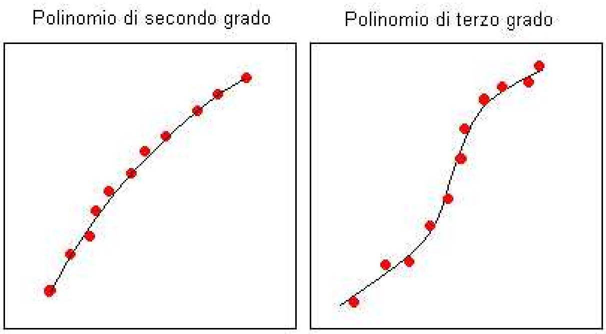
15. Regressione polinomiale di secondo grado

La regressione polinomiale utilizza lo stesso metodo matematico della regressione lineare, ma assume che la relazione di funzione che caratterizza i dati sia meglio descritta, anziché da una retta, da un polinomio. La possibilità che la relazione di funzione che lega la variabile in ordinate (y) a quella in ascisse (x) sia meglio descritta da una curva, anziché da una retta, può essere verificata mediante un test per la linearità che, se significativo, consente di affermare che la relazione è presumibilmente meglio descritta da una funzione curvilinea.



In realtà in tutti i casi nei quali è necessario descrivere una relazione tra due variabili, rappresentabile su un piano cartesiano, è indispensabile che tutta una serie di ragionamenti a monte abbiano portato a concludere che le retta rappresenta un modello applicabile. Questo è vero per esempio nel caso della relazione tra concentrazione (in ascisse) e assorbanza (in ordinate) nel caso di reazioni fotometriche, per le quali è applicabile la legge di Lambert e Beer. In questo caso, assunta la linearità della relazione, il test di linearità può essere applicato per verificare l'ambito di intervalli di concentrazione entro i quali la relazione lineare è valida nel caso del metodo analitico in questione. In altri casi la relazione può essere per definizione assunta non lineare, come avviene per esempio nel caso di reazioni antigene-anticorpo, nelle quali la quantità di immunocomplessi che si forma (e quindi il segnale prodotto dalla reazione) è noto che varia in modo meno che proporzionale all'aumentare dell'antigene.

Il metodo dei minimi quadrati consente di adattare un funzione $y = f(x)$ ad una serie di dati sperimentali in modo che risulti minimizzata la somma dei quadrati delle differenze residue fra i dati sperimentali e la funzione stessa.

In questo caso il metodo dei minimi quadrati viene impiegato per adattare ai dati un polinomio di secondo grado, nella forma

$$y = a + b \cdot x + c \cdot x^2$$

Essendo n il numero dei dati aventi coordinate (x_i,y_i), il termina noto a, e i coefficienti b e c del polinomio di secondo grado possono essere determinati risolvendo contemporaneamente le equazioni

$$a \cdot n + b \cdot \Sigma x_i + c \cdot \Sigma x_i^2 = \Sigma y_i$$
$$a \cdot \Sigma x_i + b \cdot \Sigma x_i^2 + c \cdot \Sigma x_i^3 = \Sigma\ x_i \cdot y_i$$
$$a \cdot \Sigma x_i^2 + b \cdot \Sigma x_i^3 + c \cdot \Sigma x_i^4 = \Sigma\ x_i^2 \cdot y_i$$

Il sistema può essere facilmente risolto, utilizzando qualsiasi programma che includa la soluzione dei sistemi di equazioni in forma matriciale (per esempio Excel®).