

Metodi per l'Analisi dei Dati Sperimentali

AA2009/2010



REGRESSIONI MULTILINEARI

REGRESSIONI NON LINEARI

Gaetano D'Avino

Esercitazioni

Lezione 7

01/12/09



Regressioni MultiL e NonL

Esercitazioni
Lezione 7
01/12/09

Sommario

- **Regressione multilineare**
 - Introduzione
 - Forme matriciali
 - Esempio
 - Risoluzione di sistemi lineari
- **Regressione non lineare**
 - Introduzione
 - Esempio 1: funzioni con più estremi
 - Esempio 2: il modello di Carreau-Yasuda
 - Esempio 3: linearizzazione
- **Esercizio**

*La teoria di questa esercitazione si trova nei file "**Lezione7.pdf**" e "**Lezione8.pdf**" sul sito web del Prof. Maffettone*



Regressione MultiL: introduzione

Esercitazioni
Lezione 7
01/12/09

- Un caso più generale del semplice modello lineare finora visto è il **MODELLO MULTILINEARE**
- Si supponga di misurare ancora **una sola variabile** dipendente y_i , dove i è il risultato dell' i -imo esperimento
- Il generico modello multilineare si può scrivere come:

$$y_i = b_0 + b_1 x_{1i} + b_2 x_{2i} + \dots + b_k x_{ki} + \varepsilon_i$$

- Quindi, le condizioni sperimentali, x_{ji} , hanno due pedici:
 - i : indice della prova sperimentale
 - j : indice del parametro
- Complessivamente i parametri da stimare sono: $p = k + 1$



Regressione MultiL: introduzione

Esercitazioni
Lezione 7
01/12/09

- Ipotizzeremo ancora **errori Gaussiani** e **prove indipendenti**
- In generale possiamo avere due tipi di esperimenti:
 - $\varepsilon_i: N(0, \sigma^2)$
 - $\varepsilon_i: N(0, \gamma_i^2 \sigma^2)$
- Nel primo caso le varianze sono uguali (il pedice i ad ε può essere soppresso) mentre nel secondo caso l'errore varia al variare della prova sperimentale
- Si noti che nel secondo caso i "pesi" γ_i sono noti
- Vogliamo stimare i parametri b_0, b_1, \dots, b_k e la varianza σ^2
- Applicheremo il criterio della Massima Verosimiglianza



Forme matriciali

Esercitazioni
Lezione 7
01/12/09

- Conviene introdurre una **notazione matriciale**:

$$\boldsymbol{\theta} = [b_0, b_1, \dots, b_k]^T \quad \Rightarrow \quad \text{vettore colonna dei parametri } (p \times 1)$$

$$\mathbf{y} = [y_1, y_2, \dots, y_N]^T \quad \Rightarrow \quad \text{vettore colonna dei risultati } (N \times 1)$$

$$\mathbf{X} = \begin{bmatrix} 1 & x_{11} & x_{21} & \dots & x_{k1} \\ 1 & x_{12} & x_{22} & \dots & x_{k2} \\ 1 & & & & \\ \dots & & & & \\ 1 & x_{1N} & x_{2N} & \dots & x_{kN} \end{bmatrix} \quad \Rightarrow \quad \text{matrice delle condizioni sperimentali } (N \times p)$$

- Quindi: $\mathbf{y} = \mathbf{X} \cdot \boldsymbol{\theta}$
 $(N \times 1) = (N \times p) (p \times 1)$



Forme matriciali

- Per quanto riguarda l'errore, definiamo:

– $\varepsilon_i: N(0, \sigma^2)$

$$W = \begin{bmatrix} 1 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & 1 & \dots & 0 \\ \dots & & & \dots \\ 0 & 0 & \dots & 1 \end{bmatrix} = \mathbf{I} \quad \Rightarrow \quad \text{matrice dell'errore per varianze uguali (N x N)}$$

– $\varepsilon_i: N(0, \gamma_i^2 \sigma^2)$

$$W = \begin{bmatrix} 1/\gamma_1^2 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & 1/\gamma_2^2 & \dots & 0 \\ \dots & & & \dots \\ 0 & 0 & \dots & 1/\gamma_N^2 \end{bmatrix} \quad \Rightarrow \quad \text{matrice dell'errore per varianze non uguali (N x N)}$$



Regressione Multilineare

Esercitazioni
Lezione 7
01/12/09

- Applicando il criterio della MV si verifica (vedi teoria) che la stima dei parametri si ottiene calcolando:

$$\hat{\theta} = (X^T \cdot W \cdot X)^{-1} \cdot (X^T \cdot W \cdot y)$$

$$(p \times 1) = (p \times N) (N \times N) (N \times p) \cdot (p \times N) (N \times N) (N \times 1)$$

- Mentre la stima della varianza (imparziale) è:

$$s^2 = \frac{(y - X \cdot \hat{\theta})^T \cdot W \cdot (y - X \cdot \hat{\theta})}{N - p}$$

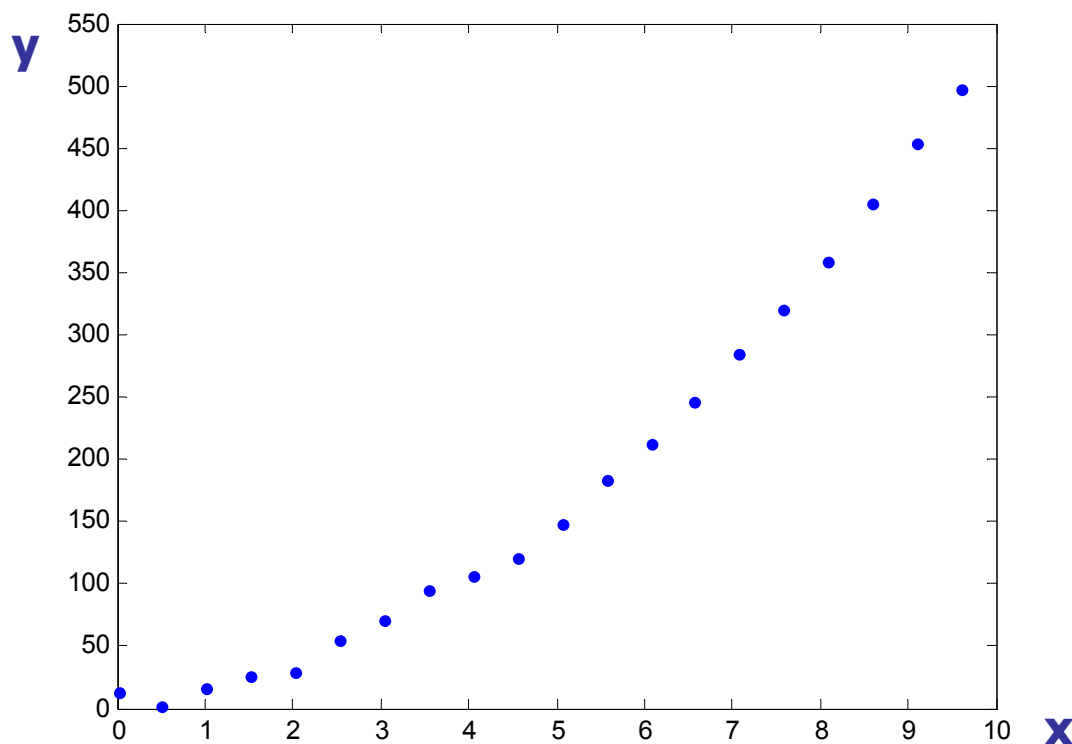
- Si noti che il calcolo di $\hat{\theta}$ implicherebbe un'inversione di matrice. Tuttavia, essendo tale operazione onerosa, è conveniente risolvere il sistema di equazioni lineari associato



Regressione MultiL: esempio

Esercitazioni
Lezione 7
01/12/09

- Sono state effettuate 20 prove (indipendenti) al variare delle condizioni sperimentali. I dati sono nel file "datiMultiL.txt"
- Effettuando un diagramma dei dati si ottiene:





Regressione MultiL: esempio

Esercitazioni
Lezione 7
01/12/09

- Per il momento si supponga che l'errore sia modellabile come ε_i : $N(0, \sigma^2)$, quindi $\mathbf{W} = \mathbf{I}$
- La distribuzione dei dati ci ricorda un profilo parabolico
- Prima di passare alla stima dei parametri nel caso multilineare, vediamo che succede supponendo che un modello lineare semplice ($y = a x + b$) vada bene
- In altre parole effettuiamo prima una regressione lineare dei dati dell'esperimento



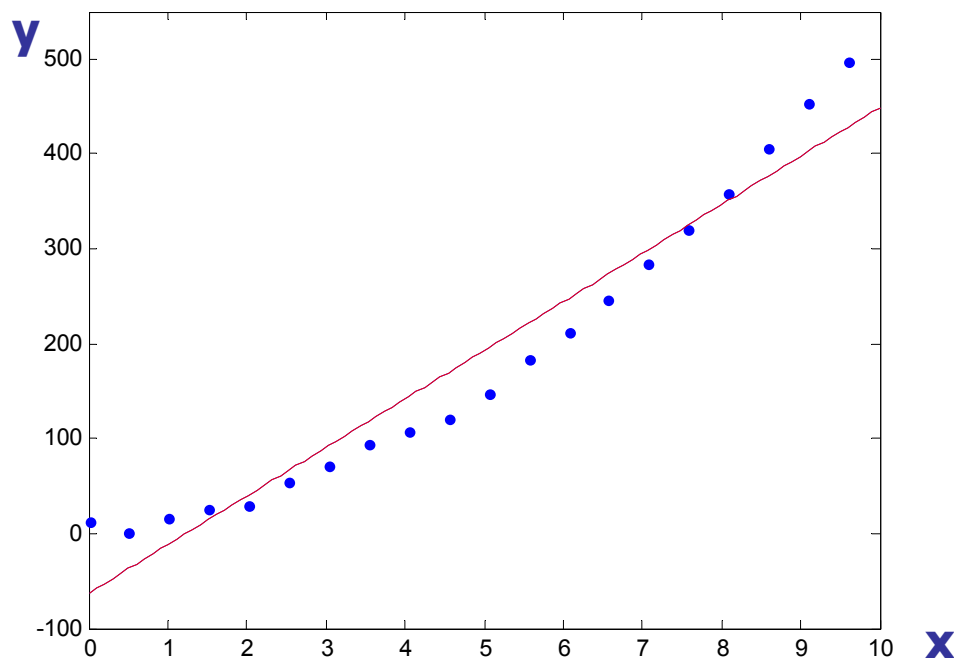
Regressione MultiL: esempio

Esercitazioni
Lezione 7
01/12/09

- Applicando i procedimenti precedentemente visti, si perviene alla seguente stima dei parametri a e b :

$$\hat{a} = 51.19 \quad \hat{b} = -62.87$$

che fornisce la retta in rosso:



Un modello
lineare non è in
grado di "fittare"
bene i dati

Regressione MultiL: esempio

- Procediamo alla regressione multilineare
- Il modello che sembrerebbe ben descrivere i dati è di tipo parabolico: $y = a + bx + cx^2$
- Si tratta ancora di un modello **lineare** nei parametri
- I vettori/matrici θ , \mathbf{y} , \mathbf{X} e \mathbf{W} sono:

$$\theta = \begin{bmatrix} a \\ b \\ c \end{bmatrix} \quad \mathbf{y} = \begin{bmatrix} y_1 \\ y_2 \\ \dots \\ y_N \end{bmatrix} \quad \mathbf{X} = \begin{bmatrix} 1 & x_1 & x_1^2 \\ 1 & x_2 & x_2^2 \\ \dots & \dots & \dots \\ 1 & x_N & x_N^2 \end{bmatrix} \quad \mathbf{W} = \mathbf{I}$$

- Dobbiamo stimare i parametri del modello ovvero: $\hat{a}, \hat{b}, \hat{c}$





Regressione MultiL: esempio

Esercitazioni
Lezione 7
01/12/09

- La formula da applicare è:

$$\hat{\theta} = (X^T \cdot I \cdot X)^{-1} \cdot (X^T \cdot I \cdot y) = (X^T \cdot X)^{-1} \cdot (X^T \cdot y)$$

- Si noti che sia **X** che **y** sono oggetti noti
- I comandi Matlab necessari si trovano nell'M-file:
"regressMultiL.m"

- Le stime dei parametri sono quindi:

$$\hat{a} = 7.6237$$

$$\hat{b} = 4.6601$$

$$\hat{c} = 4.8487$$

- Si noti che nell'M-file si è calcolato l'inverso della matrice $(X^T \cdot X)$



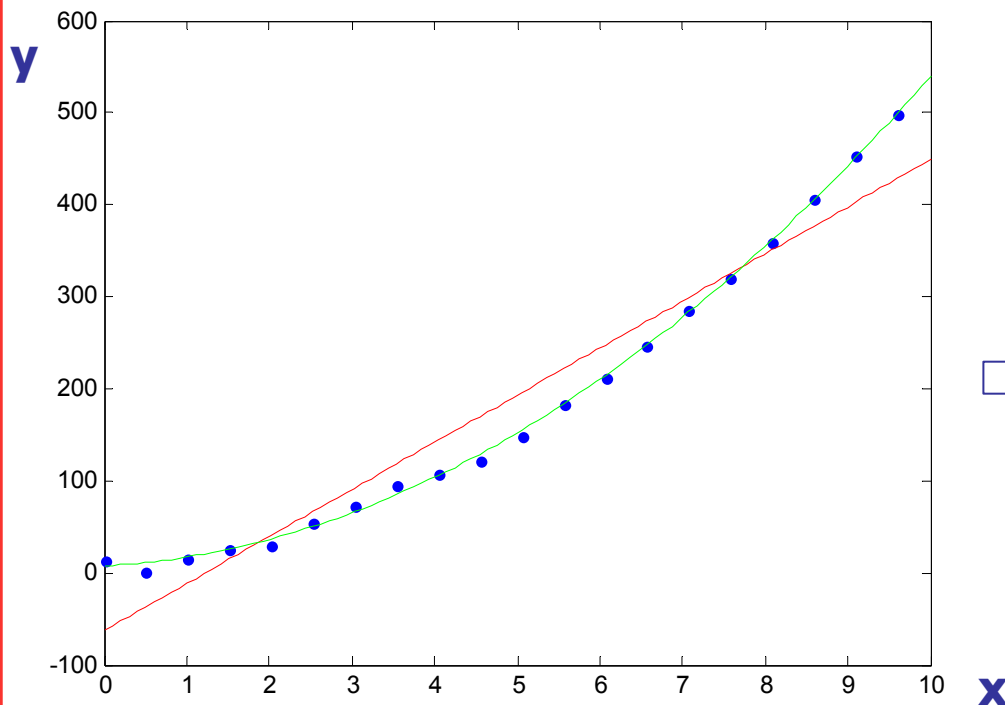
Regressione MultiL: esempio

Esercitazioni
Lezione 7
01/12/09

- Diagrammando la seguente funzione:

$$y = \hat{a} + \hat{b}x + \hat{c}x^2 = 7.6237 + 4.6601x + 4.8487x^2$$

si ottiene la curva in verde:



Il modello
parabolico offre
un fitting
decisamente
migliore



Regressione MultiL: esempio

Esercitazioni
Lezione 7
01/12/09

- Nel caso di grosse matrici \mathbf{X} , il calcolo dell'inversa può diventare particolarmente oneroso
- E' estremamente conveniente procedere alla stima attraverso la risoluzione di un sistema di equazioni lineari
- Infatti, la formula generale: $\hat{\boldsymbol{\theta}} = (\mathbf{X}^T \cdot \mathbf{W} \cdot \mathbf{X})^{-1} \cdot (\mathbf{X}^T \cdot \mathbf{W} \cdot \mathbf{y})$

può essere riscritta come: $(\mathbf{X}^T \cdot \mathbf{W} \cdot \mathbf{X}) \hat{\boldsymbol{\theta}} = \mathbf{X}^T \cdot \mathbf{W} \cdot \mathbf{y}$

ovvero: $\boxed{\mathbf{A} \cdot \hat{\boldsymbol{\theta}} = \mathbf{c}}$

dove: $\mathbf{A} = \mathbf{X}^T \cdot \mathbf{W} \cdot \mathbf{X}$

$$\mathbf{c} = \mathbf{X}^T \cdot \mathbf{W} \cdot \mathbf{y}$$



Risoluzione di sistemi lineari

Esercitazioni
Lezione 7
01/12/09

- Si tratta di un sistema di equazioni lineari nelle incognite $\hat{\theta}$
- Esistono numerosi algoritmi numerici per la risoluzione di sistemi di equazioni lineari anche di dimensioni elevate
- Inoltre, a seconda del tipo di sistema, esistono procedure ottimizzate in termini di memoria e tempo computazionale
- Senza entrare nel merito del dettaglio numerico, Matlab consente di risolvere un sistema del genere utilizzando il simbolo: `"\"`
- L'esempio di regressione multilineare precedente è risolto con questa nuova procedura nell'M-file: `"regressMultiL2.m"`
- Ovviamente si perviene alla stessa stima dei parametri



Regressione MultiL: esempio

Esercitazioni
Lezione 7
01/12/09

- Per la stima della varianza (imparziale) si applica la formula:

$$\hat{\sigma}^2 = \frac{(y - X \cdot \hat{\theta})^T \cdot I \cdot (y - X \cdot \hat{\theta})}{N - p} = \frac{(y - X \cdot \hat{\theta})^T \cdot (y - X \cdot \hat{\theta})}{17}$$

una volta noto il vettore $\hat{\theta}$

- E' possibile anche utilizzare il comando "regress" per ottenere una regressione multilineare come visto in precedenza
- Nel caso in cui $\varepsilon_i = N(0, \gamma_i^2 \sigma^2)$ allora **W** è quella precedentemente vista ed è nota
- E' sufficiente modificare opportunamente i programmi Matlab includendo anche la matrice **W**



Regressione NonL: introduzione

Esercitazioni
Lezione 7
01/12/09

- Nella sperimentazione succede spesso che per modellare adeguatamente dei dati si debba ricorrere ad un modello **NON LINEARE** nei parametri
- Esempi:
 - modello di Carreau-Yasuda
 - cinetiche enzimatiche
 - CSTR non isoterma
 - ...
- Inoltre spesso i parametri del modello sono numerosi:
 - modello di Carreau-Yasuda: 4 parametri
 - cinetiche enzimatiche: n costanti cinetiche
 - CSTR non isoterma: energia di attivazione e costante pre-esponenziale per ciascuna reazione, ecc.
 - ...



Regressione NonL

- La procedura che si utilizza è esattamente la stessa di quella vista finora utilizzando il criterio della MV
- Nelle stesse ipotesi:
 - modello esperimento: $Y_i = g(x_i, \theta) + \varepsilon_i$
 - errore: $\varepsilon_i = N(0, \sigma^2)$
 - ε_i indipendente da ε_j

anche la funzione MV da massimizzare è la stessa:

$$L(\theta, \sigma^2) = \prod_{i=1}^N \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma^2}} \exp\left[-\frac{1}{2} \frac{(y_i - g(x_i, \theta))^2}{\sigma^2}\right]$$

- Tuttavia ora è necessario calcolare il massimo della funzione MV con **tecniche numeriche iterative**



Regressione NonL: esempio 1

Esercitazioni
Lezione 7
01/12/09

Dati

x_i

0.90

0.95

1.00

1.05

1.10

y_i

0.17547

0.25858

0.01714

0.22006

0.22604

- Si hanno i dati riportati a destra e si suppone che un adeguato modello per l'esperimento sia:

$$y = g(x, k) = kx - k^2 x^2$$

- Il modello è **non lineare** nell'unico parametro k
- La funzione MV si scriverà come:

$$L(k, \sigma^2) = \prod_{i=1}^5 \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma^2}} \exp \left[-\frac{1}{2} \frac{(y_i - kx_i + k^2 x_i^2)^2}{\sigma^2} \right]$$

ovvero:

$$L(k, \sigma^2) = \frac{1}{(2\pi\sigma^2)^{\frac{5}{2}}} \exp \left[-\frac{1}{2\sigma^2} \sum_{i=1}^5 (y_i - kx_i + k^2 x_i^2)^2 \right]$$



Regressione NonL: esempio 1

Esercitazioni
Lezione 7
01/12/09

- Questa funzione si trova nel M-file "modelloNL.m"
- La ricerca del massimo della funzione MV (in particolare del suo logaritmo) rispetto a k e σ^2 ci fornirà le rispettive stime
- Dobbiamo cercare il massimo per via numerica (attraverso "fminsearch") per cui sono necessarie due stime iniziali
- Proviamo a dare come stime iniziali:

$$\begin{array}{ccc} k_0 = 0.4 & \xrightarrow{\text{fminsearch}} & \hat{k} = 0.222 \\ \sigma_0^2 = 0.1 & & \hat{\sigma}^2 = 0.0096 \end{array}$$

- Modificando le stime iniziali precedenti con le seguenti:

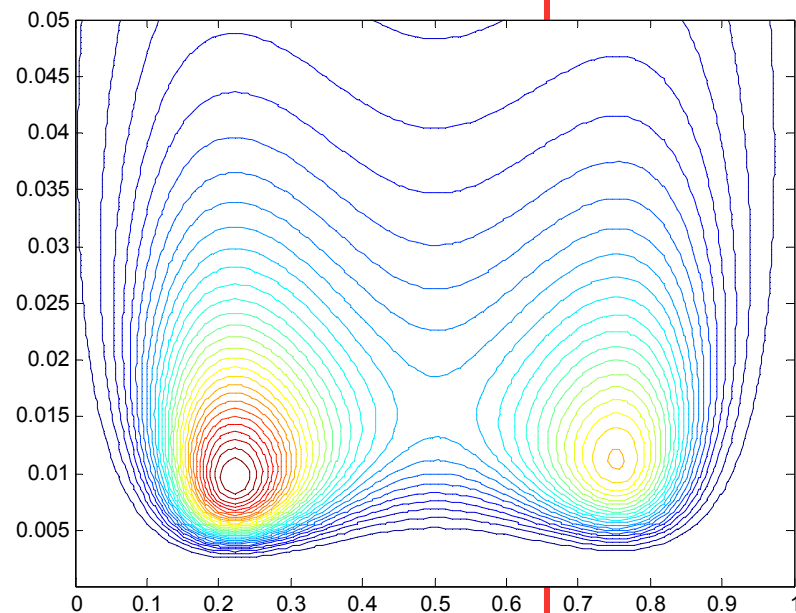
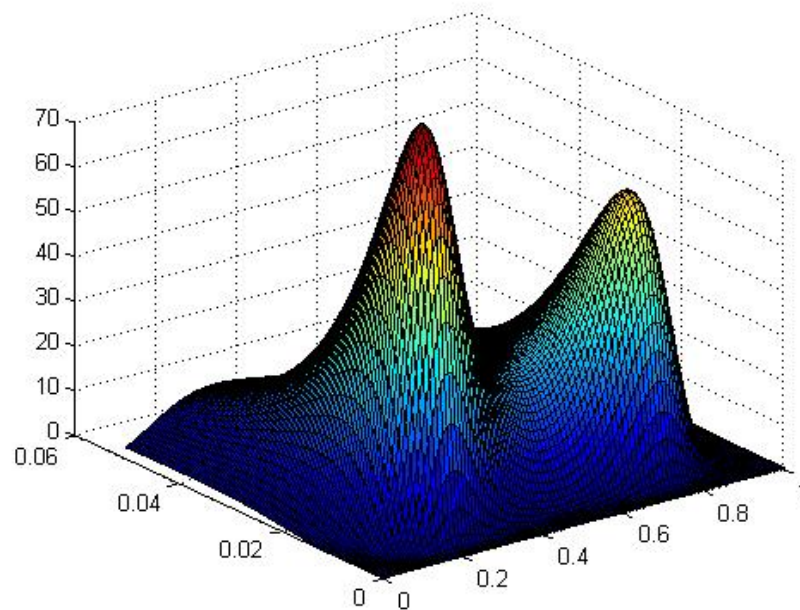
$$\begin{array}{ccc} k_0 = 0.5 & \xrightarrow{\text{fminsearch}} & \hat{k} = 0.7531 \\ \sigma_0^2 = 0.1 & & \hat{\sigma}^2 = 0.0112 \end{array}$$



Regressione NonL: esempio 1

Esercitazioni
Lezione 7
01/12/09

- Perché cambiando la stima iniziale cambia il punto di max?
- Diagrammiamo la funzione $L(k, \sigma^2)$ (i comandi necessari per effettuare il plot tridimensionale si trovano nell'M-file "plotmodelloNL.m")





Regressione NonL: esempio 1

Esercitazioni
Lezione 7
01/12/09

- Si osserva la presenza di due massimi che corrispondono alle coppie $(\hat{k}, \hat{\sigma}^2)$ precedentemente calcolate
- Ovviamente la stima esatta è la coppia corrispondente al MASSIMO ASSOLUTO della funzione MV
- **Quindi, gli algoritmi di minimizzazione sono sensibili ai valori di primo tentativo e possono approdare ad un minimo relativo e non assoluto o addirittura non convergere**
- Per verificare quale estremo è quello assoluto è sufficiente valutare il valore della funzione negli estremi



Regressione NonL: esempio 2

Esercitazioni
Lezione 7
01/12/09

- Consideriamo ora il modello di Carreau-Yasuda (vedi teoria) utilizzato per modellare dati di viscosità contro lo shear rate
- I dati sono riportati a destra e il modello, la cui funzione L è definita nell'M-file "**CarreauYasuda.m**", è il seguente:

$$\eta = \eta_0 \left[1 + (|\lambda| \gamma)^a \right]^{\frac{n-1}{a}}$$

dove:

- η : viscosità del polimero (misure sperimentali = y_i)
- γ : shear rate (condizioni sperimentali = x_i)

mentre i parametri sono:

- η_0 : viscosità di "zero shear rate"
- λ : tempo caratteristico
- $n - 1$: pendenza della regione a legge di potenza
- a : ampiezza della zona tra plateau e shear thinning

Dati Viscosità

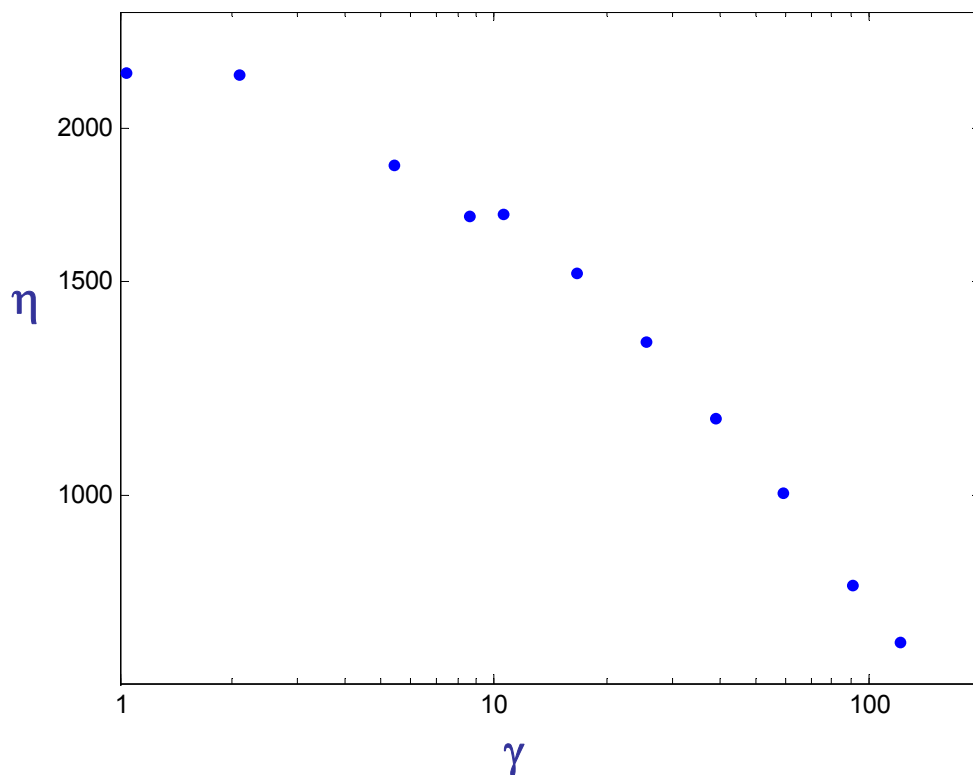
γ	η
16.37	1526.6
25.36	1340.3
38.85	1158.1
1.033	2230.1
2.066	2226.3
5.339	1872.8
8.511	1703.6
10.54	1707.1
58.68	1005.3
89.99	844.50
119.9	758.39



Regressione NonL: esempio 2

Esercitazioni
Lezione 7
01/12/09

- Il modello è **fortemente non lineare** nei parametri
- I dati sono di seguito diagrammati (in scala log-log):





Regressione NonL: esempio 2

Esercitazioni
Lezione 7
01/12/09

- Essendo il modello non lineare, è necessario procedere alla ricerca del minimo per via numerica
- Siccome i parametri da stimare sono quattro, occorre partire da buoni valori di primo tentativo
- Supponiamo di "inventare" i valori di primo tentativo per utilizzare "fminsearch"
- Per esempio, fissiamo:
 - $\eta_{0,0} \rightarrow 0.2$
 - $\lambda_0 \rightarrow 0.2$
 - $n_0 \rightarrow 0.2$
 - $a_0 \rightarrow 0.2$
- Matlab NON RIESCE ad approdare al valore del massimo



Regressione NonL: esempio 2

Esercitazioni
Lezione 7
01/12/09

- Infatti i valori di primo tentativo sono molto lontani da quelli per i quali si osserva il massimo della funzione MV
- Ci possono aiutare considerazioni sulla fisica del modello
- Per esempio, il parametro η_0 rappresenta il valore della viscosità quando $\gamma \rightarrow 0$ (come si evince anche dal modello)
 - Possiamo allora scegliere $\eta_{0,0}$ uguale al dato di viscosità che si è misurato corrispondente alla più bassa shear rate (= 2230.12)
- Inoltre, dalla sperimentazione emerge che per il parametro "a" una buona stima è intorno a 0.5
 - Fissiamo allora $a_0 = 0.5$
- Gli altri due parametri li lasciamo uguali a 0.2 anche se, come vedremo in seguito, è possibile ottenere utili informazioni anche sulla loro stima di primo tentativo

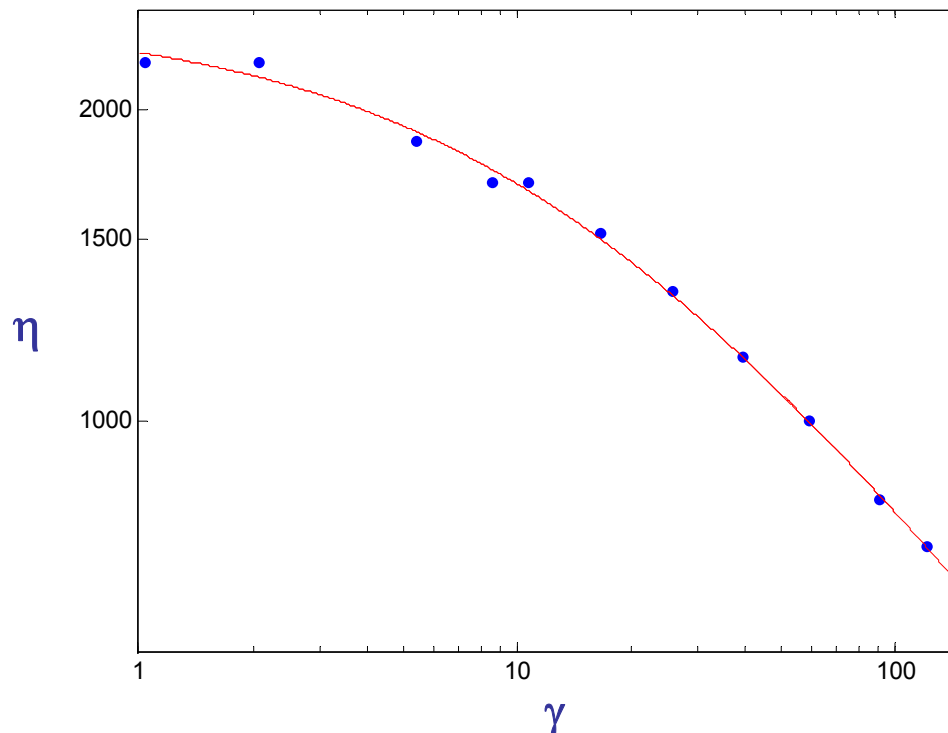
$$\eta = \eta_0 \left[1 + (|\lambda|\gamma)^a \right]^{\frac{n-1}{a}}$$



Regressione NonL: esempio 2

Esercitazioni
Lezione 7
01/12/09

- Con questi valori di primo tentativo, "fminsearch" fornisce le stime dei parametri riportate a destra. Con tali valori, la curva del modello è:



$$\hat{\eta}_0 = 2459.6$$

$$\hat{\lambda} = 0.0764$$

$$\hat{a} = 0.7755$$

$$\hat{n} = 0.5154$$

- Se i valori di primo tentativo sono lontani da quelli del minimo, l'algoritmo può non approdare all'estremo**



Regressione NonL: esempio 3

Esercitazioni
Lezione 7
01/12/09

- A volte non è possibile scegliere, attraverso considerazioni fisiche, plausibili valori di primo tentativo dei parametri
- Una utile indicazione ci viene fornita dalla **LINEARIZZAZIONE** del modello dell'esperimento
 - NB: non è sempre possibile procedere alla linearizzazione
- Vogliamo studiare la cinetica di una reazione enzimatica (vedi i dati a destra) descritta dal modello di Michaelis-Menten:

$$r = \frac{\theta_1 \cdot c}{\theta_2 + c}$$

dove:

- r : velocità di reazione ($= y_i$)
- c : concentrazione ($= x_i$)
- θ_1, θ_2 : parametri cinetici ($=$ parametri)

Dati Cinetici

c_i	r_i
0.02	76
0.06	107
0.11	139
0.22	159
0.56	201
1.10	207

Regressione NonL: esempio 3

- Ovviamente il modello è non lineare nei parametri e la ricerca del minimo della funzione MV a partire da valori iniziali “inventati” potrebbe non portare al calcolo del minimo
 - NB: siccome in questo caso i parametri p sono solo due, un diagramma della funzione MV fornirebbe buone stime di primo tentativo. In ogni caso, se $p > 2$, ciò non è più possibile
- Il modello però è linearizzabile calcolando l'inversa di entrambi i membri dell'equazione:

$$r = \frac{\theta_1 \cdot c}{\theta_2 + c} \rightarrow \frac{1}{r} = \frac{\theta_2 + c}{\theta_1 \cdot c} = \frac{1}{\theta_1} + \frac{\theta_2}{\theta_1} \cdot \frac{1}{c}$$

da cui $r_{lin} = a + b c_{lin}$ avendo posto:

- $r_{lin} = 1/r$
- $c_{lin} = 1/c$
- $a = 1/\theta_1$ e $b = \theta_2/\theta_1$





Regressione NonL: esempio 3

Esercitazioni
Lezione 7
01/12/09

- Di conseguenza, effettuando una regressione lineare sul modello linearizzato, ottengo una stima dei parametri a e b ovvero di θ_1 e θ_2
- Tali stime saranno utilizzate come valori di primo tentativo per la regressione non lineare
- Siccome la regressione lineare fornisce solo stime iniziali, possiamo applicare i MINIMI QUADRATI piuttosto che la MASSIMA VEROSIMIGLIANZA
- In realtà, poiché la trasformazione effettuata sul modello ($g = 1/r$) è non lineare, è necessario introdurre degli opportuni pesi (ovvero applicare i MINIMI QUADRATI PESATI)

Regressione NonL: esempio 3

- Che significato hanno i pesi?
- Sappiamo che, trasformando una variabile aleatoria Y attraverso una trasformazione non lineare $g(Y)$, la varianza della VA Z può essere ottenuta in forma approssimata come:

$$\sigma_Z^2 \cong \left(\left. \frac{dg}{dy} \right|_{\mu_Y} \right)^2 \sigma_Y^2$$

- Nel nostro caso abbiamo una VA "r" a cui abbiamo applicato $g(r) = 1/r$
- Quindi la varianza della nuova VA è legata a quella della vecchia VA dal fattore:

$$\left(\left. \frac{dg}{dr} \right|_{\mu_r} \right)^2 = \left(\left. \frac{d(1/r)}{dr} \right|_{\mu_r} \right)^2 = \left(\left. -\frac{1}{r^2} \right|_{\mu_r} \right)^2 = \frac{1}{r^4} \Big|_{\mu_r}$$





Regressione NonL: esempio 3

Esercitazioni
Lezione 7
01/12/09

- Il calcolo di questo fattore andrebbe effettuato in μ_r , ovvero nel valore vero di r che però non conosciamo
- Facciamo un'ulteriore approssimazione: calcolo questo fattore nei valori di r che ho misurato (ovvero nelle y_i) quindi:

$$\left. \frac{I}{r^4} \right|_{\mu_r} \cong \left. \frac{I}{r^4} \right|_{r_i} = w_i$$

- Allora ci si trova di fronte al caso in cui la \mathbf{V} è diagonale e nota ovvero la MV coincide con i MQP e la funzione da massimizzare è:

$$\min_{\theta} \sum_{i=1}^N \frac{(y_i - f(x_i, \theta))^2}{w_i \sigma^2} = \min_{\theta} \sum_{i=1}^N \frac{(y_i - f(x_i, \theta))^2}{w_i}$$

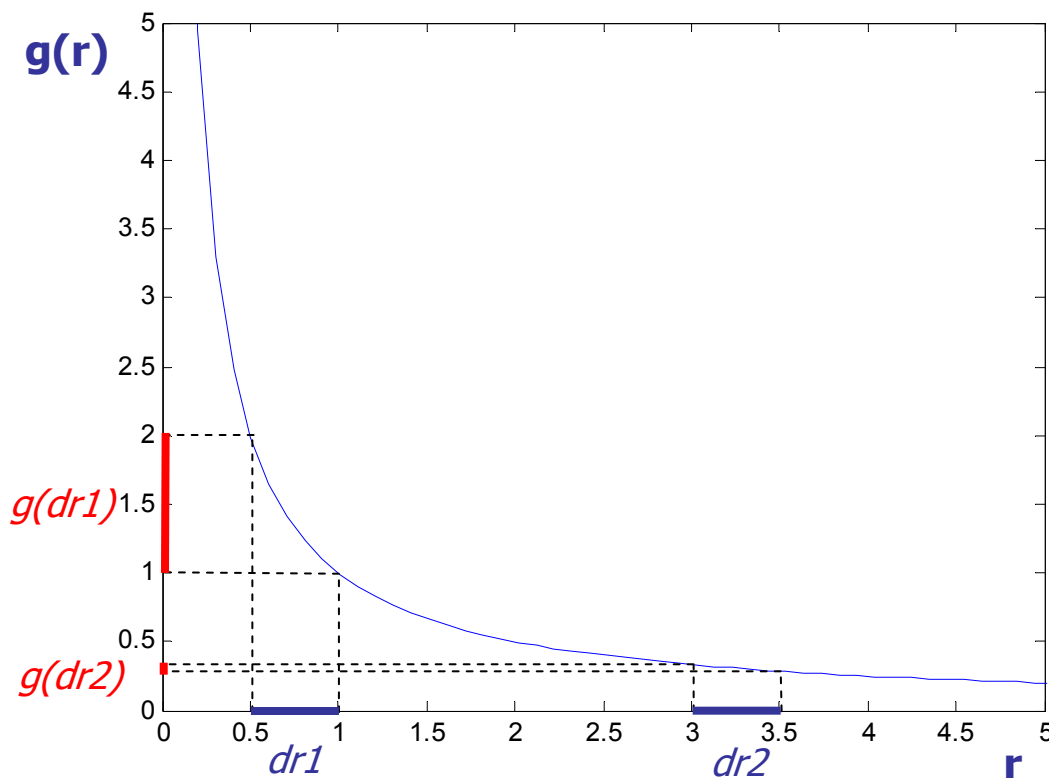
dove f è ovviamente il modello **linearizzato**



Regressione NonL: esempio 3

Esercitazioni
Lezione 7
01/12/09

- Il significato dei pesi è evidente anche se si considera il seguente ragionamento
- Il diagramma della funzione $g(r) = 1/r$ è:



- Due intervalli $dr1$ e $dr2$ sono trasformati diversamente a seconda di dove si trovano
- Quindi, nonostante le misure originali hanno uguale varianza, la trasformazione ne altera la dispersione
- Si corregge "pesando" più certe misure che altre



Regressione NonL: esempio 3

Esercitazioni
Lezione 7
01/12/09

- Procediamo ora alla minimizzazione della funzione precedente che si trova nell'M-file "MichMentLin.m"
- Essendo il modello lineare le stime di primo tentativo non incidono in maniera significativa sulla soluzione

- Partendo dai seguenti valori iniziali di a e b:

$$\begin{array}{ccc}
 a_0 = 1.0 & \xrightarrow{\text{fminsearch}} & \hat{a} = 0.00476347 \\
 b_0 = 1.0 & & \hat{b} = 0.00021938
 \end{array}
 \quad \longrightarrow \quad
 \begin{array}{l}
 \hat{\theta}_1 = 209.9 \\
 \hat{\theta}_2 = 0.0461
 \end{array}$$

- Infine, a partire da questi valori di θ_1 e θ_2 si può procedere alla regressione non lineare attraverso la MV (vedi M-file "MichMentNL.m") ottenendo:

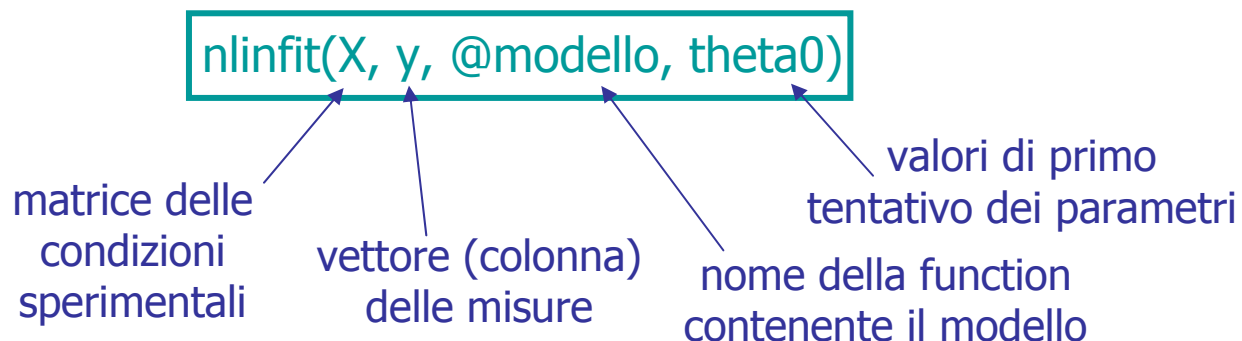
$$\begin{array}{ccc}
 \hat{\theta}_{1,0} = 209.9 & \xrightarrow{\text{fminsearch}} & \hat{\theta}_1 = 212.1 \\
 \hat{\theta}_{2,0} = 0.0461 & & \hat{\theta}_2 = 0.0528
 \end{array}$$



Regressione NonL: Matlab

Esercitazioni
Lezione 7
01/12/09

- Si noti come le stime finali sono molto simili a quelle di partenza per la regressione non lineare
- Matlab ha il comando predefinito "nlinfit" che consente di effettuare una regressione non lineare
- La sintassi è la seguente:



- La function della cinetica alla MM è definita nel file "michMenNlinfit.m" mentre i comandi necessari per effettuare la regressione sono nell'M-file "michMenMain.m"



Esercizio 1

Esercitazioni
Lezione 7
01/12/09

1. Regressione multilineare

Sono state effettuate delle misure di un processo e i dati sono nel file "datiEserc1.txt".

Si suppone che un buon modello in grado di descrivere i dati sperimentali sia:

$$y = a + \frac{b}{x} + \frac{c}{x^3}$$

Si stimino i parametri a , b e c e la varianza σ^2 .

Si modifichino opportunamente i programmi presentati e si effettui un confronto con i risultati ottenuti col comando "regress" di Matlab

2. Regressione non lineare

Si vuole studiare la dipendenza dalla temperatura di una costante cinetica, ipotizzando che la legge sia di tipo Arrhenius:

$$k = k_0 e^{-\frac{E}{RT}}$$

dove:

- k: costante cinetica (s^{-1})
- T: temperatura ($^{\circ}K$)
- k_0 : costante pre-esponenziale (s^{-1})
- R: costante cinetica dei gas ($J K^{-1} mol^{-1}$) = 8.314472
- E: energia di attivazione ($J mol^{-1}$)

A tale fine, sono state effettuate prove in cui si misura k al variare della temperatura (vedi file "datiEserc2.txt")

Si effettui una stima dei parametri k_0 ed E

- NB: il modello è linearizzabile attraverso la trasformazione $g = \ln(y)$

