МЕТОД НАИМЕНЬШИХ КВАДРАТОВ ПРИ ИСПОЛЬЗОВАНИИ НЕЛИНЕЙНОЙ ОТНОСИТЕЛЬНО ПАРАМЕТРОВ МОДЕЛИ

А. З. Волынец, Б. С. Дарховский, Б. А. Кадер

(Москва)

Обсуждается применение метода наименьших квадратов к нелинейным относительно параметров моделям, для которых существует линеаризующее преобразование Ψ (такая задача, например, возникает при экспериментальном определении параметров степенных критериальных уравнений). Доказывается, что значения параметров, определенные после преобразования, отличаются от искомых значений. На примере логарифмического преобразования показан способ получения формул, оценивающих это отличие.

Предлагается итерационный способ, сохраняющий преимущества расчетов по линейной модели, но ликвидирующий указанное отличие и приводятся достаточные условия его сходимости. Изложенный приближенный метод демонстрируется на примере обработки эмпирического материала по массоотдаче от стенки трубы в турбулентном потоке жидкости при больших числах Шмидта.

Рассмотрим случайную функцию переменной x вида $Y(\mathrm{x}) = f(\mathrm{x}) + \xi(\mathrm{x})$ (без ограничения общности можно предположить, что она определена для $\mathrm{a} \leqslant \mathrm{x} \leqslant \mathrm{b}$ и равна нулю вне этого интервала), где $f(\mathrm{x}) = \langle Y(\mathrm{x})\rangle$, а $\xi(\mathrm{x})$ — стационарная случайная функция такая, что $\langle \xi(\mathrm{x})\rangle = 0$. Обычно задача оценки кривой регрессии $f(\mathrm{x})$ по полученной реализации $y(\mathrm{x})$, $\mathrm{a} \leqslant \mathrm{x} \leqslant \mathrm{b}$ решается с помощью метода наименьших квадратов, т. е. минимизацией функционала

$$\int_{\mathrm{a}}^{\mathrm{b}} [y(\mathrm{x}) - \varphi(\mathrm{x}, \theta)]^2 d\mathrm{x} \tag{1}$$

где $\varphi(\mathrm{x}, \theta)$ — некоторый класс функций, выбранный для аппроксимации линии регрессии $f(\mathrm{x})$, а θ — обозначение набора неизвестных параметров, полностью определяющих функцию $\varphi(\mathrm{x}, \theta)$. Как правило, при этом также предполагается, что $\varphi(\mathrm{x}, \theta)$ линейно зависит от параметров, т. е. $\varphi(\mathrm{x}, \theta) = \theta_1\varphi_1(\mathrm{x}) + \ldots + \theta_N\varphi_N(\mathrm{x})$. В таком случае минимизация функционала (1) сводится к решению простой линейной системы уравнений (см., например, [1]).

Между тем на практике часто возникает такая ситуация, когда известен истинный вид функции $f(\mathrm{x}) = f(\mathrm{x}, \theta)$, но оцениваемые параметры θ входят в нее нелинейным образом (это имеет место, например, при аппроксимации экспериментальных данных по тепло- и массопередаче и передаче количества движения при помощи критериальных уравнений вида $f(\mathrm{x}, \theta) = kx_1^{l_1} \ldots x_n^{l_n}$, $\theta = (k, l_1, \ldots, l_n)$. Как правило, в таких случаях существует преобразование $\Psi(f)$, превращающее нелинейную относительно θ модель в линейную, т. е. такое, что

$$\Psi[f(\mathrm{x}, \theta)] = \theta_1 f_1(\mathrm{x}) + \ldots + \theta_n f_n(\mathrm{x}) \tag{2}$$

Тем самым задача оценки параметров θ_i сводится к стандартной задаче метода наименьших квадратов. Обозначим значение θ, оцененное таким образом, через $\theta^{(1)}$ в отличие от оценки $\theta^{(2)}$, находимой из требования минимизации функционала (1) в котором вместо $\varphi(\mathrm{x}, \theta)$ подставляется $f(\mathrm{x}, \theta)$.

Отметим, что как оценку $\theta^{(1)}$, так и оценку $\theta^{(2)}$ можно рассматривать как «наилучшую»; при этом только во втором случае «качество» оценки определяется значением интеграла (1), а в первом — некоторой иной метрикой. Использование необычного критерия качества приводит к тому, что соответствующий метод отличается от классического метода наименьших квадратов в смысле [1] и, как будет показано в дальнейшем, значительно затрудняет сравнение параметров $\theta^{(1)}$, определенных по реализациям с различными пределами (a, b), так как $\theta^{(1)}$ оказывается существенно зависящим от интервала измерений. Поэтому в дальнейшем «наилучшей» или даже «правильной» будем называть оценку $\theta^{(2)}$.

Легко доказать, что если Ψ не тождественное преобразование, то $\theta^{(2)} \neq \theta^{(1)}$. Действительно, предположим, что $\Psi(Y)$ имеет одностороннее преобразование Лапласа, т. е.

$$\Psi(Y) = \frac{1}{2\pi i} \int\limits_{\gamma - i\infty}^{\gamma + i\infty} \Phi(p)\, e^{pY}\, dp$$

Тогда

$$\langle \Psi(Y) \rangle = \frac{1}{2\pi i} \int\limits_{\gamma - i\infty}^{\gamma + i\infty} \Phi(p)\, e^{pf(\mathbf{x})} \langle e^{-p[-\xi(\mathbf{x})]} \rangle\, dp = \frac{1}{2\pi i} \int\limits_{\gamma - i\infty}^{\gamma + i\infty} \Phi(p)\, \Lambda(p)\, e^{pf(\mathbf{x})}\, dp$$

Здесь $\langle e^{-p[-\xi(\mathbf{x})]} \rangle = \Lambda(p)$ — есть двустороннее преобразование Лапласа для плотности вероятности — $\xi(\mathbf{x})$ (в предположении, что оно существует).

Таким образом, $\langle \Psi(Y) \rangle = G[f(\mathbf{x})]$, где $LG = \Phi(p)\, \Lambda(p)$ и по теореме о свертке

$$G(t) = \int\limits_{-\infty}^{t} \Psi(t-\tau)\, \lambda(\tau)\, d\tau = \int\limits_{0}^{\infty} \Psi(\tau)\, \lambda(t-\tau)\, d\tau \tag{3}$$

Здесь L — символ преобразования Лапласа, λ — одномерная плотность вероятности процесса — $\xi(\mathbf{x})$.

Для того чтобы выполнялось равенство $\theta^{(1)} = \theta^{(2)}$, функция $\Psi(Y)$, очевидно, должна удовлетворять соотношению

$$\Psi(t) = \int\limits_{0}^{\infty} \Psi(\tau)\, \lambda(t-\tau)\, d\tau \tag{4}$$

При практическом использовании метода наименьших квадратов результаты измерений, слишком сильно отличающиеся от кривой регрессии $f(\mathbf{x})$, обычно считаются ошибочными и исключаются из рассмотрения. Это обстоятельство позволяет рассматривать лишь распределения $\lambda(\tau)$, сосредоточенные на конечном отрезке $\tau \in (A, B)$. Без ограничения общности можно считать, что $Y(\mathbf{x}) > 0$ при любом $\mathbf{a} \leqslant \mathbf{x} \leqslant \mathbf{b}$, и формула (4) запишется в виде

$$\Psi(t) = \int\limits_{\delta}^{\gamma} \Psi(\tau)\, \lambda(t-\tau)\, d\tau \tag{5}$$

где δ и γ равны соответственно минимуму и максимуму

$$\{f(\mathbf{x}) \pm A,\ f(\mathbf{x}) \pm B\}, \qquad \mathbf{a} \leqslant \mathbf{x} \leqslant \mathbf{b}$$

Легко проверить, что тождественное преобразование $\Psi(t) = t$ будет решением интегрального уравнения (5), а в силу единственности решения этого уравнения (что легко следует из вывода формулы (4)) других решений нет. Отсюда следует, что тождественное преобразование и только оно обеспечивает равенство $\theta^{(1)} = \theta^{(2)}$.

Отметим, что $\lambda(t-\tau) \to \delta(t-\tau)$ при $\sigma \to 0$ и уравнение (4) переходит в тождество $\Psi(t) \equiv \Psi(t)$, т. е. ошибка в определении параметров корреляционного уравнения при любом преобразовании Ψ снижается с уменьшением среднеквадратичного отклонения σ экспериментальных данных от линии регрессии.

Формула (3) позволяет оценить расхождение оценок $\theta^{(1)}$ и $\theta^{(2)}$ и найти надлежащую поправку $(\theta^{(2)} - \theta^{(1)})$ к оценке $\theta^{(1)}$.

Рассмотрим, например, уравнение линии регрессии вида $f(x) = k\, x^l$ и предположим для определенности, что $l > 0$, так что $f(x)$ монотонно возрастает при изменении x от a до b. Кроме того, будем считать, что распределение экспериментальных точек относительно линии регрессии подчиняется «урезанному нормальному закону» с плотностью

$$\lambda(\tau) = \frac{1}{(\cdot - x)\sqrt{2\pi}\sigma} \exp\left(-\frac{\tau^2}{2\sigma^2}\right), \qquad \tau \in (A, B)$$

$$\lambda(\tau) = 0, \qquad \tau \notin (A, B)$$

где

$$1-\alpha=\frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma}\int_A^B \exp\left(-\frac{\tau^2}{2\sigma^2}\right)d\tau, \quad A=-q\sigma, \quad B=q\sigma, \quad 0<q<\infty$$

Тогда, в силу предыдущего, имеем

$$G(t)=\frac{1}{(1-\alpha)\sqrt{2\pi}\sigma}\int_{-q\sigma}^{q\sigma} \ln(t-\tau)\exp\left(-\frac{\tau^2}{2\sigma^2}\right)d\tau$$

или, с учетом того, что по условию $t>\tau$ получим (см., например, [2])

$$G(t)=\ln t-\frac{1}{(1-\alpha)\sqrt{2\pi}}\sum_{k=1}^{\infty}\frac{\sigma^{2k}}{2k}\int_{-q}^{q} u^{2k}e^{-{}^1/_2u^2}du=\ln t-\Delta(\alpha,\sigma)$$

$$\Delta(\alpha,\sigma)\approx\frac{1}{\sqrt{2\pi}}\sum_{k=1}^{\infty}\frac{\sigma^{2k}}{2k}\frac{2^{{}^1/_2(2k+1)}}{t^{2k}}\Gamma\left(\frac{2k+1}{2}\right) \tag{6}$$

где расходящийся ряд (6) следует понимать в асимптотическом смысле.

Ограничиваясь первым членом ряда (6) и оценивая $k^{(2)}$, $l^{(2)}$ из условия минимальности функционала

$$\int_a^b [\ln(kx^l)^{(1)}-\Delta-\ln(kx^l)^{(2)}]^2dx$$

получим, что при $l^{(1)}\neq {}^1/_2$

$$\ln k^{(2)}-\ln k^{(1)}=\pm 2\sqrt{\frac{2}{\pi}}\left\{\frac{\sigma^2}{k^2}\frac{1}{1-2l}\frac{1}{C^{2l}}\left[\frac{1}{2}+\frac{l(\ln C-1)}{1-2l}\right]\right\}^{(1)}$$

$$l^{(2)}-l^{(1)}=\mp 2\sqrt{\frac{2}{\pi}}\left[\frac{\sigma^2}{k^2}\frac{l}{(1-2l)^2}\frac{1}{C^{2l}}\right]^{(1)} \tag{7}$$

Здесь $\ln C={}^1/_2(\ln a+\ln b)$ — среднелогарифмический интервал измерения.

Из формул (7) (которые носят оценочный характер), видно, что поправки зависят не только от меры рассеяния экспериментальных данных, но и от интервала измерений. Это значительно затрудняет или совсем исключает сравнение экспериментально определенных параметров, оценивавшихся по линеаризованной нелинейной модели и относившихся к разным интервалам измерения.

Можно, однако, предложить и простой итерационный способ определения $\theta^{(2)}$, сохраняющий преимущества расчетов по линейной модели. Этот способ заключается в том, что на n-м шаге ищется θ_n, обращающее в минимум функционал

$$\int_a^b \beta(x,\theta_{n-1})\{\Psi[y(x)]-\Psi[f(x,\theta_n)]\}^2dx \tag{8}$$

где

$$\beta(x,\theta_{n-1})=\left\{\frac{y(x)-f(x,\theta_{n-1})}{\Psi[y(x)]-\Psi[f(x,\theta_{n-1})]}\right\}^2$$

Можно показать, что этот итерационный процесс сходится, если функция $\Psi'[f(x,\theta)]$ ограничена и отлична от нуля при $a\leqslant x\leqslant b$ и в качестве начального приближения выбрано значение θ_0, при котором $f(x,\theta_0)$ достаточно хорошо аппроксимирует реализацию (например, за θ_0 можно принять $\theta^{(1)}$).

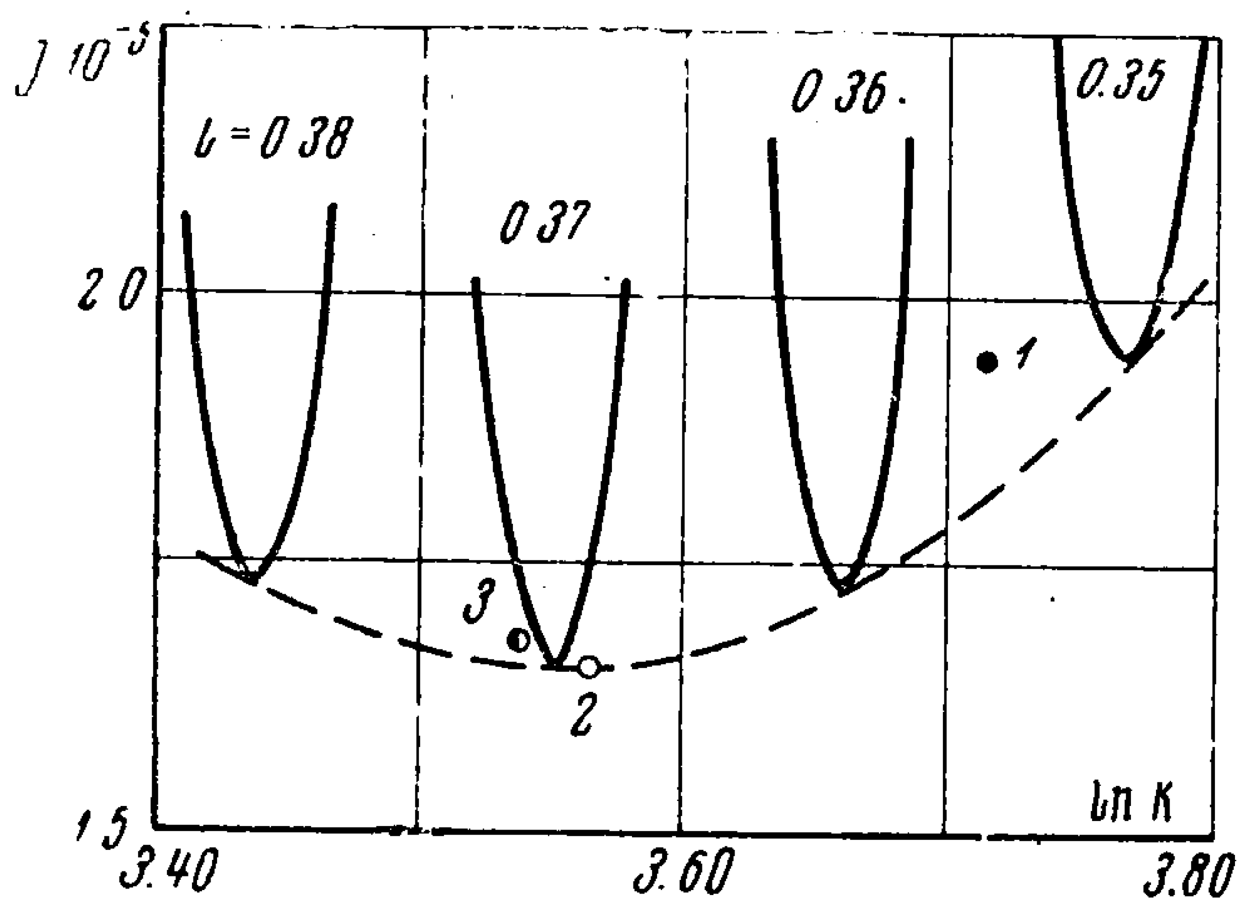
Сходимость предложенного итерационного процесса значительно убыстряется, если в первом приближении θ_0 определить графически, либо положить

$$\beta(x, \theta) = \{\Psi'[y(x)]\}^{-2} \tag{9}$$

Для иллюстрации полученных результатов приведем некоторые расчеты, выполненные по экспериментальным данным, приведенным в работе [3]. Весьма широкий диапазон изменения аргументов (число Шмидта N_{Sc} находится в пределах от 430 до 100 000) и малый разброс экспериментальных данных (снятых при фиксированном числе Рейнольдса $N_{\mathrm{Re}} = 10^4$) относительно аппроксимирующей функции $N_{\mathrm{Nu}} = kN_{\mathrm{Sc}}{}^l$ (N_{Nu} — число Нуссельта) обуславливает объективную проверку предложенных методов.

Определим $k^{(2)}$ и $l^{(2)}$, отвечающие минимуму функционала (1), который в рассматриваемом случае имеет вид

$$J = \sum_{i=1}^{28} (N_{\mathrm{Nu}_i} - kN_{\mathrm{Sc}_i}^l)^2$$



Фиг. 1

Для этого построим и найдем минимум огибающей сетки парабол, каждая из которых вычислена при фиксированном значении l и меняющихся k (фигура). Точка *1* на графике отвечает значениям параметров $k = 40.3$, $l = 0.355$, рекомендованным в работе [3] и определенным по (8) с $\beta \equiv 1$, т. е. обычным методом наименьших квадратов, примененным к $\Psi(f)$. Если принять эти значения за исходные и сделать второе приближение, то получим значения $k = 35.4$, $l = 0.369$ (точка *2*) с большей степенью точности отвечающие искомым значениям. Интересно отметить, что уже первое приближение с $\beta_i = [N_{\mathrm{Nu}_i}]^2$ (в соответствии с (9)) дает весьма хороший результат: $k = 34.4$, $l = 0.372$ (точка *3* на графике). Столь же хорошие результаты дает применение формул (7) ($k = 35.8$, $l = 0.376$), что иллюстрирует пригодность такого рода формул для оценки возможных искажений определяемых параметров из-за нелинейности линеаризующих преобразований.

Поступила 28 V 1968

ЛИТЕРАТУРА

1. Крамер Г. Математические методы статистики. М., Изд-во иностр. лит., 1948.
2. Рыжик И. М., Градштейн И. С. Таблицы интегралов, сумм, рядов и произведений. М.— Л. Гостехиздат, 1951.
3. Harriott P., Hamilton R. M. Solid — liquid mass transfer in turbulent pipe flow. Chem. Eng. Sci., 1965, vol. 20, No. 12.