

11 Nelineární regresní model



Průvodce studiem

Kapitola je věnována základům nelineární regrese. Na tuto kapitolu počítejte nejméně se třemi hodinami studia. Prostudujte důkladně i řešený příklad na konci kapitoly.

Základní představa pro nelineární regresní model je, že střední hodnoty složek náhodného vektoru \mathbf{y} , tj. $E(y_i)$, $i = 1, 2, \dots, n$, můžeme vyjádřit jako nějakou funkci regresorů

$$Ey_i = f(\mathbf{x}_i, \boldsymbol{\beta}), \quad (39)$$

kde \mathbf{x}_i je k -členný vektor nenáhodných vysvětlujících proměnných (\mathbf{x}_i^T je i -tý řádek matice regresorů \mathbf{X} , matice \mathbf{X} je typu $n \times k$) a $\boldsymbol{\beta}$ je p -členný vektor parametrů.

Obvyklou základní úlohou nelineární regrese je pro daná data $[\mathbf{y}, \mathbf{X}]$ a daný tvar funkce $f(\mathbf{x}_i, \boldsymbol{\beta})$ odhadnout hodnoty parametrů $\boldsymbol{\beta}$ tak, aby model (39) co nejlépe vysvětloval pozorované hodnoty náhodného vektoru \mathbf{y} .

Zda je model (39) opravdu nelineární v parametrech poznáme podle parciálních derivací

$$g_j = \frac{\partial f(\mathbf{x}_i, \boldsymbol{\beta})}{\partial \beta_j}$$

Pokud

$$g_j = \text{const} \quad \text{pro všechna } j = 1, 2, \dots, p \quad (40)$$

tzn. parciální derivace nejsou závislé na β_j , pak model (39) je lineární v parametrech, pokud alespoň pro jeden z parametrů β_j podmínka (40) neplatí, je model nelineární. Pokud podmínka (40) není splněna pro žádný z parametrů modelu, říkáme, že model je *neseeparabilní*. To je např. následující model s jedním regresorem ($k = 1$)

$$f(x_i, \boldsymbol{\beta}) = \exp(\beta_1 x_i) + \exp(\beta_2 x_i).$$

Pokud pro některé parametry je podmínka (40) splněna, je model *separabilní*, např.

$$f(x_i, \boldsymbol{\beta}) = \beta_1 + \beta_2 \exp(\beta_3 x_i).$$

To je model, který je nelineární jen vzhledem k parametru β_3 . Některý tvar nelineárních modelů (39) můžeme vhodnou transformací linearizovat, např.

$$f(x_i, \boldsymbol{\beta}) = \beta_1 \exp\left(\frac{\beta_2}{x_i}\right)$$

po zlogaritmování přejde na tvar

$$\ln(Ey_i) = \ln[f(x_i, \boldsymbol{\beta})] = \gamma_1 + \gamma_2 z_i,$$

což je lineární funkce proměnné $z_i = 1/x_i$ a parametry $\gamma_1 = \ln \beta_1$ a $\gamma_2 = \beta_2$.

Hodnoty regresorů z matice \mathbf{X} můžeme zobrazit jako n bodů v (k) -rozměrném prostoru. Nelineární regresní model (39) je plocha v $k+1$ -rozměrném prostoru (srovnej s lineárním modelem s jedním regresorem – hodnoty regresoru jsou zobrazeny na vodorovné ose, tj. v 1D, přímka v rovině, tj. v 2D). Na rozdíl od lineárního modelu tuto plochu nelze vyjádřit jako lineární kombinaci regresorů („není rovná“), má zakřivení. Při daných datech a modelové funkci je tvar této plochy závislý na hodnotách parametrů β_j . Úlohou odhadu parametrů nelineárního regresního modelu je tedy nalézt takové hodnoty parametrů, pro které tato plocha dobře aproximuje pozorované hodnoty náhodného vektoru \mathbf{y} . Podobně jako u lineární regrese můžeme tuto úlohu řešit *metodou nejmenších čtverců*.



Uvažujme tzv. *aditivní model* pro náhodnou složku

$$y_i = f(\mathbf{x}_i, \boldsymbol{\beta}) + \varepsilon_i \quad (41)$$

Předpokládejme, že pro $i = 1, 2, \dots, n$

- ε_i jsou vzájemně nezávislé náhodné veličiny (nejsou korelovány),
- $E(\varepsilon_i) = 0$, hodnoty y_i náhodně kolísají okolo prokládané plochy, střední hodnota tohoto kolísání je nulová,
- $\text{var } \varepsilon_i = \sigma^2$, tzn. mají konstantní rozptyl σ^2 .

Potom součet čtverců rozdílů pozorovaných a modelových hodnot vyjádřený jako funkce parametrů je

$$Q(\boldsymbol{\beta}) = \sum_{i=1}^n [y_i - f(\mathbf{x}_i, \boldsymbol{\beta})]^2 \quad (42)$$

Odhad metodou nejmenších čtverců znamená nalézt takové odhady $\hat{\boldsymbol{\beta}}$ parametrů $\boldsymbol{\beta}$, aby $Q(\boldsymbol{\beta})$ bylo minimální. Zderivujeme-li $Q(\boldsymbol{\beta})$ podle β_j , $j = 1, 2, \dots, p$ a položíme-li derivace rovny nule, dostaneme soustavu p rovnic

$$\sum_{i=1}^n [y_i - f(\mathbf{x}_i, \hat{\boldsymbol{\beta}})] \frac{\partial f(\mathbf{x}_i, \boldsymbol{\beta})}{\partial \beta_j} \Big|_{\boldsymbol{\beta}=\hat{\boldsymbol{\beta}}}, \quad (43)$$

Na rozdíl od lineární regresní funkce, kdy je soustava normálních rovnic lineární (parciální derivace jsou konstantní) a $Q(\boldsymbol{\beta})$ eliptický paraboloid s minimem v bodě $\hat{\boldsymbol{\beta}} = \mathbf{b}$, které lze za dosti obecných podmínek jednoznačně určit, je u nelineárního modelu soustava normálních rovnic nelineární. Její řešení je náročné, neboť nemusí vždy existovat jednoznačně, navíc je nutno užívat iterativních metod, které nezaručují nalezení globálního minima funkce (42).



U nelineárních modelů lze získat informace o tvaru funkce $Q(\beta)$ v okolí bodu β_k z jejího Taylorova rozvoje druhého stupně:

$$Q(\beta) \cong Q(\beta_k) + \Delta\beta_k \mathbf{g}_k + \frac{1}{2} \Delta\beta_k^T \mathbf{H}_k \Delta\beta_k, \quad (44)$$

kde $\Delta\beta_k = \beta - \beta_k$, \mathbf{g}_k je gradient (vektor) s prvky

$$g_j = \left. \frac{\partial Q(\beta)}{\partial \beta_j} \right|_{\beta=\beta_k}$$

a \mathbf{H}_k je symetrická matrice řádu p (Hessián) s prvky

$$H_{ij} = \left. \frac{\partial^2 Q(\beta)}{\partial \beta_i \partial \beta_j} \right|_{\beta=\beta_k}$$

Gradient lze vyjádřit

$$\mathbf{g}_k = -2\mathbf{J}^T \mathbf{d},$$

kde \mathbf{d} je vektor typu $(n \times 1)$ s prvky $d_i = y_i - f(\mathbf{x}_i, \beta_k)$, \mathbf{J} je matice typu $(n \times p)$ (Jakobián) s prvky

$$J_{ij} = \frac{\partial f(\mathbf{x}_i, \beta_k)}{\partial \beta_j}, \quad i = 1, 2, \dots, n, \quad j = 1, 2, \dots, p.$$

Pak pro Hessián platí:

$$\mathbf{H}_k = 2\mathbf{J}^T \mathbf{J} + \mathbf{B}_k,$$

kde \mathbf{B}_k (řádu p) má prvky:

$$B_{jl} = -2 \sum_{i=1}^n [y_i - f(\mathbf{x}_i, \beta_k)] \frac{\partial^2 f(\mathbf{x}_i, \beta_k)}{\partial \beta_j \partial \beta_l}, \quad j, l = 1, 2, \dots, p.$$



Regresní parametry lze odhadnout jednoznačně jen tehdy, jsou-li

$$\frac{\partial f(\mathbf{x}_i, \beta_k)}{\partial \beta_j}$$

lineárně nezávislé. To znamená, že neexistují $c_j \neq 0$, aby

$$\sum_{j=1}^p c_j \frac{\partial f(\mathbf{x}_i, \beta_k)}{\partial \beta_j} = 0 \quad (45)$$

Pokud platí (45), tj. $\mathbf{J}^T \mathbf{J}$ je singulární, pak je model nevhodně specifikován a nelze odhadnout jednotlivá β_j . Říkáme, že model je *přeurčen*. Jediná cesta k nápravě je změna modelu, která většinou vede přes snížení počtu parametrů, tj. zjednodušení funkce $f(\mathbf{x}_i, \beta)$. Pokud rov. (45) platí přibližně (analogie s multikolinearitou v lineárním modelu), pak jsou odhady $\hat{\beta}_j$ silně korelované a jejich odhad není spolehlivý.



Numerické metody odhadu regresních parametrů, užívané ve statistickém software, jsou většinou algoritmy, které minimalizují $Q(\beta)$ iterativně. Vycházejí z počátečního, uživatelem zadaného „náštrelu“ hodnot parametrů. Řešení probíhá po krocích

$$\beta_{(0)}, \beta_{(1)}, \dots, \beta_{(H)}.$$

Změnu mezi jednotlivými iteračními kroky můžeme vyjádřit jako přičtení přírůstkového vektoru Δ_h

$$\beta_{(h+1)} = \beta_{(h)} + \Delta_h,$$

při čemž iterační proces by měl splňovat podmínku:

$$Q(\beta_{(h+1)}) < Q(\beta_h)$$

Přírůstkový vektor můžeme vyjádřit jako součin tzv. směrového vektoru \mathbf{v}_h a koeficientu α_h ,

$$\Delta_h = \alpha_h \mathbf{v}_h$$

Jednotlivé algoritmy se liší ve volbě směrového vektoru \mathbf{v}_h a způsobu adaptace koeficientu α_h během výpočtu.

Z rovnice (44) dostaneme směrový vektor ve tvaru

$$\mathbf{v}_h = -\mathbf{H}^{-1}\mathbf{g} = (\mathbf{J}^T\mathbf{J} - \mathbf{B})^{-1}\mathbf{J}^T\hat{\mathbf{e}}, \quad (46)$$

kde $\hat{\mathbf{e}}$ je vektor residuí. Optimální je $\alpha = 1$. Tato metoda se nazývá Newtonova. Její nevýhodou je, že potřebuje výpočet matice druhých derivací kritériální funkce $Q(\beta)$. V metodě Gauss-Newtonově se zanedbává matice \mathbf{B} a směrový vektor se určuje ze vztahu

$$\mathbf{v}_h = (\mathbf{J}^T\mathbf{J})^{-1}\mathbf{J}^T\hat{\mathbf{e}}. \quad (47)$$

Dalšími běžně užívanými metodami jsou různé modifikace Marquardtovy metody, kdy směrový vektor se určuje podle vztahu

$$\mathbf{v}_h = (\mathbf{J}^T\mathbf{J} + \lambda\mathbf{D}_h^T\mathbf{D}_h)^{-1}\mathbf{J}^T\hat{\mathbf{e}}, \quad (48)$$

kde \mathbf{D}_h je diagonální matice eliminující vliv různých velikostí složek matice \mathbf{J} a λ je parametr, jehož hodnota se adaptuje během iteračního procesu. Podrobněji viz např. Meloun a Militký [20]. Jedna z variant této metody je implementována i v NCSS 2000 [14].

Pro všechny iterativní algoritmy je však velmi podstatný uživatelem zadaný „náštrél“ počátečních hodnot parametrů a jejich minima a maxima. Špatná volba počátečních hodnot může způsobit buď pomalou konvergenci, případně ukončení v nějakém lokálním minimu, nebo dokonce úplné selhání algoritmu. Vždy se vyplatí obor hod-



not parametrů věcně i numericky předem důkladně analyzovat a teprve pak spustit výpočet. Pokud standardní iterativní algoritmy selhávají, lze k odhadu parametrů nelineárního regresního model užít některý ze stochastických algoritmů globální optimalizace.

Odhadneme-li parametry nelineárního regresního modelu, můžeme (a většinou i musíme, neboť správnost odhadu, tj. nalezení globálního minima funkce $Q(\beta)$ není zaručena) posoudit vhodnost modelu a správnost nalezených odhadů. K prvnímu hrubému posouzení poslouží index determinace R^2 ,

$$R^2 = 1 - \frac{\text{RSS}}{\text{TSS}},$$

kde $\text{RSS} = Q(\hat{\beta})$, celková suma čtverců TSS je definována stejně jako u lineárního modelu. Dalšími užitečnými jednoduchými charakteristikami je odhad residuálního rozptylu

$$\hat{\sigma}^2 = s^2 = \frac{\text{RSS}}{n - p},$$

případně odhad směrodatné odchylky residuů, která je odmocninou residuálního rozptylu.

Dále je vždy potřeba posoudit, zda regresní funkce s nalezenými hodnotami parametrů dobře vystihuje pozorované veličiny vysvětlované veličiny \mathbf{y} . Pokud máme v modelu jen jeden regresor, většinou postačí jen vizuální posouzení grafu nalezené funkce a hodnot \mathbf{y} proti hodnotám regresoru. Pokud je regresorů více, můžeme užít grafy residuů podobně jako je popsáno v kapitole o lineárním regresním modelu.

Je také vhodné posoudit, jak silně jsou odhady parametrů korelovány. Kovarianční matice odhadů se obvykle nejjednodušeji aproximuje

$$\mathbf{S}_b = s^2 (\mathbf{J}^T \mathbf{J})^{-1},$$

po případě přesnějšími aproximacemi s využitím i druhých derivací kritériální funkce $Q(\beta)$ v bodě $\hat{\beta}$, tj. s využitím matice \mathbf{H} . V matici \mathbf{S}_b jsou na diagonále odhady rozptylů jednotlivých odhadů parametrů, takže lze pak snadno z kovarianční matice \mathbf{S}_b i korelační matici. Pokud se absolutní hodnota některého z korelačních koeficientů blíží jedné, je model buď přeurčený nebo špatně podmíněný. Pak je potřeba celý problém znovu analyzovat a buď zjednodušit model nebo doměřit další data.

Za předpokladu, že v modelu (41) mají náhodné složky normální rozdělení, tj. $\epsilon \sim N(\mathbf{0}, \sigma^2 \mathbf{I})$, lze pak spočítat i intervalové odhady pro parametry a testovat hypotézy $H_0: \beta_j = 0, j = 1, 2, \dots, p$. Jak intervaly spolehlivosti, tak testy je však nutno užívat s opatrností, neboť v případě nelineární regrese odhady parametrů získané metodou nejmenších čtverců obecně nemusí být nestranné a intervaly spolehlivosti i

testy hypotéz jsou založeny jen na aproximaci tvaru funkce $Q(\beta)$ v okolí nalezených hodnot odhadů $\hat{\beta}$.

Příklad 11.1 Data v souboru NLR1.XLS obsahují 44 pozorování veličin X a Y . Regresní funkce má tvar $Y = A + (0.49 - A) * \exp(-B * X)$. Máme odhadnout parametry A , B a posoudit vhodnost modelu.



Výstup z modulu nonlinear regression [14] je následující:

Nonlinear Regression Report

Dependent Y

Minimization Phase Section

| Itn | Error Sum | | | |
|--|--------------|--------------|-----------|--------------|
| No. | Lambda | Lambda | A | B |
| 0 | 3.58328 | 0.00004 | 0.1 | 0.13 |
| 1 | 2.387233E-02 | 0.000016 | 0.3856243 | 7.893059E-02 |
| Stepsize reduced to 0.9189852 by bounds. | | | | |
| Stepsize reduced to 0.9202212 by bounds. | | | | |
| Stepsize reduced to 0.9325328 by bounds. | | | | |
| 2 | 1.453589E-02 | 0.064 | 0.3846167 | 3.805048E-02 |
| 3 | 9.619339E-03 | 0.0256 | 0.3635308 | 3.545998E-02 |
| 4 | 9.364404E-03 | 0.01024 | 0.3440655 | 2.731663E-02 |
| 5 | 8.930465E-03 | 0.004096 | 0.3211968 | 2.272922E-02 |
| 6 | 8.764675E-03 | 0.0016384 | 0.3023451 | 2.005132E-02 |
| 7 | 8.722906E-03 | 6.5536E-04 | 0.2922916 | 0.0189681 |
| 8 | 8.720914E-03 | 2.62144E-04 | 0.2899626 | 1.874566E-02 |
| 9 | 8.720909E-03 | 1.048576E-04 | 0.2898918 | 1.874063E-02 |
| 10 | 8.720909E-03 | 4.194304E-05 | 0.2898947 | 0.018741 |
| Convergence criterion met. | | | | |

Ve výstupu vidíme, jak z počátečních hodnot parametrů ($A = 0.1$, $B = 0.13$) postupuje iterativní proces hledání minima residuální sumy čtverců.

Model Estimation Section

| Parameter Name | Parameter Estimate | Asymptotic Standard Error | Lower 95% C.L. | Upper 95% C.L. |
|----------------|--------------------|---------------------------|----------------|----------------|
| A | 0.2898947 | 6.939709E-02 | 0.1498457 | 0.4299437 |
| B | 0.018741 | 8.529059E-03 | 1.528661E-03 | 3.595333E-02 |

Z odhadů parametrů a jejich intervalů spolehlivosti vidíme, že odhady jsou významně odlišné od nuly.

Model $Y = A + (0.49 - A) * \text{EXP}(-B * X)$

R-Squared 0.779217

Iterations 10

Estimated Model

$(.2898947) + (0.49 - (.2898947)) * \text{EXP}(-(.018741) * (X))$

Index determinace ukazuje, že model vysvětluje asi tři čtvrtiny z celkové variability veličiny Y .

Analysis of Variance Table

| Source | DF | Sum of Squares | Mean Square |
|-------------|----|----------------|--------------|
| Mean | 1 | 7.9475 | 7.9475 |
| Model | 2 | 7.978279 | 3.98914 |
| Model (Adj) | 1 | 3.077909E-02 | 3.077909E-02 |
| Error | 42 | 8.720909E-03 | 2.076407E-04 |
| Total (Adj) | 43 | 0.0395 | |
| Total | 44 | 7.987 | |

Tabulka analýzy rozptylu má podobný účel, jako u lineárního modelu, můžeme zamítnout hypotézu, že vektor parametrů je nulový.

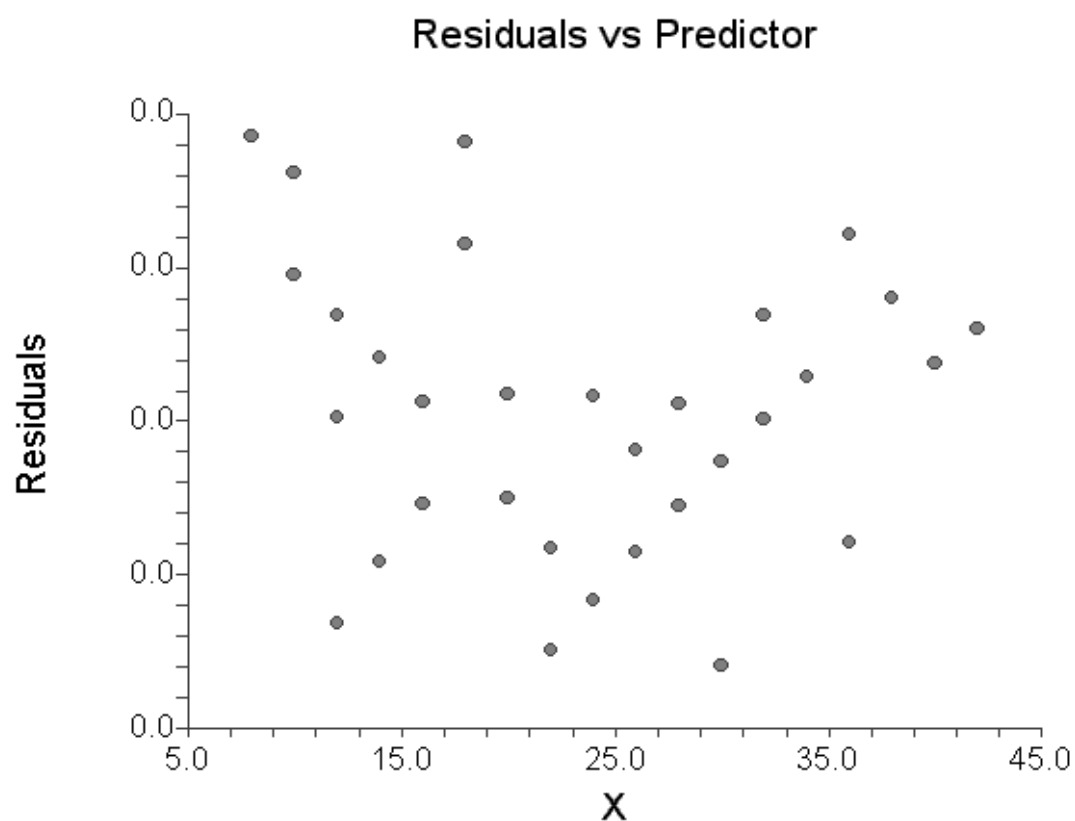
Asymptotic Correlation Matrix of Parameters

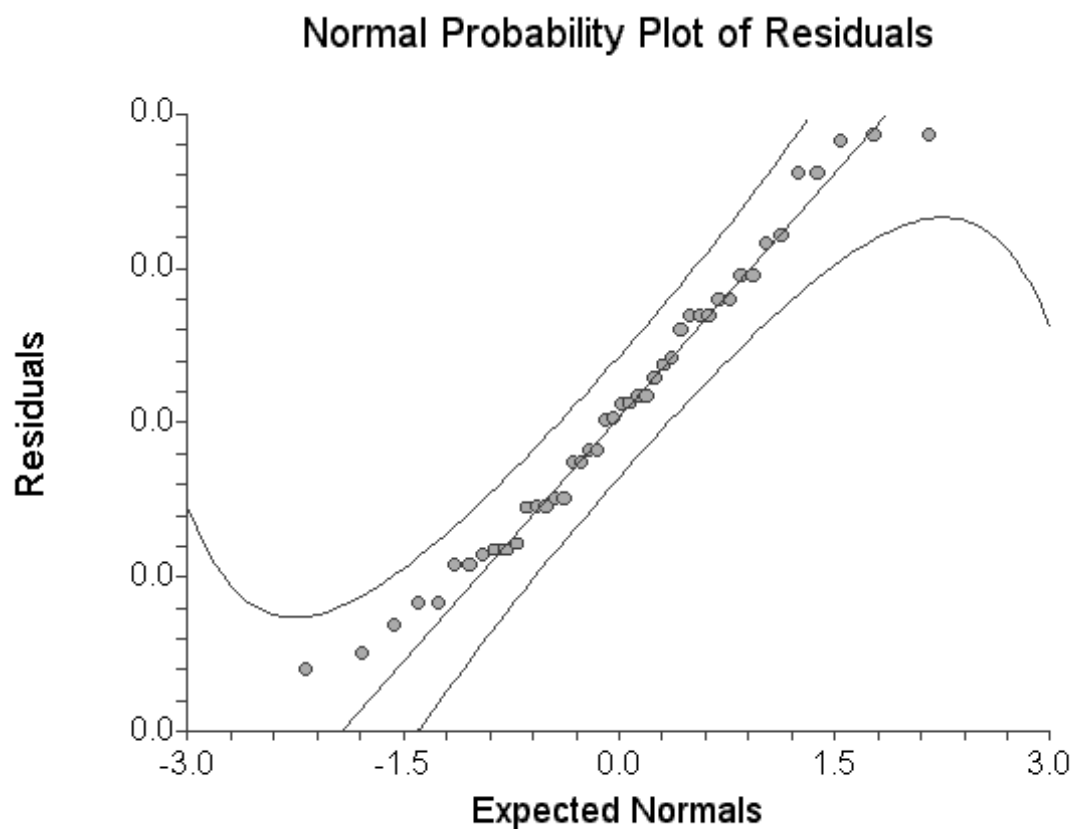
| | A | B |
|---|----------|----------|
| A | 1.000000 | 0.996008 |
| B | 0.996008 | 1.000000 |

Z korelační matice odhadů je zřejmé, že odhady jsou silně korelovány. To je u nelineárních modelů tohoto typu (jeden parametr je v součiniteli výrazu, ve kterém je druhý parametr v exponentu) častý jev. Indikuje, že minimalizovaná účelová funkce

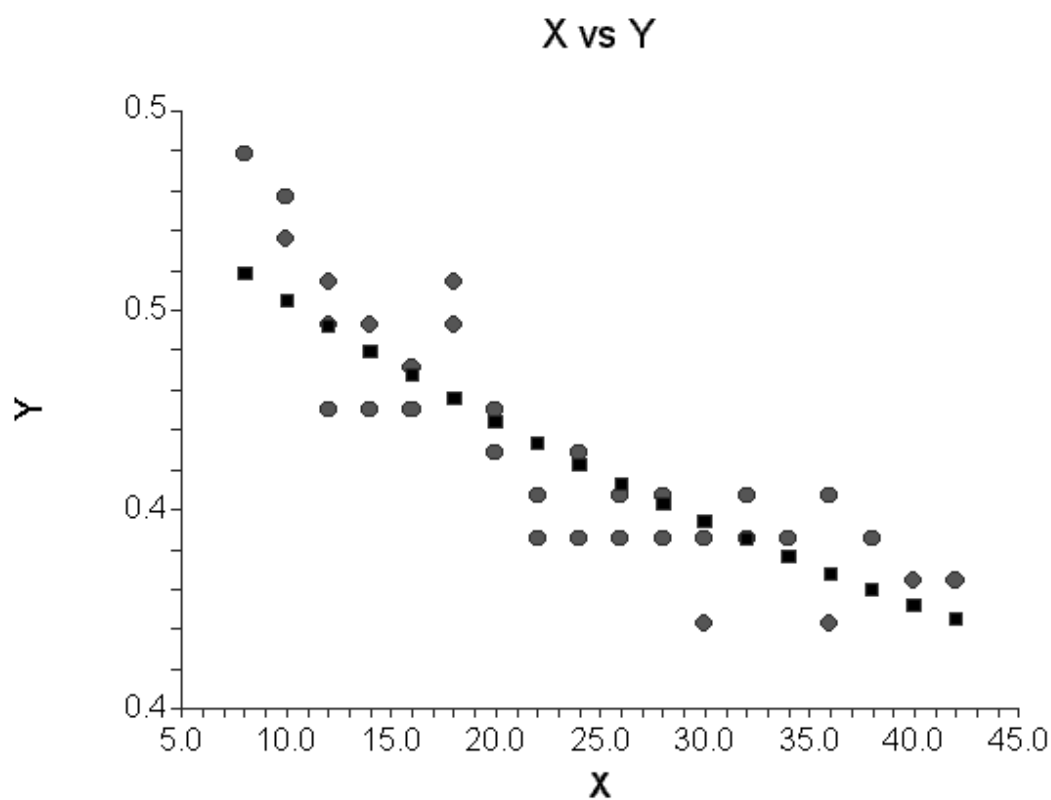
(součet residuálních čtverců) je v okolí nalezeného minima málo zakřivená a změna v hodnotách odhadů nezpůsobuje dramatickou změnu v hodnotě minimalizované funkce.

Z diagnostických grafů vidíme, že předpoklady modelu jsou zhruba splněny, rozptyl residuí můžeme považovat za konstantní, residua jsou zhruba normálně rozdělená.



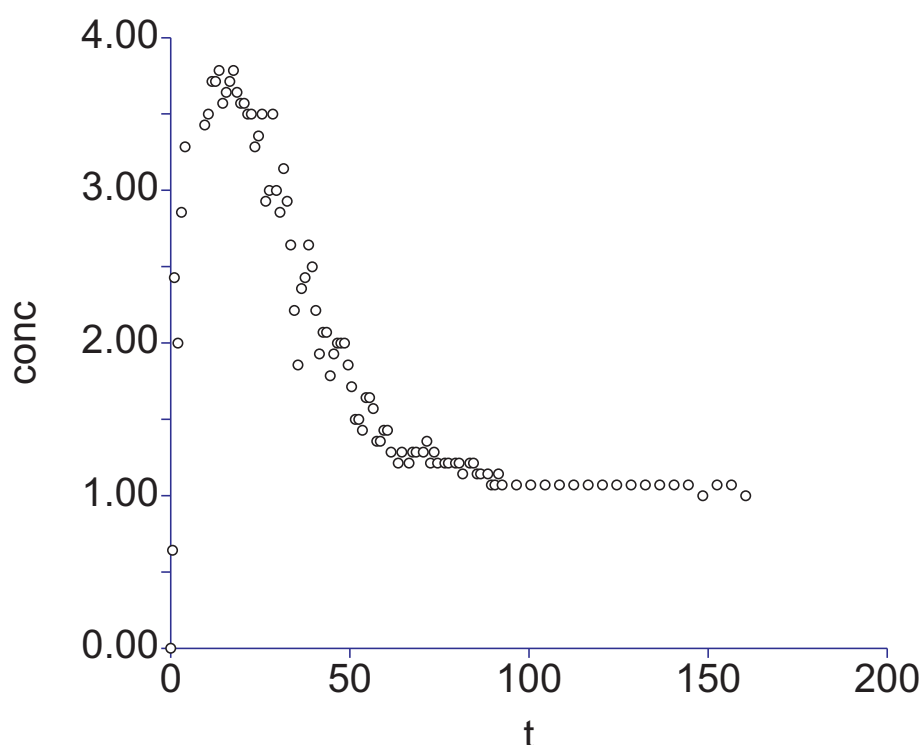


Nalezený model ukazuje následující graf. Pozorované hodnoty jsou vyznačeny kroužky, odhadované (modelové) hodnoty čtverečky.



Z grafu je zřejmé, že model dobře prokládá pozorované hodnoty. Můžeme tedy uzavřít, že navržený model je pro tuto závislost vhodný, index determinace je 0.78, odhadovaná residuální odchylka je 0.0144, odhady parametrů jsou výše.

Příklad 11.2 Na tomto příkladu si ukážeme postup při řešení jedné praktické úlohy, ve které je potřeba proložit nějakou vhodnou funkcí naměřenými daty. Tato úloha je převzata od Ing. Morávky z firmy Třinecký inženýring, a.s. Data pro tento příklad jsou v souboru moravka_prikl.xls. Měřila se závislost koncentrace (conc) na čase (t). Zjištěná empirická závislost je nakreslena na následujícím obrázku:



Požadavek byl proložit tuto závislost funkcí, která bude mít následující vlastnosti:

- v čase $t = 0$ má mít koncentrace hodnotu rovnou nule $f(0) = 0$
- v čase $t \rightarrow \infty$ má mít koncentrace hodnotu rovnou jedné
- funkce má dobře prokládat empirickou závislost

Z grafu závislosti vidíme, že počáteční (rostoucí) část závislosti i za ní následující prudký pokles bychom mohli vystihnout součinem dvou funkcí:

- nějaké závislosti procházející počátkem, např. ve tvaru $y = A t$, kde A je nějaký neznámý parametr, jehož hodnotu pak odhadneme z dat, nebo funkcí s dvěma parametry $y_1 = A t^B$, která umožní rychlost růstu aproximovat pružněji.

- exponenciální funkce ve tvaru $y_2 = \exp(C t)$, která může dobře prokládat klesající část závislosti koncentrace na čase, C je opět parametr modelu. (Exponenciální závislost y_2 klesá rychleji než roste y_1).

Pak nám ještě zbývá vyřešit to, aby s rostoucím časem se funkce blížila hodnotě jedna. To znamená, že k výše uvedenému součinu potřebujeme přičíst nějakou funkci y_3 , která má malé hodnoty při malých hodnotách t a $\lim y_3(t) = 1$ pro $t \rightarrow \infty$. Tomuto požadavku vyhovuje např. funkce ve tvaru

$$y_3 = 1 - \frac{1}{\exp(D t)}$$

Pro lepší pochopení těchto úvah si zkuste nakreslit průběhy funkcí y_1, y_2, y_3 pro různé hodnoty jejich parametrů a $0 \leq t \leq 100$ pomocí nějakého software, můžete třeba užít možnost „function plot“ v nabídce „Graphics“ v NCSS.

Empirickou závislost tedy můžeme zkusit modelovat funkcí

$$f(t) = y_1 \times y_2 + y_3 = A t^B \exp(C t) + 1 - \frac{1}{\exp(D t)},$$

kde A, B, C, D jsou čtyři neznámé parametry, jejichž hodnoty odhadneme z dat metodou nejmenších čtverců. K tomu můžeme využít standardní statistický software, např. NCSS.

Víme už, že pro úspěšný odhad parametrů nelineárního modelu iterativními metodami je velmi důležité vhodně volit jejich počáteční „nástřely“ a dovolený obor hodnot, tj. minimum a maximum. Při tom musíme vzít v úvahu jak tvar funkce, tak i obor hodnot nezávisle proměnné, tj. času t .

U parametru A je to celkem snadná úloha: jelikož hodnoty koncentrace jsou nezáporné, i hodnota A musí být nezáporná. Hodnoty koncentrace jsou menší než 4, takže maximální hodnota parametru A nemůže být příliš velká, interval $[0, 20]$ je postačující, startovací hodnota $A = 1$ může být dobrá volba.

U parametru B musíme uvážit, jak rychle má funkce růst. Pokud by $B = 1$, pak by růst podle y_2 byl lineární, pro $B < 1$ pomalejší, pro $B > 1$ rychlejší. Můžeme zkusit počáteční hodnotu $B = 1$ a dovolené hodnoty z intervalu $[0, 2]$.

U parametrů C a D musíme být opatrnější. Oba parametry jsou v exponentu, navíc v součinu s veličinou t , která má hodnoty z intervalu $[0, 160]$, tzn. hrozí numerické problémy – přetečení největší v počítači reprezentované hodnoty čísla v pohyblivé čárce. Je zřejmé, že hodnoty C a D musí být kladné, ale malé. Tedy zkusíme nástřely $C = 0.01$ a $D = 0.01$ a interval pro oba parametry $[0, 0.1]$ a zjistíme, že v průběhu iterací došlo k přetečení (overflow). Změníme-li nástřel na $D = 0.001$, iterační proces konverguje po 25 krocích a dostaneme následující výsledky:

Database D:\UZIVATELE\Moravka\moravka_prikl.S0

Dependent conc

Model Estimation Section

| Parameter Name | Parameter Estimate | Asymptotic Standard Error | Lower 95% C.L. | Upper 95% C.L. |
|-------------------|-----------------------|------------------------------|-------------------|-------------------|
| A | 1.685585 | 9.694253E-02 | 1.493156 | 1.878015 |
| B | 0.5552467 | 3.312053E-02 | 0.489503 | 0.6209905 |
| C | 5.248904E-02 | 3.513403E-03 | 4.551499E-02 | 5.946309E-02 |
| D | 2.545075E-02 | 7.617775E-03 | 1.032959E-02 | 4.057191E-02 |

Model conc = $(A \cdot T^B) \cdot \exp(-C \cdot T) + 1 - 1/\exp(D \cdot T)$

R-Squared 0.963863

Iterations 25

Estimated Model

$((1.685585) \cdot (T)^{(0.5552467)}) \cdot \exp(-(5.248904E-02) \cdot (T))$
 $+ 1 - 1/\exp((2.545075E-02) \cdot (T))$

Analysis of Variance Table

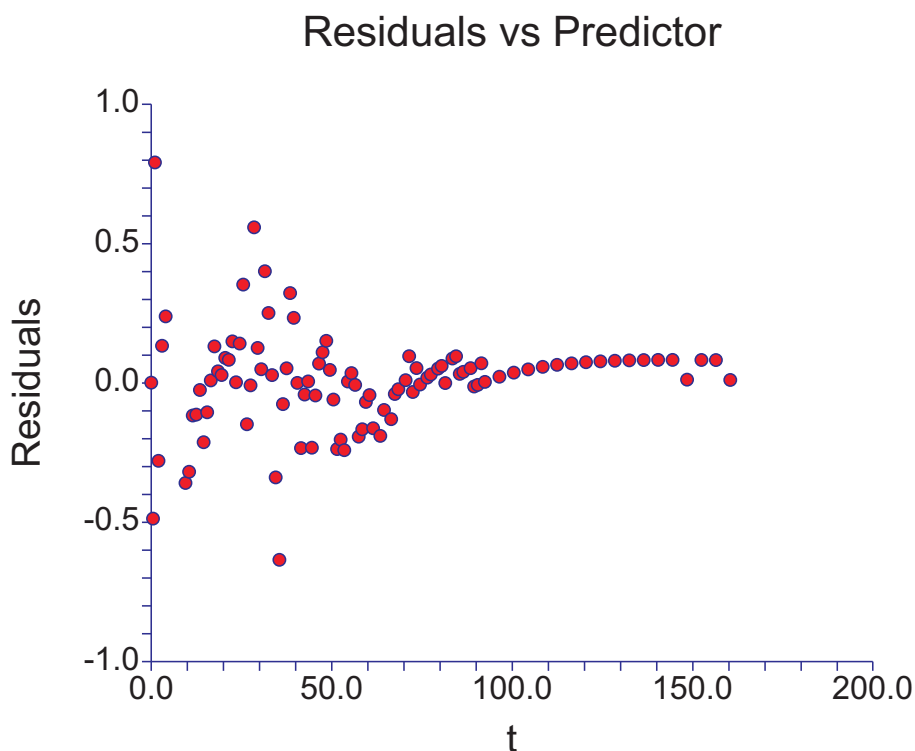
| Source | Sum of DF | Mean Squares | Square |
|------------------|--------------|-----------------|--------------|
| Mean | 1 | 378.8356 | 378.8356 |
| Model | 4 | 469.3829 | 117.3457 |
| Model (Adjusted) | 3 | 90.54733 | 30.18244 |
| Error | 96 | 3.394817 | 3.536267E-02 |
| Total (Adjusted) | 99 | 93.94215 | |
| Total | 100 | 472.7778 | |

Asymptotic Correlation Matrix of Parameters

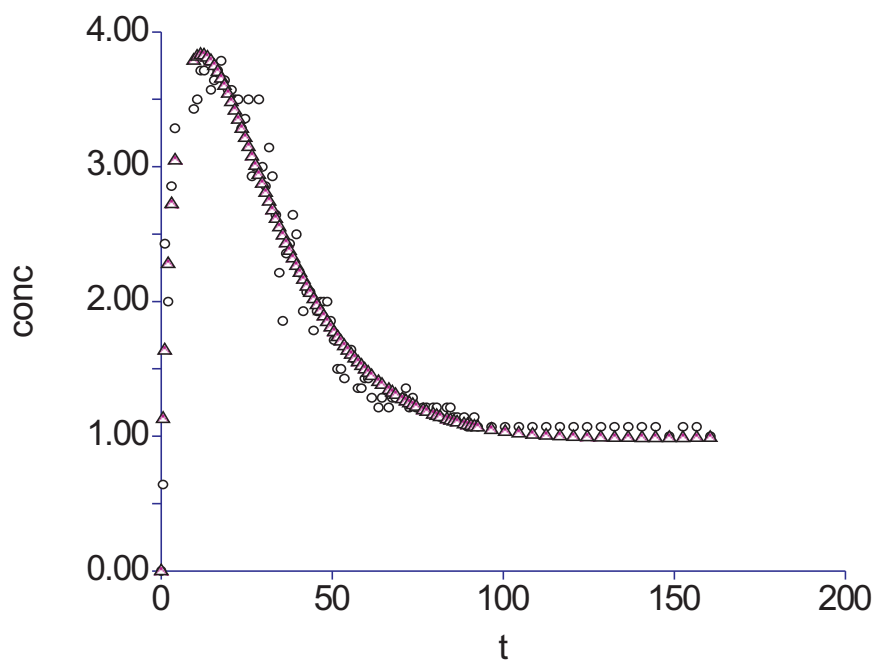
| | A | B | C | D |
|---|-----------|-----------|-----------|-----------|
| A | 1.000000 | -0.913029 | -0.572957 | -0.339223 |
| B | -0.913029 | 1.000000 | 0.810758 | 0.531945 |
| C | -0.572957 | 0.810758 | 1.000000 | 0.885083 |
| D | -0.339223 | 0.531945 | 0.885083 | 1.000000 |

Vidíme, že index determinace je přibližně 0.964, tedy model dobře prokládá empirickou závislost. Graf reziduí na následujícím obrázku ukazuje, že větší odchylka modelových hodnot od pozorovaných se vyskytuje především pro malé hodnoty t ,

kde i z grafu empirické závislosti je patrné, že v této oblasti byla přesnost měření nejmenší.



Vhodnost zvoleného modelu ukazuje i následující obrázek, kde jsou kromě empirické závislosti nakresleny i modelové hodnoty (body vyznačené trojúhelníky).



Shrnutí



- *nelineární regresní model, metoda nejmenších čtverců*
- *aproximace tvaru kritériální funkce v okolí nalezeného minima*
- *metody odhadu parametrů*

Kontrolní otázky



1. *Vysvětlete hlavní rozdíly mezi lineárním a nelineárním regresním modelem.*
2. *V čem je nalezení odhadů parametrů modelu obtížné?*
3. *Vysvětlete principy algoritmů pro odhad parametrů nelineárních regresních modelů.*

Korespondenční úloha

Korespondenční úlohy budou zadávány ke každému kursu samostatně.

