilon$$

参数	参数估计值	置信区间
β_0	29.1133	[13.7013 44.5252]
β_1	11.1342	[1.9778 20.2906]
β_2	-7.6080	[-12.6932 -2.5228]
β_3	0.6712	[0.2538 1.0887]
β_4	-1.4777	[-2.8518 -0.1037]
$R^2=0.9209 \quad F=72.7771 \quad p=0.0000$		

两模型销售量预测比较

控制价格差 $x_1=0.2$ 元，投入广告费 $x_2=6.5$ 百万元

$$\hat{y} = \hat{\beta}_0 + \hat{\beta}_1 x_1 + \hat{\beta}_2 x_2 + \hat{\beta}_3 x_2^2$$

$$\hat{y} = 8.2933 \text{ (百万支)}$$

$$\text{区间 } [7.8320, 8.7636]$$

$$\hat{y} = \beta_0 + \hat{\beta}_1 x_1 + \hat{\beta}_2 x_2 + \hat{\beta}_3 x_2^2 + \hat{\beta}_4 x_1 x_2$$

$$\hat{y} = 8.3272 \text{ (百万支)}$$

$$\text{区间 } [7.8953, 8.7592]$$

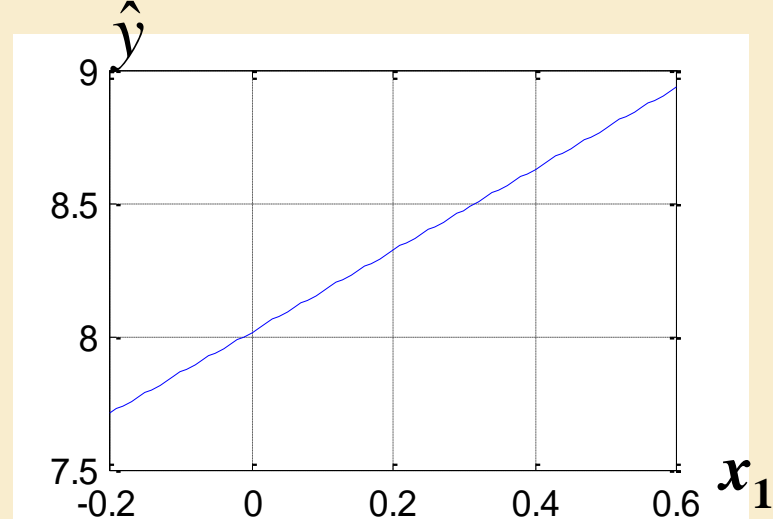
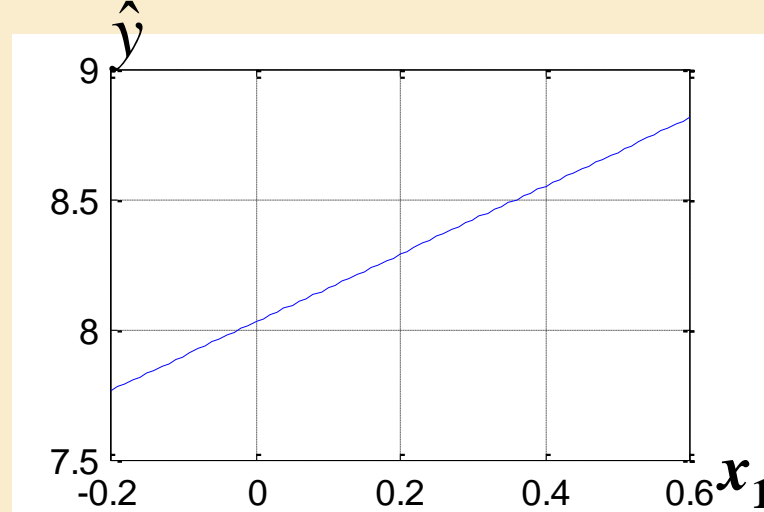
\hat{y} 略有增加

预测区间长度更短

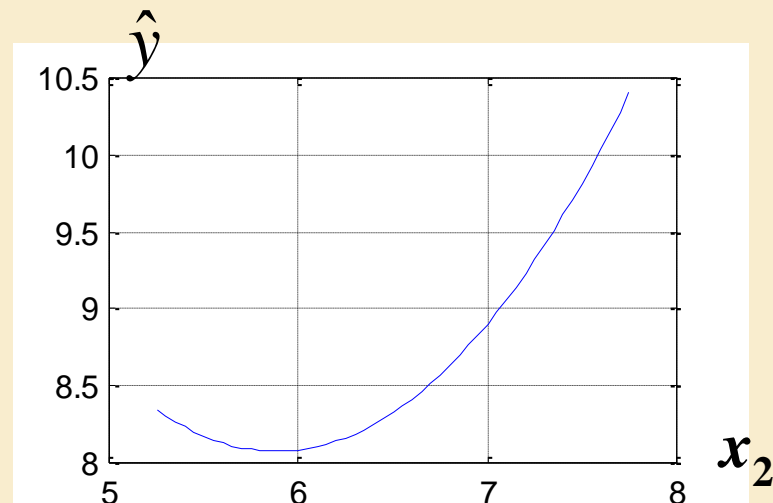
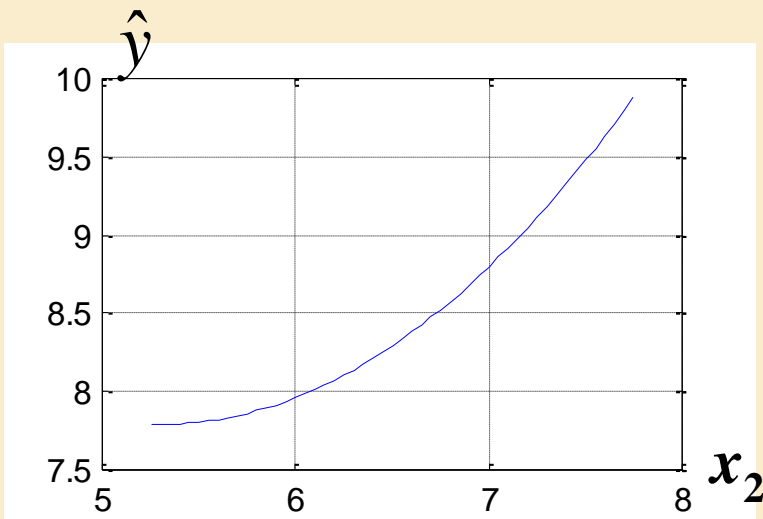
两模型 \hat{y} 与 x_1, x_2 关系的比较

$$\hat{y} = \hat{\beta}_0 + \hat{\beta}_1 x_1 + \hat{\beta}_2 x_2 + \hat{\beta}_3 x_2^2 \quad \hat{y} = \beta_0 + \hat{\beta}_1 x_1 + \hat{\beta}_2 x_2 + \hat{\beta}_3 x_2^2 + \hat{\beta}_4 x_1 x_2$$

$x_2=6.5$



$x_1=0.2$



交互作用影响的讨论

$$\hat{y} = \beta_0 + \hat{\beta}_1 x_1 + \hat{\beta}_2 x_2 + \hat{\beta}_3 x_2^2 + \hat{\beta}_4 x_1 x_2$$

价格差 $x_1=0.1$

$$\hat{y}|_{x_1=0.1} = 30.2267 - 7.7558 x_2 + 0.6712 x_2^2$$

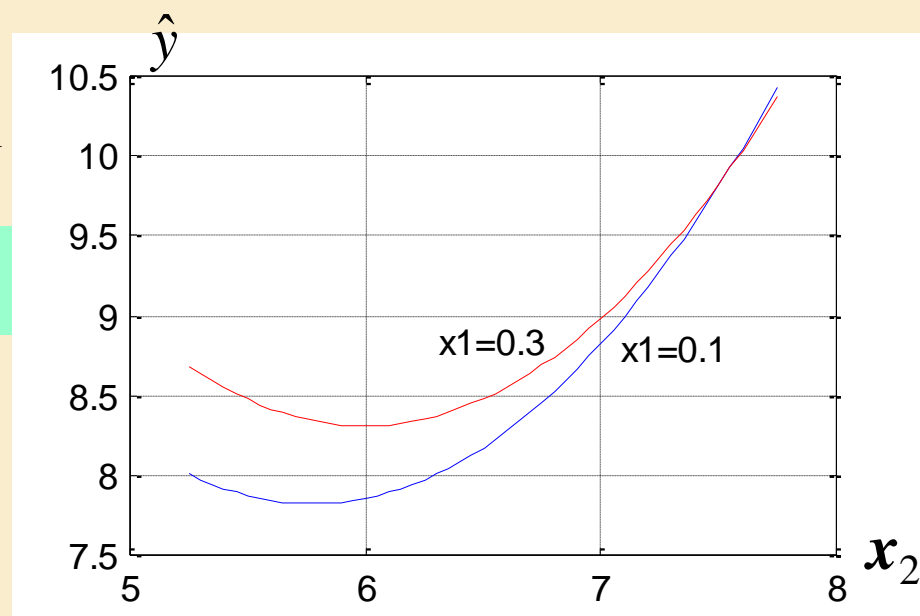
价格差 $x_1=0.3$

$$\hat{y}|_{x_1=0.3} = 32.4535 - 8.0513 x_2 + 0.6712 x_2^2$$

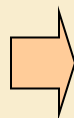
$$x_2 < 7.5357 \Rightarrow \hat{y}|_{x_1=0.3} > \hat{y}|_{x_1=0.1}$$

价格优势会使销售量增加

加大广告投入使销售量增加
(x_2 大于 6 百万元)



价格差较小时增加的
速率更大

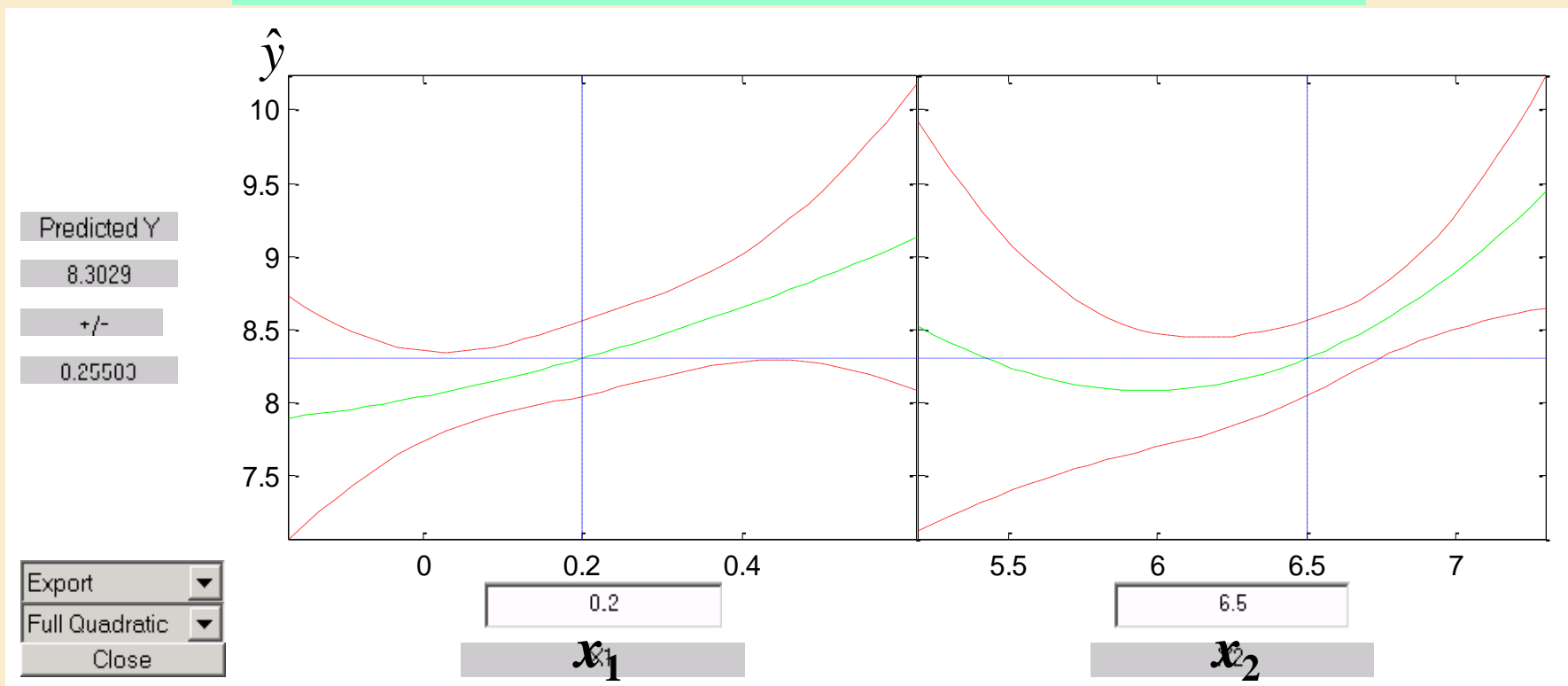


价格差较小时更需要靠广告
来吸引顾客的眼球

完全二次多项式模型

$$y = \beta_0 + \beta_1 x_1 + \beta_2 x_2 + \beta_3 x_1 x_2 + \beta_4 x_1^2 + \beta_5 x_2^2 + \varepsilon$$

MATLAB中有命令`rstool`直接求解



从输出 **Export** 可得 $\hat{\beta} = (\hat{\beta}_0, \hat{\beta}_1, \hat{\beta}_2, \hat{\beta}_3, \hat{\beta}_4, \hat{\beta}_5)$

总结:

1. 根据已知数据，分析决定取哪几个回归变量及函数形式（线性、二次的）；
2. 用Matlab求解并作统计分析，检验回归变量对因变量是否显著；
3. 否则改进模型，如添二次项、交互项等。

10.2 软件开发人员的薪金

建立模型研究薪金与资历、管理责任、教育程度的关系

分析人事策略的合理性，作为新聘用人员薪金的参考

46名软件开发人员的档案资料

编号	薪金	资历	管理	教育	编号	薪金	资历	管理	教育
01	13876	1	1	1	42	27837	16	1	2
02	11608	1	0	3	43	18838	16	0	2
03	18701	1	1	3	44	17483	16	0	1
04	11283	1	0	2	45	19207	17	0	2
...	46	19346	20	0	1

资历~ 从事专业工作的年数；管理~ 1=管理人员，0=非管理人员；教育~ 1=中学，2=大学，3=更高程度

分析与假设 $y \sim$ 薪金, $x_1 \sim$ 资历 (年)

$x_2 = 1 \sim$ 管理人员, $x_2 = 0 \sim$ 非管理人员

教育	1=中学	$x_3 = \begin{cases} 1, & \text{中学} \\ 0, & \text{其它} \end{cases}$ $x_4 = \begin{cases} 1, & \text{大学} \\ 0, & \text{其它} \end{cases}$	\Rightarrow	中学: $x_3 = 1, x_4 = 0$;
	2=大学			大学: $x_3 = 0, x_4 = 1$;
	3=更高			更高: $x_3 = 0, x_4 = 0$

资历每加一年薪金的增长是常数;

管理、教育、资历之间无交互作用

线性回归模型 $y = a_0 + a_1 x_1 + a_2 x_2 + a_3 x_3 + a_4 x_4 + \varepsilon$

a_0, a_1, \dots, a_4 是待估计的回归系数, ε 是随机误差

模型求解

$$y = a_0 + a_1x_1 + a_2x_2 + a_3x_3 + a_4x_4 + \varepsilon$$

参数	参数估计值	置信区间
a_0	11032	[10258 11807]
a_1	546	[484 608]
a_2	6883	[6248 7517]
a_3	-2994	[-3826 -2162]
a_4	148	[-636 931]
$R^2=0.957 \quad F=226 \quad p=0.000$		

资历增加1年薪
金增长546

管理人员薪金多
6883

中学程度薪金比更
高的少2994

大学程度薪金比更
高的多148

a_4 置信区间包含零点，
解释不可靠！

$R^2, F, p \rightarrow$ 模型整体上可用

$x_1 \sim$ 资历(年)

$x_2 = 1 \sim$ 管理,

$x_2 = 0 \sim$ 非管理

中学: $x_3=1, x_4=0$;

大学: $x_3=0, x_4=1$;

更高: $x_3=0, x_4=0$.

结果分析

残差分析方法

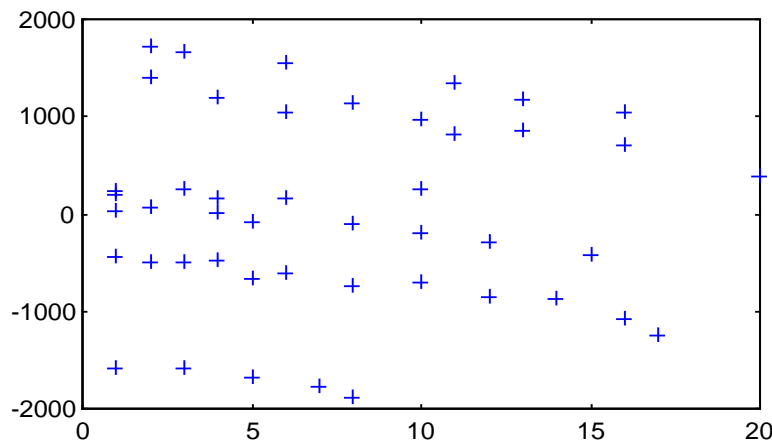
$$\hat{y} = \hat{a}_0 + \hat{a}_1 x_1 + \hat{a}_2 x_2 + \hat{a}_3 x_3 + \hat{a}_4 x_4$$

残差 $e = y - \hat{y}$

管理与教育的组合

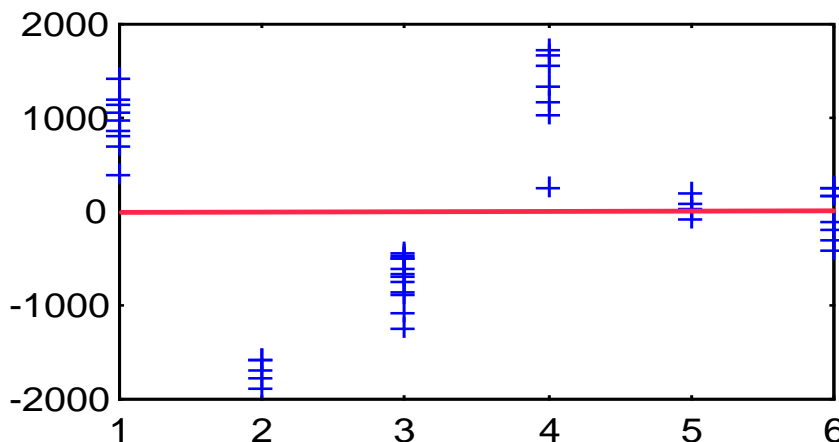
组合	1	2	3	4	5	6
管理	0	1	0	1	0	1
教育	1	1	2	2	3	3

e 与资历 x_1 的关系



残差大概分成3个水平，
6种管理—教育组合混在一起，未正确反映。

e 与管理—教育组合的关系



前4个残差全为正，或全为负，
管理—教育组合处理不当

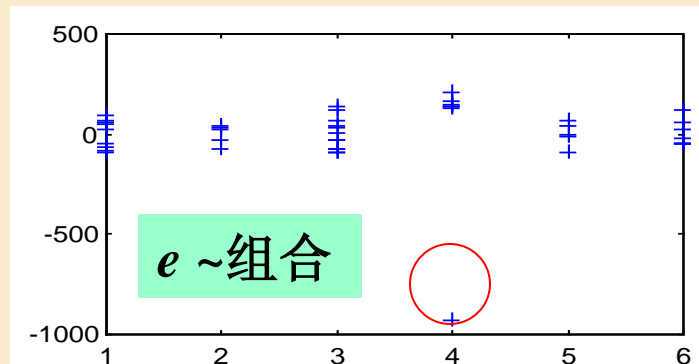
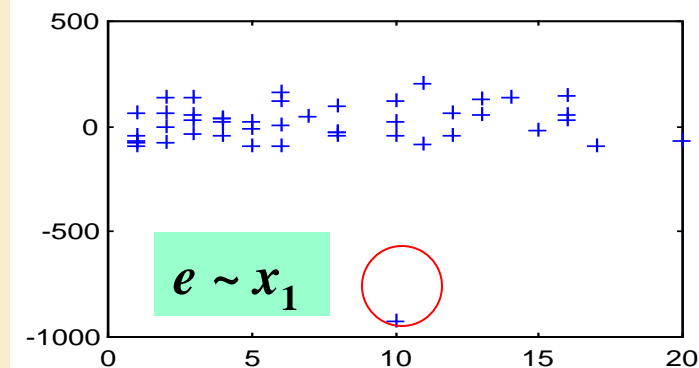
应在模型中增加管理 x_2 与教育 x_3, x_4 的交互项

进一步的模型

增加管理 x_2 与教育 x_3, x_4 的交互项

$$y = a_0 + a_1x_1 + a_2x_2 + a_3x_3 + a_4x_4 + a_5x_2x_3 + a_6x_2x_4 + \varepsilon$$

参数	参数估计值	置信区间
a_0	11204	[11044 11363]
a_1	497	[486 508]
a_2	7048	[6841 7255]
a_3	-1727	[-1939 -1514]
a_4	-348	[-545 -152]
a_5	-3071	[-3372 -2769]
a_6	1836	[1571 2101]
$R^2=0.999$ $F=554$ $p=0.000$		



R^2, F 有改进, 所有回归系数置信区间都不含零点, 模型完全可用

消除了不正常现象

异常数据(33号)应去掉

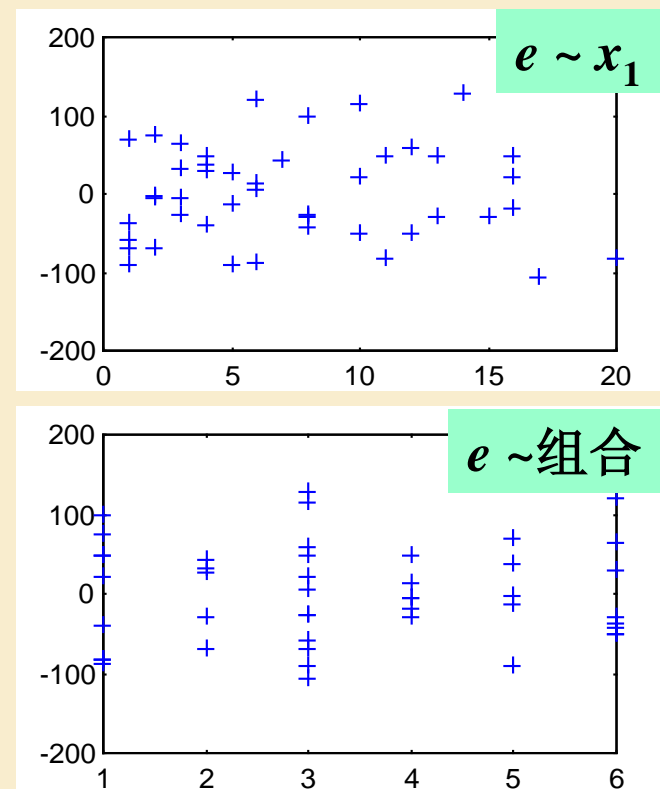
去掉异常数据后的结果

参数	参数估计值	置信区间
a_0	11200	[11139 11261]
a_1	498	[494 503]
a_2	7041	[6962 7120]
a_3	-1737	[-1818 -1656]
a_4	-356	[-431 -281]
a_5	-3056	[-3171 -2942]
a_6	1997	[1894 2100]
$R^2= 0.9998 \quad F=36701 \quad p=0.0000$		

$R^2: 0.957 \rightarrow 0.999 \rightarrow 0.9998$

$F: 226 \rightarrow 554 \rightarrow 36701$

置信区间长度更短



残差图十分正常

最终模型的结果可以应用

模型应用

$$\hat{y} = \hat{a}_0 + \hat{a}_1 x_1 + \hat{a}_2 x_2 + \hat{a}_3 x_3 + \hat{a}_4 x_4 + \hat{a}_5 x_2 x_3 + \hat{a}_6 x_2 x_4$$

制订6种管理—教育组合人员的“基础”薪金(资历为0)

$x_1=0$; $x_2=1$ ~ 管理, $x_2=0$ ~ 非管理

中学: $x_3=1, x_4=0$; 大学: $x_3=0, x_4=1$; 更高: $x_3=0, x_4=0$

组合	管理	教育	系数	“基础”薪金
1	0	1	a_0+a_3	9463
2	1	1	$a_0+a_2+a_3+a_5$	13448
3	0	2	a_0+a_4	10844
4	1	2	$a_0+a_2+a_4+a_6$	19882
5	0	3	a_0	11200
6	1	3	a_0+a_2	18241

大学程度非管理人员比更高程度非管理人员的薪金略低

大学程度管理人员比更高程度管理人员的薪金高

软件开发人员的薪金

对定性因素(如管理、教育)，可以引入0-1变量处理，0-1变量的个数应比定性因素的水平少1（如教育程度有3个水平，引入2个0-1变量）

残差分析方法可以发现模型的缺陷，引入交互作用项常常能够改善模型

剔除异常数据，有助于得到更好的结果

注：可以直接对6种管理—教育组合引入5个0-1变量

非线性回归

1、回归：

(1) 确定回归系数的命令：

$$[\text{beta}, \text{r}, \text{J}] = \text{nlinfit}(\text{x}, \text{y}, \text{'model'}, \text{beta0})$$
估计出的
回归系数

残差

Jacobian矩阵

输入数据x、y分别为
 $n \times m$ 矩阵和n维列向
量，对一元非线性回
归，x为n维列向量。

回归系数
的初值

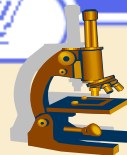
是事先用m-文件定
义的非线性函数

(2) 非线性回归命令：nlintool (x, y, 'model', beta0, alpha)

2、预测和预测误差估计：

$$[Y, \text{DELTA}] = \text{nlpredci}(\text{'model'}, \text{x}, \text{beta}, \text{r}, \text{J})$$

求nlinfit 或nlintool所得的回归函数在x处的预测值Y及预测值的显著性为1-alpha的置信区间Y±DELTA.



10.3 酶促反应

问题

研究酶促反应（酶催化反应）中嘌呤霉素对反应速度与底物（反应物）浓度之间关系的影响

建立数学模型，反映该酶促反应的速度与底物浓度以及经嘌呤霉素处理与否之间的关系

方案

设计了两个实验：酶经过嘌呤霉素处理；酶未经嘌呤霉素处理。实验数据见下表：

底物浓度(ppm)		0.02		0.06		0.11		0.22		0.56		1.10	
反应速度	处理	76	47	97	107	123	139	159	152	191	201	207	200
	未处理	67	51	84	86	98	115	131	124	144	158	160	/

酶促反应的基本性质

底物浓度较小时，反应速度大致与浓度成正比；
底物浓度很大、渐进饱和时，反应速度趋于固定值。

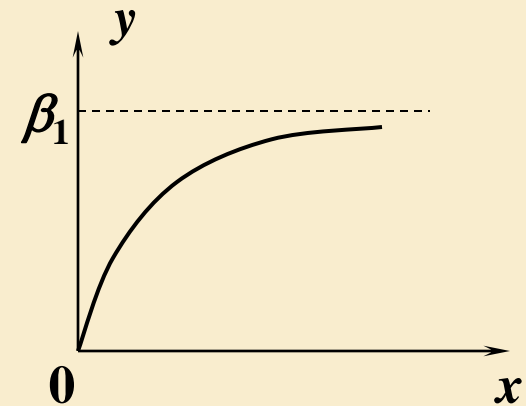
基本模型

Michaelis-Menten模型

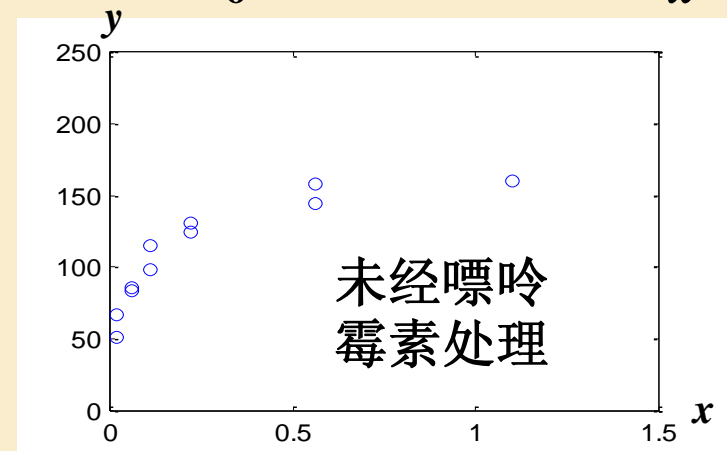
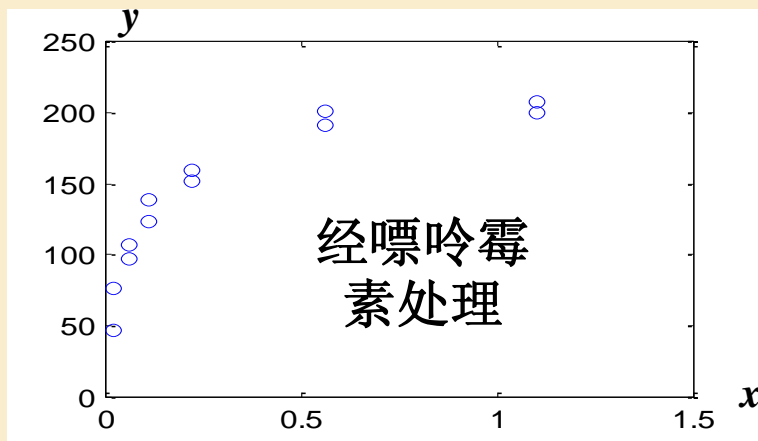
y ~ 酶促反应的速度, x ~ 底物浓度

$$y = f(x, \beta) = \frac{\beta_1 x}{\beta_2 + x}$$

β_1, β_2 ~ 待
定系数



实验 数据



线性化模型

$$y = \frac{\beta_1 x}{\beta_2 + x} \quad \Rightarrow \quad \frac{1}{y} = \frac{1}{\beta_1} + \frac{\beta_2}{\beta_1} \frac{1}{x} = \theta_1 + \theta_2 \frac{1}{x}$$

对 β_1, β_2 非线性对 θ_1, θ_2 线性

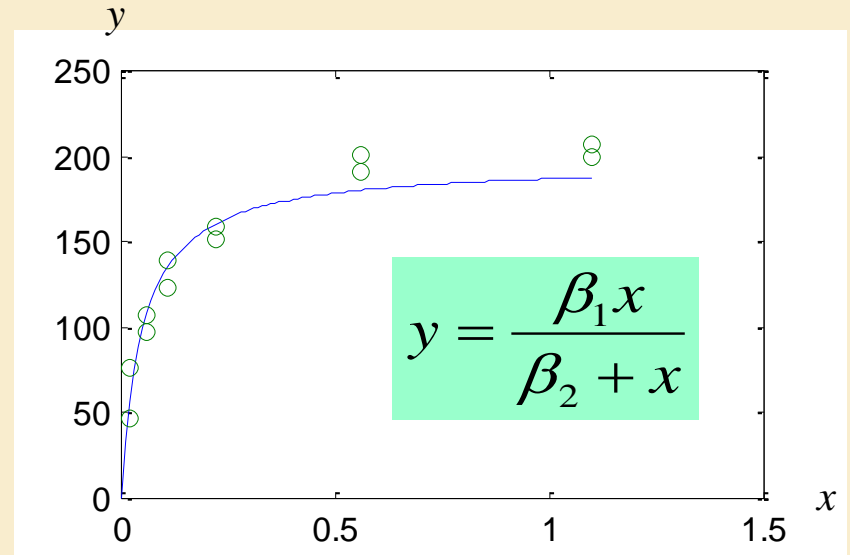
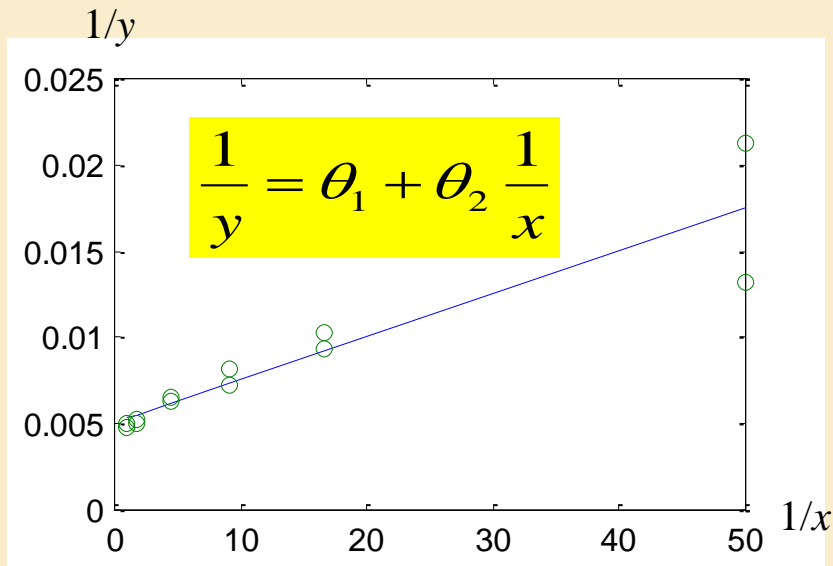
经嘌呤霉素处理后实验数据的估计结果

参数	参数估计值 ($\times 10^{-3}$)	置信区间 ($\times 10^{-3}$)
θ_1	5.107	[3.539 6.676]
θ_2	0.247	[0.176 0.319]
$R^2=0.8557 \quad F=59.2975 \quad p=0.0000$		

$$\hat{\beta}_1 = 1 / \hat{\theta}_1 = 195.8027$$

$$\hat{\beta}_2 = \hat{\theta}_2 / \hat{\theta}_1 = 0.04841$$

线性化模型结果分析



$1/x$ 较小时有很好的线性趋势， $1/x$ 较大时出现很大的起落

x 较大时， y 有较大偏差

- 参数估计时， x 较小（ $1/x$ 很大）的数据控制了回归参数的确定

非线性模型参数估计

MATLAB 统计工具箱

[beta,R,J] = nlinfit (x,y,'model',beta0)

输入

x~自变量数据矩阵
y ~因变量数据向量

$$y = \frac{\beta_1 x}{\beta_2 + x}$$

beta0~线性化模型估计结果

model ~模型的函数M文件名
beta0 ~给定的参数初值

x= ; **y=** ;

beta0=[195.8027 0.04841];

[beta,R,J]=nlinfit(x,y,'f1',beta0);

betaci=nlparci(beta,R,J);

beta, betaci

输出

beta ~参数的估计值
R ~残差, **J** ~估计预测误差的Jacobi矩阵

beta的置信区间

betaci =nlparci(beta,R,J)

function y=f1(beta, x)

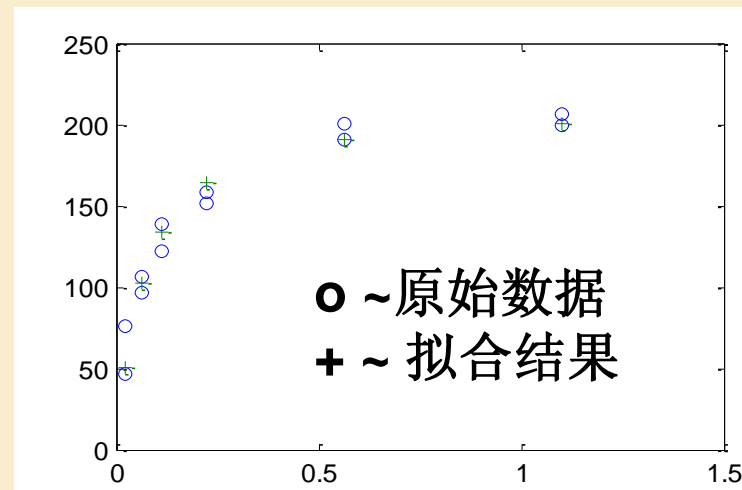
y=beta(1)*x./(beta(2)+x);

非线性模型结果分析

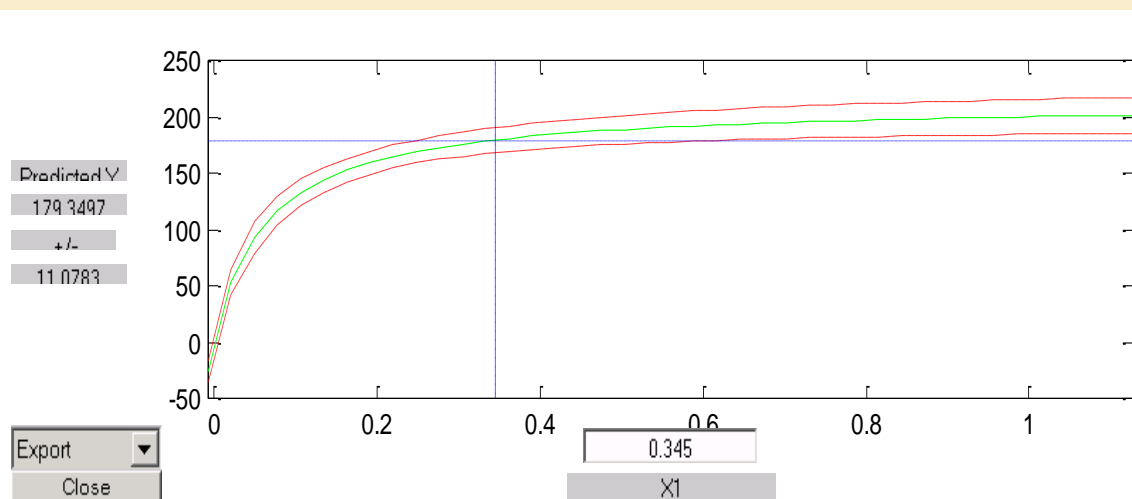
$$y = \frac{\beta_1 x}{\beta_2 + x}$$

参数	参数估计值	置信区间
β_1	212.6819	[197.2029 228.1609]
β_2	0.0641	[0.0457 0.0826]

最终反应速度为 $\hat{\beta}_1 = 212.6831$
 半速度点(达到最终速度一半
 时的 x 值)为 $\hat{\beta}_2 = 0.0641$



其它输出 命令nlintool 给出交互画面



拖动画面的十字线，得
 y 的预测值和预测区间

画面左下方的**Export**
 输出其它统计结果。

剩余标准差 **s= 10.9337**

混合反应模型

在同一模型中考虑嘌呤霉素处理的影响

$$y = \frac{\beta_1 x}{\beta_2 + x} \quad \Rightarrow \quad y = \frac{(\beta_1 + \gamma_1 x_2) x_1}{(\beta_2 + \gamma_2 x_2) + x_1}$$

x_1 为底物浓度， x_2 为一示性变量

$x_2=1$ 表示经过处理， $x_2=0$ 表示未经处理

β_1 是未经处理的最终反应速度

γ_1 是经处理后最终反应速度的增长值

β_2 是未经处理的反应的半速度点

γ_2 是经处理后反应的半速度点的增长值

混合模型求解

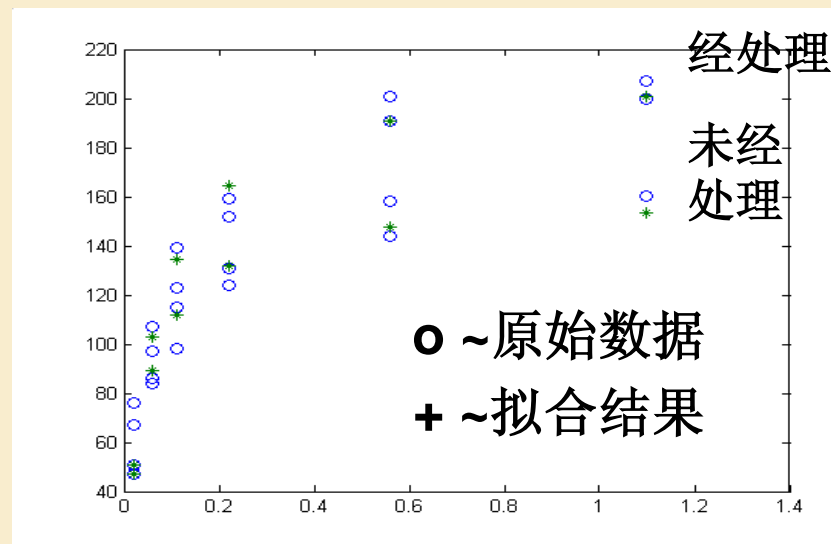
$$y = \frac{(\beta_1 + \gamma_1 x_2) x_1}{(\beta_2 + \gamma_2 x_2) + x_1}$$

用nlinfit 和 nlintool命令

参数初值 (基于对数据的分析) $\beta_1^0 = 170, \gamma_1^0 = 60, \beta_2^0 = 0.05, \gamma_2^0 = 0.01$

估计结果和预测

参数	参数估计值	置信区间
β_1	160.2802	[145.8466 174.7137]
β_2	0.0477	[0.0304 0.0650]
γ_1	52.4035	[32.4130 72.3941]
γ_2	0.0164	[-0.0075 0.0403]

剩余标准差 $s = 10.4000$ γ_2 置信区间包含零点, 表明 γ_2 对因变量 y 的影响不显著

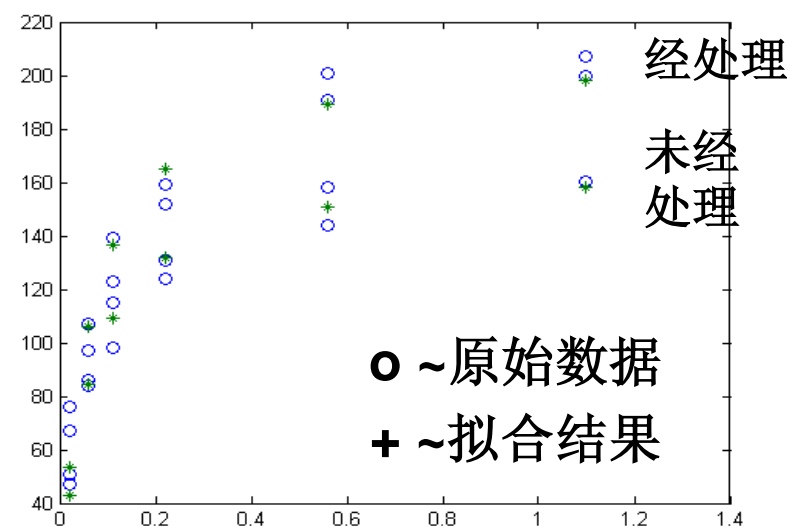
经嘌呤霉素处理的作用不影响半速度点参数

简化的混合模型

$$y = \frac{(\beta_1 + \gamma_1 x_2) x_1}{(\beta_2 + \gamma_2 x_2) + x_1} \Rightarrow y = \frac{(\beta_1 + \gamma_1 x_2) x_1}{\beta_2 + x_1}$$

估计结果和预测

参数	参数估计值	置信区间
β_1	166.6025	[154.4886 178.7164]
β_2	0.0580	[0.0456 0.0703]
γ_1	42.0252	[28.9419 55.1085]



简化的混合模型形式简单，参数置信区间不含零点

剩余标准差 $s = 10.5851 > 10.4$ ，比一般混合模型略大

一般混合模型与简化混合模型预测比较

$$y = \frac{(\beta_1 + \gamma_1 x_2) x_1}{(\beta_2 + \gamma_2 x_2) + x_1}$$

$$y = \frac{(\beta_1 + \gamma_1 x_2) x_1}{\beta_2 + x_1}$$

预测区间为
预测值 $\pm \Delta$

实际值	一般模型预测值	Δ (一般模型)	简化模型预测值	Δ (简化模型)
67	47.3443	9.2078	42.7358	5.4446
51	47.3443	9.2078	42.7358	5.4446
84	89.2856	9.5710	84.7356	7.0478
...
191	190.8329	9.1484	189.0574	8.8438
201	190.8329	9.1484	189.0574	8.8438
207	200.9688	11.0447	198.1837	10.1812
200	200.9688	11.0447	198.1837	10.1812

简化混合模型的预测区间较短，更为实用、有效

酶促反应

机理分析

反应速度与底物浓度的关系

非线性关系

求解线性模型

求解非线性模型

发现问题（误差扰动），得参数初值

嘌呤霉素处理对反应速度与底物浓度关系的影响

混合模型

简化模型

引入0-1变量

检查参数置信区间是否包含零点

注：非线性模型拟合程度的评价无法直接利用线性模型的方法，但 R^2 与剩余标准差 s 仍然有效。

自己练习：习题1