

УДК 519.21

**ОПРЕДЕЛЕНИЕ ГРАНИЦ ДОВЕРИТЕЛЬНОЙ ОБЛАСТИ
ПРИ НЕЛИНЕЙНОМ ОЦЕНИВАНИИ ПАРАМЕТРОВ
ФИЗИКО-ХИМИЧЕСКИХ МОДЕЛЕЙ**

Цибанов В. В.

Предложен алгоритм нахождения интервальных оценок параметров нелинейных моделей, использующий минимизацию функций многих переменных без вычисления производных.

Важным разделом исследования физико-химического объекта при помощи математического моделирования является оценивание параметров модели из опытных данных. Известно, что решение этой задачи методом наименьших квадратов (МНК) включает два основных этапа: 1) нахождение вектора оценок, минимизирующего сумму квадратов отклонений, и 2) статистическую интерпретацию результата. Данная работа касается в основном второго этапа, на котором в случае нелинейных моделей возникают трудности установления границ и описания совместной доверительной области для найденных оценок.

Пусть

$$S = S(\vec{\theta}) = \sum_{i=1}^n [y_i - \eta(\vec{\theta}, \vec{x}_i)]^2 \quad (1)$$

сумма квадратов отклонений экспериментально наблюдаемых значений y_i некоторого свойства системы от предсказываемых моделью $\eta(\vec{\theta}, \vec{x})$ в точках \vec{x}_i , \vec{x} - вектор независимых переменных, i - номер наблюдения, $\vec{\theta} = \vec{\theta}_m$ - вектор неизвестных параметров.

Известно, что если в качестве оценки параметра $\vec{\theta}$ выбирается величина $\vec{\theta}^*$, минимизирующая сумму S , то мерой неопределенности оценки служит совместная доверительная область, ограниченная поверхностью

$$S = S^* + \varepsilon, \quad (2)$$

причем для линейной функции η

$$\varepsilon = \hat{\sigma}_y^2 m F_{1-\alpha}(m, n-m), \quad (3)$$

где $S^* = S(\vec{\theta}^*)$, $\hat{\sigma}_y^2$ - оценка дисперсии наблюдений, $F_{1-\alpha}(m, n-m)$ - квантиль распределения Фишера при уровне значимости α и числах степеней свободы $f_1 = m$, $f_2 = n-m$ [1-3]. В случае нелинейной функции η контур доверительной области также может быть описан при помощи выражения (2), но при использовании (3) значение α становится приближенным [3]. В работе [1] показано, что если функция η "умеренно нелинейна", лучшее приближение достигается при выборе

$$\varepsilon = \left[1 + \frac{n(m+2)}{(n-m)m} N_\theta \right] \hat{\sigma}_y^2 m F_{1-\alpha}(m, n-m), \quad (4)$$

где N_θ - мера нелинейности модели, $m \geq 2$, а дисперсия ошибок оценивается как $\hat{\sigma}_y^2 = S^*/(n-m)$. Там же указаны способы оценки N_θ .

После того, как параметр $\bar{\theta}^*$ найден, главной задачей остается представление информации о доверительной области. Графический способ благодаря своей наглядности, видимо, является одним из лучших, но его возможности ограничиваются случаями, когда $m \leq 2$ [4]. Для задач большей размерности предлагалось фиксировать часть параметров точке $\bar{\theta}^*$ [5], но очевидно, что при сильной взаимосвязи между параметрами результирующие сечения не дают сведений о протяженности доверительной области в целом.

В методах, основанных на квадратичной аппроксимации величины S в окрестности $\bar{\theta}^*$, либо на линеаризации модели $\eta(\bar{\theta}, \bar{x})$, когда

$$S \approx S^* + \frac{1}{2} \delta\bar{\theta}^T H^* \delta\bar{\theta} \quad \text{или} \quad S \approx S^* + \delta\bar{\theta}^T X^{*T} X^* \delta\bar{\theta} \quad (5)$$

($\delta\bar{\theta} = \bar{\theta} - \bar{\theta}^*$; $H = H_{mm}$ и $X = X_{nm}$ соответственно матрицы из элементов $\partial^2 S / \partial \theta_j \partial \theta_k$ и $\partial \eta(\bar{\theta}, \bar{x}) / \partial \theta_j |_{\bar{x}=\bar{x}_i}$), часто вовсе не используется понятие о совместной доверительной области [6 – 8]. Здесь, как в аппарате линейной регрессии, мерой неопределенности и взаимосвязи параметров берут матрицу

$$V = 2\hat{\sigma}_y^2 (H^*)^{-1} \quad \text{либо} \quad V = \hat{\sigma}_y^2 (X^{*T} X^*)^{-1}, \quad (6)$$

а также рассматривают индивидуальные доверительные интервалы

$$\theta_j^* - \Delta_j \leq \theta_j \leq \theta_j^* + \Delta_j, \quad \Delta_j = t_{1-\alpha/2}(n-m) \cdot V_{jj}^{1/2}, \quad (j = 1, \dots, m), \quad (7)$$

где $t_{1-\alpha/2}(n-m)$ - квантиль распределения Стьюдента при уровне значимости α и $n-m$ степенях свободы. Как недостаток такого способа отмечалось, что в прямоугольную область пространства $\bar{\theta}$, ограниченную неравенствами (7), попадают точки, не принадлежащие совместной доверительной области, а с другой стороны, периферийные участки доверительного эллипсоида

$$\frac{1}{2} \delta\bar{\theta}^T H^* \delta\bar{\theta} = \varepsilon \quad \text{или} \quad \delta\bar{\theta}^T X^{*T} X^* \delta\bar{\theta} = \varepsilon \quad (8)$$

оказываются за пределами индивидуальных доверительных интервалов [3, 9].

В этом отношении более полные сведения о локализации приближенной доверительной области дает совокупность *совместных* доверительных интервалов [10], образуемых системой $2m$ ортогональных гиперплоскостей, касательных к эллипсоиду (8)

$$\theta_j = \theta_j^* \pm [\hat{\sigma}_y^2 m F_{1-\alpha}(m, n-m) \cdot V_{jj}]^{1/2}, \quad (j = 1, \dots, m). \quad (9)$$

Считается [10], что выделяемая таким образом область уже полностью включает в себя доверительный эллипсоид, т.е. неизвестный вектор содержится в ней с вероятностью, не меньшей, чем $1-\alpha$. Разумеется, последнее справедливо лишь в той мере, в какой допустима эллиптическая аппроксимация области (2).

Известно, что в некоторых ситуациях доверительные контуры резко отличаются от эллиптических (см., например, [4]), поэтому представляло интерес распространить

концепцию совместных доверительных интервалов на случай, когда доверительная область задана точным уравнением (2). Вообще говоря, такая задача допускает лишь численное решение, и здесь предлагается один из его вариантов.

Обозначим через $\theta_j^* - a_j, \theta_j^* + b_j$ ($j=1, \dots, m$) соответственно минимальные и максимальные значения каждого из элементов вектора $\bar{\theta}$, которые могут быть достигнуты на границе области (2). Ни один из θ_j при этом не фиксируется в точке $\bar{\theta}^*$. Для линейной функции η при $\varepsilon = \hat{\sigma}_y^2$ величины $a_j = b_j$ имеют ясный статистический смысл – они являются *стандартными отклонениями* МНК-оценок параметров [7]. В общем же случае их можно условно назвать *экстремальными отклонениями* величины $\bar{\theta}^*$ при уровне значимости α и считать, что с вероятностью, равной по меньшей мере $1 - \alpha$, оцениваемый вектор $\bar{\theta}$ находится внутри области, заданной неравенствами

$$\theta_j^* - a_j \leq \theta_j \leq \theta_j^* + b_j, \quad (j=1, \dots, m). \quad (10)$$

Следует, однако, помнить, что суждение о том, насколько точно известно значение α , будет определяться правильностью и обоснованностью выбора величины ε . Для рассмотрения предлагаемого алгоритма данный вопрос не является принципиальным.

Задача сводится к последовательному отысканию величин $\theta_j^* - a_j, \theta_j^* + b_j$, т.е. минимумов и максимумов каждого из элементов вектора $\bar{\theta}$ при нелинейном ограничении, наложенном на параметры в виде равенства (2): найти

$$\min, \max \{ \theta_j | \bar{\theta} \in R \}, \quad (j=1, \dots, m), \quad R: S(\bar{\theta}) = S^* + \varepsilon. \quad (11)$$

Такая постановка задачи имеет ряд преимуществ. Появляется возможность применить в одной машинной программе единый алгоритм минимизации для двух целей – отыскания оценок $\bar{\theta}^*$, а затем – их экстремальных отклонений. Это особенно ценно при расчетах на малых ЭВМ, когда одним из требований, предъявляемых к алгоритму, является его компактность. Можно выбирать в принципе любые методы минимизации, в том числе и те, которые не требуют вычисления частных производных.

Для нахождения экстремальных отклонений предлагается следующий вариант метода штрафных функций, при котором решение задачи (11) сводится к последовательности процедур минимизации без ограничений. В качестве целевой функции выбирается переменная θ_j при поиске $\theta_j^* - a_j$ или $-\theta_j$ при поиске $\theta_j^* + b_j$, а мерой отклонения от условия (2) служит штраф $t(\bar{\theta}) = (S - S^* - \varepsilon)^2$. Для каждого значения $j = 1, \dots, m$ последовательно ищутся минимальные значения штрафных функций

$$\varphi_{jk} = \pm \theta_j + \omega_k \cdot t(\bar{\theta}), \quad k=1, 2, \dots, \quad (12)$$

(k – номер приближения при фиксированном значении j), где величина ω_k , представляющая собой вес штрафа, выбирается так, чтобы по мере приближения $\bar{\theta}$ к ε -границе требования к выполнению условия (2) возрастали. Практически оказался удобным простейший алгоритм изменения веса: $\omega_k = 10^{k-1}$, так что вначале минимизируется φ_{j1} при $\omega_1 = 1$ из точки $\bar{\theta}^*$, а затем уже из найденной точки – функция φ_{j2} при $\omega_2 = 10$, и так до тех пор, пока не будет удовлетворено условие $t(\bar{\theta}) < \gamma \cdot |\theta_j|$, $\gamma \sim 10^{-3} \div 10^{-4}$.

При поиске экстремальных отклонений малозначимых параметров функция $t(\vec{\theta})$ может представлять собой недостаточно высокий потенциальный барьер, и φ_{jk} может не иметь конечного экстремума при малых ω_k . В машинной программе предусмотрен выход из процедуры минимизации φ_{jk} при выполнении условия $\varphi_{jk} < -M$, где M – число, близкое к предельно допустимому для используемой ЭВМ. Минимизация предпринимается вновь из точки $\vec{\theta}^*$ при большем значении веса. Если при $\omega_k \geq M$ экстремум все еще не найден, параметр θ_j считается незначимым. Предполагается, конечно, что задача правильно масштабирована.

Ниже дается более конкретное описание алгоритма:

1. Ввести исходные данные для расчета. Пуск программы.
2. Найти $\vec{\theta}^*$, S^* и $\hat{\sigma}_y^2$ путем минимизации $S(\vec{\theta})$; вывести результат.
3. Положить $j = 1, k = 1, \omega_k = 1, \vec{\theta} = \vec{\theta}^*$.
4. Минимизировать φ_{jk} ; если $\varphi_{jk} < -M$, то положить $\vec{\theta} = \vec{\theta}^*$ и перейти к п. 6, иначе – к следующему пункту.
5. Если $t(\vec{\theta}) < \gamma \cdot |\theta_j|$, то перейти к п. 7, иначе – к следующему.
6. Положить $k = k + 1, \omega_k = 10 \omega_{k-1}$; если $\omega_k \geq M$, то вывести признак отсутствия границы и перейти к п. 8, иначе вернуться к п. 4.
7. Вывести значение $\min\{\varphi_{jk}\}$.
8. Если $j < m$, увеличить j на 1, положить $\vec{\theta} = \vec{\theta}^*$ и вернуться к п. 4, иначе – перейти к следующему.
9. Поменять знак целевой функции, повторить п.п. 3-8 и закончить вычисления.

Данный алгоритм был запрограммирован на языке БЭЙСИК. В основу процедуры, минимизирующей функции $S(\vec{\theta})$ и $\varphi_{jk}(\vec{\theta})$, положен метод деформируемого многогранника (симплексный метод по Нелдеру и Миду), описанный в работе [11].

Для примера рассмотрим результаты вычисления МНК-оценок и экстремальных отклонений параметров модели кинетики двустадийной химической реакции типа $A \rightarrow B \rightarrow C$,

$$\eta(\vec{\theta}, \vec{x}) = \frac{\theta_1}{\theta_1 - \theta_2} (e^{-\theta_2 x} - e^{-\theta_1 x}) \quad (13)$$

на основании следующих наблюдений:

i	x_i	y_i
1	0.5	0.263
2	1.0	0.455
3	1.5	0.548

(заимствовано из [11], задача 3.44).

Расчет методом линеаризации модели по Гауссу [9] из начального приближения $\vec{\theta} = [1 \ 0]^T$ дал следующие значения оценок:

- параметров - $\vec{\theta}^* = [0.6630 \ 0.1546]^T$
- дисперсии ошибок наблюдений - $\hat{\sigma}_y^2 = S^*/(n-2) = 1.718 \cdot 10^{-4}$
- стандартных отклонений параметров - $\hat{\sigma}_{\theta_1} = 0.0404, \hat{\sigma}_{\theta_2} = 0.0570$.

Приближенные индивидуальные доверительные интервалы

$$0.14 \leq \theta_1 \leq 1.19, \quad -0.57 \leq \theta_2 \leq 0.88 \quad (14)$$

получены по формуле (7) при $\alpha = 0.05$.

Расчеты по описанной выше программе привели к результатам: $\vec{\theta}^* = [0.6628 \ 0.1537]^T$, $\hat{\sigma}_y^2 = 1.719 \cdot 10^{-4}$ при старте из точки $\vec{\theta} = [1 \ 0.5]^T$, для чего потребовалось 68 обращений к подпрограмме вычисления суммы квадратов. При $\varepsilon = \hat{\sigma}_y^2$, $\gamma = 10^{-4}$ получено: $a_1 = 0.0392$, $b_1 = 0.0411$, $a_2 = 0.0566$, $b_2 = 0.0567$. Можно отметить хорошее соответствие найденных оценок стандартным отклонениям $\vec{\sigma}_{\theta_j}$ для линеаризованной модели. При $\alpha = 0.05$, когда $\varepsilon = m \hat{\sigma}_y^2 \cdot F_{0.95}(2,1) = 0.069$, экстремальные отклонения составили:

$$a_1 = 0.533, \quad b_1 = 1.224, \quad a_2 = -1.565, \quad b_2 = 0.995.$$

Для их поиска потребовалось в общей сложности 2248 значений $S(\vec{\theta})$, причем заданная точность вычислений ($\gamma = 10^{-4}$) была достигнута при $\omega = 1000$. В качестве следующего приближения к экстремальным точкам 95%-ной доверительной области был вычислен эмпирический коэффициент \hat{N}_θ нелинейности функции (13) как оценка величины N_θ в (4). Расчеты выполнены по формулам [1]:

$$\hat{N}_\theta = m \hat{\sigma}_y^2 Q_\theta / D,$$

$$Q_\theta = \sum_{u=1}^L \sum_{i=1}^n \left[\eta_{ui} - \eta_i^* - \sum_{j=1}^m \frac{\partial \eta_i}{\partial \theta_j} (\theta_{uj} - \theta_j^*) \right]^2$$

$$D = \sum_{u=1}^L \left[\sum_{i=1}^n (\eta_{ui} - \eta_i^*)^2 \right],$$

где θ_u - совокупность точек пространства параметров, расположенных вблизи $\vec{\theta}^*$ ($u=1, \dots, L$). В соответствии с рекомендациями [1, стр. 54] выбрано значение $L = 2m = 4$ с расположением точек на концах главных осей приближенного 95%-ного доверительного эллипсоида. Найдено: $\hat{N}_\theta = 2.92 \cdot 10^{-4}$. Согласно [1], мера нелинейности значима при $\alpha = 0.05$, т.к. $\hat{N}_\theta > 0.01/F_{1-\alpha}(2,1) = 5 \cdot 10^{-5}$, однако поправочный коэффициент $1 + n(m+2)/[(n-m)m] \hat{N}_\theta = 1 + 6 \hat{N}_\theta \approx 1$. Итак, совместная 95%-ная доверительная область (2) заключена внутри прямоугольника

$$0.13 \leq \theta_1 \leq 1.87; \quad -1.41 \leq \theta_2 \leq 1.15. \quad (15)$$

Полученные оценки существенно отличаются от вычисленных традиционным способом индивидуальных доверительных интервалов и дают более точную информацию о расположении доверительной области, чем совокупность совместных интервалов, рассчитанных по формуле (9): $-0.14 \leq \theta_1 \leq 1.47$; $-0.98 \leq \theta_2 \leq 1.30$.

Это наглядно следует из рисунка, где сопоставлены совместная доверительная область, ее эллиптическая аппроксимация по формуле (8), а также прямоугольные области (14) и (15). Ломаная линия показывает траекторию движения "наилучшей" точки деформируемого многогранника при поиске правой экстремальной границы для параметра θ_1 .

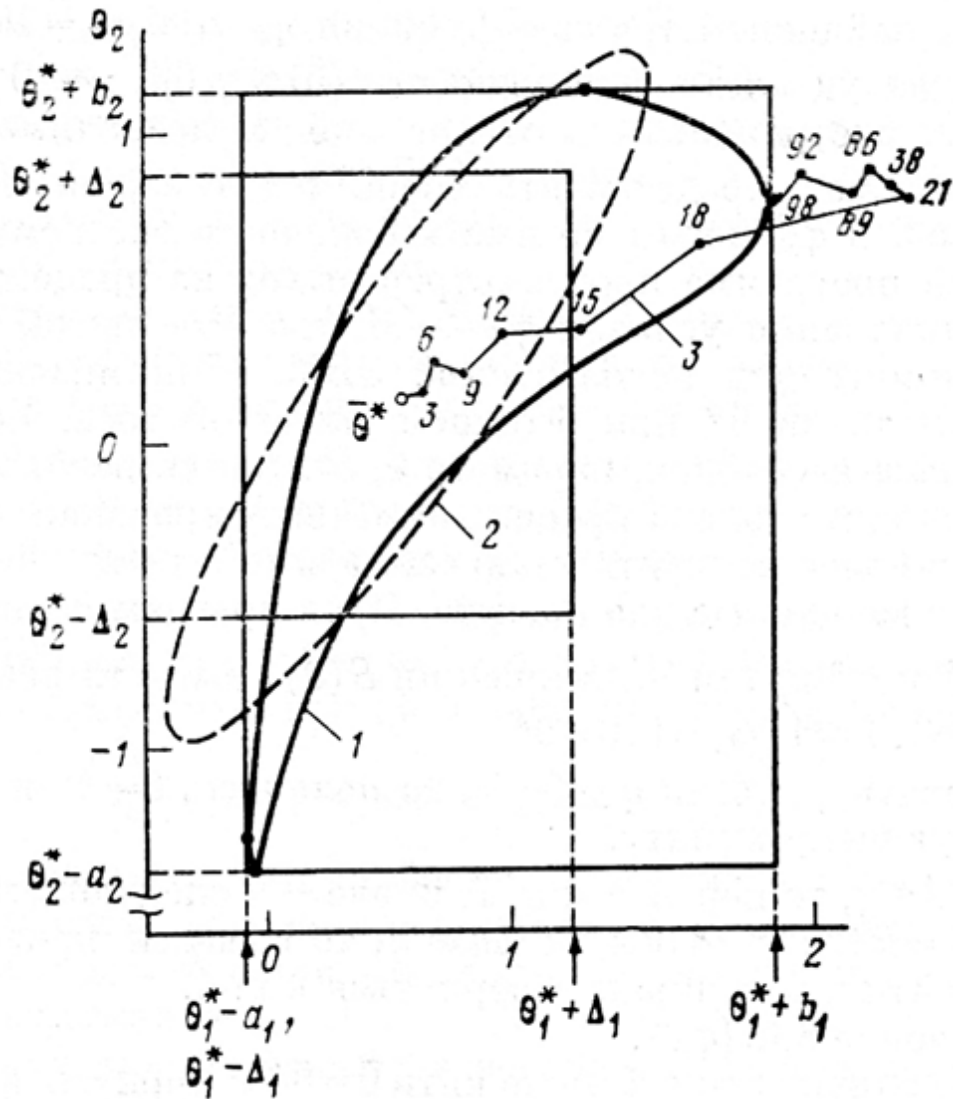
Как недостаток предложенного алгоритма следует отметить его относительно невысокое быстродействие по сравнению, например, с классическим методом Гаусса, что вообще типично для методов, не использующих производные. В данном случае поиск экстремальных границ еще осложнен "овражным" характером штрафных функций, особенно заметным при больших значениях ω . Тем не менее, выбранный способ минимизации по Нелдеру-Миуду оказался вполне надежным, видимо, потому, что деформируемый многогранник обладает способностью вытягиваться вдоль оврага, приспособляясь тем самым к топологии целевой функции.

ЛИТЕРАТУРА

1. *Beale E. M. L.* // J. Roy. Soc. 1960. В. 22. Р. 41.
2. *Бард Я.* Нелинейное оценивание параметров. М.: Статистика, 1979. 349 с.
3. *Дрейпер Н., Смит Г.* Прикладной регрессионный анализ. М.: Статистика, 1973.
4. *Vox G. E. P., Hunter W. G.* // Technometrics. 1962. V. 4. P. 301.
5. *Hoare D. G.* // Anal. Biochem. 1972. V. 46. P. 604.
6. *Spendley W.* // Optimization / Ed. R. Fletcher. L.-N.Y.: Acad. Press, 1969. P. 259-270.
7. *Sillen L. S.* // Acta Chem. Scand. 1962. V. 16. P. 159.
8. *Адельсон-Вельский Г. М., Бекетова Н. В., Чернышева И. Б.* // Завод. лаб. 1971. № 1. С. 68.
9. *Химмельблау Д.* Анализ процессов статистическими методами. М.: Мир, 1973. 957 с.
10. *Stone H.* // J. Roy. Statis. Soc. 1960. В-22. Р. 41.
11. *Химмельблау Д.* Прикладное нелинейное программирование. М.: Мир, 1975. 534 с.

Всесоюзный научно-исследовательский
Институт антибиотиков
Москва

Поступила в редакцию
23. 03. 1988



Совместная доверительная область для оценок параметров модели (11) при $\alpha \approx 0.05$ (1), ее эллиптическая аппроксимация (2) и траектория движения "наилучшей" точки деформируемого многогранника при поиске минимума штрафной функции $\varphi_1 = -\theta_1 + 10 \cdot t(\vec{\theta})$ (3) (цифрами указано, сколько раз вычислялось значение $S(\vec{\theta})$).