4. HODINA

Metóda najmenších štvorcov

rovnica priamky:

y = ax + b

súbor dát:

(x_1, y_1), (x_2, y_2), ... (x_n, y_n) $n \geq 2$

najlepší opis priamkou s minimálnou hodnotou funkcie:

$$\Pi = \sum_{i=1}^{n} \left[y_i - f(x_i)\right]^2 = \sum_{i=1}^{n} \left[y_i - (ax_i + b)\right]^2 = \min$$

$$\frac{\partial \Pi}{\partial a} = 2\sum_{i=1}^{n} x_i \left[y_i - (ax_i + b)\right] = 0$$

$$\frac{\partial \Pi}{\partial b} = 2\sum_{i=1}^{n} \left[y_i - (ax_i + b)\right] = 0$$

$$a = \frac{n\sum xy - \left(\sum x\right)\left(\sum y\right)}{n\sum x^2 - \left(\sum x\right)^2}$$

$$b = \frac{\left(\sum y\right)\left(\sum x^2\right) - \left(\sum x\right)\left(\sum xy\right)}{n\sum x^2 - \left(\sum x\right)^2}$$

Smerodajné odchýlky týchto parametrov sa počítajú zo vzťahov

$$\boxed{s_b = \frac{s}{\sqrt{\sum_{i=1}^{n} x_i^2 - \frac{\left(\sum_{i=1}^{n} x_i\right)^2}{n}}}} \qquad \boxed{s_a = \sqrt{\frac{\frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n} x_i^2}{\sum_{i=1}^{n} x_i^2 - \frac{\left(\sum_{i=1}^{n} x_i\right)^2}{n}}}\; s}$$

kde s je vyjadrené výrazom

$$s = \sqrt{\frac{\chi^2}{n-2}}$$

χ^2 je súčet štvorcov rezíduí definovaný výrazom

$$\chi^2 = \sum_{i=1}^{n} \left[y_i - (a + bx_i)\right]^2$$

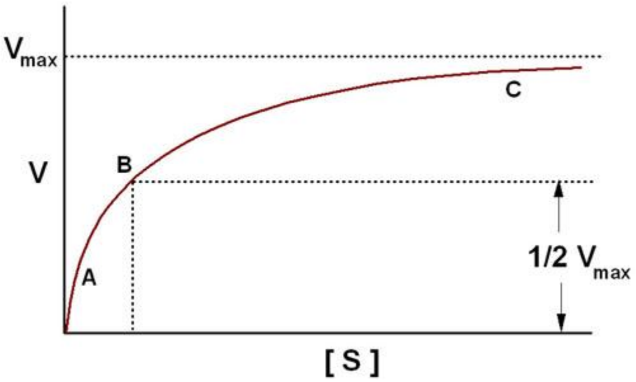
Lineárna regresia

Príklad 1: Vypočítajte konštanty Michaelis-Mentenovej rovnice K_m a v_{max} na základe experimentálne nameraných údajov v tabuľke:

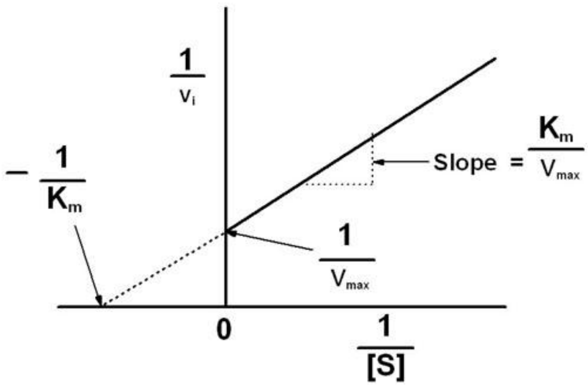
[S] [mM*]	v [mM/s]
8.33	3.62E-06
5.55	3.39E-06
2.77	2.75E-06
1.38	1.99E-06
0.83	1.49E-06

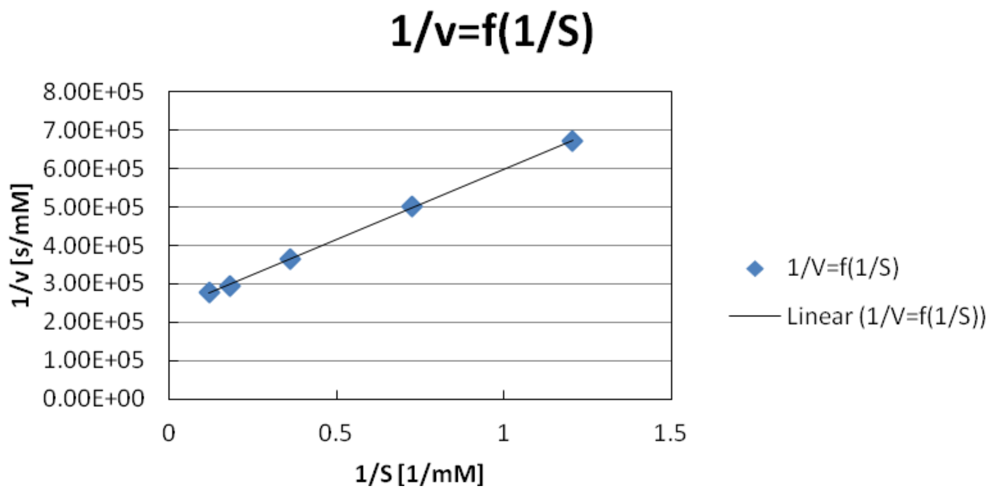
*1 M = 1 mol/l

Michaelis-Mentenovej rovnica: $$v = \frac{v_{\max} S}{K_m + S}$$



Linearizácia rovnice: $$\frac{1}{v} = \frac{K_m}{v_{\max}} \frac{1}{S} + \frac{1}{v_{\max}}$$

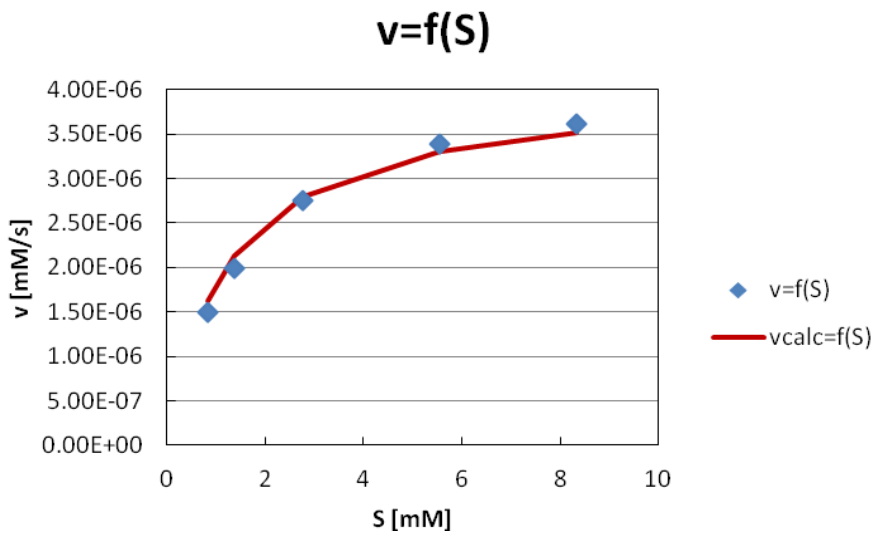




K_m = 1.58 mM
v_{max} = 4.32E-06 mM/s

<u>Nelineárna regresia a optimalizácia</u>

Príklad 2: Riešte Príklad 1 optimalizáciou v nelineárnom tvare (minimalizáciou rozdielu medzi vypočítanými a nameranými hodnotami *v*).



K_m = 1.24 mM
v_{max} = 4.05E-06 mM/s