LÜHITEATEID * КРАТКИЕ СООБЩЕНИЯ
SHORT COMMUNICATIONS

Изв. АН Эстонии. Геол. 1990, 39, № 3, 123—126

УДК 535.37+549.6

Галина ХЮТТ, Владимир ПОЛЯКОВ

РЕГРЕССИОННЫЙ АНАЛИЗ В ЭКСПОНЕНЦИАЛЬНОЙ МОДЕЛИ ФОРМИРОВАНИЯ ПАЛЕОДОЗЫ

Galina HÜTT, Vladimir POLJAKOV. REGRESSIOONANALÜÜS PALEODOOSI FORMEERUMISE EKSPONENTSIAALMUDELIS

Galina HÜTT and Vladimir POLYAKOV. A REGRESSION ANALYSIS IN THE PALAEODOSE FORMATION EXPONENTIAL MODEL

Проблема лабораторной реконструкции палеодозы при палеодозиметрических методах датирования является ключевой. Как правило, она решается с помощью метода «прибавочных доз» с последующей экстраполяцией полученной экспериментальной кривой до пересечения с осью абсцисс. Имея экспериментальный набор данных

$$\{D_A^{(i)},\ I_i\equiv I(D_A^{(i)});\ i=1,\ \ldots,\ n\},\tag{1.1}$$

где D_A — лабораторная прибавочная доза, $I(D_A)$ — интенсивность информативного ТЛ-пика или сигнала ЭПР-спектра, реконструкцию аккумулированной дозы D_N можно свести к статистическому регрессионному анализу. Для этой цели важно сделать оптимальный выбор регрессионной функциональной зависимости.

Решение кинетического уравнения в предположении, что фединг является термоактивационным процессом I порядка, приводит к следующему функциональному виду накопления «возрастной» информации (Hütt, Smirnov, 1982):

$$I(D_A)=I_0[1-e^{-\beta(D_N+D_A)}],\tag{1.2}$$

где I_0,β — параметры, характеризующие палеодозиметр. Таким образом, (1.1) и (1.2) представляют собой нелинейную трехпараметрическую регрессионную модель, а I_0, β, D_N — параметры, подлежащие оцениванию.

Регрессионный анализ удобнее проводить, переписав уравнение (1.2) в виде

$$y(x)=a+be^{cx},$$

где $x\equiv D_A$ и $y(x)\equiv I(D_A)$. Из условия $y(-D_N)=0$ получим значение аккумулированной дозы:

$$D_N=\frac{1}{c}\ln(-b/a).\tag{2}$$

Придадим модели окончательную форму:

$$y_i=f(\vec{\theta};\ x_i)+\varepsilon_i,\quad i=1,\ \ldots,\ n,$$

где y_i — зависимая переменная, $\vec{\theta}=\{a,\ b,\ c\}$ — вектор оцениваемых параметров, x_i — независимая переменная, ε — вектор случайных отклонений. Предположим также, что x_i строго детерминированы, а случайные отклонения имеют нормальное распределение и некоррелированы, т. е.

$$\operatorname{cov}(\vec{\varepsilon}) \sim N(\vec{0}, \sigma^2 \vec{I}).$$

Для оценки параметров a, b, c используем метод наименьших квадратов, когда оптимальный выбор этих параметров $\hat{\vec{\theta}} = \{\hat{a}, \hat{b}, \hat{c}\}$ определяется условием минимизации величины

$$S(a, b, c; x_i, y_i) = \sum_{i=1}^{n} (y_i - a - b e^{c x_i})^2. \tag{3}$$

Из литературы (Berger и др., 1987) известна линеаризованная процедура минимизации $S(\vec{\theta}; x_i, y_i)$ методом Ньютона—Гаусса. Однако она имеет ряд недостатков. В частности, в некоторых задачах приводит к медленной сходимости итерационных процессов и даже расходимости.

В настоящей работе предлагается прямой метод минимизации (3) как решение соответствующей системы нормальных уравнений:

$$\begin{aligned}
\left.\frac{\partial S}{\partial a}\right|_{\vec{\theta}=\hat{\vec{\theta}}} &= -\sum_{i=1}^{n} 2(y_i - \hat{a} - \hat{b} e^{\hat{c} x_i}) = 0,\\
\left.\frac{\partial S}{\partial b}\right|_{\vec{\theta}=\hat{\vec{\theta}}} &= -\sum_{i=1}^{n} 2(y_i - \hat{a} - \hat{b} e^{\hat{c} x_i}) e^{\hat{c} x_i} = 0,\\
\left.\frac{\partial S}{\partial c}\right|_{\vec{\theta}=\hat{\vec{\theta}}} &= -\sum_{i=1}^{n} 2\hat{b}(y_i - \hat{a} - \hat{b} e^{\hat{c} x_i}) x_i e^{\hat{c} x_i} = 0.
\end{aligned} \tag{4}$$

Из первых двух уравнений системы (4) имеем

$$\hat{b} = \frac{\sum_{i=1}^{n} y_i e^{\hat{c} x_i} - \frac{1}{n} \sum_{i=1}^{n} e^{\hat{c} x_i} \sum_{i=1}^{n} y_i}{\sum_{i=1}^{n} (e^{\hat{c} x_i})^2 - \frac{1}{n} \left(\sum_{i=1}^{n} e^{\hat{c} x_i}\right)^2}, \tag{5}$$

$$\hat{a} = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^{n} y_i - \frac{b}{n} \sum_{i=1}^{n} e^{\hat{c} x_i}.$$

Подставляя (5) в третье уравнение из (4), получим уравнение для $\hat{c}$:

$$F(\hat{a}, \hat{b}, \hat{c}; x_i, y_i) = 0. \tag{6}$$

Нелинейное уравнение (6) решаем численным способом с помощью итерационного метода Ньютона:

$$\hat{c}_k = \hat{c}_{k-1} - \frac{F(\hat{c}_{k-1})}{F'(\hat{c}_{k-1})}, \quad k = 1, 2, \ldots, \tag{7}$$

где $\hat{c}_0$ — начальное приближение,

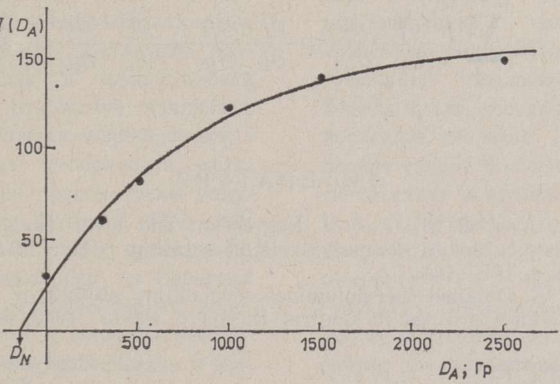
$$F'(c) \equiv \frac{\partial F}{\partial c} + \frac{\partial F}{\partial a} \frac{\partial a}{\partial c} + \frac{\partial F}{\partial b} \frac{\partial b}{\partial c}.$$

Вычислив с помощью (5) входящие в $F'(\widehat{c}_{k-1})$ производные, мы полностью определим вычислительную схему итерационной процедуры.

Прерывание итерационного процесса (7) проводится с помощью естественного условия близости последовательных приближений для $\widehat{c}$:

$$|\widehat{c}_{k^*} - \widehat{c}_{k^*-1}| \leqslant \varepsilon.$$

Предложенная вычислительная схема реализована в виде BASIC-программы (рисунок).



Определение аккумулированной дозы D_N с помощью BASIC-программы. Сплошная линия — регрессионная зависимость, точки — экспериментальные данные.

Проблема построения доверительных областей для случая нелинейных регрессионных моделей чрезвычайно сложна. Мы можем определить доверительную область с помощью выражения

$$S(\vec{\theta}) = S(\hat{\vec{\theta}})\left[1 + \frac{p}{n-p} F(p,\ n-p,\ 1-\alpha)\right], \tag{8}$$

где n — размерность экспериментальной выборки, p — размерность пространства параметров $\vec{\theta} = \{\theta_1, \ldots \theta_p\}$, $(1-\alpha)$ — доверительная вероятность, F — распределение Фишера.

Однако выражение (8) справедливо лишь для линейных моделей, в случае же нелинейной модели мы можем назвать такую область приблизительно $100\,(1-\alpha)\,\%$-ной доверительной областью для $\vec{\theta}$.

Для приближенной оценки погрешности в определении аккумулированной дозы поступим следующим образом. Обозначим через $s^2_{y_i}$ среднеквадратичное отклонение y_i:

$$s^2_{y_i} = \frac{1}{m_i - 1} \sum_{j=1}^{m_i} (y_{ij} - \bar{y}_i)^2, \quad i = 1, \ldots, n,$$

где $\bar{y}_i = \frac{1}{m_i} \sum_{j=1}^{m_i} y_{ij}$, y_{ij} — число повторных измерений величины y_i. Далее, разложим аккумулированную дозу (2) в ряд Тейлора по степеням $\delta y_i \equiv y_i - \bar{y}_i$, ограничиваясь линейными членами:

$$\delta_{D_N}=\frac{\partial f}{\partial a}\sum_{i=1}^{n}\frac{\partial a}{\partial y_i}\delta y_i+\frac{\partial f}{\partial b}\sum_{i=1}^{n}\frac{\partial b}{\partial y_i}\delta y_i+\frac{\partial f}{\partial c}\sum_{i=1}^{n}\frac{\partial c}{\partial y_i}\delta y_i, \qquad (9)$$

где $f=D_N=-\frac{1}{c}\ln(-b/a)$, $a=a(x_i, y_i)$, $b=b(x_i, y_i)$, $c=c(x_i, y_i)$; $\delta_{D_N}\equiv f(a, b, c)-f(\widehat{a}, \widehat{b}, \widehat{c})$ и производные от функции f берутся в точке

$$\vec{\widehat{\theta}}=\{\widehat{a}(x_i, \bar{y}_i), \widehat{b}(x_i, \bar{y}_i), \widehat{c}(x_i, \bar{y}_i)\}.$$

Используя (9), получим приближенную оценку среднеквадратичного отклонения для D_N:

$$s^2_{D_N}=\sum_{i=1}^{n}\left(\frac{\partial f}{\partial a}\cdot\frac{\partial a}{\partial y_i}+\frac{\partial f}{\partial b}\cdot\frac{\partial b}{\partial y_i}+\frac{\partial f}{\partial c}\cdot\frac{\partial c}{\partial y_i}\right)^2\cdot s^2_{y_i}.$$

ЛИТЕРАТУРА

Berger, G. W., Lockhart, R. A., Kuo, I. Regression and error analysis applied to the dose-response curves in thermoluminescence dating. // Nucl. Tracks Radiat. Meas., 1987, **13**, N 4, 177—184.

Hütt, G., Smirnov, A. Detailed thermoluminescence dating studies of samples from geological reference profiles in Central Russia // PACT, 1982, **6**, 505—513.

Институт геологии
Академии наук Эстонии

Поступила в редакцию
24/XI 1989