МОДИФИКАЦИЯ АЛГОРИТМА ЛЕВЕНБЕРГА-МАРКВАРДТА ДЛЯ ЗАДАЧ НЕЛИНЕЙНОЙ РЕГРЕССИИ С УЧЕТОМ ПОГРЕШНОСТЕЙ КАК В ЗАВИСИМЫХ, ТАК И В НЕЗАВИСИМЫХ ДАННЫХ

Г. И. Рудой

1 Введение

Для известной задачи нахождения оптимальных коэффициентов некоторой фиксированной регрессионной модели, представленной в виде формулы, по набору экспериментальных данных широко применяется алгоритм Левенберга-Марквардта [1]. Однако, данный алгоритм построен и статистически обоснован в предположении о нормальности распределения регрессионных остатков и точно измеренных независимых переменных — иными словами, учитываются и рассматриваются только ошибки измерения зависимой переменной. Более того, предполагается, что ошибки для всех точек принадлежат одному и тому же распределению с одними и теми же параметрами.

В ряде физических приложений это предположение не выполняется. Например, в задаче нахождения дисперсионной зависимости прозрачного полимера (то есть, зависимости коэффициента преломления n от длины волны λ) погрешности измерения различных физических параметров, вообще говоря, различны. Так, например, если для измерения длины волны λ используется дифракционная решетка, то постоянной является относительная погрешность определения длины волны $\frac{\sigma_{\lambda_i}}{\lambda_i} \approx \text{const}$, и, следовательно, погрешность определения длины волны зависит от самой длины волны.

Таким образом, возникает задача поиска оптимальных коэффициентов регрессионной формулы с учетом отличающихся погрешностей различных экспериментальных точек. Для некоторых частных случаев эта задача уже была решена: например, в работе [**?**] вводится предположение, что зависимые переменные y_i измеряются неточно, и каждая переменная y_i имеет свою собственную погрешность измерения σ_{y_i}. Затем в работе показывается, что обычный функционал суммы квадратов регрессионных остатков, где каждый остаток нормирован на соответствующую величину $\sigma^2_{y_i}$, корректен и статистически состоятелен.

В настоящей работе вводятся дополнительные предположения о том, что независимые переменные также измеряются неточно, и каждая переменная имеет свою собственную погрешность измерения. Предлагается функционал качества и модифцированный алгоритм Левенберга-Марквардта, позволяющий найти оптимальные параметры согласно этому функционалу качества. Доказывается сходимость модифицированного алгоритма и приводятся результаты на экспериментальных данных по измерению насыщения лазерного излучателя.

2 Постановка задачи

Дана обучающая выборка $D = \{\mathbf{x}_i, y_i\} | i \in \{1, \dots, \ell\}, x_i \in R^m$. Для каждой зависимой переменной переменной y_i известно стандартное отклонение ошибки ее измерения σ_{y_i}, а для соответствующего вектора независимых переменных $\mathbf{x}_i$ аналогично известны стандартные отклонения его компонент $\sigma_{x_{ij}} | j \in \{1, \dots, m\}$. Пусть, кроме того, дана некоторая параметрическая регрессионная модель $y = f(\mathbf{x}, \boldsymbol{\omega})$.

Для удобства обозначим вектор, составленный из ошибок измерений зависимых переменных σ_{y_i} как $\boldsymbol{\sigma}_y$:

$$\boldsymbol{\sigma}_y = \{\sigma_{y_1}, \ldots, \sigma_{y_\ell}\}.$$

Аналогично обозначим матрицу, составленную из ошибок измерений компонент независимых переменных $\sigma_{x_{ij}}$ как Σ_x:

$$\Sigma_x = \|\sigma_{x_{ij}}\| | i \in \{1, \ldots, \ell\}, j \in \{1, \ldots, m\}.$$

Требуется построить функционал ошибки $S(\boldsymbol{\omega})$ вектора параметров $\boldsymbol{\omega}$ модели f, учитывающий ошибки измерений σ_{y_i} и $\sigma_{x_{ij}}$:

$$S(\boldsymbol{\omega}) = S(\boldsymbol{\omega}, \boldsymbol{\sigma}_y, \Sigma_x), \tag{1}$$

и, кроме того, найти вектор параметров ω, минимизирующий функционал S:

$$\hat{\boldsymbol{\omega}} = \arg\min_{\boldsymbol{\omega}} S(\boldsymbol{\omega}) \tag{2}$$

3 Модифицированный функционал качества

В качестве функционала ошибки S предлагается использовать следующее выражение:

$$S(\boldsymbol{\omega}) = \sum_{i=1}^{\ell} \Big(\frac{y_i - f(\mathbf{x}_i, \boldsymbol{\omega})}{\sigma_{y_i} + \sum_{j=1}^{m} \frac{\partial f}{\partial x_j}(\mathbf{x}_i, \boldsymbol{\omega}) \sigma_{x_{ij}}} \Big)^2. \tag{3}$$

Список литературы

[1] Marquardt, D. W.: *An algorithm for least-squares estimation of non-linear parameters.* Journal of the Society of Industrial and Applied Mathematics, 11(2):431–441, 1963.