

土壤学中非线性数学模型 参数估计的探讨

汪枳生 刘多森

(中国科学院南京土壤研究所 南京 210008)

摘 要

本文介绍了非线性数学模型参数估计的一般方法,运用实例说明将非线性模型化为线性模型进行拟合所得参数未必是最佳参数,并对含有隐函数的非线性模型的参数估计提出了行之有效的处理方法。

关键词 非线性模型;拟合;参数估计;最优化

土壤科学中许多因素之间的关系可以用数学模型加以定量描述。随着研究的深入和各边缘学科的兴起,土壤科学中越来越多的数学模型得到了发展和应用^[1]。这些模型或多或少带有参数,模型的精确性和可靠性有时就取决于模型参数的准确与否。在模型给定后,借助实际系统的观测数据寻求模型系统的参数就是所谓的参数估计问题。参数估计就是在系统的某些特性(如线性度)已知,而动态方程的阶次和有关的系数值未知的情况下,通过调整参数的数值使模型和观测数据得到最好的拟合^[2]。参数估计是使模型系统和被其描述的实际系统实现近似等价(即相同的输入下,两个系统的输出近似相等)的措施之一。为了判定近似等价的程度,通常利用准则函数^[3]:

$$J = \sum_{i=1}^n (y_i - \hat{y}_i)^2 \quad (1)$$

式中, y_i , \hat{y}_i 分别为实际系统因变量的观测值和模型系统因变量的计算值, i 为数据的编号, n 为因变量观测数据的个数。同等条件下, J 值越小,效果越好。

由于测量误差等原因的存在,即使所用的模型完全正确,数据之间也不表现为精确的确定性关系而表现为一定程度的相关关系。故相关系统 R 常被用作判别拟合效果的依据^[4-8]。

$$R = \sqrt{1 - \frac{\sum (y_i - \hat{y}_i)^2}{\sum y_i^2 - \frac{(\sum y_i)^2}{n}}} \quad (2)$$

式(2)中 Σ 的上、下附标同式(1)。 R 和 J 是相联系的, J 越小, R 越趋近于 1。且有: $0 \leq R < 1$, 即 R 没有负值。

非线性模型的参数估计问题属于最优化理论和估计理论的范畴。参数估计的方法有最小二乘法、直接优化法和卡尔曼滤波法等。有一些已编成了计算机应用软件。下面讨论的是我

们在实际研究工作中^[4-8]所采用的方法和所遇到的问题。

1 将非线性模型化为线性模型后再用最小二乘法求解参数

一部分非线性模型(特别是具有线性参数的非线性模型)可以应用变量置换、取对数、级数展开等方法化为线性模型。在此,我们仅以表达土壤重金属 Pb 和土壤酶活性之间关系的非线性模型^[9]为例。

$$y = A \exp(Bx) \quad (3)$$

式中, x 为土壤中 Pb 的含量, 是自变量; y 为脲酶的活性, 是因变量; A 和 B 为参数。显然, 式(3)可以通过取对数化为:

$$\ln y = \ln A + Bx \quad (4)$$

如将 $\ln y$ 视为因变量, $\ln A$ 视为参数 a , 则式(4)可用直线方程来拟合, 其程序已固化在计算器里, 使用非常方便。求得 a, B 后, 再将 a 转换成 A 即可。

将非线性模型通过变量置换化为线性模型再求得参数值, 是经典的方法。但是我们应当注意: 因变量转换之后, 所求得的参数与用原模型所得结果已不尽一致。这是因为用转换后的因变量拟合的最小离差平方和并不是用原始因变量拟合的最小离差平方和。用非线性方程(3)(参数估计方法见第2节)与用其转换后的线性方程(4)分别拟合表1的数据, 结果列于表2。

表1 待处理数据^[9]

土壤 Pb 含量 x (mg/kg)	脲酶活性 y (NH ₃ -N mg/g)
34.2	0.24
34.1	0.82
34.3	0.71
29.7	1.50
34.0	0.73
31.9	1.45
29.8	1.67
25.2	4.60
29.7	2.30
25.3	4.58
25.4	3.40

表2 式(3)和式(4)的拟合结果比较

模型	A	B	准则函数 J	相关系数 R	相关系数 r	$\Sigma(\ln y_i - \ln \hat{y}_i)^2$
式(3)	608.566	-0.196456	1.45545	0.9691	-	1.46201
式(4)	1260.55	-0.223084	1.74601	0.9628	-0.9172	1.29495

注: 1. 式(4)的 R 值由直线拟合得到的 A, B 代入式(3)算得 \hat{y} , 再由式(2)求出。

2. r 为式(4)直线方程的因变量 $\ln y$ 与自变量 x 拟合得到的相关系数。

从表2看出: 使用 y 对于 x 的非线性方程(3)以直接寻优的方法得到的参数, 明显不同于用线性方程(4)所得参数, 它们可使 J 更小, 而 R 更大。这种差别在因变量的值跨度较大时更为突出。当然, 就 $\ln y_i$ 与 $\ln \hat{y}_i$ 之差的平方和而言, 虽然由线性方程(4)所得者更小些, 但我们真正关心的实际上不是转换后的因变量 $\ln y_i$ 与 $\ln \hat{y}_i$ 之差的平方和, 而是原始因变量 y_i 与 \hat{y}_i 之差的平方和即准则函数 J 。所以, 从非线性方程直接寻优可获得更好的参数值。

2 用直接寻优方法获取参数

有许多非线性模型可以用这样或那样的方法化为线性模型,再通过线性回归来获取参数。但也有些(具有非线性参数的)非线性模型不能或不适合化为线性模型。为此,许多最优化方法^[10]被用来直接寻找非线性模型的最优参数。这时即成为多维空间(多参数)求 J 的极小值问题,或求 R 的极大值问题。当 J 为严格的凸函数时^[10],唯一的极小值点为最小值点。求极小值问题可以通过乘以 -1 化为求极大值问题。当极值点不止一个时,就要从多个极值点中找出最小(大)值点。我们在研究工作中用单纯形法编制了参数寻优的程序。运行该程序,曾为具有2—4个参数的非线性模型(有的含有隐函数)^[5-8]找到了最佳拟合结果。其源程序流程图如图1。

对于因变量具有隐函数的模型,由于不能直接从自变量和参数的值求出因变量的值,以致用上述算法会遇到困难。于是,我们利用一维寻优的思想,根据自变量的值,求解因变量的逼近值。在计算 R 前,嵌入这样一段寻求带有隐函数的因变量的值的程序,就可以用一般的非线性模型参数的拟合程序来进行含有隐函数的模型的参数寻优了。

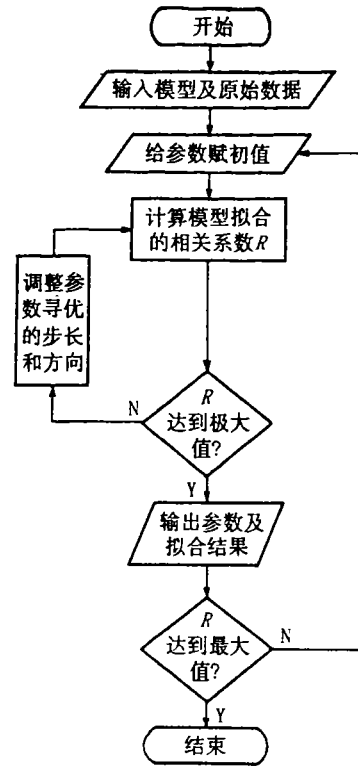


图1 单纯形算法参数寻优的程序流程

3 讨论

以上介绍的参数估计方法,不仅适用于土壤学领域,而且对于任何确定性的数学模型都行行之有效。在实际的参数寻优中,我们还应注意以下问题。

3.1 参数寻优时的初值赋予

在多个参数的寻优计算中,初值的赋予相当重要,初值选择不当时不会得到正确的结果。数学模型中的机理模型的参数是具有一定物理意义的。其中有些参数可以测定或者推算(而非拟合)出来。因此所选的初值必须符合该参数的物理意义。否则,仅以相关系数最大为唯一判别标准,有可能得到的只是一个经验公式(回归方程),而非机理模型。多参数条件下的 R 极大值不一定是唯一的,局部的极大值未必是整体上的最大值。欲求得 R 最大值,往往需要从诸参数的多组初值点出发,从所有结果中选取。有时候,最大值的获得还和操作者的经验有关。

3.2 参数寻优时的模型选择

一般来说,参数估计是在模型确定之后。但有时在估计参数时还要考虑采用什么样的模

型。因为同样的实验数据可以用不同的模型拟合,所得拟合结果也不尽相同。机理正确的模型可能由于过程噪声和观测噪声的干扰而拟合不佳。若是想得到一个经验公式,当然选取相关系数最大的模型(包括参数);若是建立一个机理模型,相关系数即使不是最大,但已达到较高的显著水平,仍应考虑接受。

3.3 数据的数量和分布的要求

关于参数估计的数据数量的要求,原则上有效数据越多越好。但是在一定的实验条件下,所得到的实验数据总是有限的,并且当数据的个数超过一定数量时,再增加数据对提高数据的统计意义并不大。一般地说,当数据的准确度较高时,数据可以少一些;反之,数据则要求多一些。此外,实验数据应在曲线的各段都有分布。在曲线的斜率变化较大的线段,数据点不宜稀疏,以便较好地反映曲线的特征。

参 考 文 献

- [1] Sparks, D.L., *Kinetics of Soil Chemical Processes*, Academic Press, San Diego, CA, 1989, 210 pp.
- [2] (美)夏天长著(熊光楞、李芳芸译),系统辨识,清华大学出版社,1983。
- [3] 侯克复编著,环境系统工程,北京理工大学出版社,1992。
- [4] 刘多森、曾志远编著,土壤和环境研究中的数学方法与建模,农业出版社,1987。
- [5] Zhang, S.M., Liu, D.S., Wang, Z.S. and Ma, X.F., *Ecological Modelling*, 1993, 70:115-125.
- [6] Liu, D.S., Li, Z.G., Wang, Z.S. and Pan, Y.H., *Ecological Modelling*, 1995, 82:193-198.
- [7] Wang, Z.S., Liu, D.S. and Zhang, S.M., *Pedosphere*, 1997, 7(1):9-14.
- [8] Wang, Z.S., Zhang, S.M. and Liu, D.S., *Pedosphere*, 1997, 7(2):119-126.
- [9] 刘树庆,土壤学报,1996,33(2):175-182。
- [10] 席少霖,赵凤治编著,最优化计算方法,上海科学技术出版社,1983。

☆☆

(上接第298页)

参 考 文 献

- [1] 华中农学院微生物教研室,农用抗生素5102的研究, I:产生菌的分类,微生物学报,1978,18(1):23-26。
- [2] 张声华、刘锦林、赵宏佐、王学文,农用抗生素5102的研究 II:5102-I号抗菌素第III组份的分离及鉴别,华中农学院学报,1981,(3):30-43。
- [3] 尹莘耘,抗菌素肥及其应用,北京:农业出版社,1966,1-20。
- [4] 周秀芬、周启,吸水链霉菌应城变种和庆丰链霉菌种间原生质体融合及其融合子的生物学特性,生物工程学报,1989,5(3):226-231。
- [5] 袁丽蓉,麦迪霉素产生菌——生长卡链霉菌原生质体融合的研究,抗生素,1983,8(6)。
- [6] 梁蓉芳、周启,农抗5102产生菌原生质体融合育种的研究 I.影响原生质体形成和再生的因素,华中农学院学报,1985,4(3):48-54。
- [7] 周东坡、平文祥,微生物原生质体融合,黑龙江科学技术出版社,1990,91-94。