

РЕГРЕССИОННЫЙ АНАЛИЗ В ЭКСПОНЕНЦИАЛЬНОЙ МОДЕЛИ
ФОРМИРОВАНИЯ ПАЛЕОДОЗЫ

*Galina HUTT, Vladimir POLYAKOV. REGRESSIOONANALÜÜS PALEODOOSI FORMEERUMISE
EKSPONENTSIAALMUDELIS*

*Galina HUTT 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

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

где D_A — лабораторная прибавочная доза, $I(D_A)$ — интенсивность информативного ТЛ-пика или сигнала ЭПР-спектра, реконструкцию аккумулярованной 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):

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

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 аккумулярованной дозы:

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

Придадим модели окончательную форму:

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

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.

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

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

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

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:

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

Из первых двух уравнений системы (4) имеем

$$\begin{aligned} \hat{b} &= \frac{\sum_{i=1}^n y_i e^{\hat{c}x_i} - \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n e^{\hat{c}x_i} \sum_{i=1}^n y_i}{\sum_{i=1}^n (e^{\hat{c}x_i})^2 - \frac{1}{n} \left(\sum_{i=1}^n e^{\hat{c}x_i} \right)^2}, \\ \hat{a} &= \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n y_i - \frac{\hat{b}}{n} \sum_{i=1}^n e^{\hat{c}x_i}. \end{aligned} \quad (5)$$

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

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

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

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

где \hat{c}_0 — начальное приближение,

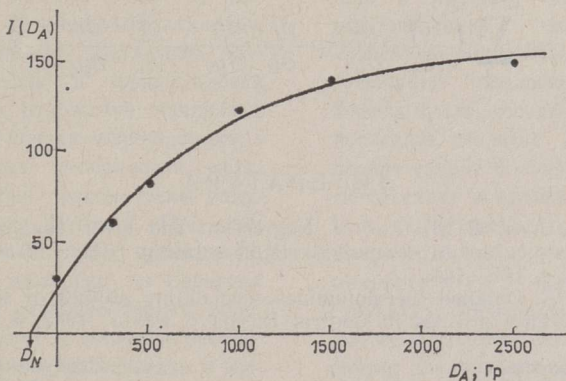
$$F'(c) \equiv \frac{\partial F}{\partial c} + \frac{\partial F}{\partial a} \frac{\partial a}{\partial c} + \frac{\partial F}{\partial b} \frac{\partial b}{\partial c}.$$

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

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

$$|\hat{c}_{h^*} - \hat{c}_{h^*-1}| \leq \varepsilon.$$

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



Определение аккумулятивной 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

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

где n — размерность экспериментальной выборки, p — размерность пространства параметров $\vec{\theta} = \{\theta_1, \dots, \theta_p\}$, $(1-\alpha)$ — 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 аккумулятивной дозы поступим следующим образом. Обозначим через $s_{y_i}^2$ среднеквадратичное отклонение y_i :

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

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 аккумулятивную дозу (2) в ряд Тейлора по степеням $\delta y_i \equiv y_i - \bar{y}_i$, ограничиваясь линейными членами:

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

где $f = D_N = \frac{1}{c} \ln(-b/a)$, $a = a(x_i, y_i)$, $b = b(x_i, y_i)$, $c = c(x_i, y_i)$;

$\delta_{D_N} \equiv f(a, b, c) - f(\hat{a}, \hat{b}, \hat{c})$ и производные от функции f берутся в точке

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

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

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

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 // *РАСТ*, 1982, 6, 505—513.

Институт геологии
Академии наук Эстонии

Поступила в редакцию
24/XI 1989