8. Obliczenie równania regresji

Model:

$$y=f(b_0,\ldots,b_k;\, x_1,\ldots,x_k)=f(\mathbf{b};\mathbf{x})$$

Sposób obliczenia współczynników modelu b_i gdy:

1) liczba pomiarów m jest nie mniejsza niż liczba szacowanych współczynników k,

2) żadna zmienna objaśniająca nie jest kombinacją liniową innych zmiennych objaśniających.

Ogólne rozwiązanie przypadku modelu liniowego

Dany jest model:

$$y_j = \sum_{i=0}^{k} b_i f(x_{ij}) + \varepsilon_j$$

gdzie $b_0 = const, \; f(x_0) = 1, \; \varepsilon_j = y_j - y_j^{eksp}$.

Równanie regresji obliczane jest na podstawie poniższych danych ($m > k$):

Nr dośw.	Zmienne niezależne	Wyniki (***y***)
1	$x_{10}, x_{11}, \ldots, x_{1i}, \ldots, x_{1k}$	y_1
2	$x_{20}, x_{21}, \ldots, x_{2i}, \ldots, x_{2k}$	y_2
...	...	...
j	$x_{j0}, x_{j1}, \ldots, x_{ji}, \ldots, x_{jk}$	y_j
...	...	...
m	$x_{m0}, x_{m1}, \ldots, x_{mi}, \ldots, x_{mk}$	y_m

Dane te można przedstawić jako macierz

$$\boldsymbol{X}=\begin{vmatrix} x_{10} & x_{11} & \dots & x_{1i} & \dots & x_{1k} \\ x_{20} & x_{21} & \dots & x_{2i} & \dots & x_{2k} \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ x_{j0} & x_{j1} & \dots & x_{ji} & \dots & x_{jk} \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ x_{m0} & x_{m1} & \dots & x_{mi} & \dots & x_{mk} \end{vmatrix}$$

i wektory:

$$\boldsymbol{Y}=\begin{vmatrix} y_1 \\ y_2 \\ \dots \\ y_j \\ \dots \\ y_m \end{vmatrix}, \boldsymbol{E}=\begin{vmatrix} \varepsilon_1 \\ \varepsilon_2 \\ \dots \\ \varepsilon_j \\ \dots \\ \varepsilon_m \end{vmatrix}, \boldsymbol{B}=\begin{vmatrix} b_0 \\ b_1 \\ \dots \\ b_i \\ \dots \\ b_k \end{vmatrix}$$

Model można przedstawić w postaci równania: $\boldsymbol{Y}=\boldsymbol{X}*\boldsymbol{B}+\boldsymbol{E}$

Ponieważ

$$\boldsymbol{E}^T\boldsymbol{E}= \begin{vmatrix} \varepsilon_1 & \dots & \varepsilon_j & \dots & \varepsilon_m \end{vmatrix} \begin{vmatrix} \varepsilon_1 \\ \dots \\ \varepsilon_j \\ \dots \\ \varepsilon_m \end{vmatrix} = \begin{vmatrix} \varepsilon_1^2 & \dots & \varepsilon_j^2 & \dots & \varepsilon_m^2 \end{vmatrix}$$

i

$$\boldsymbol{E}^T\boldsymbol{E} = (\boldsymbol{Y}-\boldsymbol{XB})^T(\boldsymbol{Y}-\boldsymbol{XB}) = \boldsymbol{Y}^T\boldsymbol{Y} - 2\boldsymbol{B}^T\boldsymbol{X}^T\boldsymbol{Y} + \boldsymbol{B}^T\boldsymbol{X}^T\boldsymbol{XB}$$

(biorąc pod uwagę, że $\boldsymbol{B}^T\boldsymbol{X}^T\boldsymbol{Y} = (\boldsymbol{B}^T\boldsymbol{X}^T\boldsymbol{Y})^T = \boldsymbol{Y}^T\boldsymbol{XB}$)

to po zróżniczkowaniu i przyrównaniu do 0 otrzymuje się

$$\boldsymbol{X}^T(\boldsymbol{Y}-\boldsymbol{XB}) = 0$$

a po przekształceniu

$$\boldsymbol{X}^T\boldsymbol{XB}=\boldsymbol{X}^T\boldsymbol{Y}$$

i po pomnożeniu obu stron przez $(\boldsymbol{X}^T\boldsymbol{X})^{-1}$

$$(\boldsymbol{X}^T\boldsymbol{X})^{-1}(\boldsymbol{X}^T\boldsymbol{X})\boldsymbol{B} = (\boldsymbol{X}^T\boldsymbol{X})^{-1}\boldsymbol{X}^T\boldsymbol{Y}$$

można obliczyć wartości współczynników równania liniowego:

$$\boldsymbol{B} = (\boldsymbol{X}^T\boldsymbol{X})^{-1}\boldsymbol{X}^T\boldsymbol{Y}$$

Można również wykazać, że elementy przekątne c_{ii} macierzy:

$$\left(\boldsymbol{X}^T \boldsymbol{X}\right)^{-1} s_{powt}^2$$

są równe wariancjom współczynników b_i**,** a elementy nieprzekątniowe c_{ih} są kowariancjami współczynników b_i i b_h.

Wariancja współczynników b_i:

$$s_{b_i}^2 = c_{ii} s_{powt}^2$$

Kryterium jakości równania regresji:

$$y_{dośw} - y_{obl}$$

Wyniki uzyskane tą metodą są zgodne z obliczeniami na

podstawie metody najmniejszych kwadratów,

która polega na wyznaczaniu minimum wyrażenia S

(obliczane są współczynniki b_i):

$$S = \sum_{i=1}^{m} \left(y_i - f\left(x_1, ..., x_k \right)^2 \right) = \min$$

Przykład równania nieliniowego

$$\boldsymbol{B}=\begin{vmatrix} b_0 \\ \dots \\ b_4 \end{vmatrix}, \quad \boldsymbol{X}=\begin{vmatrix} 1 & \sin(x_1) & x_1 & x_1^2 & \cos(x_1) \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ 1 & \sin(x_m) & x_m & x_m^2 & \cos(x_m) \end{vmatrix}, \quad \boldsymbol{Y}=\begin{vmatrix} y_1 \\ \dots \\ y_m \end{vmatrix}$$

Po podstawieniu:

$$z_1 = \sin(x), \; z_2 = x, \; z_3 = x^2, \; z_4 = \cos(x)$$

otrzymuje się

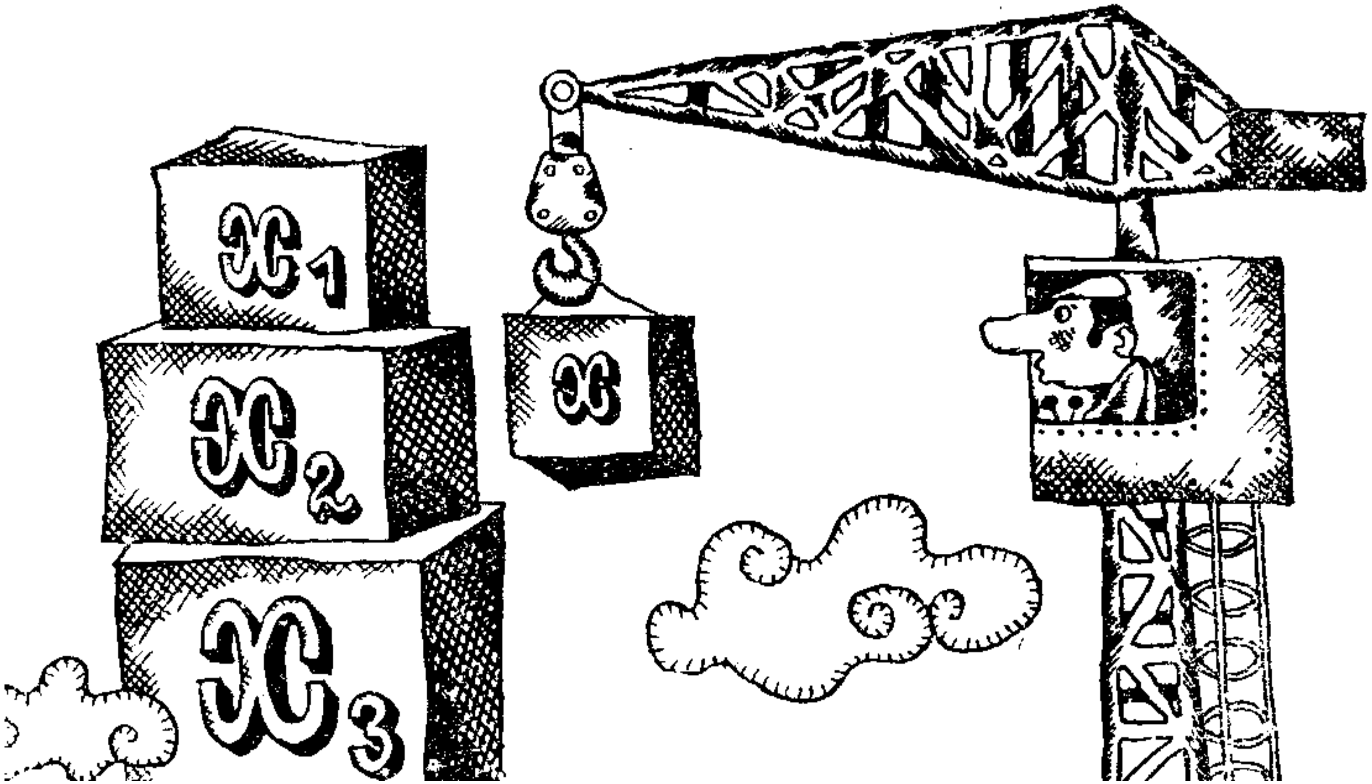
$$y_j = b_0 + b_1 z_1 + b_2 z_2 + b_3 z_3 + b_4 z_4$$

$$\boldsymbol{X}=\begin{vmatrix} 1 & z_{11} & z_{12} & z_{13} & z_{14} \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ 1 & z_{m1} & z_{m2} & z_{m3} & z_{m4} \end{vmatrix}$$

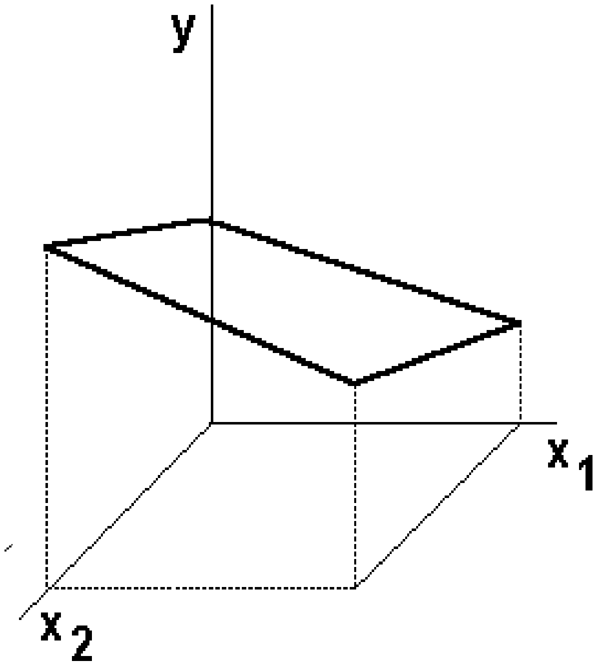
a następnie oblicza się:

$$\left(X^T X\right), \; \left(X^T X\right)^{-1}, \; \left(\mathrm{X}^{\mathrm{T}} Y\right), \; B = \left(X^T X\right)^{-1}\left(\mathrm{X}^{\mathrm{T}} Y\right)$$

Stopniowe tworzenie

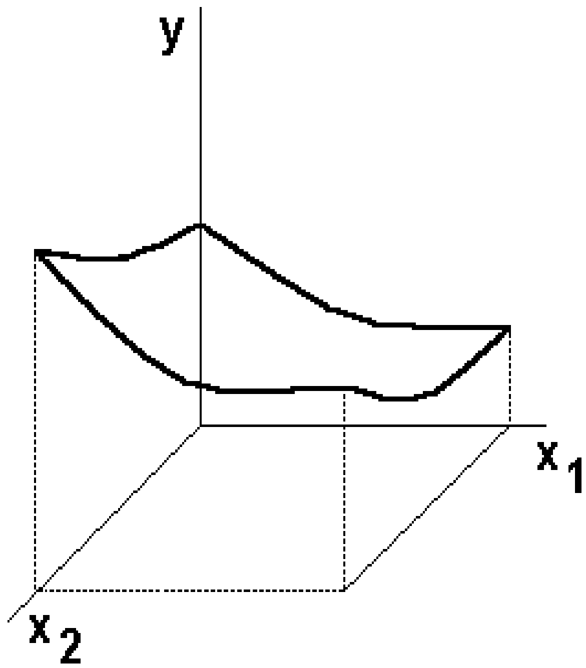


Efekt współdziałania



Wynik zależy od obu zmiennych x_1 i x_2

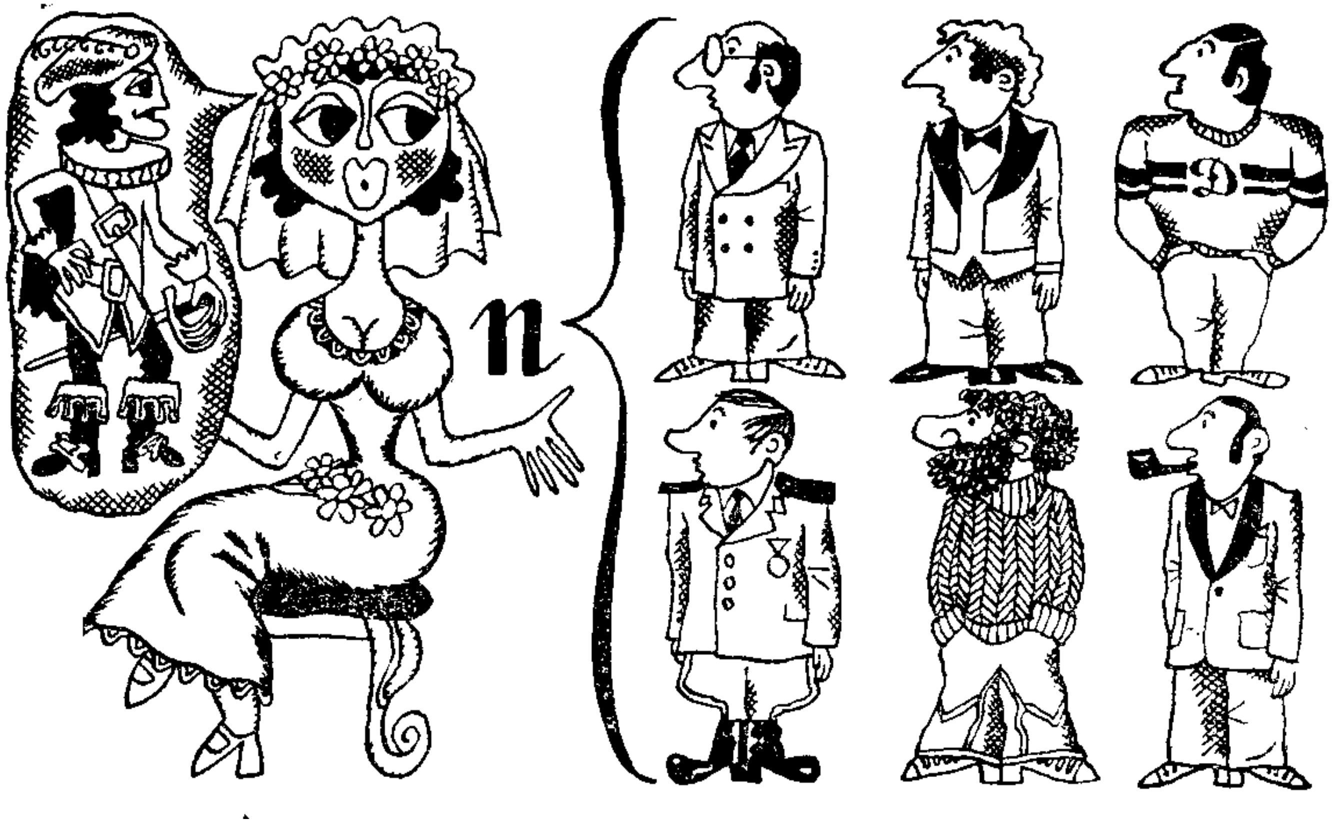
$y = b_0 + b_1 x_1 + b_2 x_2$



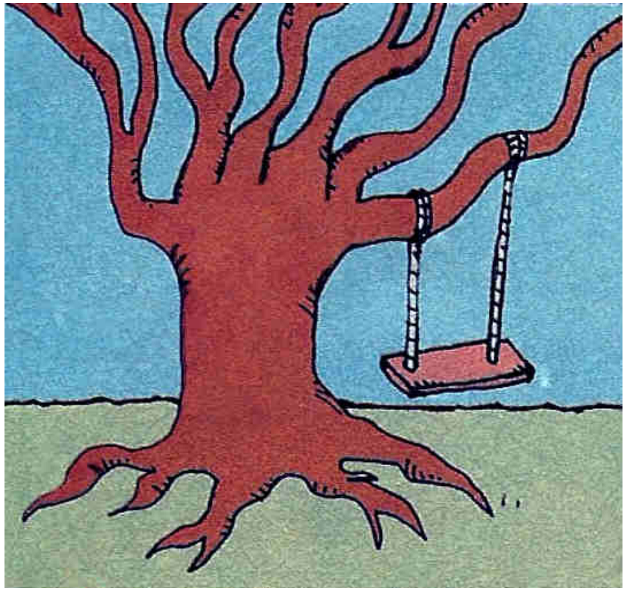
Wynik zależy od obu zmiennych x_1 i x_2

$y = b_0 + b_1 x_1 + b_2 x_2 + b_{12} x_1 x_2$

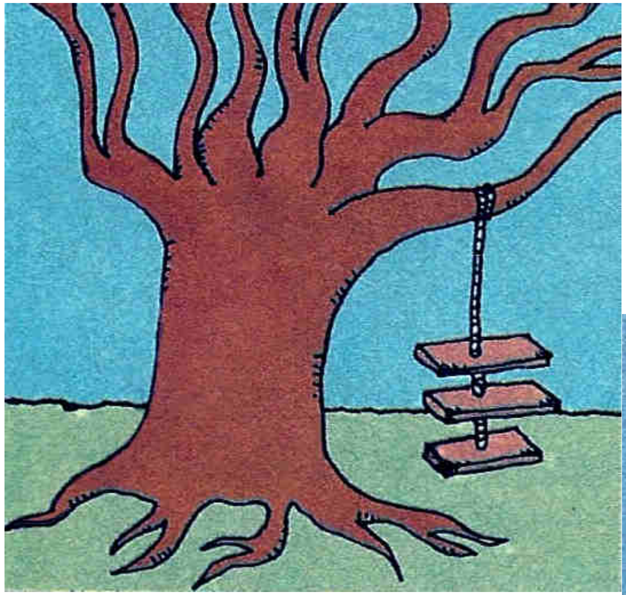
Wybór modelu



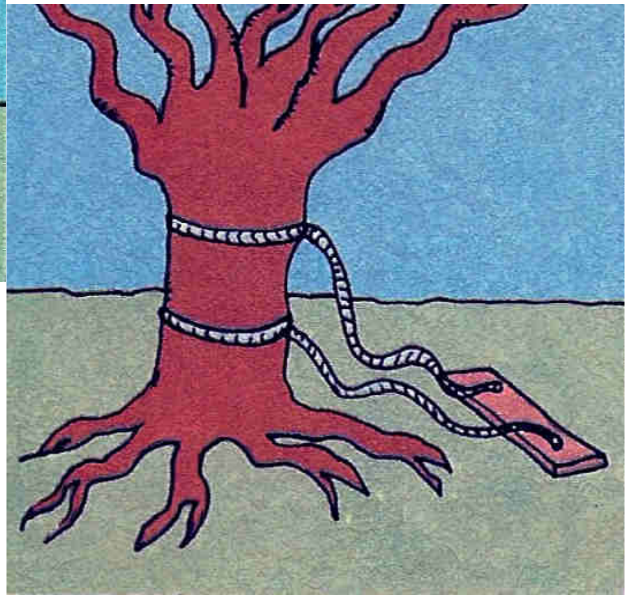
To, co klient zamówił



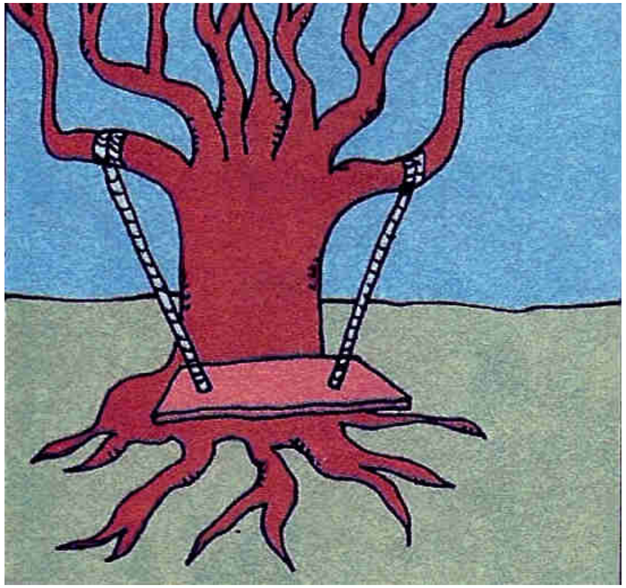
To, co projektant zrozumiał



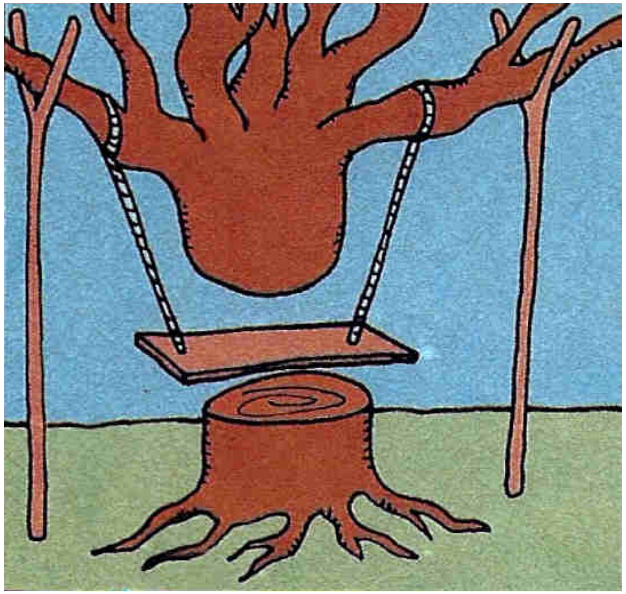
To, co opisywał projekt



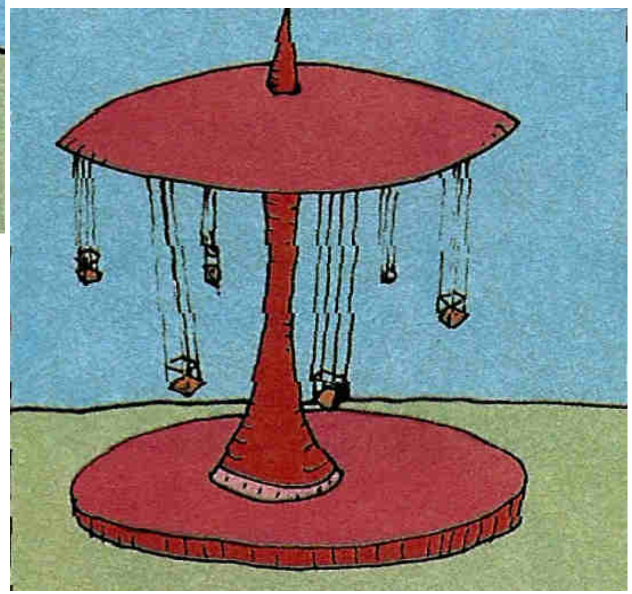
To, co wykonał projektant



To, co wdrożono



To, co klient kupił



Badanie istotności otrzymanego równania regresji

Analiza wariancji

Równanie regresji

$$y = b_0 + b_1 x_1 + b_2 x_2 + \cdots + b_k x_k$$

Istotność równania regresji

Hipoteza:

$$H_0 : \beta_1 = \beta_2 = \cdots = \beta_k = 0, \quad H_1 : \beta_i \neq 0$$

Kryterium istotności równania regresji:

$$F_{obl} = \frac{s_{regr}^2}{s_{reszt}^2}, \quad F_{kryt}(0{,}05; k; n-k-1)$$

gdzie

$$s_{regr}^2 = \frac{i = \sum_{i=1}^{n} \left(y_{obl,i} - \bar{y}_{śr}\right)^2}{k}, \quad s_{reszt}^2 = \frac{\sum_{i=1}^{n} \left(y_{dośw,i} - y_{obl,i}\right)^2}{n-k-1}$$

gdzie

n – liczba wyników $y_{dośw}$, k – liczba zmiennych niezależnych

Równanie regresji

$$y = b_0 + b_1 x_1 + b_2 x_2 + \cdots + b_k x_k$$

Adekwatność równania regresji

Hipoteza:

$$H_0; \sigma^2_{reszt} = \sigma^2_{powt}, \quad H_1 : \sigma^2_{reszt} > \sigma^2_{powt}$$

Kryterium adekwatności równania regresji:

$$F_{obl} = \frac{s^2_{reszt}}{s^2_{powt}}, \quad F(0{,}05; n-k-1; m-1)$$

gdzie

$$s^2_{reszt} = \frac{\sum_{i=1}^{n} \left(y_{dośw,i} - y_{obl,i}\right)^2}{n-k-1}, \quad s^2_{powt} = \frac{\sum_{i=1}^{m} \left(y_{powt,i} - \bar{y}_{powt}\right)^2}{m-1}$$

gdzie

n – liczba wyników $y_{dośw}$, k – liczba zmiennych niezależnych, m – liczba wyników y_{powt}

Niekiedy, gdy brak danych o s^2_{powt} można stosować s^2_{reszt}.

Linia prosta istotna i adekwatna

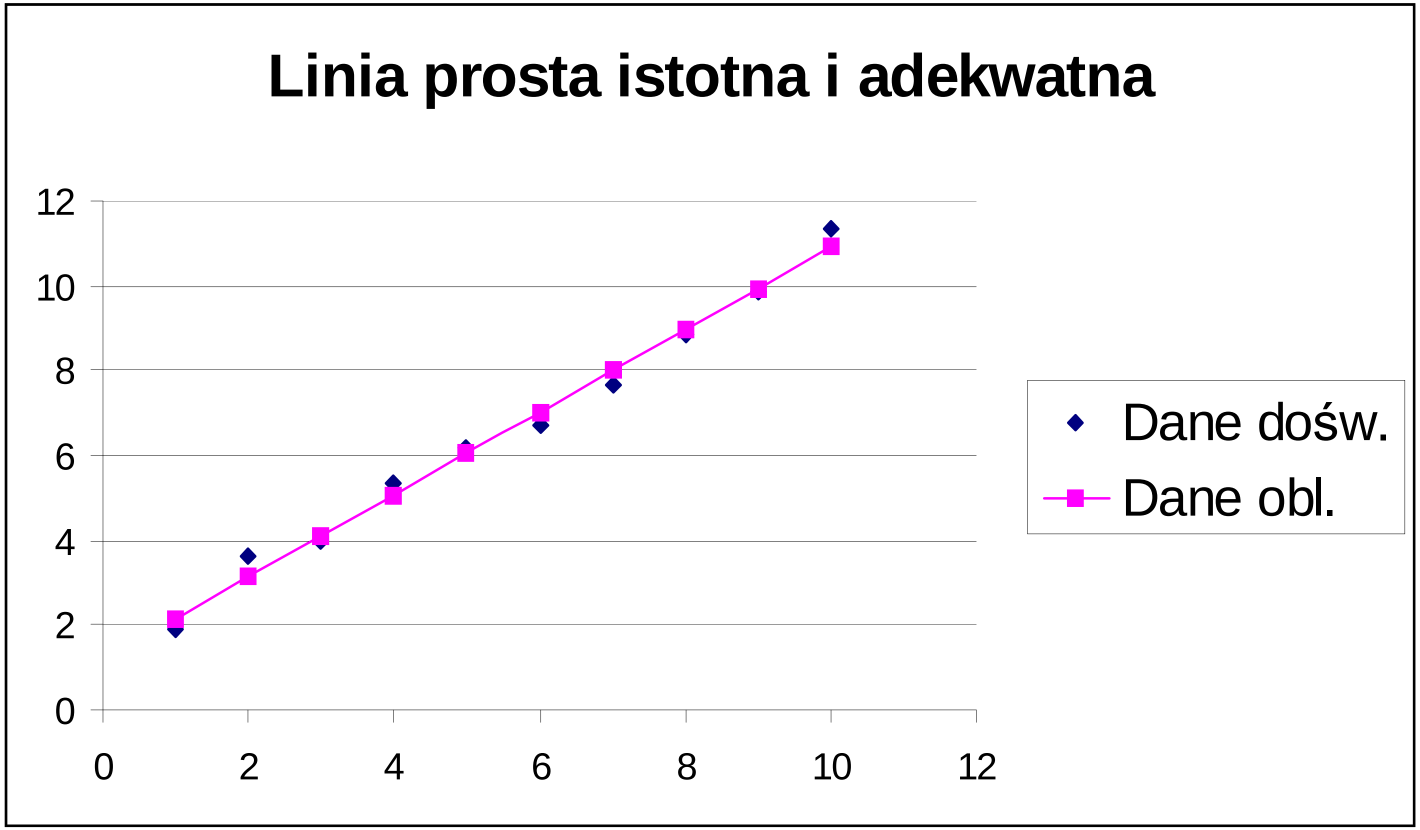
Dane linii prostej				Wyniki obliczeń			
Nr	x_0	x	y	y_{obl}	$y_{śr}$	N	10
1	1	1	1,915017	2,15804	6,5394	S_x	55,0000
2	1	2	3,597179	3,13169	6,5394	S_y	65,3945
3	1	3	3,980176	4,10534	6,5394	SS_x	385,0000
4	1	4	5,328136	5,07898	6,5394	SP_{xy}	439,9954
5	1	5	6,156007	6,05263	6,5394	SSD_x	82,5000
6	1	6	6,688133	7,02627	6,5394	SPD_{xy}	80,3257
7	1	7	7,667144	7,99992	6,5394	SS_y	506,658
8	1	8	8,869709	8,97356	6,5394	$x_{śr}$	5,5000
9	1	9	9,833395	9,94721	6,5394	$y_{śr}$	6,5394
10	1	10	11,35959	10,92085	6,5394	b	0,973645
						a	1,184400
		Powtarzalność				s_0^2	1,007E-01
		x	y			s_b^2	1,220E-03
		5,5	6,32643			s_a^2	4,699E-02
		5,5	6,33466			s_0	3,173E-01
		5,5	6,53975			s_b	3,493E-02
		5,5	6,69900			s_a	2,168E-01

Analiza wariancji regresji liniowej

Zmienność	Suma kwad.	L. stop. kw.	Śred. kw.	F
Regresja	78,2088	1	78,20877	7,77E+02
Rozrzut	8,05E-01	8	0,100684	-
Ogólna	79,0142	9	-	-
F_{kryt}(0,05;1;9)		5,117	Regresja istotna	

Test adekwatności

s_{powt}^2	s_{reszt}^2	F_{obl}	F_{kryt}
0,0320453	0,100684425	3,142	8,785
Równanie liniowe jest adekwatne			


Linia prosta istotna i adekwatna
12
10
8
6
4
2
0
0
2
4
6
8
10
12
Dane dośw.
Dane obl.

Linia prosta istotna i niedekwatna

Dane linii prostej				Wyniki obliczeń			
Nr	x_0	x	y	y_{obl}	$y_{śr}$	N	10
1	1	1	2,0150174	1,05804	10,3894	S_x	55,0000
2	1	2	3,9971788	3,13169	10,3894	S_y	103,8945
3	1	3	4,8801759	5,20534	10,3894	SS_x	385,0000
4	1	4	6,928136	7,27898	10,3894	SP_{xy}	742,4954
5	1	5	8,656007	9,35263	10,3894	SSD_x	82,5000
6	1	6	10,288133	11,42627	10,3894	SPD_{xy}	171,0757
7	1	7	12,567144	13,49992	10,3894	SS_y	1441,561
8	1	8	15,269709	15,57356	10,3894	$x_{śr}$	5,5000
9	1	9	17,933395	17,64721	10,3894	$y_{śr}$	10,3894
10	1	10	21,359588	19,72085	10,3894	b	2,073645
						a	-1,015600
						s_0^2	9,255E-01
						s_b^2	1,122E-02
						s_a^2	4,319E-01
						s_0	9,620E-01
						s_b	1,059E-01
						s_a	6,572E-01

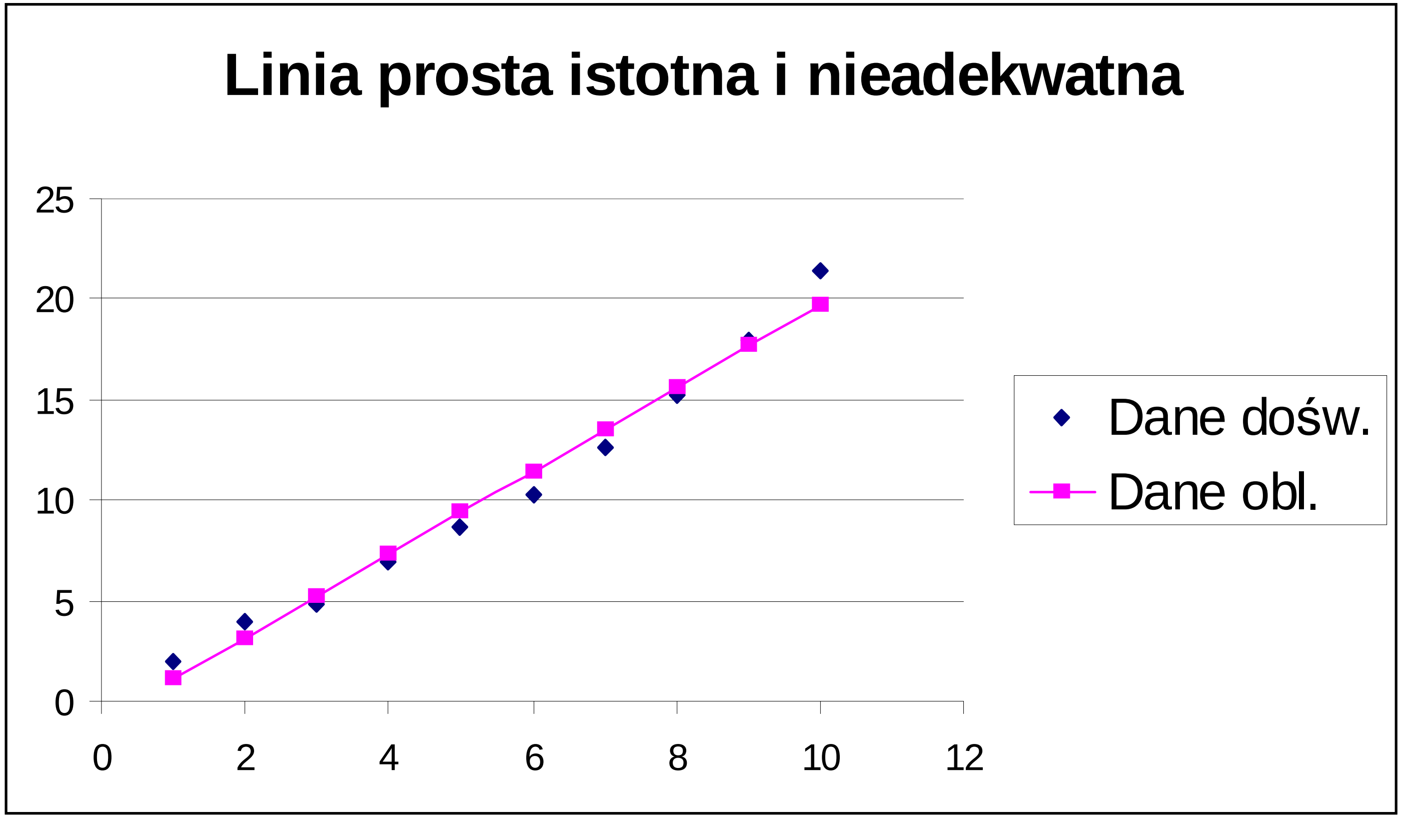
Powtarzalność	
x	y
5,5	9,35143
5,5	9,35966
5,5	9,56475
5,5	9,72400

Analiza wariancji regresji liniowej

Zmienność	Suma kwad.	L. stop. kw.	Śred. kw.	F
Regresja	354,7504	1	354,75038	3,83E+02
Rozrzut	7,40E+00	8	0,9255091	-
Ogólna	362,1544	9	-	-
F_{kryt}(0,05;1;9)		5,117	**Regresja istotna**	

Test adekwatności

s_{powt}^2	s_{reszt}^2	F_{obl}	F_{kryt}
0,03204533	0,92550909	28,881	8,786
Równanie liniowe nie jest adekwatne			


Linia prosta istotna i nieadekwatna
25
20
15
10
5
0
0
2
4
6
8
10
12
Dane dośw.
Dane obl.

Linia prosta nieistotna i adekwatna

Dane linii prostej				Wyniki obliczeń			
Nr	x_0	x	y	y_{obl}	$y_{śr}$	N	10
1	1	1	1,015017	1,25804	1,5894	S_x	55,0000
2	1	2	1,797179	1,33169	1,5894	S_y	15,8945
3	1	3	1,280176	1,40534	1,5894	SS_x	385,0000
4	1	4	1,728136	1,47898	1,5894	SP_{xy}	93,4954
5	1	5	1,656007	1,55263	1,5894	SSD_x	82,5000
6	1	6	1,288133	1,62627	1,5894	SPD_{xy}	6,0757
7	1	7	1,367144	1,69992	1,5894	SS_y	26,516
8	1	8	1,669709	1,77356	1,5894	$x_{śr}$	5,5000
9	1	9	1,733395	1,84721	1,5894	$y_{śr}$	1,5894
10	1	10	2,359588	1,92085	1,5894	b	0,073645
						a	1,184400
		Powtarzalność				s_0^2	1,007E-01
		x	y			s_b^2	1,220E-03
		5,5	1,37643			s_a^2	4,699E-02
		5,5	1,38466			s_0	3,173E-01
		5,5	1,58975			s_b	3,493E-02
		5,5	1,74900			s_a	2,168E-01

Analiza wariancji regresji liniowej

Zmienność	Suma kwad.	L. stop. kw.	Śred. kw.	F
Regresja	0,4474	1	0,447449	4,44E+00
Rozrzut	8,05E-01	8	0,100684	-
Ogólna	1,2529	9	-	-
F_{kryt}(0,05;1;9)		5,117	**Regresja nieistotna**	

Test adekwatności

s_{powt}^2	s_{reszt}^2	F_{obl}	F_{kryt}
0,03204533	0,10068443	3,142	8,785
Równanie liniowe jest adekwatne			

Linia prosta nieistotna i nieadekwatna

Dane linii prostej				Wyniki obliczeń			
Nr	x_0	x	y	y_{obl}	$y_{śr}$	N	10
1	1	1	1,015017	1,25804	1,5894	S_x	55,0000
2	1	2	1,797179	1,33169	1,5894	S_y	15,8945
3	1	3	1,280176	1,40534	1,5894	SS_x	385,0000
4	1	4	1,728136	1,47898	1,5894	SP_{xy}	93,4954
5	1	5	1,656007	1,55263	1,5894	SSD_x	82,5000
6	1	6	1,288133	1,62627	1,5894	SPD_{xy}	6,0757
7	1	7	1,367144	1,69992	1,5894	SS_y	26,516
8	1	8	1,669709	1,77356	1,5894	$x_{śr}$	5,5000
9	1	9	1,733395	1,84721	1,5894	$y_{śr}$	1,5894
10	1	10	2,359588	1,92085	1,5894	b	0,073645
						a	1,184400
						s_0^2	1,007E-01
						s_b^2	1,220E-03
						s_a^2	4,699E-02
						s_0	3,173E-01
						s_b	3,493E-02
						s_a	2,168E-01

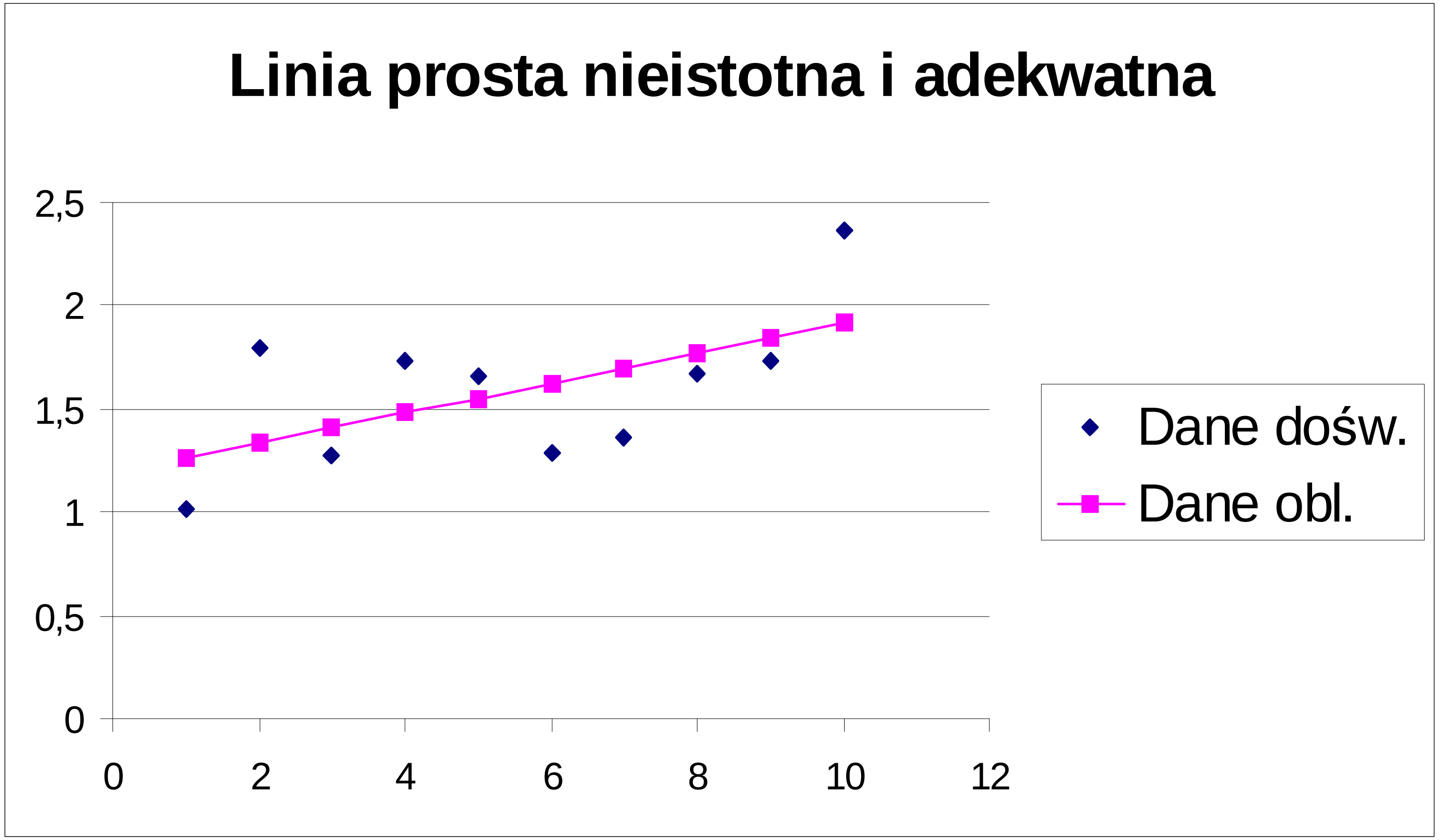
Powtarzalność	
x	y
5,5	1,44655
5,5	1,45146
5,5	1,57369
5,5	1,66860

Analiza wariancji regresji liniowej

Zmienność	Suma kwad.	L. stop. kw.	Śred. kw.	F
Regresja	0,4474	1	0,447449	4,44E+00
Rozrzut	8,05E-01	8	0,100684	-
Ogólna	1,2529	9	-	-
F_{kryt}(0,05;1;9)		5,117	**Regresja nieistotna**	

Test adekwatności

s_{powt}^2	s_{reszt}^2	F_{obl}	F_{kryt}
0,01138302	0,10068443	8,845	8,785
Równanie liniowe nie jest adekwatne			


Linia prosta nieistotna i adekwatna
2,5
2
1,5
1
0,5
0
0
2
4
6
8
10
12
Dane dośw.
Dane obl.

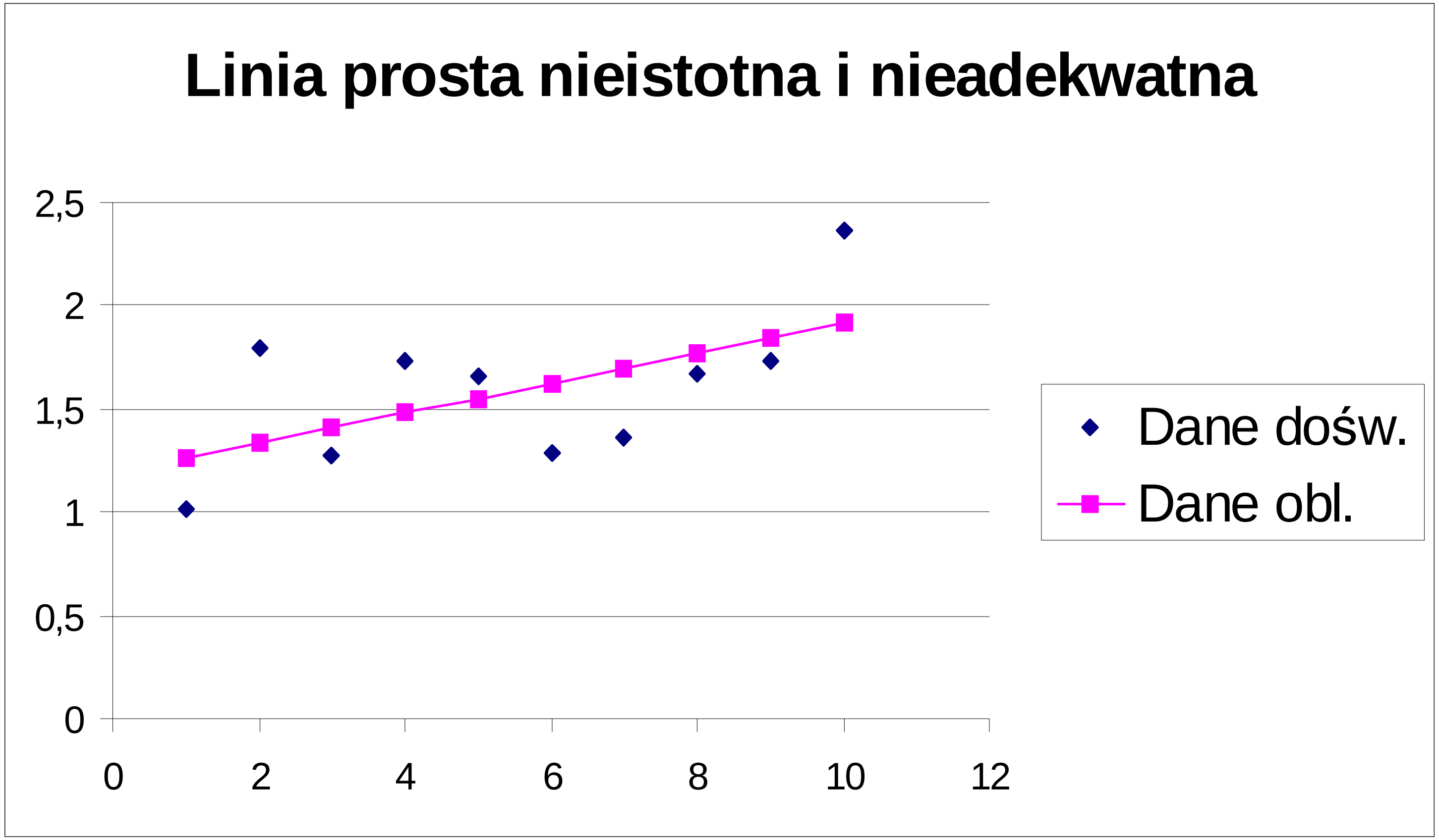
Obliczenia

Nr dośw.	Macierz ***X***			$y_{dośw}$	y_{obl}	$y_{śred}$	$(y_{dośw}-y_{obl})^2$
	x_0	x_1	x_2				
1	1	-1,00	-1,00	71,40569	71,78311	78,12373	0,14245
2	1	1,00	-1,00	80,06655	79,68913	78,12373	0,14245
3	1	-1,00	1,00	76,93575	76,55833	78,12373	0,14245
4	1	1,00	1,00	84,08693	84,46435	78,12373	0,14245
5	1	0	0	77,46240	78,12373		
6	1	0	0	77,27525	78,12373		
7	1	0	0	77,26686	78,12373		
8	1	0	0	77,34788	78,12373		

				t_{kryt}	3,182	Wniosek
b_0	78,1237308	s_{b0}^2	2,048E-03	$t_{obl,0}$	1726,444	**ISTOT.**
b_1	3,95301216	s_{b1}^2	2,048E-03	$t_{obl,1}$	87,357	**ISTOT.**
b_2	2,38761157	s_{b2}^2	2,048E-03	$t_{obl,2}$	52,763	**ISTOT.**

Analiza wariancji regresji liniowej						
Zmienność	Suma kwad.	L. stop. kw.	Śred. kw.	F	F_{kryt}	**Regresja nieistotna**
Regresja	8,5308E+01	2	4,265E+01	74,860	199,499	
Rozrzut	5,6978E-01	1	5,698E-01			
Ogólna	8,5878E+01	3				

Test adekwatności, F			
s_{powt}^2	s_{reszt}^2	F_{obl}	F_{kryt}
8,191E-03	5,698E-01	6,956E+01	10,128
Równanie liniowe nie jest adekwatne			


Linia prosta nieistotna i nieadekwatna
2,5
2
1,5
1
0,5
0
0
2
4
6
8
10
12
Dane dośw.
Dane obl.

Problemy z równaniem regresji (klasyczna MNK) i analiza reszt

Analiza reszt 1: linia prosta jest prawdopodobna

x	y	yobl	y - y_{obl}
4	4,26	5,00	-0,74
5	5,68	5,50	0,18
6	7,24	6,00	1,24
7	4,82	6,50	-1,68
8	6,95	7,00	-0,05
9	8,81	7,50	1,31
10	8,04	8,00	0,04
11	8,33	8,50	-0,17
12	10,84	9,00	1,84
13	7,58	9,50	-1,92
14	9,96	10,00	-0,04

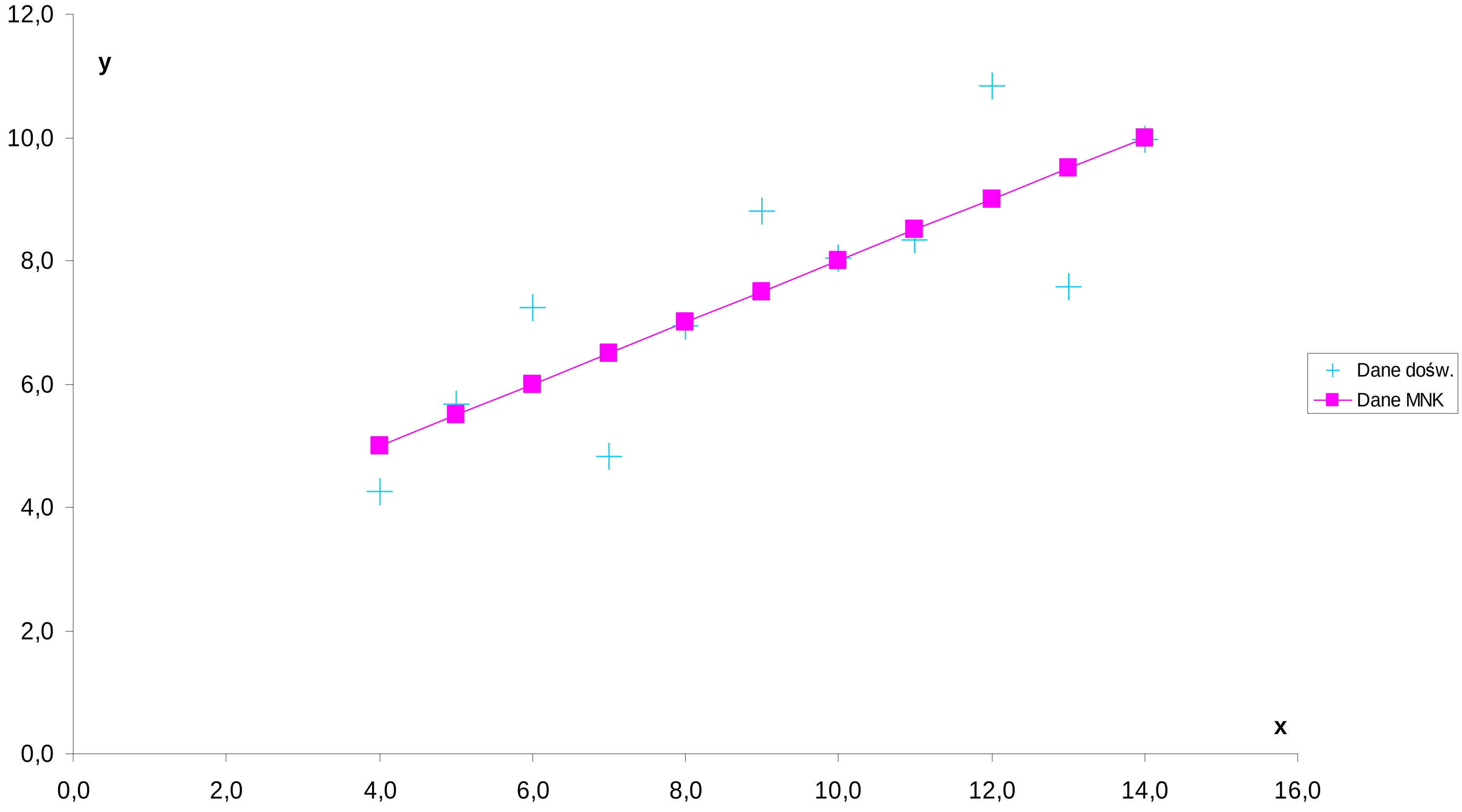
PODSUMOWANIE - WYJŚCIE

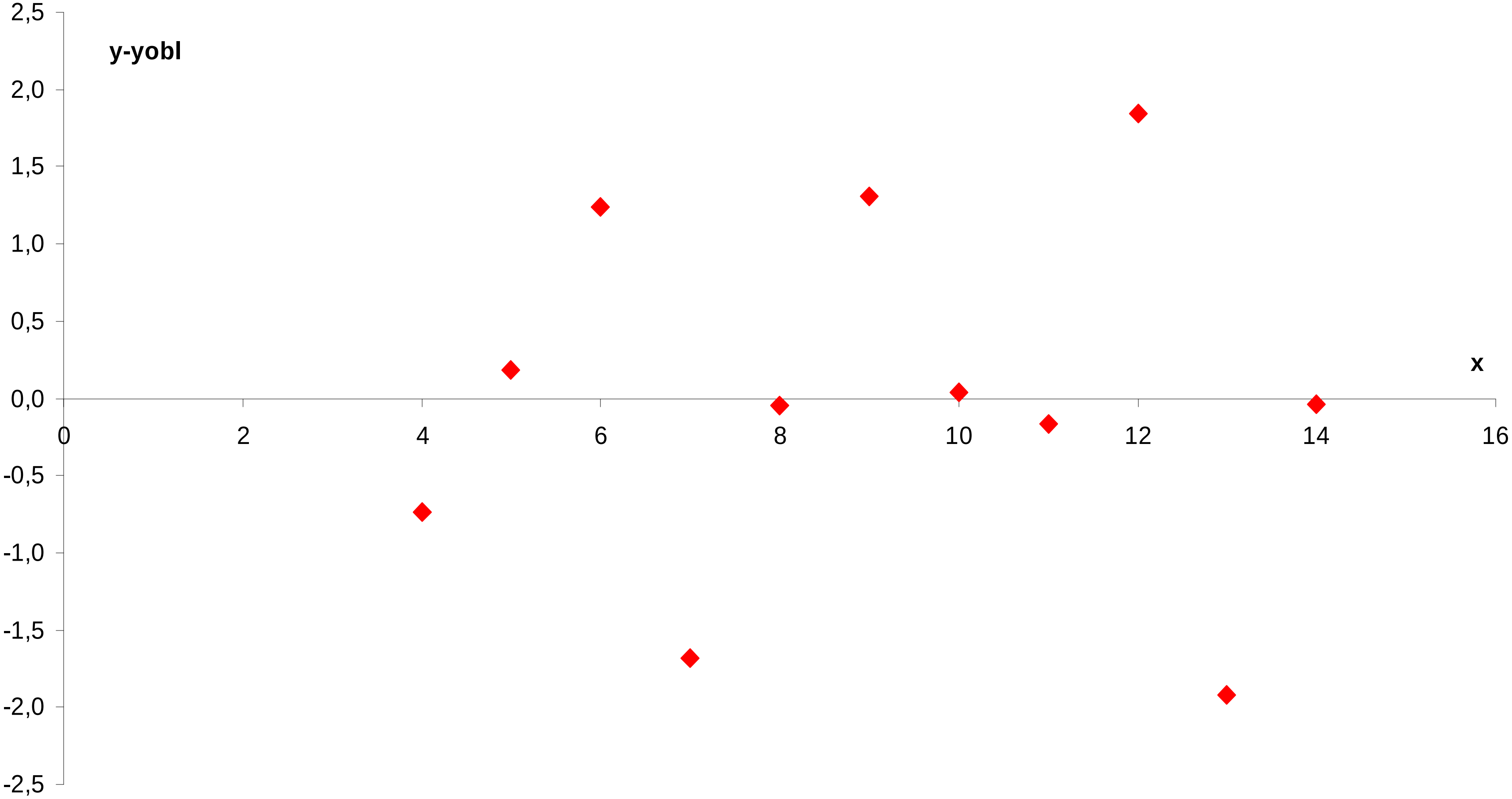
Statystyki regresji	
Wielokrotn	0,816421
R kwadrat	0,666542
Dopasowa	0,629492
Błąd stand	1,236603
Obserwacj	11

ANALIZA WARIANCJI

	df	*SS*	*MS*	*F*	*Istotność F*
Regresja	1	27,51	27,51	17,98994	0,00217
Resztkowy	9	13,76269	1,529188		
Razem	10	41,27269			

	Współczynni	*d standard*	*t Stat*	*Wartość-p*	*Dolne 95%*	*Górne 95%*
Przecięcie	**3,000091**	1,124747	2,667348	0,025734	0,455735	5,544447
Zmienna X	**0,500091**	0,117906	4,241455	0,00217	0,23337	0,766812


12,0
10,0
8,0
6,0
4,0
2,0
0,0
y
x
0,0
2,0
4,0
6,0
8,0
10,0
12,0
14,0
16,0
Dane dośw.
Dane MNK


2,5
y-yobl
2,0
1,5
1,0
0,5
0,0
-0,5
-1,0
-1,5
-2,0
-2,5
0
2
4
6
8
10
12
14
16
x

Analiza reszt 2: to nie jest linia prosta

x	*y*	*yobl*	*y - y_{obl}*
4	3,1	5,00	-1,90
5	4,74	5,50	-0,76
6	6,13	6,00	0,13
7	7,26	6,50	0,76
8	8,14	7,00	1,14
9	8,77	7,50	1,27
10	9,14	8,00	1,14
11	9,26	8,50	0,76
12	9,13	9,00	0,13
13	8,74	9,50	-0,76
14	8,1	10,00	-1,90

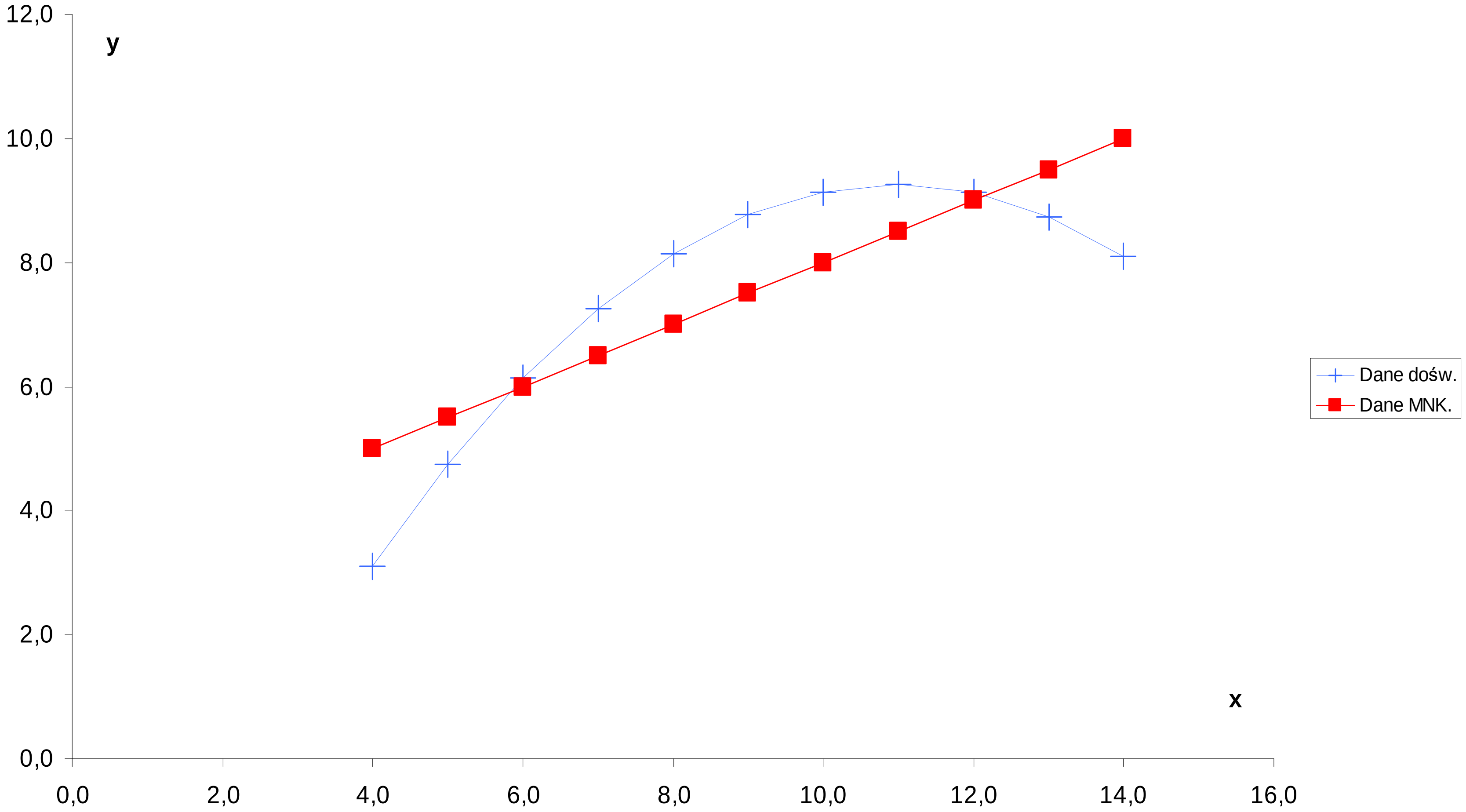
PODSUMOWANIE - WYJŚCIE

Statystyki regresji	
Wielokrotn	0,816237
R kwadrat	0,666242
Dopasowa	0,629158
Błąd stand	1,237214
Obserwacj	11

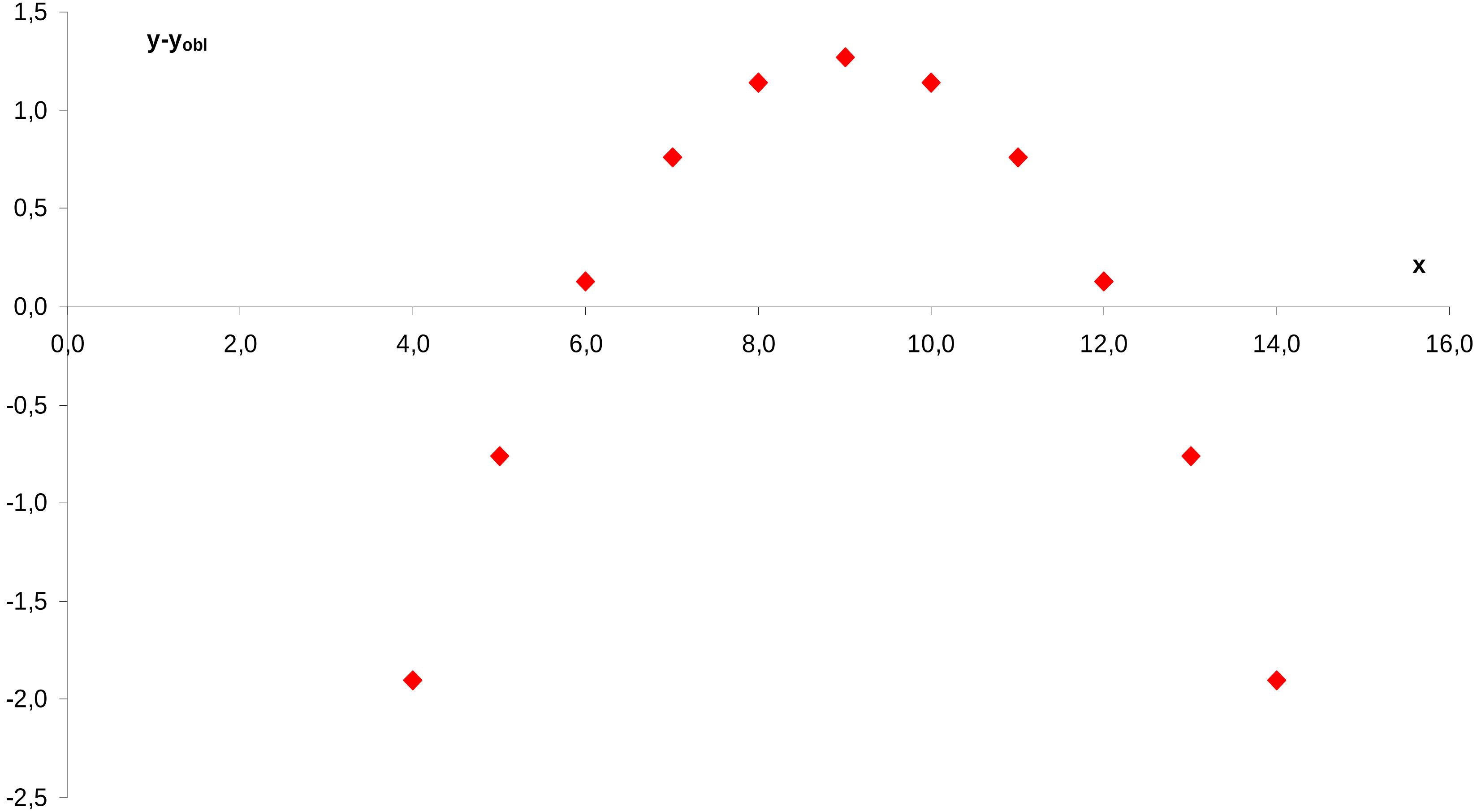
ANALIZA WARIANCJI

	df	*SS*	*MS*	*F*	*Istotność F*
Regresja	1	27,5	27,5	17,96565	0,002179
Resztkowy	9	13,77629	1,530699		
Razem	10	41,27629			

	Współczynniki	*d standardo*	*t Stat*	*Wartość-p*	*Dolne 95%*	*Górne 95%*
Przecięcie	**3,000909**	1,125302	2,666758	0,025759	0,455296	5,546522
Zmienna X	**0,500000**	0,117964	4,23859	0,002179	0,233147	0,766853



12,0
10,0
8,0
6,0
4,0
2,0
0,0
y
x
0,0
2,0
4,0
6,0
8,0
10,0
12,0
14,0
16,0
Dane dośw.
Dane MNK.


y-y$_{obl}$
x
1,5
1,0
0,5
0,0
-0,5
-1,0
-1,5
-2,0
-2,5
0,0
2,0
4,0
6,0
8,0
10,0
12,0
14,0
16,0

Analiza reszt 3: podejrzanie duża różnica

x	y	yobl	$y - y_{obl}$
4,00	5,39	5,00	0,39
5,00	5,73	5,50	0,23
6,00	6,08	6,00	0,08
7,00	6,42	6,50	-0,08
8,00	6,77	7,00	-0,23
9,00	7,11	7,50	-0,39
10,00	7,46	8,00	-0,54
11,00	7,81	8,50	-0,69
12,00	8,15	9,00	-0,85
13,00	12,74	9,50	**3,24**
14,00	8,84	10,00	-1,16

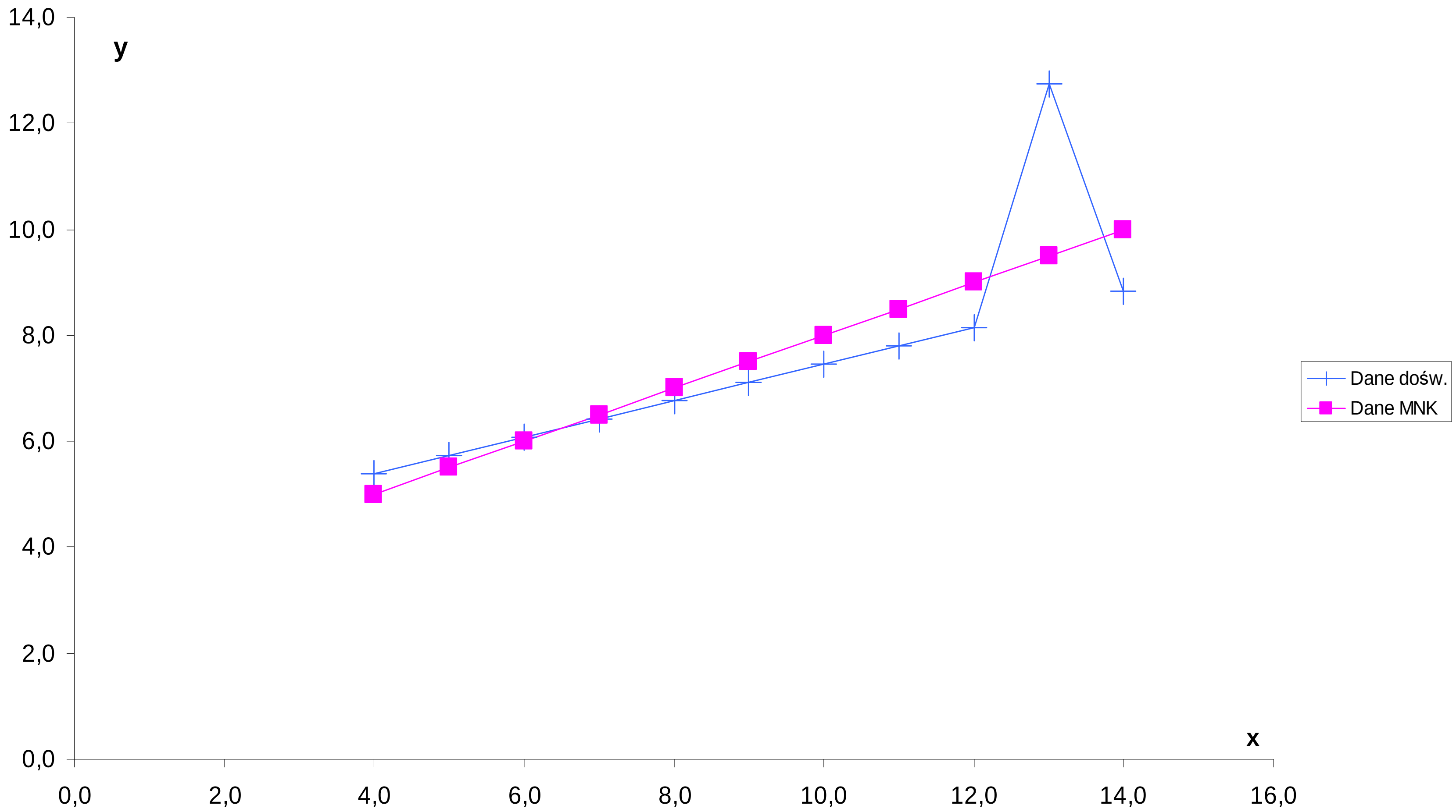
PODSUMOWANIE - WYJŚCIE

Statystyki regresji	
Wielokrotn	0,816287
R kwadrat	0,666324
Dopasowa	0,629249
Błąd stand	1,236311
Obserwacj	11

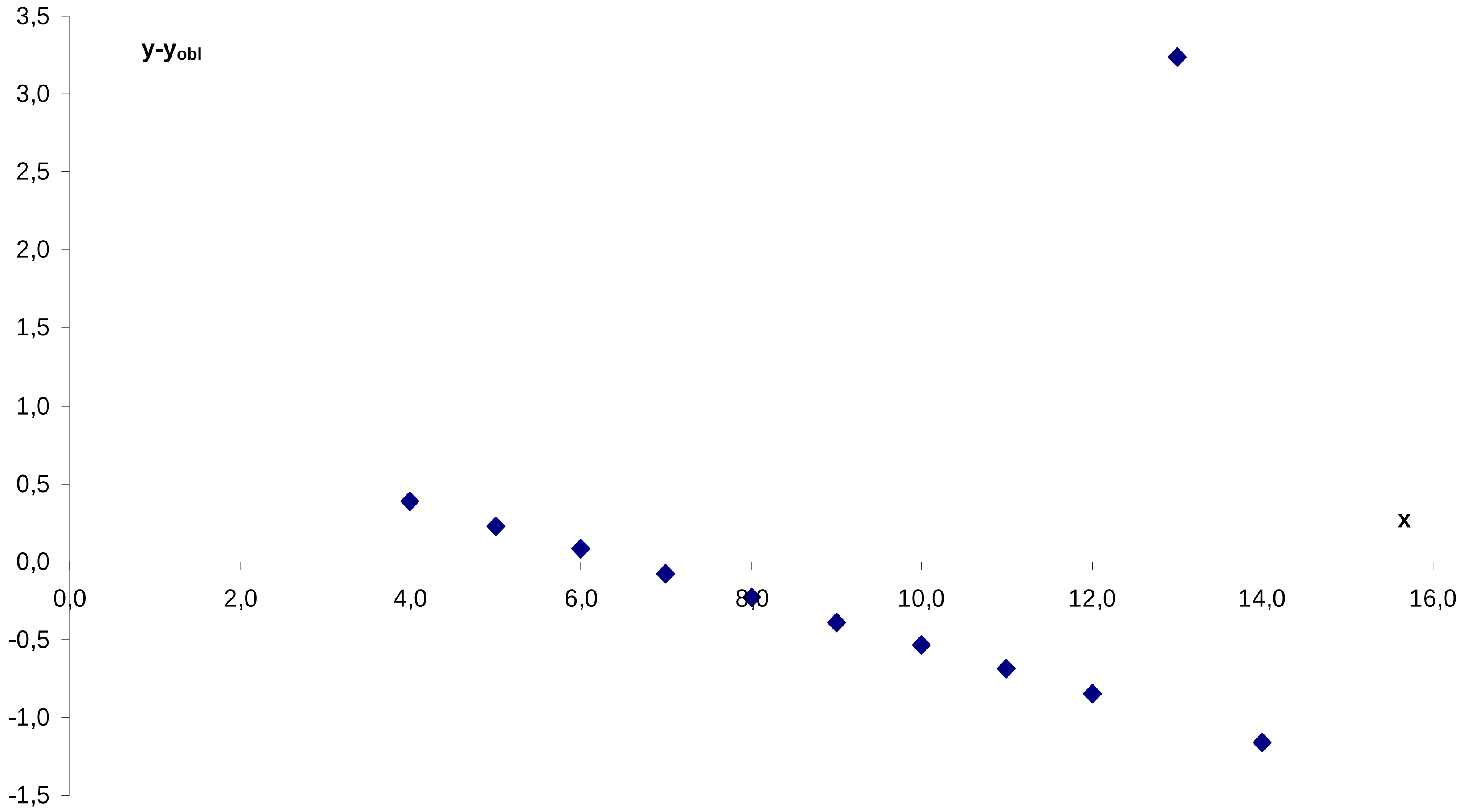
ANALIZA WARIANCJI

	df	*SS*	*MS*	*F*	*Istotność F*
Regresja	1	27,47001	27,47001	17,97228	0,002176
Resztkowy	9	13,75619	1,528466		
Razem	10	41,2262			

	Współczynni	*d standardo*	*t Stat*	*Wartość-p*	*Dolne 95%*
Przecięcie	**3,002455**	1,124481	2,67008	0,025619	0,458699
Zmienna X	**0,499727**	0,117878	4,239372	0,002176	0,233069



14,0
y
12,0
10,0
8,0
6,0
4,0
2,0
0,0
0,0
2,0
4,0
6,0
8,0
10,0
12,0
14,0
16,0
x
Dane dośw.
Dane MNK



3,5
y-yobl
3,0
2,5
2,0
1,5
1,0
0,5
x
0,0
0,0
2,0
4,0
6,0
8,0
10,0
12,0
14,0
16,0
-0,5
-1,0
-1,5

Analiza reszt 4: dziwny rozkład punktów

x	*y*	*yobl*	$y - y_{obl}$
8,10	6,58	7,00	-0,42
7,90	5,76	7,00	-1,24
8,20	7,71	7,00	0,71
7,80	8,84	7,00	1,84
8,30	8,47	7,00	1,47
7,70	7,04	7,00	0,04
8,40	5,25	7,00	-1,75
7,60	5,56	7,00	-1,44
8,00	7,91	7,00	0,91
8,00	6,89	7,00	-0,11
19,00	12,50	12,50	-3,55E-15

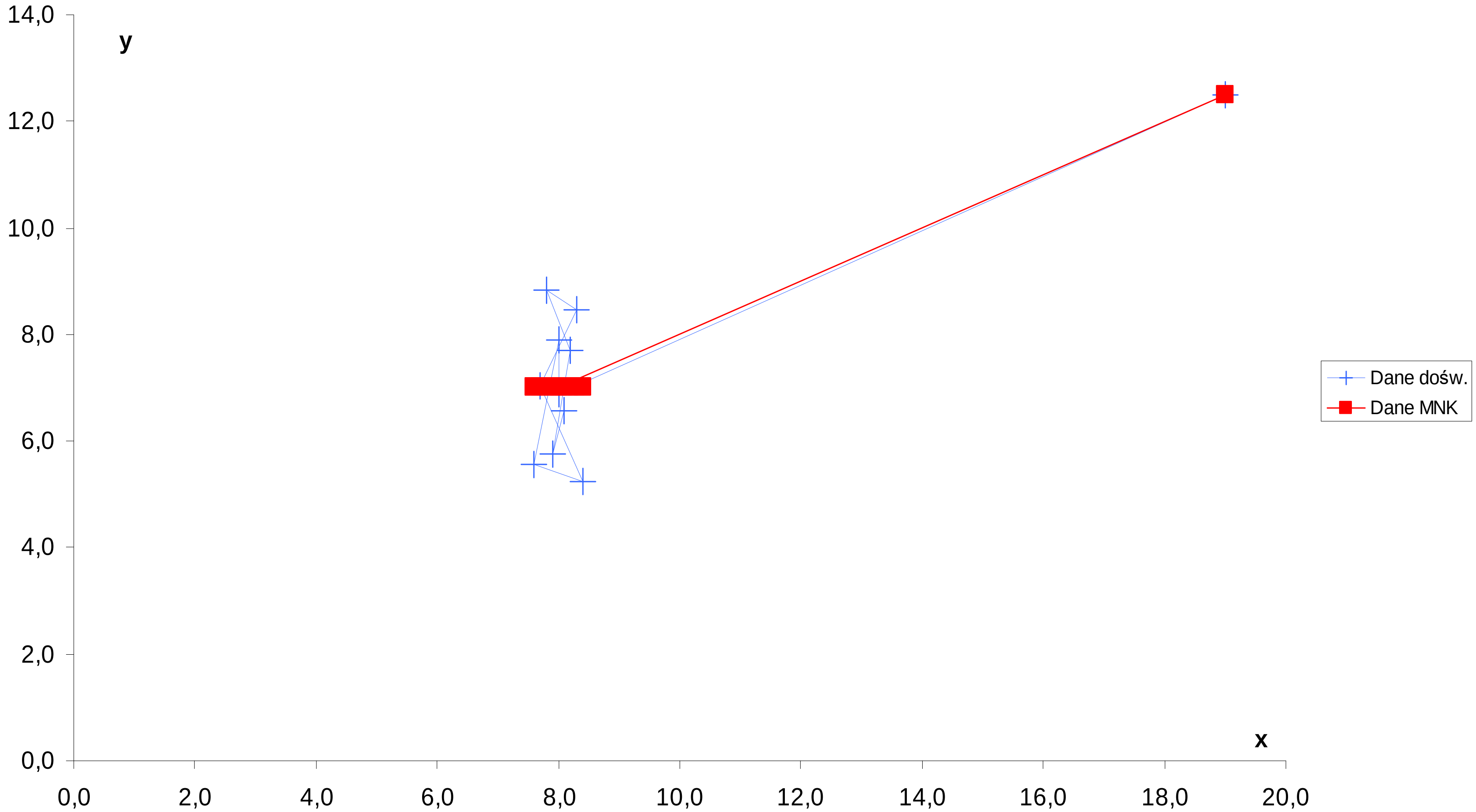
PODSUMOWANIE - WYJŚCIE

Statystyki regresji	
Wielokrotn	0,816688
R kwadrat	0,666979
Dopasowa	0,629977
Błąd stand	1,235192
Obserwacj	11

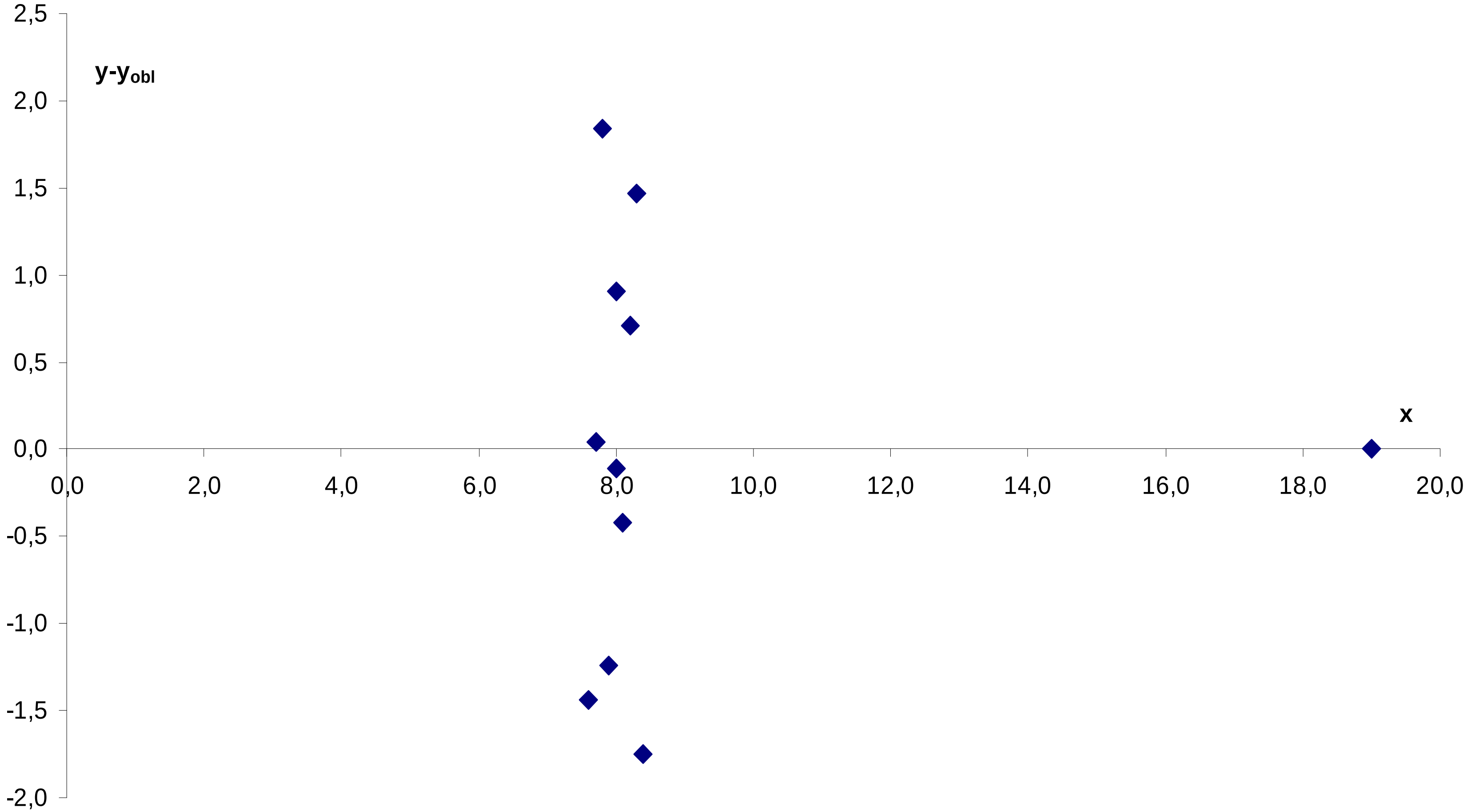
ANALIZA WARIANCJI

	df	*SS*	*MS*	*F*	*Istotność F*
Regresja	1	27,5012	27,5012	18,02531	0,002156
Resztkowy	9	13,73129	1,525699		
Razem	10	41,23249			

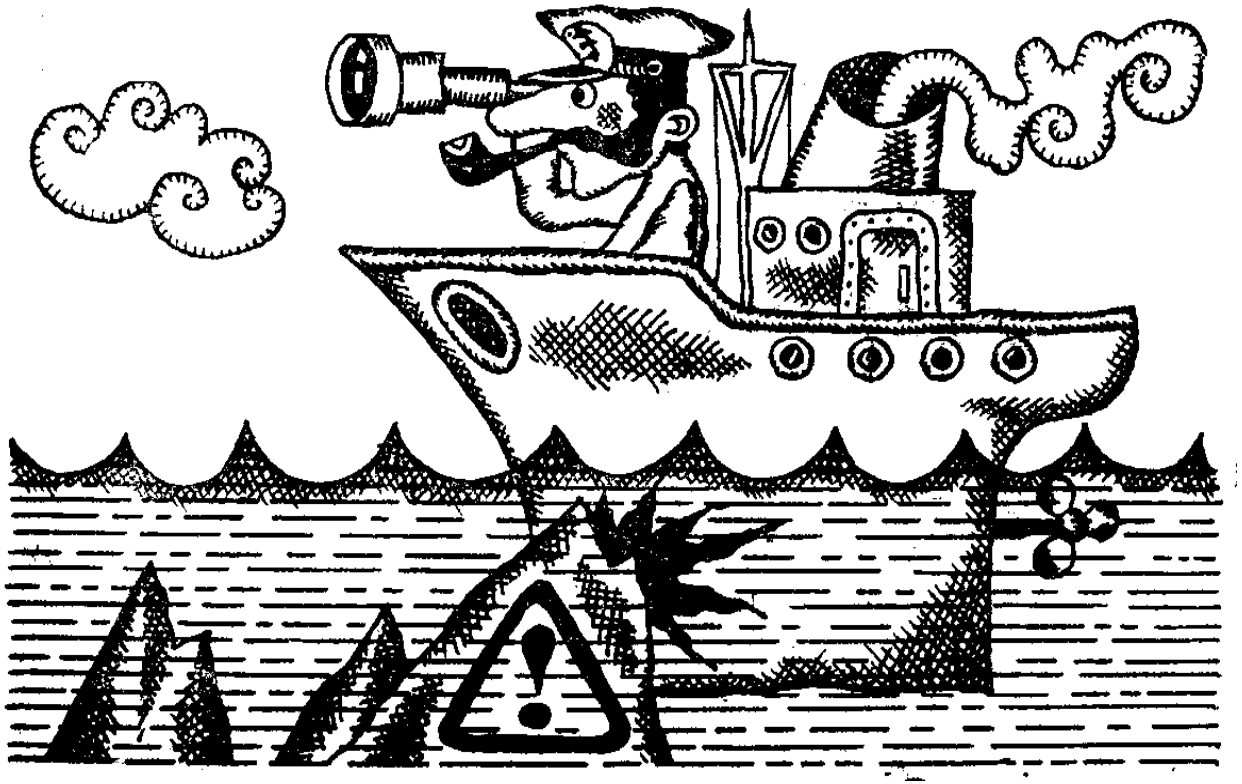
	Współczynni	*d standard*	*t Stat*	*Wartość-p*	*Dolne 95%*
Przecięcie	**3,013034**	1,120747	2,688415	0,024861	0,477726
Zmienna X	**0,498653**	0,117451	4,245623	0,002156	0,23296



14,0
12,0
10,0
8,0
6,0
4,0
2,0
0,0
y
x
0,0
2,0
4,0
6,0
8,0
10,0
12,0
14,0
16,0
18,0
20,0
Dane dośw.
Dane MNK


2,5
2,0
1,5
1,0
0,5
0,0
-0,5
-1,0
-1,5
-2,0
y-y_{obl}
x
0,0
2,0
4,0
6,0
8,0
10,0
12,0
14,0
16,0
18,0
20,0

Czy problem jest liniowy?



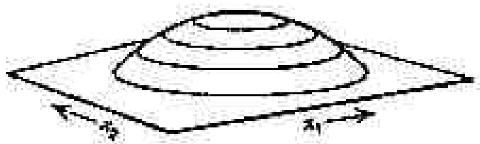
Punkt stacjonarny i
analiza kanoniczna wielomianu drugiego stopnia

Po wyznaczeniu równania regresji drugiego stopnia (w zmiennych kodowanych):

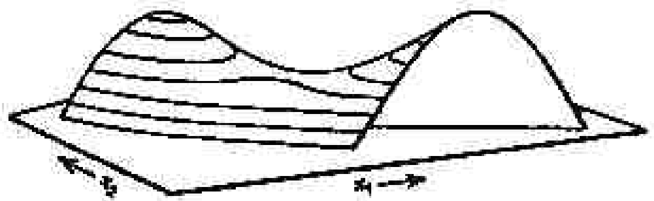
$$y = b_0 + b_1 x_1 + b_2 x_2 + \ldots + b_k x_k + b_{12} x_1 x_2 +$$
$$+ \ldots + b_{k-1,k} x_{k-1} x_k + b_{11} x_1^2 + \ldots + b_{kk} x_k^2$$

często interesujące jest wyznaczenie współrzędnych punktu stacjonarnego tego równania (w punkcie tym wartości pochodnych cząstkowych równania względem zmiennych niezależnych x_j są równe zeru).

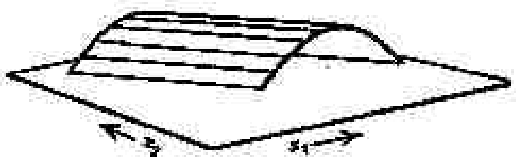
Punkt stacjonarny może odpowiadać maksimum lub minimum funkcji, albo być punktem przegięcia lub punktem siodłowym.



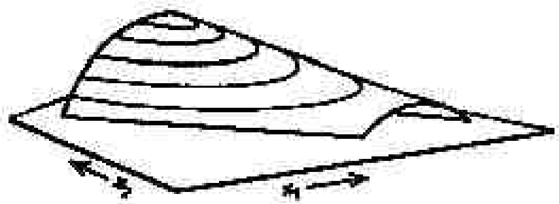
a) maksimum



b) minimaks (siodło)



c) grzbiet



d) rosnący grzbiet

Porównanie metod wyznaczania równania regresji

Równania regresji 2-go stopnia obliczono stosując plan losowy, rotatabilny i ortogonalny. Wyniki doświadczeń symulowano na podstawie następującego równania

$$y = 10{,}00 + 0{,}50x_1 - 0{,}50x_2 + 0{,}25x_1x_2 + 1{,}00x_1^2 + 0{,}25x_2^2$$

dodając do obliczonych wartości y iloczyn błędu losowego o rozkładzie $N(0,1)$ i założonego odchylenia standardowego s.

We wszystkich planach symulowano wyniki 13 doświadczeń dla tych samych błędów losowych i s=0,07.

1) Plan losowy (zmienne naturalne):

Nr doświad.	Macierz planu X						y_{sym}	y_{obl}
	x_0	x_1	x_2	$x_1{*}x_2$	x_1^2	x_2^2		
1	1	**-0,8875**	**-1,1750**	1,0428	0,7877	1,3806	10,9439	10,9740
2	1	**0,9500**	**-0,9625**	-0,9144	0,9025	0,9264	11,1649	11,2170
3	1	**-1,4250**	**1,1375**	-1,6209	2,0306	1,2939	10,3830	10,3680
4	1	**1,3500**	**1,2125**	1,6369	1,8225	1,4702	11,5345	11,5207
5	1	**-0,8250**	**0,0500**	-0,0413	0,6806	0,0025	10,1000	10,0959
6	1	**1,2125**	**0,1375**	0,1667	1,4702	0,0189	11,2439	11,2382
7	1	**0,3250**	**-1,4875**	-0,4834	0,1056	2,2127	11,0168	10,9706
8	1	**-0,1375**	**1,0125**	-0,1392	0,0189	1,0252	9,6183	9,6693
9	1	**0**	**0**	0	0	0	9,8387	9,9394
10	1	**0**	**0**	0	0	0	9,9807	9,9394
11	1	**0**	**0**	0	0	0	9,9854	9,9394
12	1	**0**	**0**	0	0	0	9,9037	9,9394
13	1	**0**	**0**	0	0	0	10,0367	9,9394

2) Plan rotatabilny (zmienne kodowane):

Nr doświad.	Macierz planu X						y_{sym}	y_{obl}
	x_0	x_0	x_1	x_2	$x_1 {*} x_2$	x_1^2		
1	1	**-1**	**-1**	1	1	1	10,9120	10,9658
2	1	**1**	**-1**	-1	1	1	11,2536	11,3011
3	1	**-1**	**1**	-1	1	1	9,9432	9,9159
4	1	**1**	**1**	1	1	1	10,8240	10,7904
5	1	**-1,4142**	**0**	0	2	0	10,8152	10,8007
6	1	**1,4142**	**0**	0	2	0	11,6619	11,6562
7	1	**0**	**-1,4142**	0	0	2	10,8773	10,8099
8	1	**0**	**1,4142**	0	0	2	9,6592	9,7064
9	1	**0**	**0**	0	0	0	9,8387	9,9490
10	1	**0**	**0**	0	0	0	9,9807	9,9490
11	1	**0**	**0**	0	0	0	9,9854	9,9490
12	1	**0**	**0**	0	0	0	9,9037	9,9490
13	1	**0**	**0**	0	0	0	10,0367	9,9490

3) Plan ortogonalny (zmienne kodowane i zmodyfikowane):

Nr doświad.	Macierz planu X						$y_{dośw}$	y_{obl}
	x_0	x_1	x_2	$x_1 * x_2$	$x_1'^2$	$x_2'^2$		
1	1	**-1**	**-1**	1	0,4453	0,4453	10,9120	10,9587
2	1	**1**	**-1**	-1	0,4453	0,4453	11,2536	11,2984
3	1	**-1**	**1**	-1	0,4453	0,4453	9,9432	9,9148
4	1	**1**	**1**	1	0,4453	0,4453	10,8240	10,7937
5	1	**-1,2671**	**0**	0	1,0509	-0,5547	10,6016	10,5899
6	1	**1,2671**	**0**	0	1,0509	-0,5547	11,3706	11,3619
7	1	**0**	**-1,2671**	0	-0,5547	1,0509	10,7551	10,6856
8	1	**0**	**1,2671**	0	-0,5547	1,0509	9,6553	9,7044
9	1	**0**	**0**	0	-0,5547	-0,5547	9,8387	9,9507
10	1	**0**	**0**	0	-0,5547	-0,5547	9,9807	9,9507
11	1	**0**	**0**	0	-0,5547	-0,5547	9,9854	9,9507
12	1	**0**	**0**	0	-0,5547	-0,5547	9,9037	9,9507
13	1	**0**	**0**	0	-0,5547	-0,5547	10,0367	9,9507

Dla planów obliczono macierze $(\boldsymbol{X}^T\boldsymbol{X})^{-1}$:

1) Plan losowy

$$(\boldsymbol{X}^T\boldsymbol{X})^{-1} = \begin{vmatrix} 0{,}1595 & 0{,}0003 & 0{,}0148 & 0{,}0027 & -0{,}0722 & -0{,}0608 \\ 0{,}0003 & 0{,}1527 & 0{,}0206 & -0{,}0585 & -0{,}0269 & 0{,}0121 \\ 0{,}0148 & 0{,}0206 & 0{,}1667 & -0{,}0150 & -0{,}0966 & 0{,}0671 \\ 0{,}0027 & -0{,}0585 & -0{,}0150 & 0{,}1560 & 0{,}0123 & -0{,}0052 \\ -0{,}0722 & -0{,}0269 & -0{,}0966 & 0{,}0123 & 0{,}2257 & -0{,}0977 \\ -0{,}0608 & 0{,}0121 & 0{,}0671 & -0{,}0052 & -0{,}0977 & 0{,}1861 \end{vmatrix}$$

2) Plan rotatabilny

$$(\boldsymbol{X}^T\boldsymbol{X})^{-1} = \begin{vmatrix} 0{,}2 & 0 & 0 & 0 & -0{,}1 & -0{,}1 \\ 0 & 0{,}125 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0{,}125 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0{,}25 & 0 & 0 \\ -0{,}1 & 0 & 0 & 0 & 0{,}1437 & 0{,}0187 \\ -0{,}1 & 0 & 0 & 0 & 0{,}0187 & 0{,}1437 \end{vmatrix}$$

3) Plan ortogonalny

$$(\boldsymbol{X}^T\boldsymbol{X})^{-1} = \begin{vmatrix} 0{,}0769 & 0 & 0 & 0 & 1{,}33\cdot10^{-17} & 5{,}71\cdot10^{-34} \\ 0 & 0{,}1387 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0{,}1387 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0{,}25 & 0 & 0 \\ 1{,}33\cdot10^{-17} & 0 & 0 & 0 & 0{,}1940 & 8{,}35\cdot10^{-18} \\ 5{,}71\cdot10^{-34} & 0 & 0 & 0 & 8{,}35\cdot10^{-18} & 0{,}1940 \end{vmatrix}$$

Obliczone współczynniki regresji

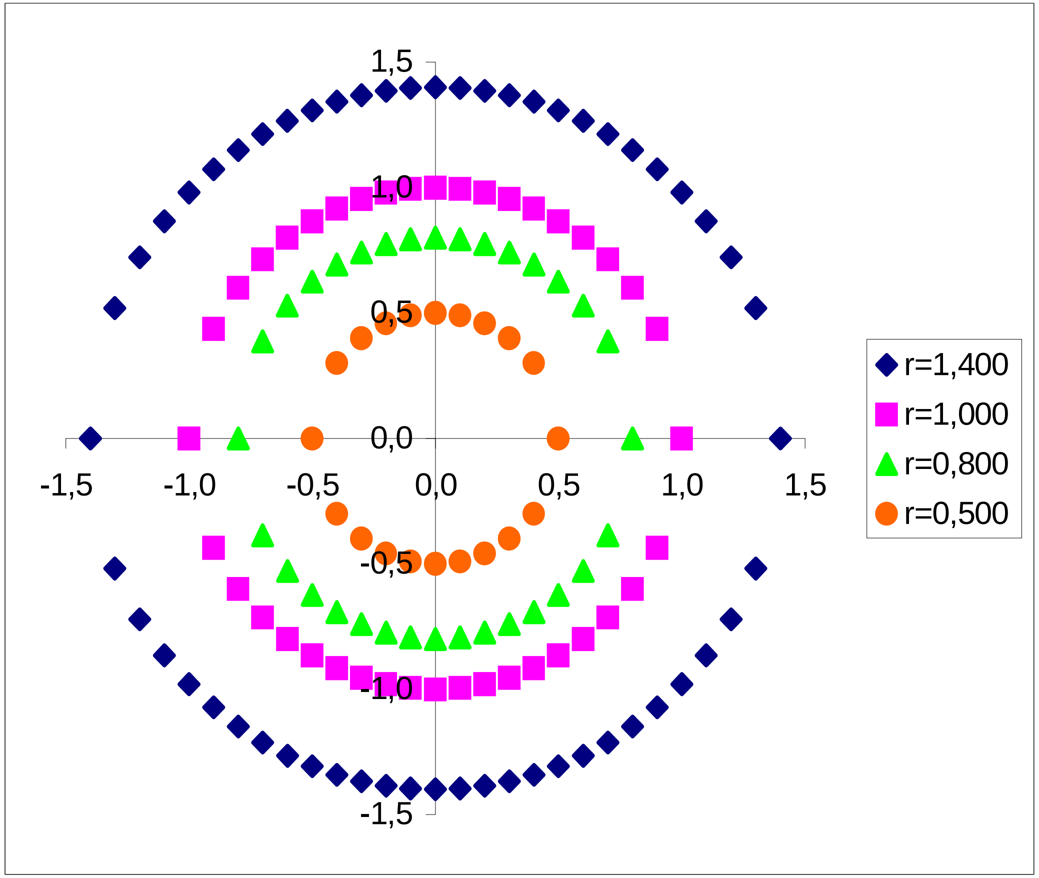
	Oczekiwane współ. b_j	Plan losowy		Plan rotatabilny		Plan ortogonalny	
		b_j	s_{b_j}	b_j	s_{b_j}	b_j	s_{b_j}
b_0	10,0000	9,9394	$3{,}108 \cdot 10^{-2}$	9,9490	$3{,}481 \cdot 10^{-2}$	10,3893	$2{,}159 \cdot 10^{-2}$
b_1	0,5000	0,3128	$3{,}042 \cdot 10^{-2}$	0,3025	$2{,}752 \cdot 10^{-2}$	0,3046	$2{,}899 \cdot 10^{-2}$
b_2	-0,5000	-0,3816	$3{,}178 \cdot 10^{-2}$	-0,3901	$2{,}752 \cdot 10^{-2}$	-0,3872	$2{,}899 \cdot 10^{-2}$
b_{12}	0,2500	0,1286	$3{,}075 \cdot 10^{-2}$	0,1348	$3{,}892 \cdot 10^{-2}$	0,1348	$3{,}892 \cdot 10^{-2}$
b_{11}	1,0000	0,6445	$3{,}698 \cdot 10^{-2}$	0,6397	$2{,}951 \cdot 10^{-2}$	0,6386	$3{,}428 \cdot 10^{-2}$
b_{22}	0,2500	0,1609	$3{,}358 \cdot 10^{-2}$	0,1546	$2{,}951 \cdot 10^{-2}$	0,1522	$3{,}428 \cdot 10^{-2}$

i wariancje resztowe

Plan losowy	Plan rotatabilny	Plan ortogonalny
0,004788	0,005468	0,005376

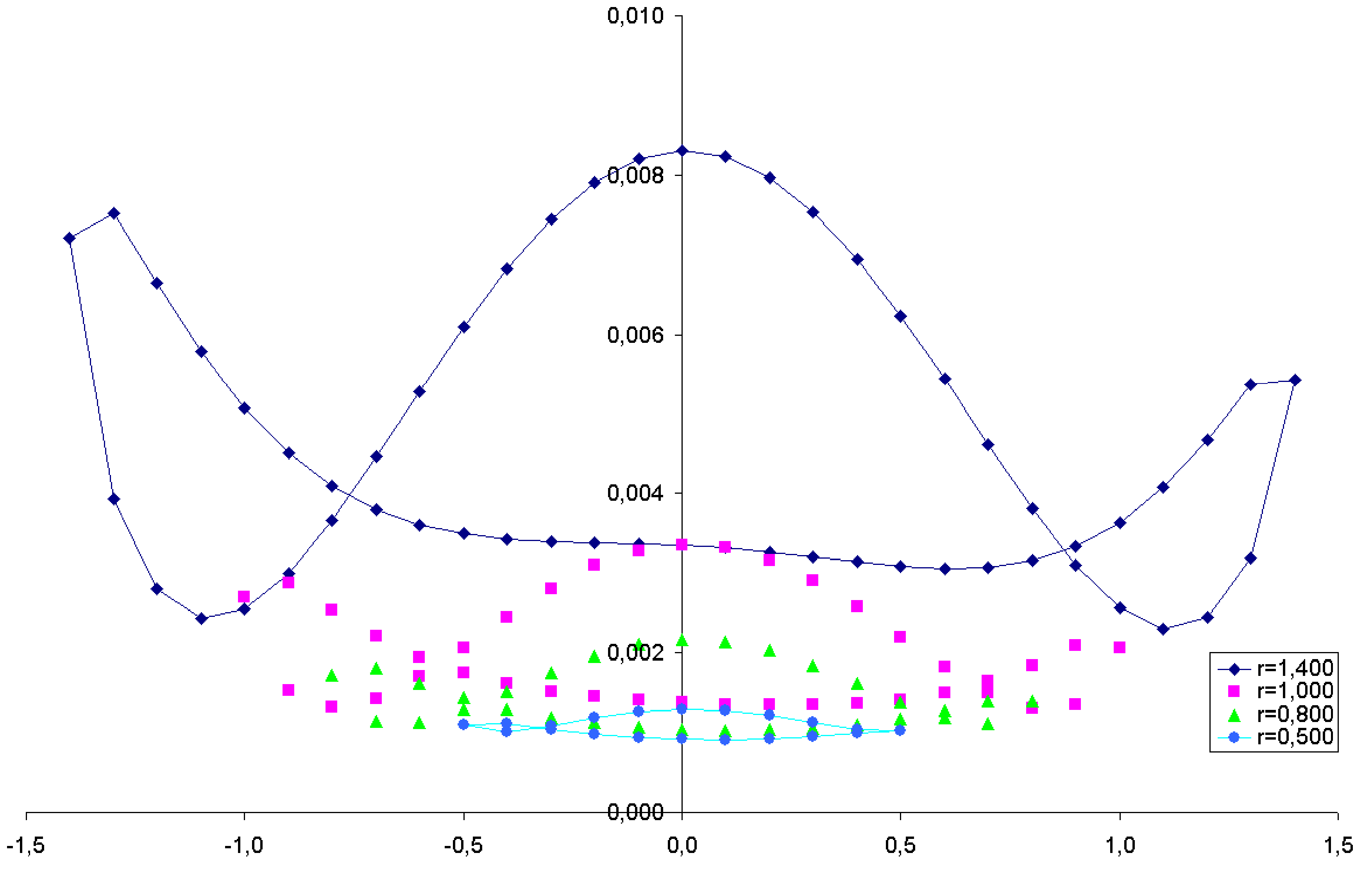
Analiza błędów wartości y_{obl} w zależności od planu eksperymentu

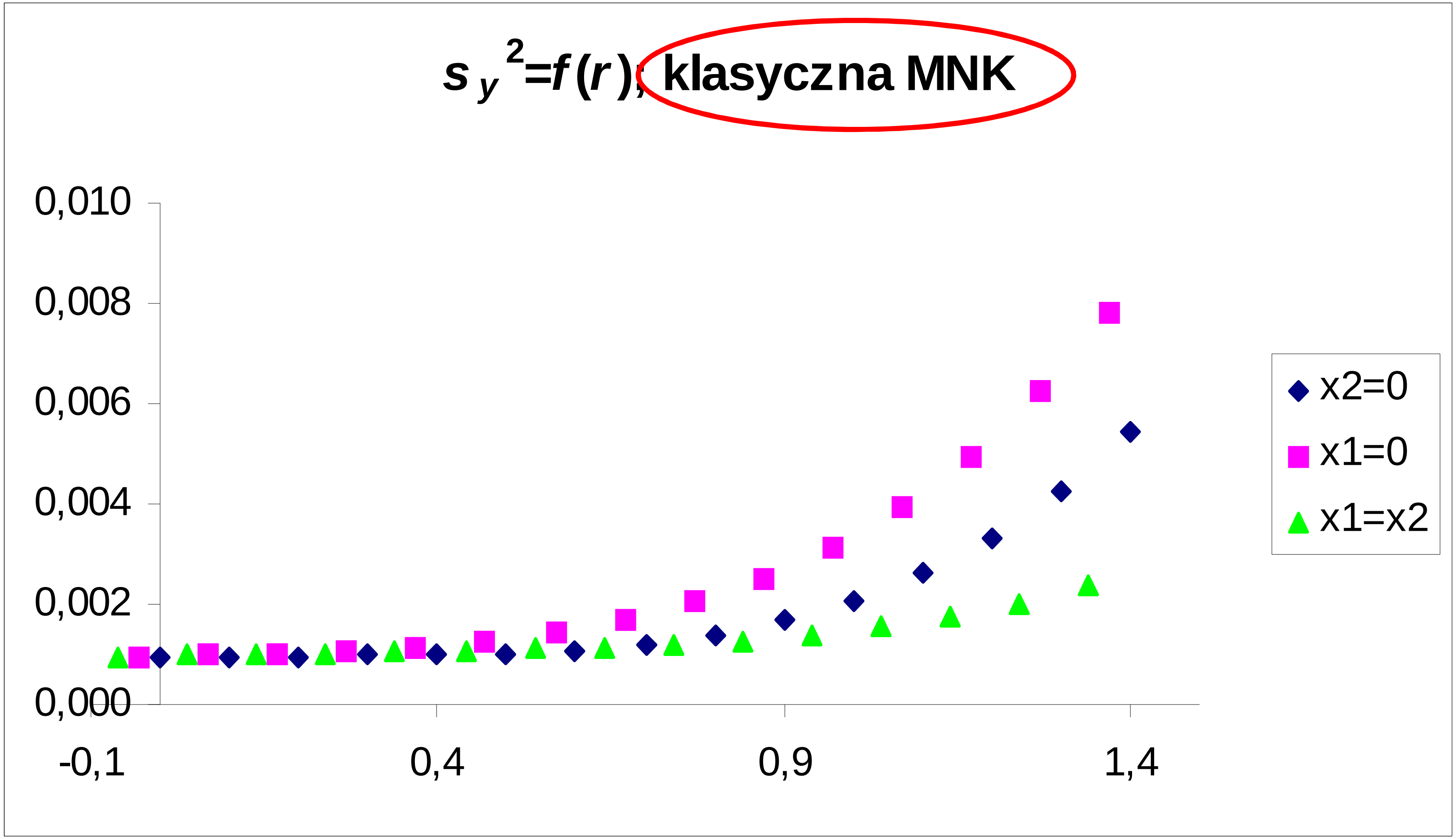
Rozkład punktów na płaszczyźnie x_1, x_2 na obwodzie koła o promieniu r.



Dla powyższych punktów obliczono wariancję $s_y^2 = s_{powt}^2 x^T \left(X^T X\right)^{-1} x$

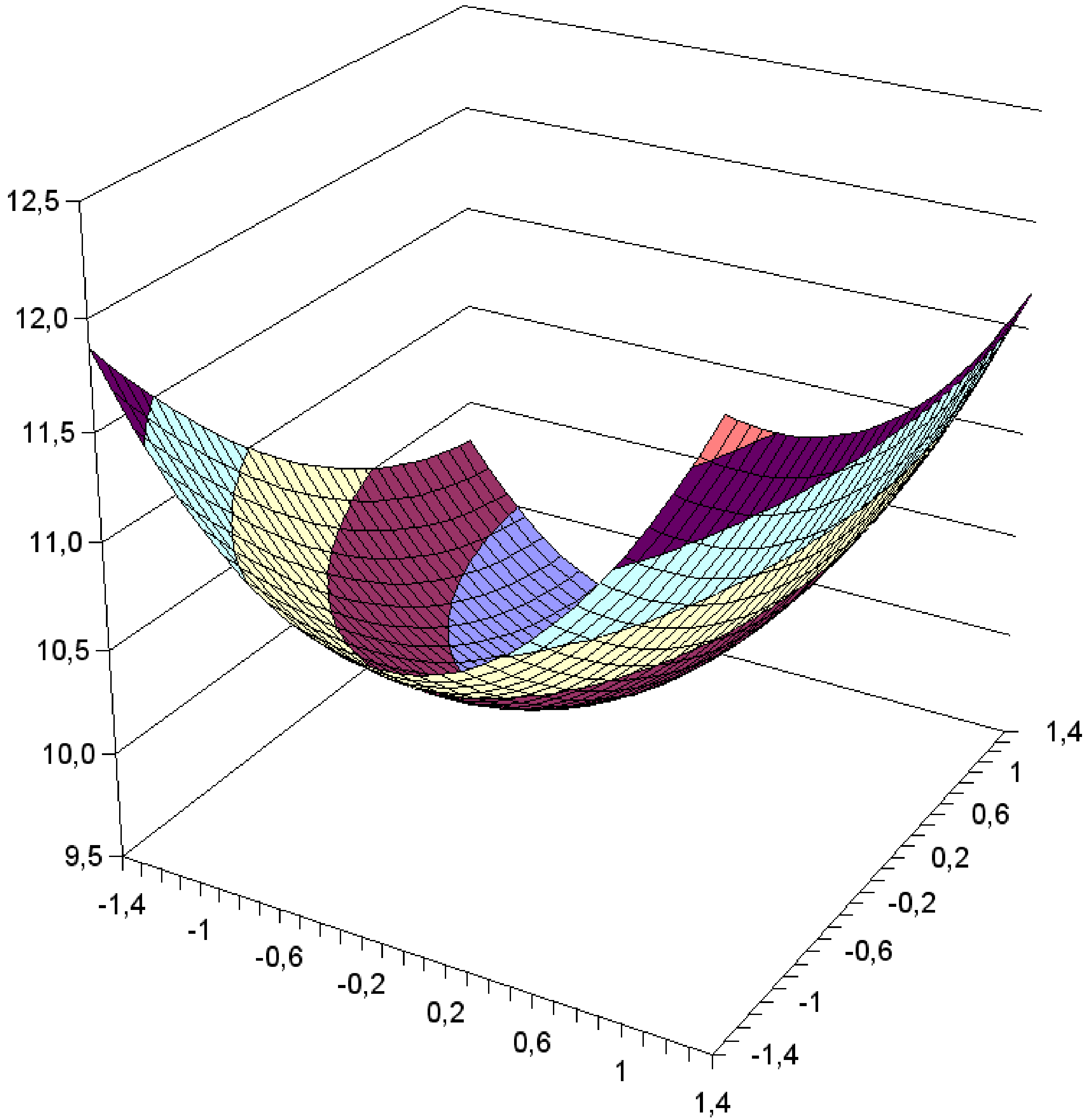
Metoda MNK: $s_y^2=f(x_1)$; r=const; $x_2^2=r^2-x_1^2$



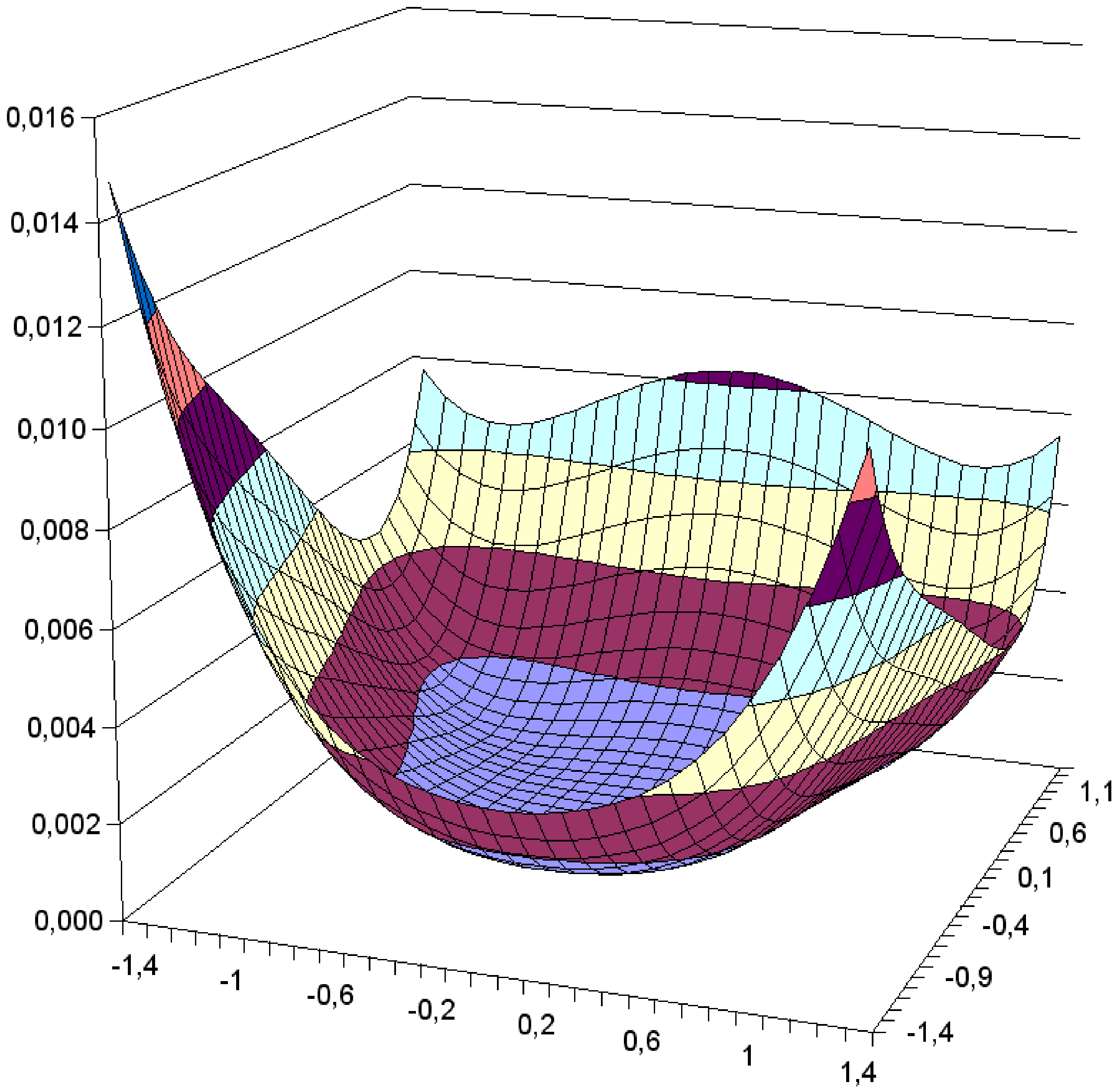

$s_y^2 = f(r)$; klasyczna MNK
0,010
0,008
0,006
0,004
0,002
0,000
-0,1
0,4
0,9
1,4
x2=0
x1=0
x1=x2

$y=f(x_1,x_2)$; plan losowy

y=*f*(*x*1,*x*2); klasyczna

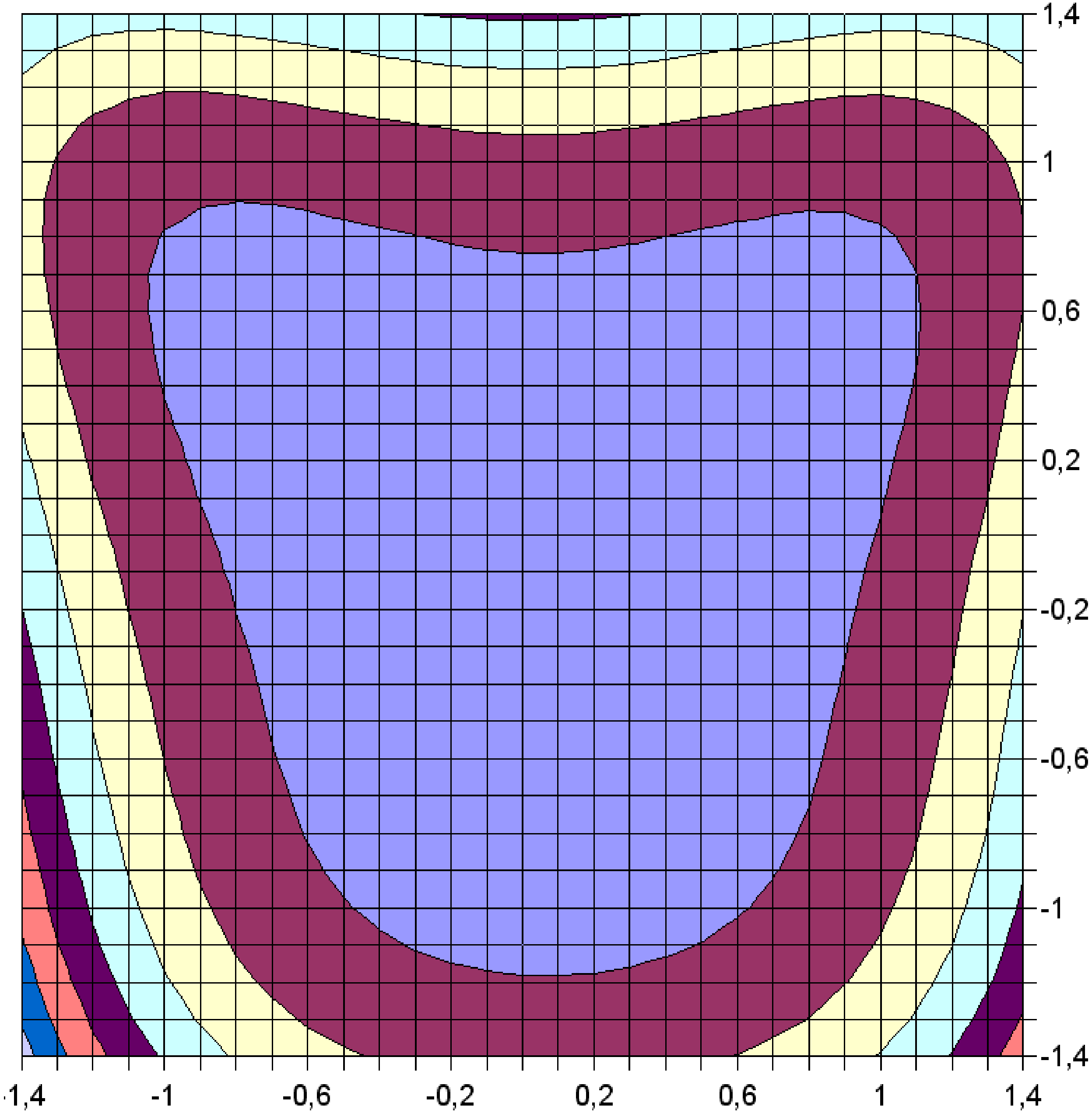


$s_y^2 = f(x_1, x_2)$; plan losowy

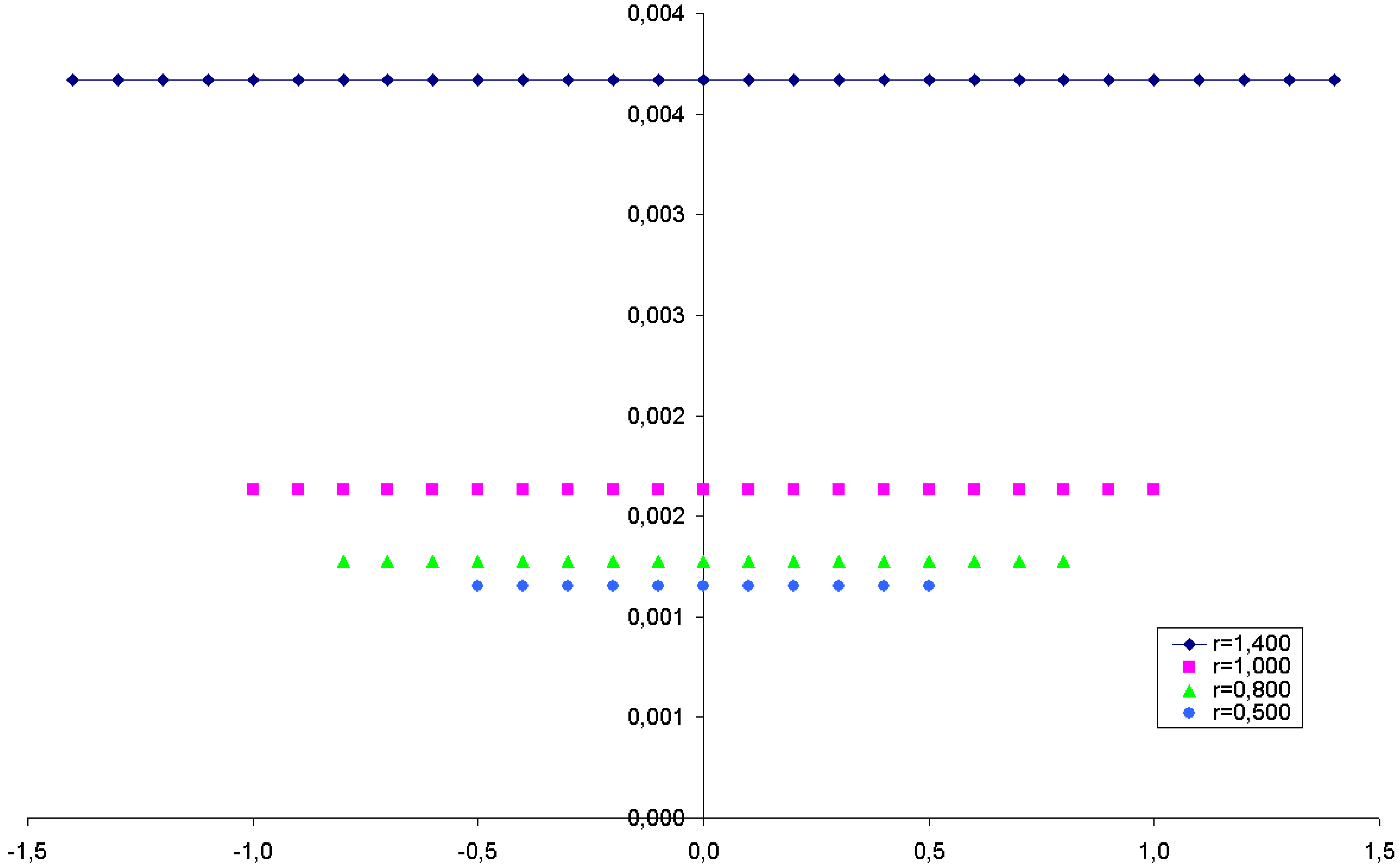


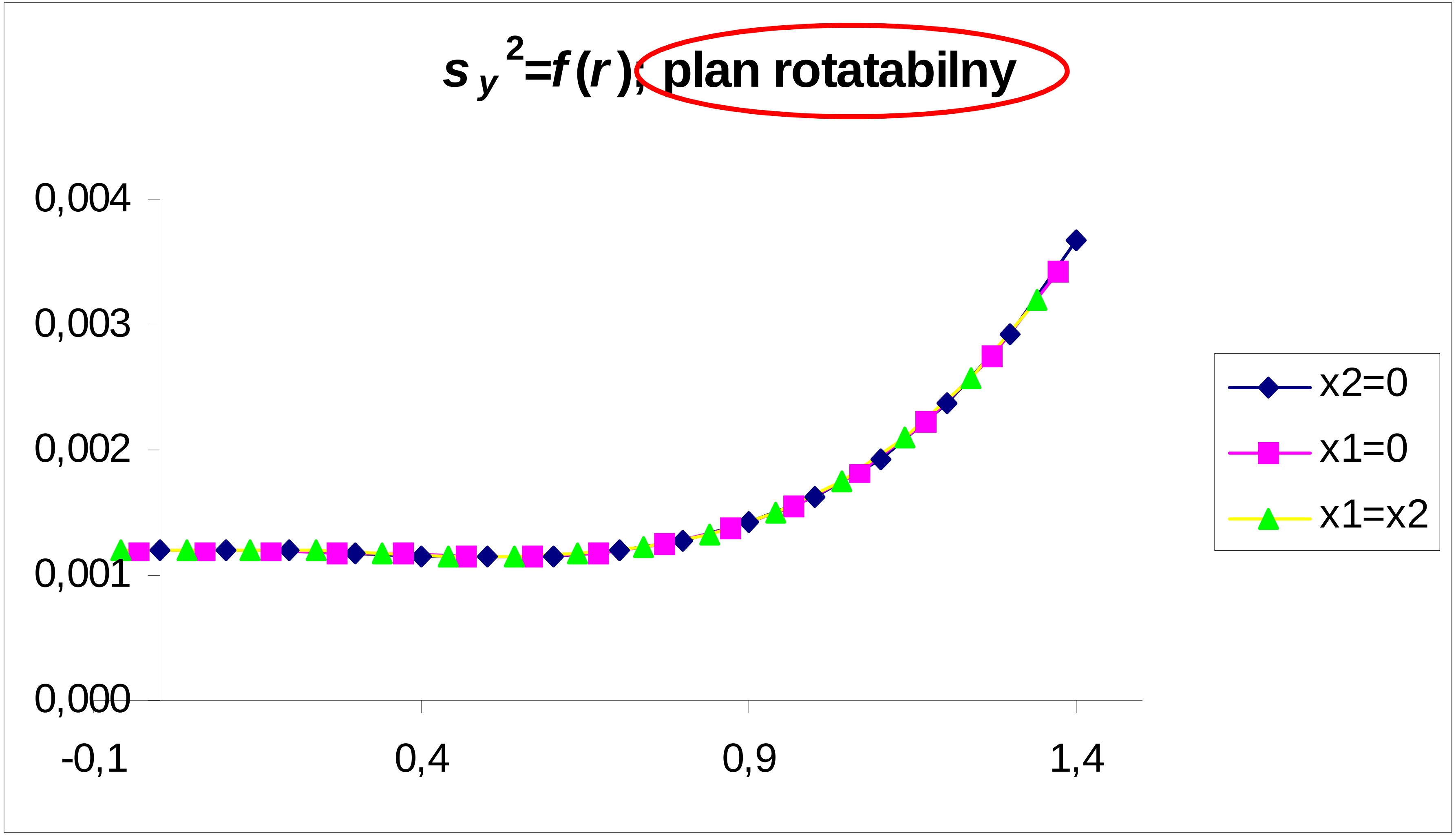
49

$s_y^2 = f(x_1, x_2)$; plan losowy

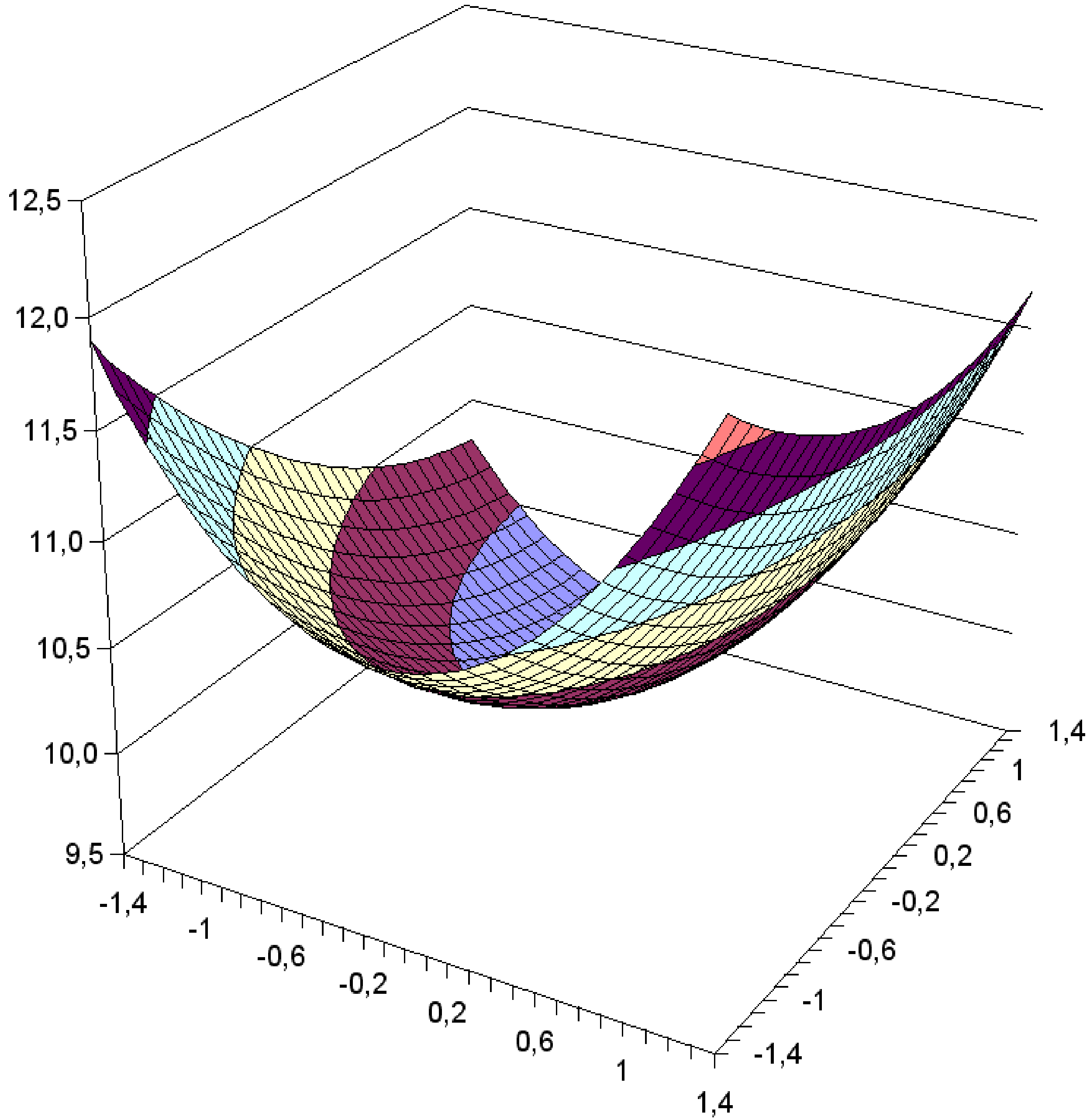


Plan rotatabilny: $s_y^2=f(x_1)$; $r=const$; $x_2^2=r^2-x_1^2$

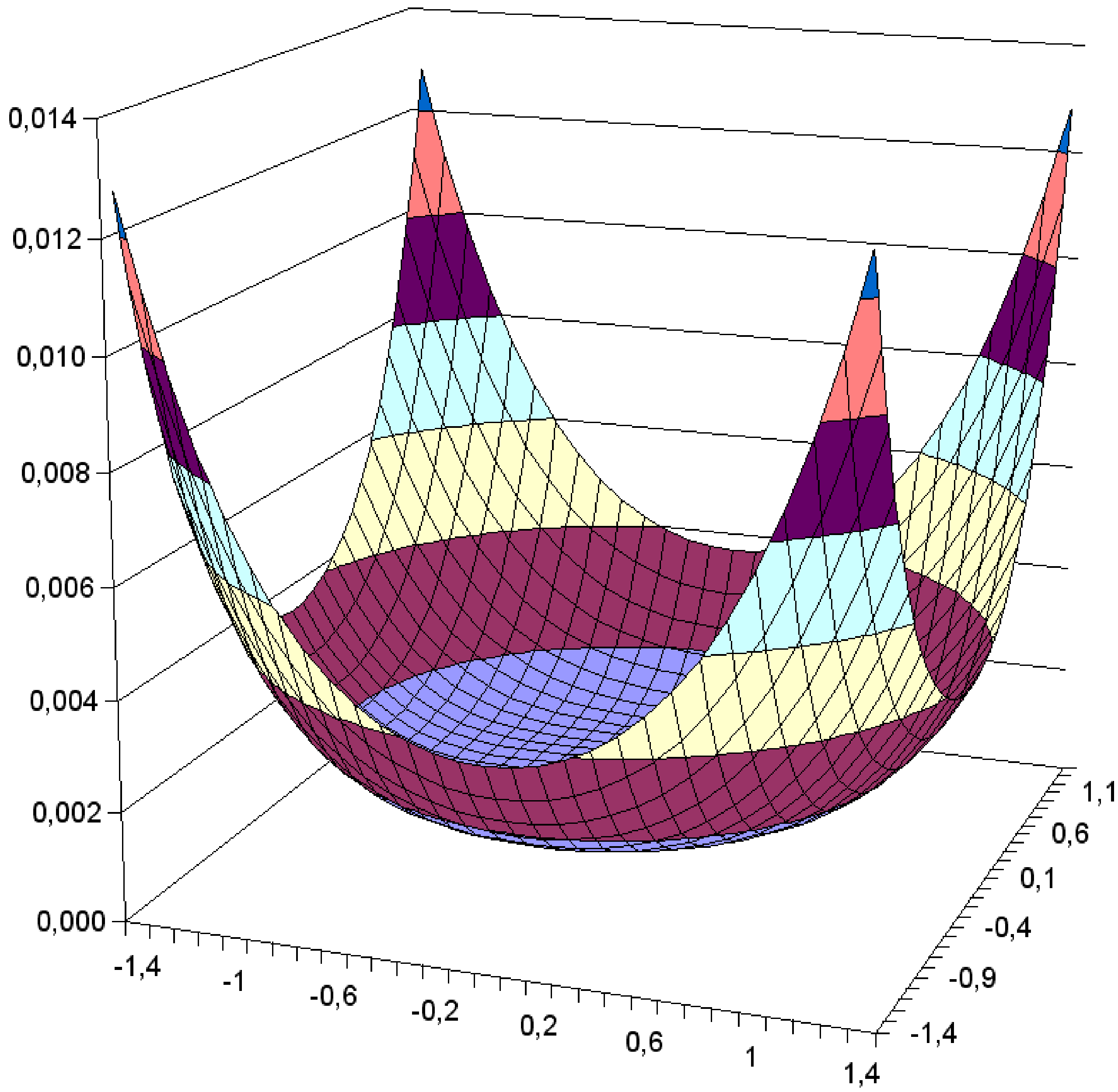



$s_y^2 = f(r)$; plan rotatabilny
0,004
0,003
0,002
0,001
0,000
-0,1
0,4
0,9
1,4
x2=0
x1=0
x1=x2

$y=f(x_1,x_2)$; plan rotatabilny

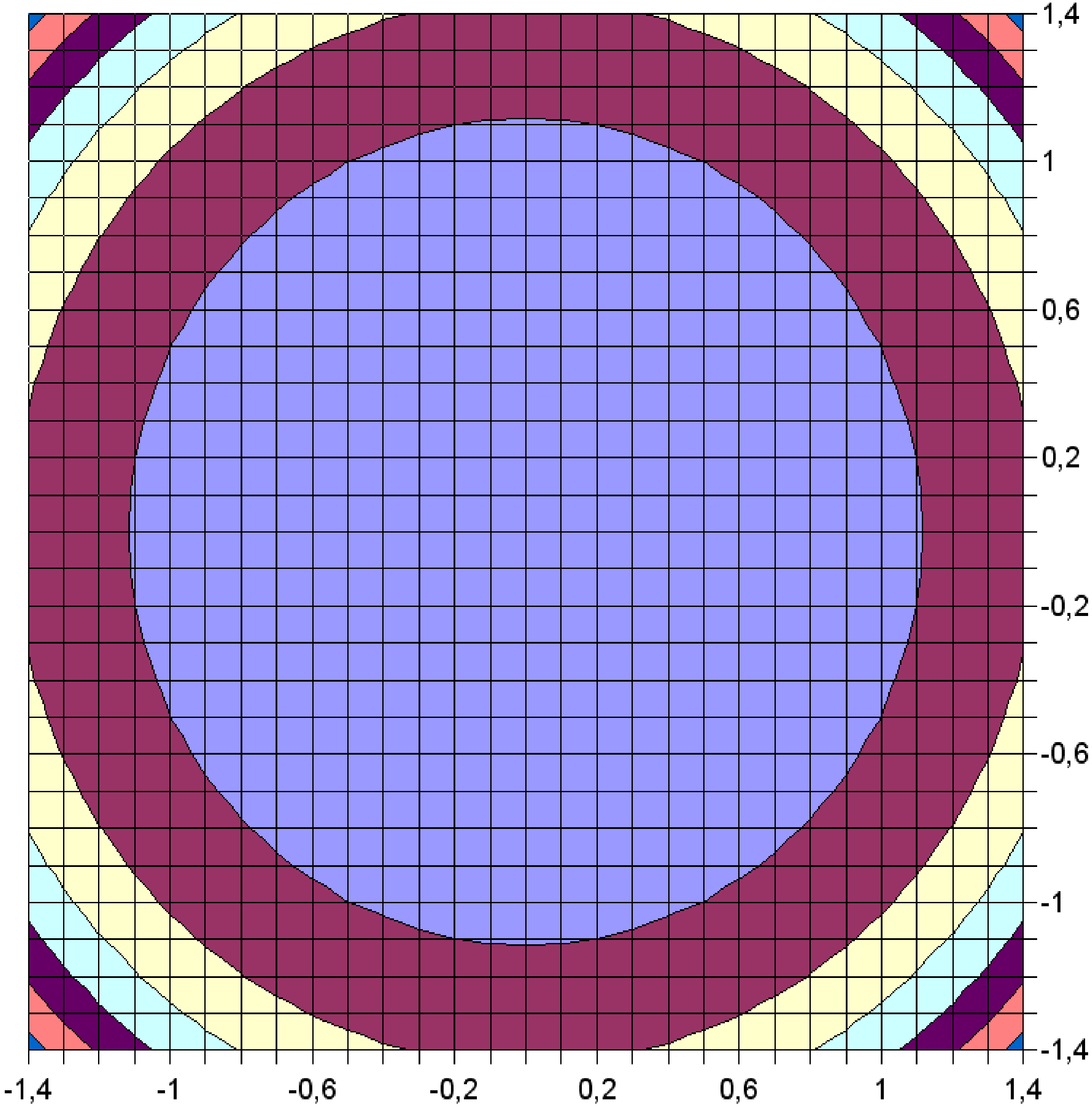


$s_y^2=f(x_1,x_2)$; plan rotatabilny

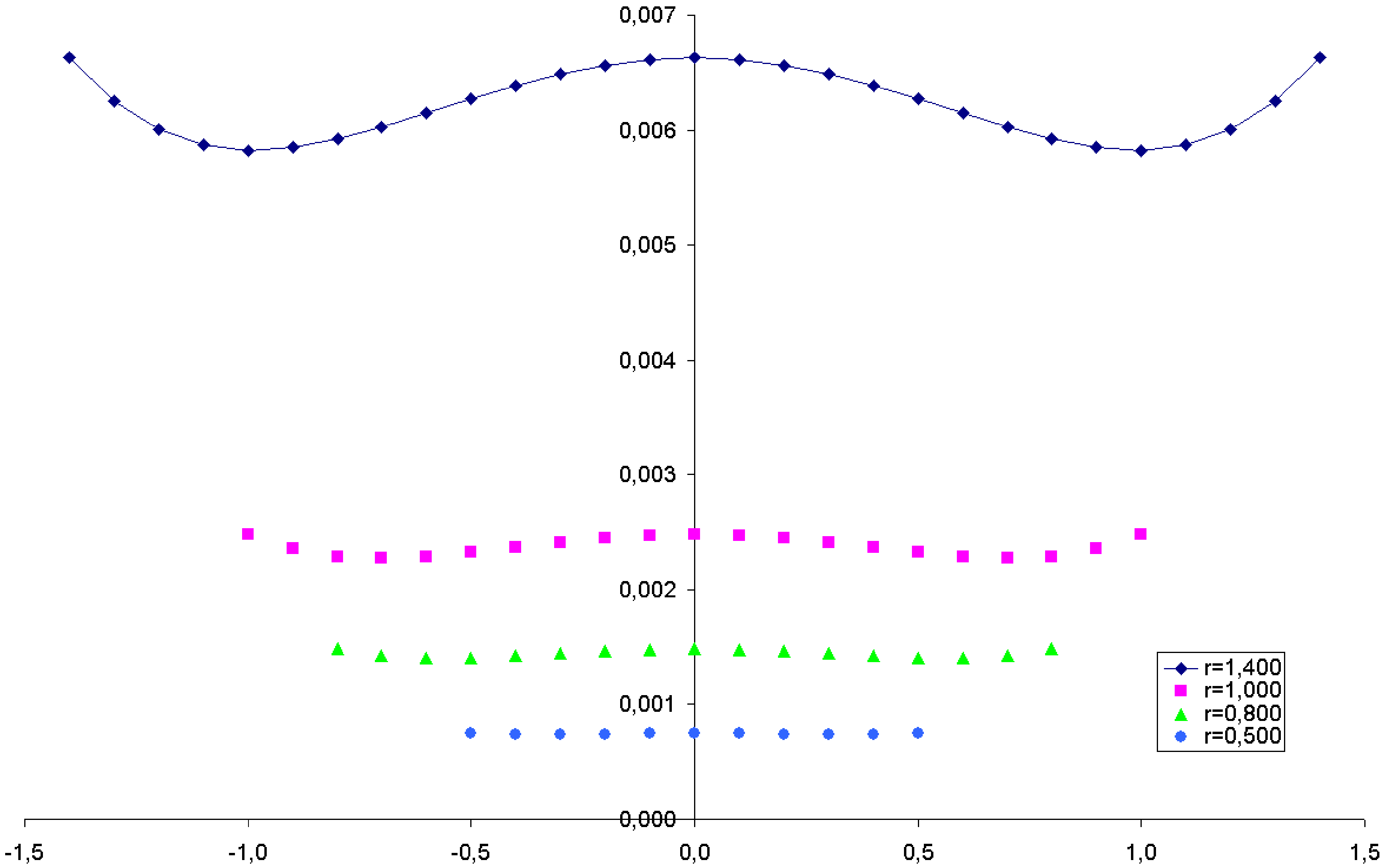


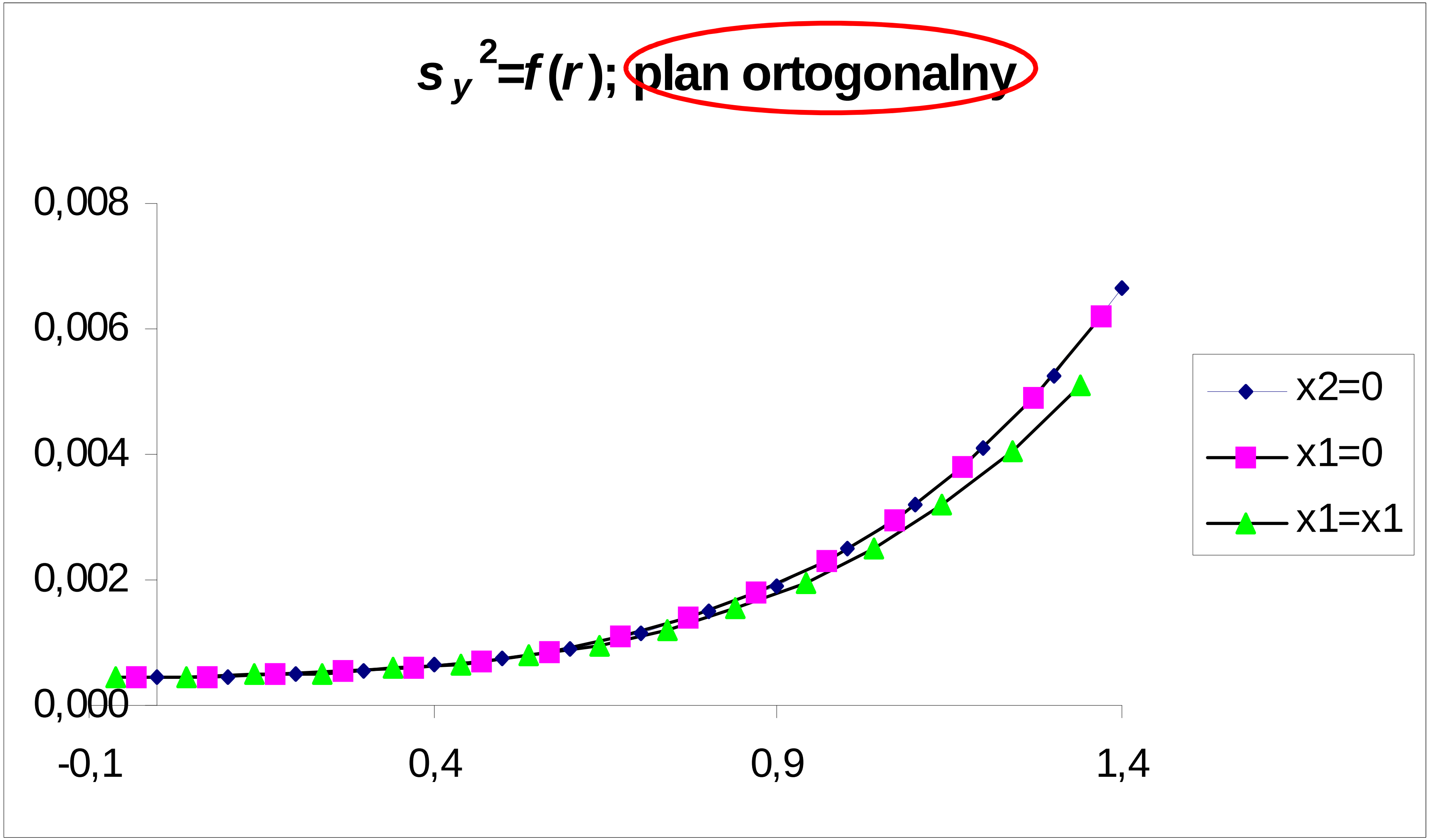
54

$s_y^2 = f(x_1, x_2)$; plan rotatabilny

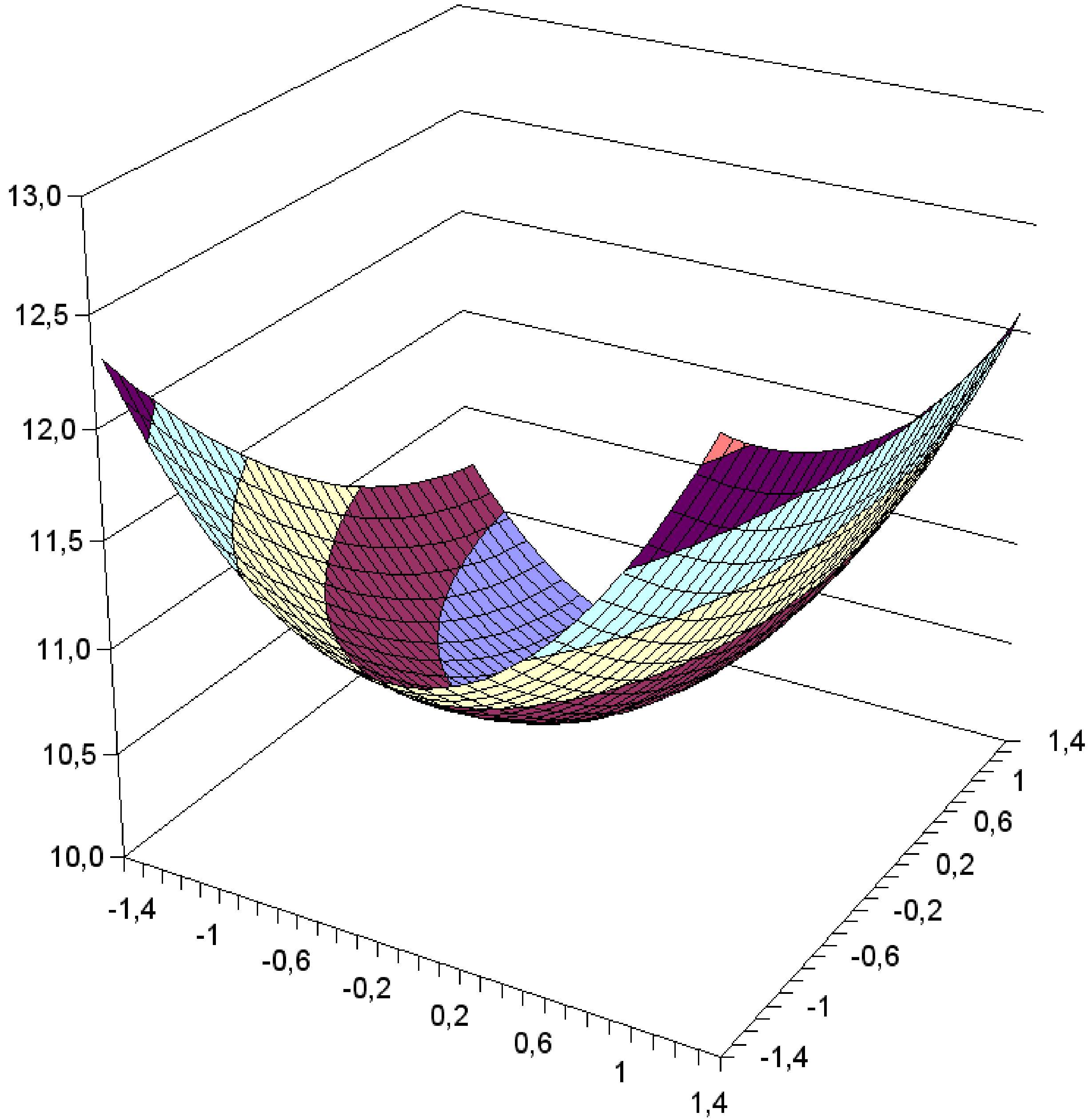


Plan ortogonalny; $s_y^2=f(x_1)$; r=const; $x_2^2=r^2-x_1^2$

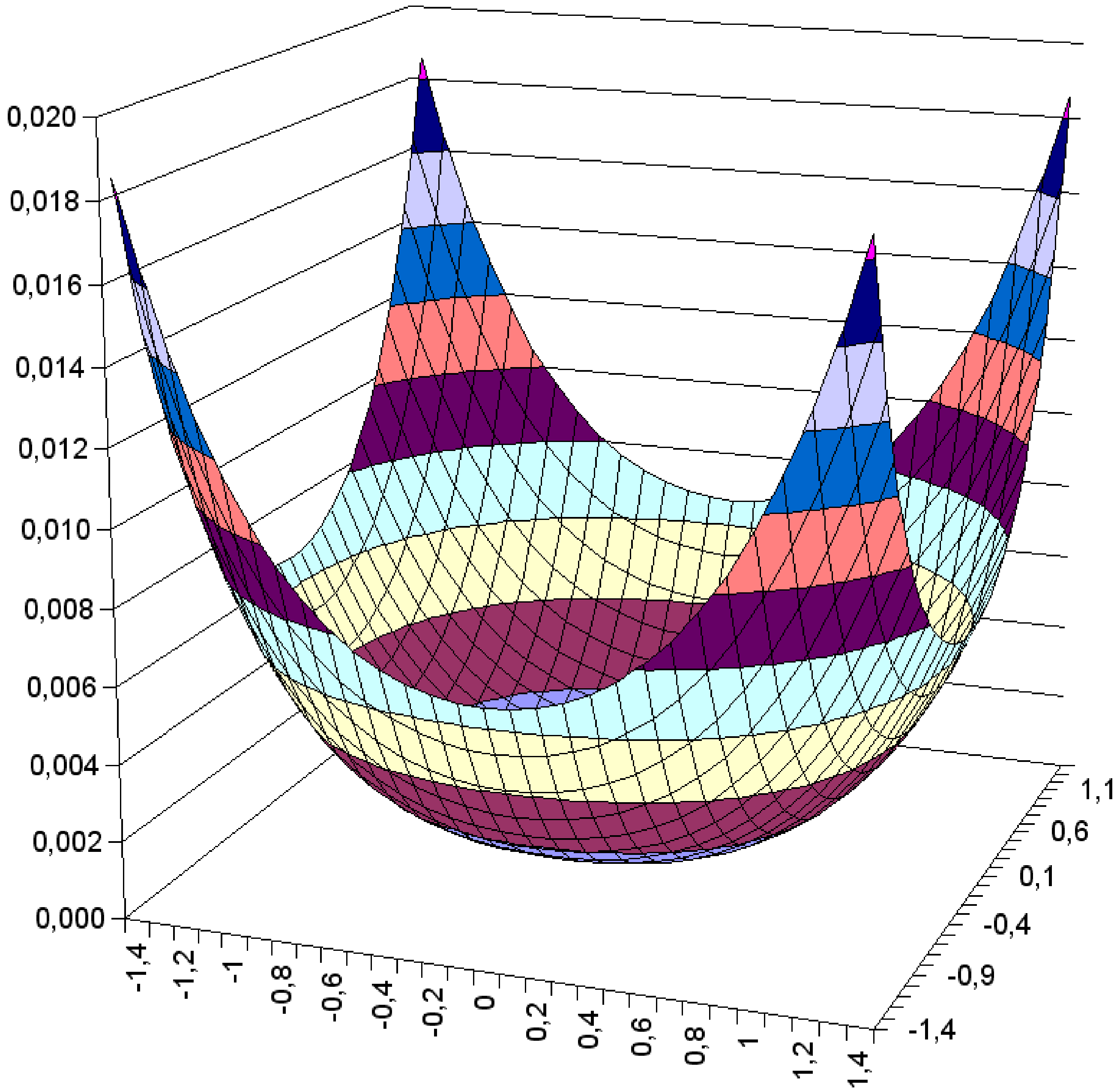



$s_y^2 = f(r)$; plan ortogonalny
0,008
0,006
0,004
0,002
0,000
-0,1
0,4
0,9
1,4
x2=0
x1=0
x1=x1

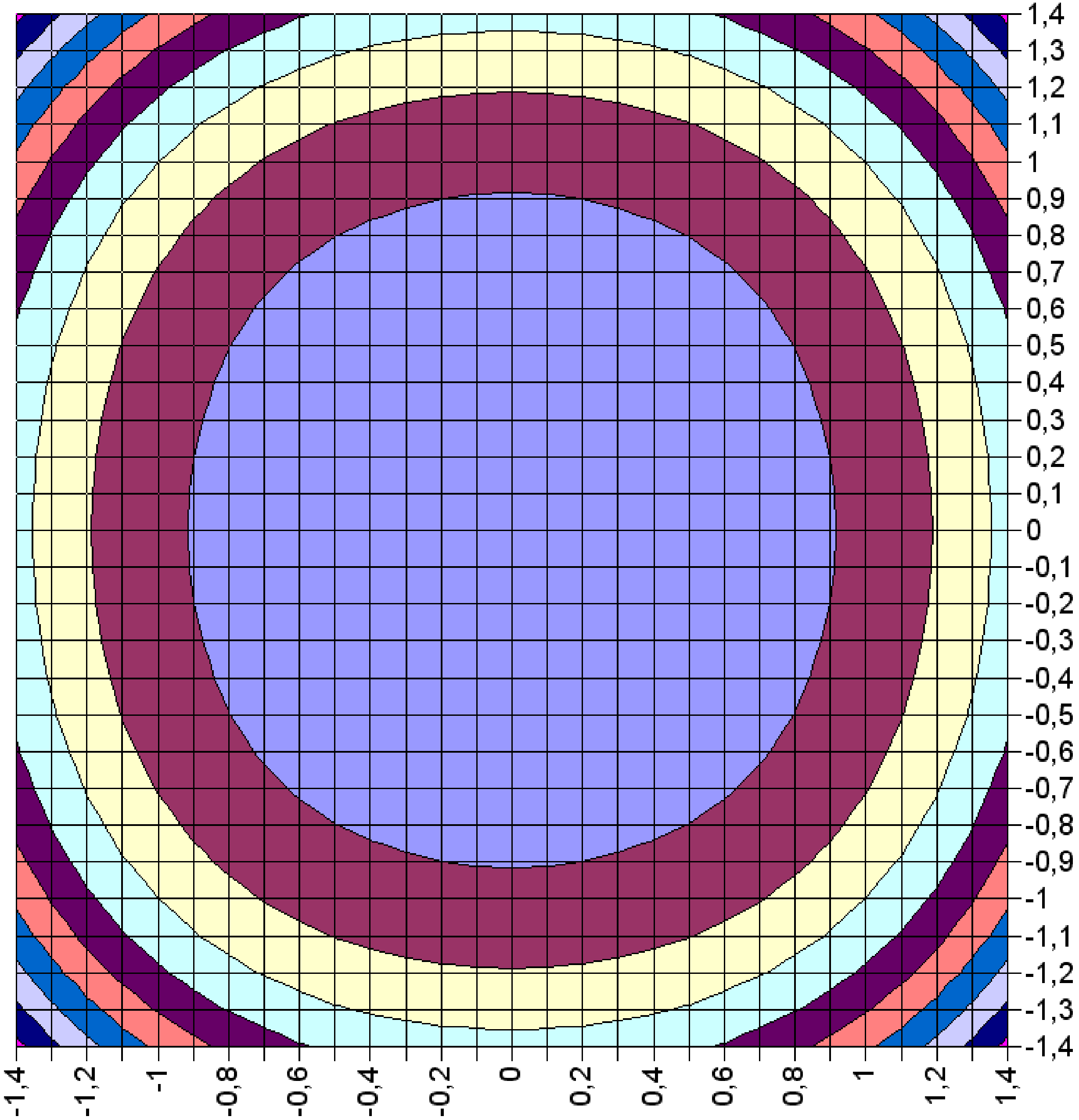
$y=f(x_1,x_2)$; plan ortogonalny



$s_y^2 = f(x_1, x_2)$; plan ortogonalny



$s_y^2 = f(x_1, x_2)$; plan ortogonalny



Optymalizacja

Sformułowanie matematyczne

$$y = f\left(x_1, x_2, \ldots, x_n\right)$$

Optimum globalne i lokalne.

Wyznaczanie optimum:

1) metoda matematyczna (dla znanej funkcji *y*): rachunek różniczkowy, rozwiązywanie układu równań utworzonych z pochodnych cząstkowych

2) metoda heurystyczna (dla nieznanej lub bardzo skomplikowanej funkcji *y*): subiektywna (brak ścisłych naukowych kryteriów) ocena zbioru wyników uzyskanych dla różnych wektorów *x*. Poszukiwany wynik y jest uznawany za dobry. Wynik *y* jest położony w pobliżu najlepszego możliwego rozwiązania. Stosowane metody: plany czynnikowe, metoda simpleksowa, algorytmy genetyczne, metoda symulowanego wyżarzania (*simulated annealing method*).

Ograniczenia metod heurystycznych:

brak oceny wyników algorytmu, nieprzydatność do problemów wymagających ścisłego optymalnego rozwiązania.

Problemy doboru niezależnych (wektora *x*) i wartości mierzonej *y*.

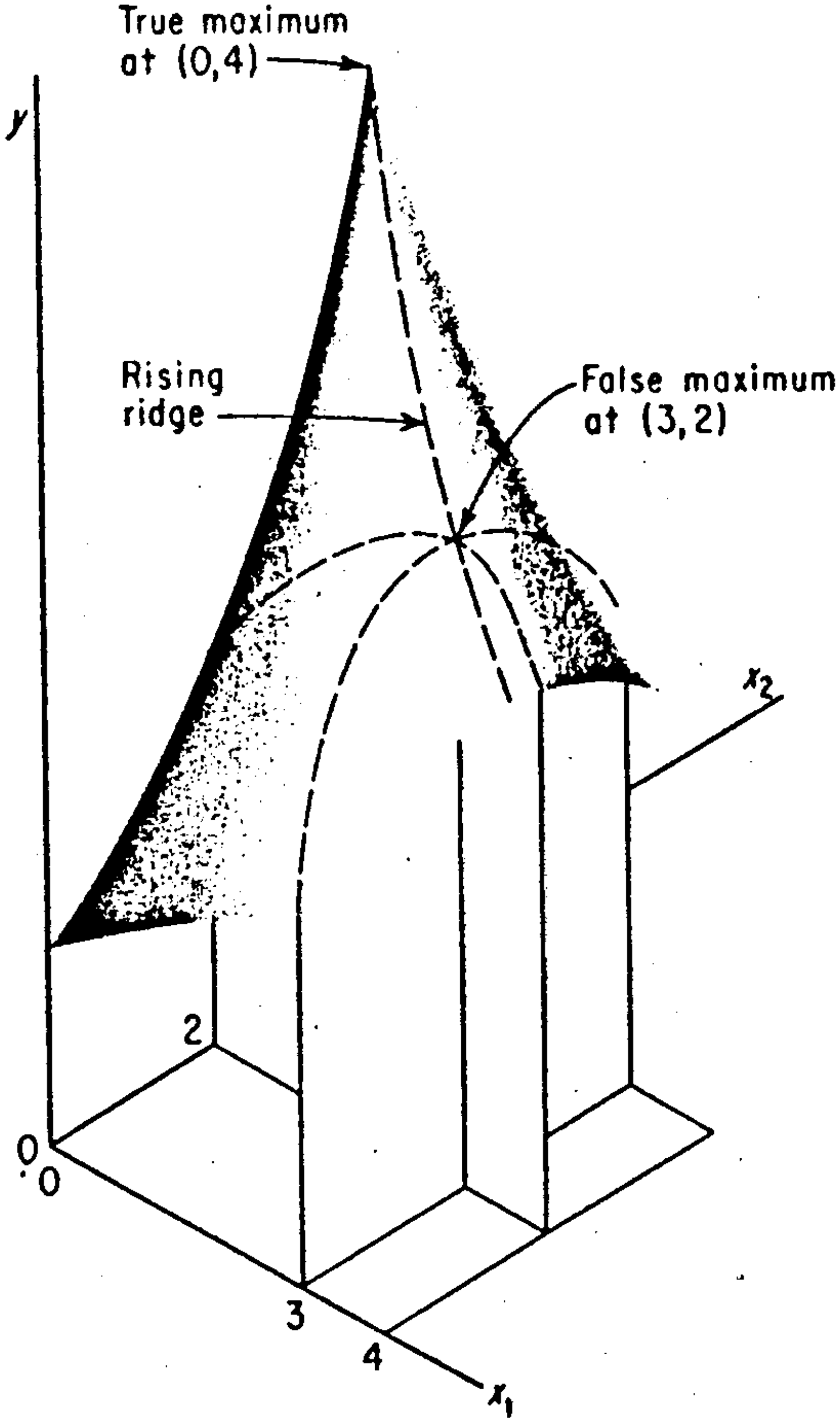
Przykłady *y*:

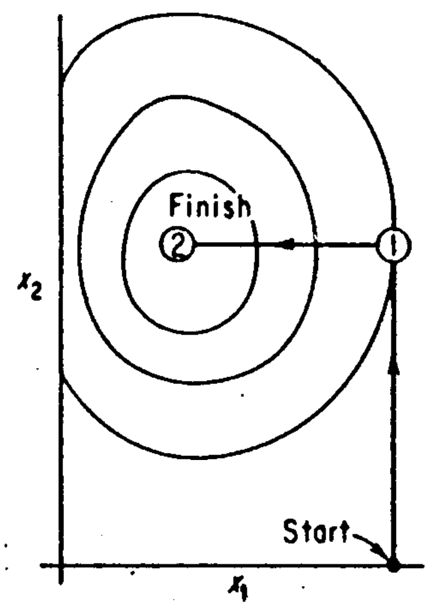
wielkość fizykochemiczna opisująca najlepiej cel badania, S/N (stosunek sygnał – szum), selektywność, precyzja wyników, widmo, pik itp.

Ograniczenia zakresów zmiennych niezależnych.

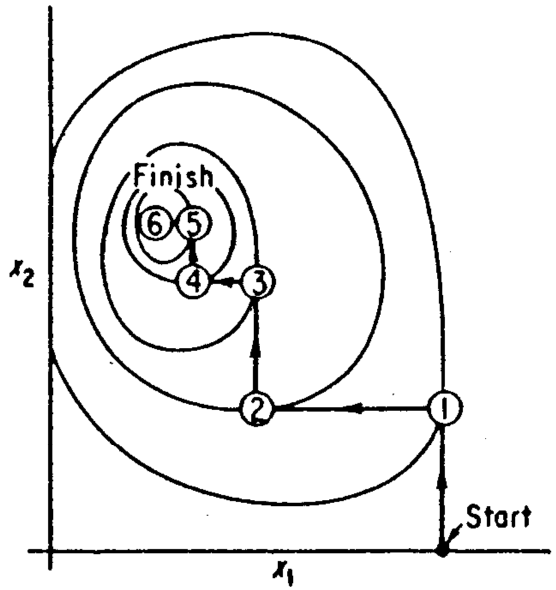
Problemy optymalizacji w chemii:

optymalizacja *on–line* i *off–line*, przyrządy z programami optymalizującymi ich pracę, opracowanie danych wielowymiarowych (widma, chromatogramy), dobór długości fal (spektroskopia, analiza układów wieloskładnikowych, dobór modelu (*curve fitting*).

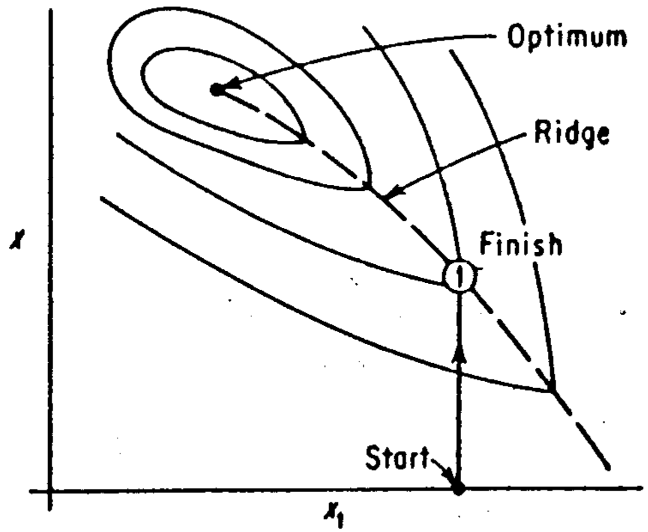

True maximum
at (0,4)
y
Rising
ridge
False maximum
at (3,2)
x_2
2
0
0
3
4
x_1



(*a*) No interaction – search effective



(*b*) Mild interaction – search inefficient

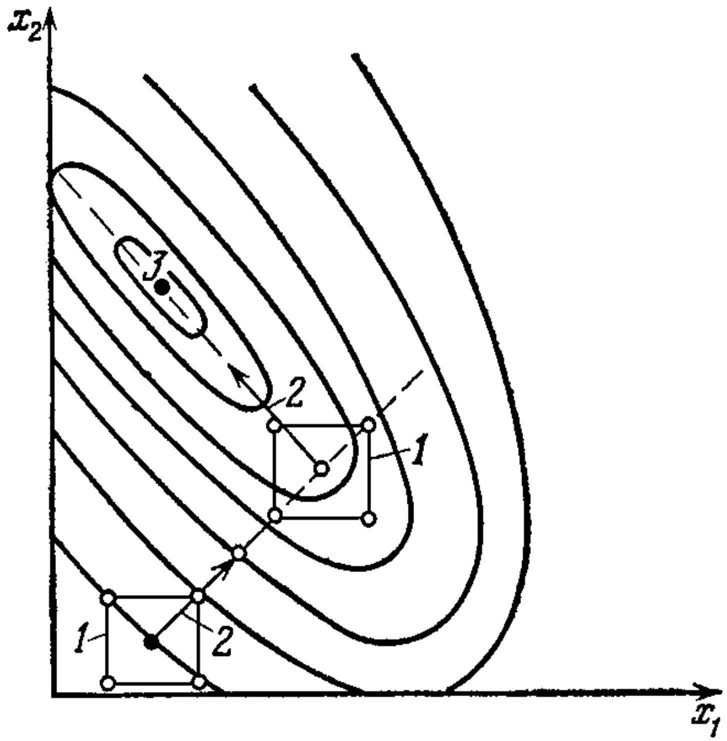


(*c*) Strong interaction – search ineffective

Metoda Boxa-Wilsona
(przejście po gradiencie; metoda największego spadku)

Zadanie optymalizacji można sprowadzić do zagadnienia wyznaczenia współrzędnych punktu (z_1^{opt}, z_2^{opt}, …, z_k^{opt}) funkcji:

$$y = f\left(z_1, z_2, \ldots, z_k\right)$$



Najkrótszą drogą jest ruch wzdłuż gradientu. W przypadku funkcji *y* gradient jest następujący:

$$grad = \frac{\partial f}{\partial z_1}\vec{i} + \frac{\partial f}{\partial z_2}\vec{j} + \ldots + \frac{\partial f}{\partial z_k}\vec{k}$$

gdzie: $\vec{i}, \vec{j}, \ldots, \vec{k}$ – wektory układu współrzędnych.

Wynikiem realizacji planu czynnikowego typy 2^k jest zastąpienie funkcji $y=f(z_1,...,z_k)$ w pobliżu punktu centralnego planu równaniem liniowym:

$$y = b_0 z_0 + b_1 z_1 + \cdots + b_k z_k$$

Elementy gradientu są następujące:

$$\frac{\partial f}{\partial z_1} = b_1,\ \frac{\partial f}{\partial z_2} = b_2,\ \cdots,\ \frac{\partial f}{\partial z_k} = b_k$$

Realizacja metody największego spadku

	z_1	z_2	...	z_k	y
Środek planu z_j^0	z_1^0	z_2^0	...	z_k^0	
Przedział zmian Δz_j	Δz_1	Δz_2	...	Δz_k	
Współczynnik b_j	b_1	b_2	...	b_k	
Iloczyn $b_j \Delta z_j$	$b_1 \Delta z_1$	$b_2 \Delta z_2$	...	$b_k \Delta z_k$	
Krok k_j	k_1	k_2	...	k_k	
Nr doświadczenia					
1	$z_1^0 + k_1$	$z_2^0 + k_2$	...	$z_k^0 + k_k$	y_1
2	$z_1^0 + 2k_1$	$z_2^0 + 2k_2$	...	$z_k^0 + 2k_k$	y_2
...	...	...	...	...	...
i	$z_1^0 + ik_1$	$z_2^0 + ik_2$	...	$z_k^0 + ik_k$	y_i
...	...	...	...	...	...
p	$z_1^0 + pk_1$	$z_2^0 + pk_2$	...	$z_k^0 + pk_k$	y_p

Mnożnik α można ustalić w następujący sposób. Eksperymentator ustala krok k_j dla zmiennej niezależnej najbardziej wpływającej na wartość y i oblicza krok dla pozostałych zmiennych

$$k_j = \alpha b_j \Delta z_j \qquad \alpha = \frac{k_j}{b_j \Delta z_j} \qquad k_h = \alpha b_h \Delta z_h, \quad h = 1, \ldots, k, \quad h \neq j$$

Analiza powierzchni odpowiedzi

Plan rotatabilny (zmienne kodowane)

Nr	Plan w zmiennych kodowanych						y_{obl}	Obl. dla równ. regresji	
	x_0	x_1	x_2	$x_1{*}x_2$	x_1^2	x_2^2		y_{regr}	$y_{regr}-y_{obl}$
1	1	-1	-1	1	1	1	1,20087	1,19817	-2,703E-03
2	1	1	-1	-1	1	1	2,39732	2,39913	1,816E-03
3	1	-1	1	-1	1	1	0,60059	0,59866	-1,930E-03
4	1	1	1	1	1	1	1,40374	1,40633	2,590E-03
5	1	-1,414	0	0	2,000	0	0,68820	0,69146	3,253E-03
6	1	1,414	0	0	2,000	0	2,11492	2,11178	-3,139E-03
7	1	0	-1,414	0	0	2,000	1,96189	1,96249	6,036E-04
8	1	0	1,414	0	0	2,000	0,83705	0,83656	-4,901E-04
9	1	0	0	0	0	0	0,00091	-0,00272	-3,631E-03
10	1	0	0	0	0	0	0,00272	-0,00272	-5,441E-03
11	1	0	0	0	0	0	-0,00758	-0,00272	4,861E-03
12	1	0	0	0	0	0	-0,01058	-0,00272	7,858E-03
13	1	0	0	0	0	0	0,00093	-0,00272	-3,648E-03

Parametry	
b_0	-0,00272
b_1	0,50216
b_2	-0,39808
b_3	-0,09832
b_4	0,70217
b_5	0,70112

Do obliczenia parametrów można stosować $B=(X^TX)^{-1}{*}X^TY$ lub *Narzędzia, Analiza danych, Regresja*

s_{reszt}^2	2,622E-05

Do obliczania współrzęnych *x* stosuje się *Narzędzia, Solver*

Solver (maksimum lub minimum)		
x_1	x_2	$f(x,y)$
-0,339368	**0,260091**	-0,13970

Współrzędne ekstremum:

Układ równań otrzymany z pochodnych cząstkowych wielomianu $y=b_0+b_1x_1+b_2x_2+b_{12}x_1x_2+b_{11}x_1^2+b_{22}x_2^2$

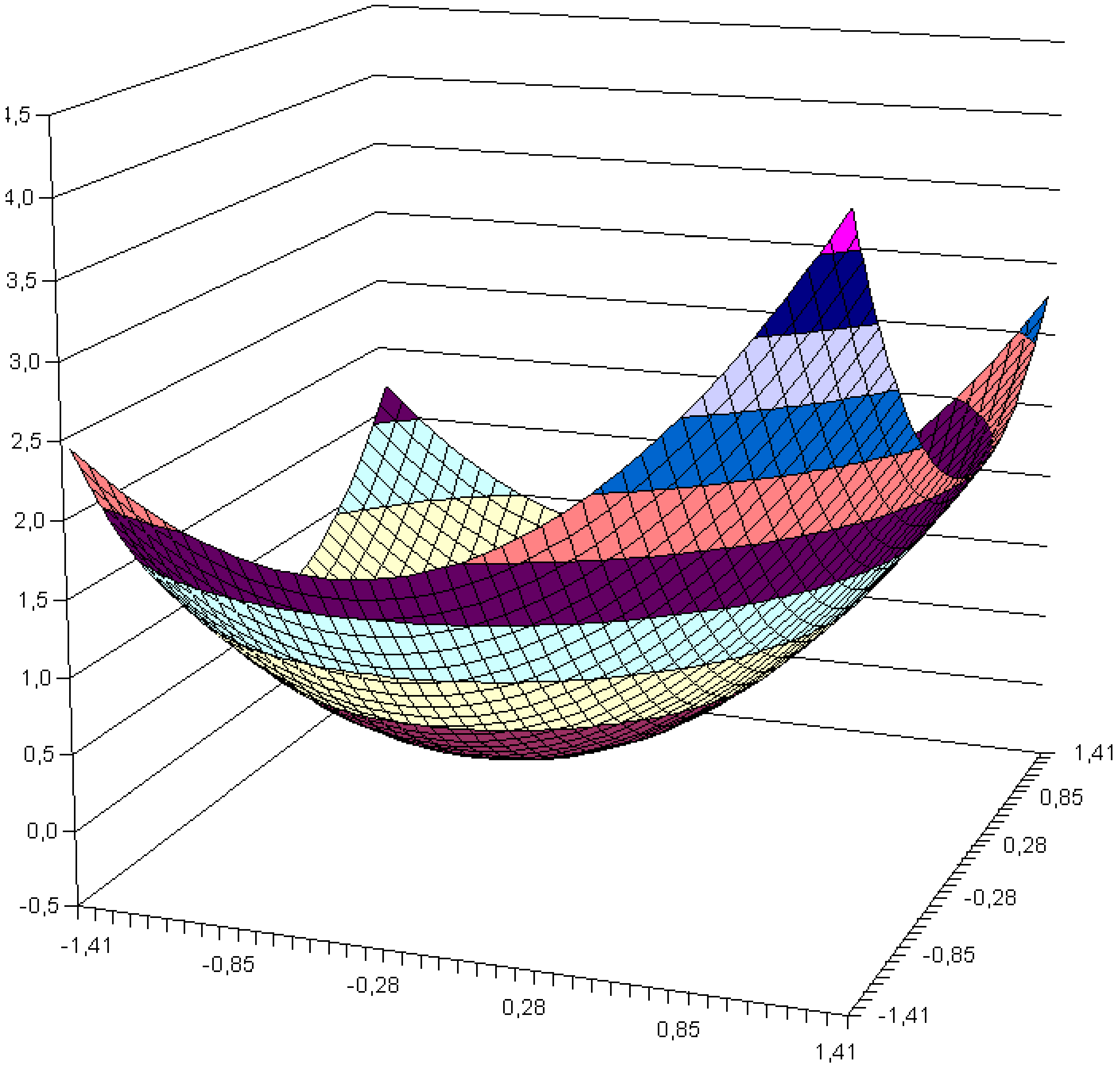
$2b_{11}x_1+b_{12}x_2=-b_1$

$b_{12}x_1+2b_{22}x_2=-b_2$

Rozwiązanie: $X=A^{-1}C$

Zmienne kodowane:

Współczynniki A		Stałe C	$X=A^{-1}C$		Sprawdzenie	
1,40434	-0,09832	-0,50216	x_1	**-0,339368**	-0,50216	$-b_1$
-0,09832	1,402246663	0,39808	x_2	**0,260091**	0,39808	$-b_2$


4,5
4,0
3,5
3,0
2,5
2,0
1,5
1,0
0,5
0,0
-0,5
-1,41
-0,85
-0,28
0,28
0,85
1,41
1,41
0,85
0,28
-0,28
-0,85
-1,41

Plan rotatabilny (zmienne kodowane)

Nr	Plan w zmiennych kodowanych						y_{obl}	Obl. dla równ. regresji	
	x_0	x_1	x_2	$x_1{*}x_2$	x_1^2	x_2^2		y_{regr}	y_{regr}-y_{obl}
1	1	-1	-1	1	1	1	-1,59913	-1,60183	-2,703E-03
2	1	1	-1	-1	1	1	-0,40268	-0,40087	1,816E-03
3	1	-1	1	-1	1	1	-2,19941	-2,20134	-1,930E-03
4	1	1	1	1	1	1	-1,39626	-1,39367	2,590E-03
5	1	-1,414	0	0	2,000	0	-2,11180	-2,10854	3,253E-03
6	1	1,414	0	0	2,000	0	-0,68508	-0,68822	-3,139E-03
7	1	0	-1,414	0	0	2,000	-0,83811	-0,83751	6,036E-04
8	1	0	1,414	0	0	2,000	-1,96295	-1,96344	-4,901E-04
9	1	0	0	0	0	0	0,00091	-0,00272	-3,631E-03
10	1	0	0	0	0	0	0,00272	-0,00272	-5,441E-03
11	1	0	0	0	0	0	-0,00758	-0,00272	4,861E-03
12	1	0	0	0	0	0	-0,01058	-0,00272	7,858E-03
13	1	0	0	0	0	0	0,00093	-0,00272	-3,648E-03

Parametry	
b_0	-0,00272
b_1	0,50216
b_2	-0,39808
b_3	-0,09832
b_4	-0,69783
b_5	-0,69888

Do obliczenia parametrów można stosować $B=(X^TX)^{-1}*X^TY$ lub *Narzędzia, Analiza danych, Regresja*

s_{reszt}^2	2,622E-05

Do obliczania współrzęnych x stosuje się *Narzędzia, Solver*

Solver (maksimum lub minimum)		
x_1	x_2	$f(x,y)$
0,381755	**-0,311653**	0,15516

Współrzędne ekstremum:

Układ równań otrzymany z pochodnych cząstkowych wielomianu $y=b_0+b_1x_1+b_2x_2+b_{12}x_1x_2+b_{11}x_1^2+b_{22}x_2^2$

$2b_{11}x_1+b_{12}x_2=-b_1$

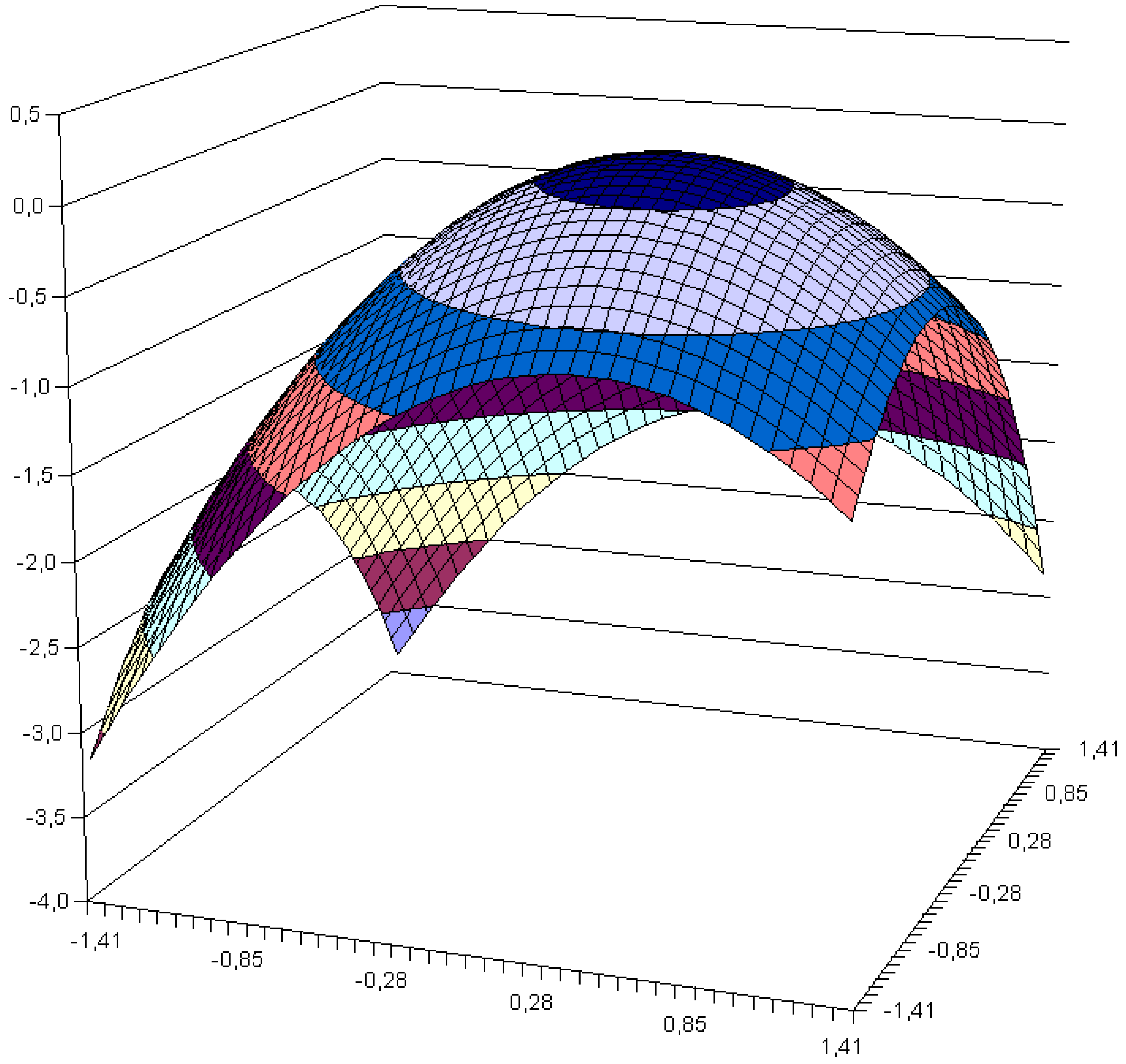
$b_{12}x_1+2b_{22}x_2=-b_2$

Rozwiązanie: $X=A^{-1}C$

Zmienne kodowane:

Współczynniki **A**		Stałe **C**	$X=A^{-1}C$		Sprawdzenie	
-1,39566	-0,09832	-0,50216	x_1	**0,381755**	-0,50216	$-b_1$
-0,09832	-1,397753337	0,39808	x_2	**-0,311653**	0,39808	$-b_2$

70


0,5
0,0
-0,5
-1,0
-1,5
-2,0
-2,5
-3,0
-3,5
-4,0
-1,41
-0,85
-0,28
0,28
0,85
1,41
1,41
0,85
0,28
-0,28
-0,85
-1,41

Plan rotatabilny (zmienne kodowane)

Nr	Plan w zmiennych kodowanych						y_{obl}	Obl. dla równ. regresji	
	x_0	x_1	x_2	$x_1{*}x_2$	x_1^2	x_2^2		y_{regr}	y_{regr}-y_{obl}
1	1	-1	-1	1	1	1	-0,19913	-0,20183	-2,703E-03
2	1	1	-1	-1	1	1	0,99732	0,99913	1,816E-03
3	1	-1	1	-1	1	1	-0,79941	-0,80134	-1,930E-03
4	1	1	1	1	1	1	0,00374	0,00633	2,590E-03
5	1	-1,414	0	0	2,000	0	0,68820	0,69146	3,253E-03
6	1	1,414	0	0	2,000	0	2,11492	2,11178	-3,139E-03
7	1	0	-1,414	0	0	2,000	-0,83811	-0,83751	6,036E-04
8	1	0	1,414	0	0	2,000	-1,96295	-1,96344	-4,901E-04
9	1	0	0	0	0	0	0,00091	-0,00272	-3,631E-03
10	1	0	0	0	0	0	0,00272	-0,00272	-5,441E-03
11	1	0	0	0	0	0	-0,00758	-0,00272	4,861E-03
12	1	0	0	0	0	0	-0,01058	-0,00272	7,858E-03
13	1	0	0	0	0	0	0,00093	-0,00272	-3,648E-03

Parametry	
b_0	-0,00272
b_1	0,50216
b_2	-0,39808
b_3	-0,09832
b_4	0,70217
b_5	-0,69888

Do obliczenia parametrów można stosować $B=(X^TX)^{-1}{*}X^TY$ lub *Narzędzia, Analiza danych, Regresja*

s_{reszt}^2	2,622E-05

Do obliczania współrzęnych *x* stosuje się *Narzędzia, Solver*

Solver (maksimum lub minimum)		
x_1	x_2	$f(x,y)$
-0,456591	**-1,414214**	-0,98389

Współrzędne ekstremum:

Maksimum	1,41421	-0,38428	2,21498
Minimum	-0,45659	-1,41421	-0,98389

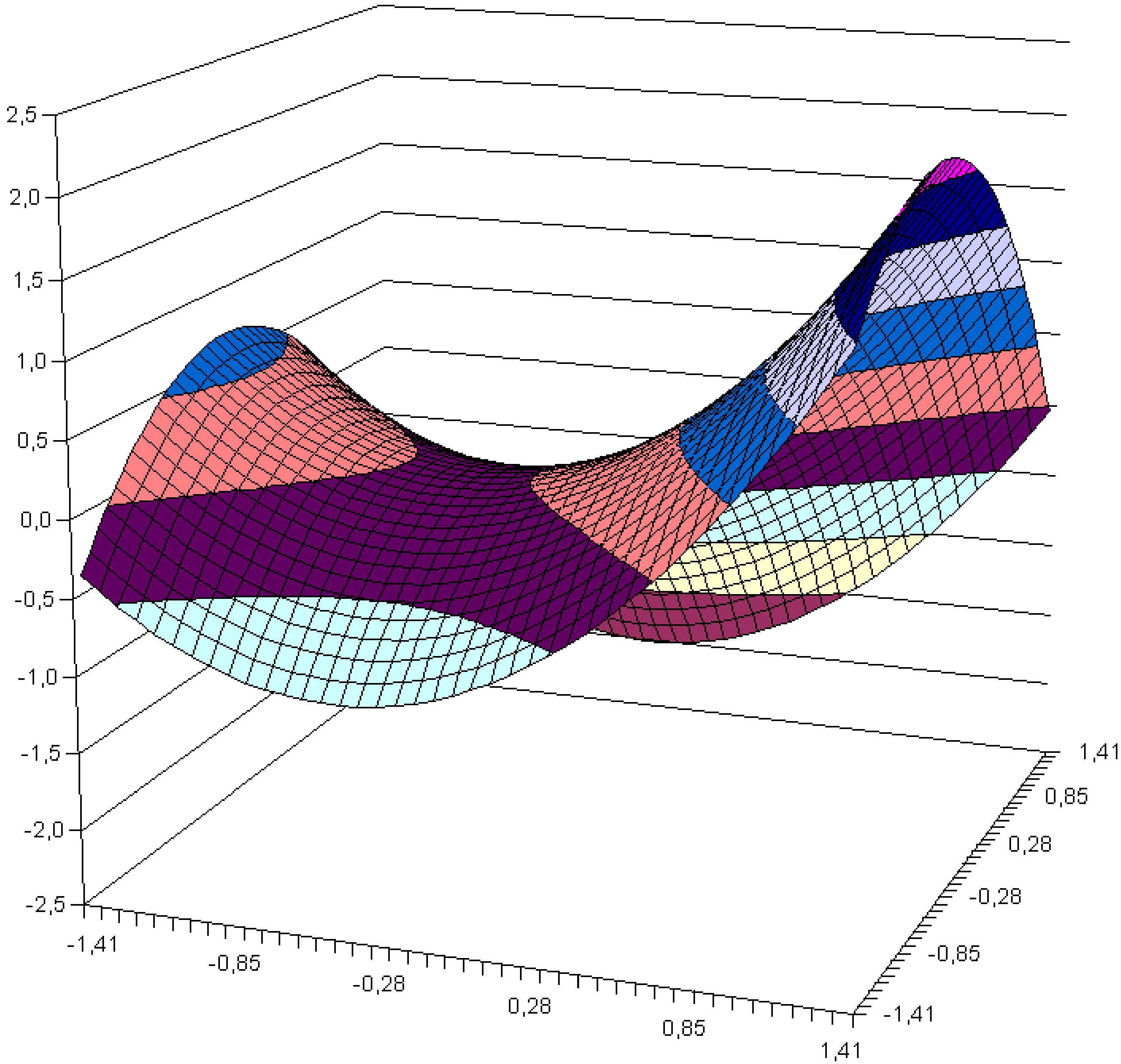
Układ równań otrzymany z pochodnych cząstkowych wielomianu $y=b_0+b_1x_1+b_2x_2+b_{12}x_1x_2+b_{11}x_1^2+b_{22}x_2^2$

$$2b_{11}x_1+b_{12}x_2=-b_1$$
$$b_{12}x_1+2b_{22}x_2=-b_2$$

Rozwiązanie: $X=A^{-1}C$

Zmienne kodowane:

Współczynniki **A**		Stałe **C**	$X=A^{-1}C$		Sprawdzenie	
1,40434	-0,09832	-0,50216	x_1	**-0,375667**	-0,50216	$-b_1$
-0,09832	-1,397753337	0,39808	x_2	**-0,258373**	0,39808	$-b_2$


2,5
2,0
1,5
1,0
0,5
0,0
-0,5
-1,0
-1,5
-2,0
-2,5
-1,41
-0,85
-0,28
0,28
0,85
1,41
1,41
0,85
0,28
-0,28
-0,85
-1,41

Kłopoty z Solverem w przypadku siodła

Solver (poszukiwanie maksimum)					Solver (poszukiwanie maksimum)				
$x_{1,zał}$	$x_{2,zał}$	x_1	x_2	y	$x_{1,zał}$	$x_{2,zał}$	x_1	x_2	y
0,000	0,000	1,414	-0,384	2,215	**-0,376**	**-0,258**	**-0,376**	**-0,258**	**-0,046**
0,010	0,010	1,414	-0,384	2,215	-0,366	-0,248	1,414	-0,384	2,215
-0,010	-0,010	1,414	-0,384	2,215	**-0,386**	**-0,268**	**-1,414**	**-0,185**	**0,715**
-0,010	0,010	1,414	-0,384	2,215	**-0,386**	**-0,248**	**-1,414**	**-0,185**	**0,715**
0,010	-0,010	1,414	-0,384	2,215	-0,366	-0,268	1,414	-0,384	2,215
0,100	0,100	1,414	-0,384	2,215	-0,276	-0,158	1,414	-0,384	2,215
-0,100	-0,100	1,414	-0,384	2,215	**-0,476**	**-0,358**	**-1,414**	**-0,185**	**0,715**
-0,100	0,100	1,414	-0,384	2,215	**-0,476**	**-0,158**	**-1,414**	**-0,185**	**0,715**
0,100	-0,100	1,414	-0,384	2,215	-0,276	-0,358	1,414	-0,384	2,215
0,375	0,375	1,414	-0,384	2,215	-0,001	0,117	1,414	-0,384	2,215
-0,375	-0,375	1,414	-0,384	2,215	**-0,751**	**-0,633**	**-1,414**	**-0,185**	**0,715**
-0,375	**0,375**	**-1,414**	**-0,185**	**0,715**	**-0,751**	**0,117**	**-1,414**	**-0,185**	**0,715**
0,375	-0,375	1,414	-0,384	2,215	-0,001	-0,633	1,414	-0,384	2,215
0,500	0,500	1,414	-0,384	2,215	0,124	0,242	1,414	-0,384	2,215
-0,500	**-0,500**	**-1,414**	**-0,185**	**0,715**	**-0,876**	**-0,758**	**-1,414**	**-0,185**	**0,715**
-0,500	**0,500**	**-1,414**	**-0,185**	**0,715**	**-0,876**	**0,242**	**-1,414**	**-0,185**	**0,715**
0,500	-0,500	1,414	-0,384	2,215	0,124	-0,758	1,414	-0,384	2,215
1,414	1,414	1,414	-0,384	2,215	1,039	1,156	1,414	-0,384	2,215
-1,414	**-1,414**	**-1,414**	**-0,185**	**0,715**	**-1,790**	**-1,673**	**-1,414**	**-0,185**	**0,715**
-1,414	**1,414**	**-1,414**	**-0,185**	**0,715**	**-1,790**	**1,156**	**-1,414**	**-0,185**	**0,715**
1,414	-1,414	1,414	-0,384	2,215	1,039	-1,673	1,414	-0,384	2,215
2,000	2,000	1,414	-0,384	2,215	1,624	1,742	1,414	-0,384	2,215
-2,000	**-2,000**	**-1,414**	**-0,185**	**0,715**	**-2,376**	**-2,258**	**-1,414**	**-0,185**	**0,715**
-2,000	**2,000**	**-1,414**	**-0,185**	**0,715**	**-2,376**	**1,742**	**-1,414**	**-0,185**	**0,715**
2,000	-2,000	1,414	-0,384	2,215	1,624	-2,258	1,414	-0,384	2,215

Decyzja