解非线性回归问题的迭代法在水文学中的应用

陶 云 山

（建筑工程系）

摘 要

本文论述了迭代法的原理。导出了进行回归分析的基本公式。並列举若干算例，说明回归分析的迭代法，在非线性和线性回归“拟合”中的应用。

引 言

在现实世界中，由于错综复杂因素的互相影响，致使回归分析不仅有线性的，而且更多更普遍的是非线性的。

对于线性（包括可线性化的非线性）问题，我们均可用最小二乘法进行分析，但对那些不能线性化的非线性回归问题，其待定常数就不容易用最小二乘法来确定。下面我们介绍用迭代法来解决这种类型的问题。

一、解非线性回归问题的迭代法原理

设有一回归模型

$$Y_K = F(x_k、b_1、b_2、\cdots\cdots b_\alpha) \qquad (1)$$

其中$k = 1、2、\cdots\cdots m$；$b_1、b_2\cdots\cdots b_\alpha$是α个待定常数；$Y_K$和$X_K$是随机变量。

我们可以先给一组待定常数近似的初始值$b_1^{(0)}、b_2^{(0)}\cdots\cdots b_\alpha^{(0)}$，並记初始值与真值之差为$\varepsilon_1、\varepsilon_2、\cdots\cdots\varepsilon_\alpha$，于是得

$$b_\alpha = b_\alpha^{(0)} + \varepsilon_\alpha \qquad (2)$$

现将F函数在$b_\alpha^{(0)}$附近进行台劳级数展开，並略去ε_α值的非线性各项，这样就有

本文于1990年9月27日收到

$$F(X_K,\ b_1,\ b_2\cdots\cdots b_\alpha)=F_{K0}+\varepsilon_1\frac{\partial F_{K0}}{\partial b_1}+\varepsilon_2\frac{\partial F_{K0}}{\partial b_2}+\cdots\cdots+\varepsilon_\alpha\frac{\partial F_{K0}}{\partial b_\alpha} \quad (3)$$

式中

$$\frac{\partial F_{K0}}{\partial b_\alpha}=\frac{\partial F(X_K,b_1^{(0)},b_2^{(0)}\cdots\cdots b_\alpha^{(0)})}{\partial b_\alpha} \quad (4)$$

取初始值离差平方和

$$Q=\sum_{k=1}^{m}\left[Y_K-F(X_K,b_1^{(0)},b_2^{(0)}\cdots\cdots b_\alpha^{(0)})\right]^2$$

$$=\sum_{k=1}^{m}\left[Y_K-(F_{K0}+\varepsilon_1\frac{\partial F_{K0}}{\partial b_1}+\varepsilon_2\frac{\partial F_{K0}}{\partial b_2}+\cdots\cdots+\varepsilon_\alpha\frac{\partial F_{K0}}{\partial b_\alpha})\right]^2$$

令

$$\frac{\partial Q}{\partial b_i}=2\left[\varepsilon_1\sum_{k=1}^{m}\frac{\partial F_{K0}}{\partial b_1}\frac{\partial F_{K0}}{\partial b_i}+\cdots\cdots+\varepsilon_\alpha\sum_{k=1}^{m}\frac{\partial F_{K0}}{\partial b_\alpha}\frac{\partial F_{K0}}{\partial b_j}-\sum_{k=1}^{m}\frac{\partial F_{K0}}{\partial b_i}(Y_K-F_{K0})\right]=0$$

于是有

$$\varepsilon_1\sum_{k=1}^{m}\frac{\partial F_{K0}}{\partial b_1}\frac{\partial F_{K0}}{\partial b_i}+\cdots\cdots+\varepsilon_\alpha\sum_{k=1}^{m}\frac{\partial F_{K0}}{\partial b_\alpha}\frac{\partial F_{K0}}{\partial b_i}=\sum_{k=1}^{m}\frac{\partial F_{K0}}{\partial b_i}(Y_K-F_{K0}) \quad (5)$$

令:

$$a_{ij}=\sum_{k=1}^{m}\frac{\partial F_{K0}}{\partial b_i}\frac{\partial F_{K0}}{\partial b_j} \quad (6)$$

$$a_{i(1+\alpha)}=\sum_{k=1}^{m}\frac{\partial F_{K0}}{\partial b_i}(Y_K-F_{K0}) \quad (7)$$

$i,\ j=1,\ 2,\ \cdots\cdots\alpha;\qquad k=1,\ 2,\ \cdots\cdots m$。

这时可写出修正值ε_α的正规方程组:

$$\begin{cases} a_{11}\varepsilon_1+a_{12}\varepsilon_2+\cdots+a_{1\alpha}\varepsilon_\alpha=a_{1(1+\alpha)} \\ a_{21}\varepsilon_1+a_{22}\varepsilon_2+\cdots+a_{2\alpha}\varepsilon_\alpha=a_{2(1+\alpha)} \\ \cdots\cdots \qquad\qquad \cdots\cdots \\ a_{\alpha1}\varepsilon_1+a_{2\alpha}\varepsilon_2+\cdots+a_{\alpha\alpha}\varepsilon_\alpha=a_{\alpha(1+\alpha)} \end{cases} \quad (8)$$

只要根据已知资料和给定的初始值，利用（6）和（7）式算出a_{ij}和$a_{i(1+\alpha)}$的值，再代入（8）式，解正规方程组，就可求得修正值ε_1，ε_2，$\cdots\varepsilon_\alpha$的数值；用（2）式对初始值$b_1^{(0)}$，$b_2^{(0)}$，$\cdots\cdots b_\alpha^{(0)}$进行修正。当$|\varepsilon_\alpha|$值的大小还不满足精度要求时，重复上步工作，不断求出新的ε_1，$\varepsilon_2\cdots\cdots\varepsilon_\alpha$的值，再修正，直至$|\varepsilon_\alpha|$值符合精度要求为止。

二、若干算例

例1、某城镇雨量站，测得暴雨强度i与历时t的数值如表一1。经判定i与t的关系可用函数 $i=\frac{a}{(t+b)^N}$ 来表示，试确定其待定常数 a，b 及N的数值，并建立回归方程（要求 $|\varepsilon_i|<0.1$）。

表一1

历时 t（分）	5	7.5	10	15	25	35	40	45	50	55
i（毫米/小时）	70.1	61.5	54.7	41.4	33.5	25.5	22.7	20.4	19.8	18.4

解：对暴雨强度公式 $i=\frac{a}{(t+b)^N}$，根据迭代法原理，由（6）和（7）式，可导出 a_{ij} 及 $a_{i(1+4)}$ 的计算公式。

$$\left\{\begin{aligned}
a_{11}&=\sum_{k=1}^{m}\left[\frac{1}{(t_K+b)^N}\right]^2\\
a_{12}&=\sum_{k=1}^{m}\left[\frac{-a\ln(t_K+b)}{(t_K+b)^{2N}}\right]=a_{21}\\
a_{13}&=\sum_{k=1}^{m}\left[\frac{-aN}{(t_K+b)^{2N+1}}\right]=a_{31}\\
a_{22}&=\sum_{k=1}^{m}\left[\frac{-a\ln(t_K+b)}{(t_K+b)^N}\right]^2\\
a_{23}&=\sum_{k=1}^{m}\left[\frac{a^2N\ln(t_K+b)}{(t_K+b)^{2N+1}}\right]=a_{23}\\
a_{33}&=\sum_{k=1}^{m}\left[\frac{-aN}{(t_K+b)^{N+1}}\right]^2\\
a_{14}&=\sum_{k=1}^{m}\left[\frac{1}{(t_K+b)^N}\right]\left[i_K-\frac{a}{(t_K+b)^N}\right]\\
a_{24}&=\sum_{k=1}^{m}\left[\frac{-a\ln(t_K+b)}{(t_K+b)^N}\right]\left[i_K-\frac{a}{(t_K+b)^N}\right]\\
a_{34}&=\sum_{k=1}^{m}\left[\frac{-aN}{(t_K+b)^{N+1}}\right]\left[i_K-\frac{a}{(t_K+b)^N}\right]
\end{aligned}\right. \tag{9}$$

取初始值$a^{(0)}=731$，$b^{(0)}=8.9$，$N^{(0)}=0.88$，这时可连同已给的资料，分别代入（9）式，则有

$$a_{11}=0.033,\quad a_{12}=-73.198,\quad a_{13}=-1.127,\quad a_{14}=-0.608;$$
$$a_{21}=a_{12},\quad a_{22}=165230.155,\quad a_{23}=2366.297,\quad a_{24}=1372.973;$$
$$a_{31}=a_{13},\quad a_{32}=a_{23},\quad a_{33}=42.801,\quad a_{34}=19.622。$$

把上述各值代入（8）式，得

$$\begin{cases}0.033\varepsilon_1-73.198\varepsilon_2-1.127\varepsilon_3=-0.608\\ -73.198\varepsilon_1+165230.155\varepsilon_2+2366.297\varepsilon_3=1372.973\\ -1.127\varepsilon_1+2366.297\varepsilon_2+42.801\varepsilon_3=19.622\end{cases}$$

联立求解方程组得：$\varepsilon_1=1.007$，$\varepsilon_2=0.009$，$\varepsilon_3=0.004$，並代入（2）式，对待定常数的初始值进行修正。

$$a^{(1)}=a^{(0)}+\varepsilon_1=731+1.007=732.007$$
$$N^{(1)}=N^{(0)}+\varepsilon_2=0.88+0.009=0.889$$
$$b^{(1)}=b^{(0)}+\varepsilon_3=8.9+0.004=8.904$$

因为$|\varepsilon_\alpha|>0.1$，这时可把$a^{(1)}$，$b^{(1)}$及$N^{(1)}$的值和已给的资料分别再代入（9）式，于是又得到a_{ij}和$a_{i(1+\alpha)}$的值；再将其值代入（8）式，得到正规方程组，解方程组可得新的ε_α值；又可利用（2）式进行修正。若$|\varepsilon_\alpha|$的数值还不符合精度要求，则重复上述步骤。经过四次迭代得：$\varepsilon_1=0.045$，$\varepsilon_2=0.00$，$\varepsilon_3=0.001$，再用（2）式修正。

$$a^{(4)}=a^{(3)}+\varepsilon_1=732.406+0.045=732.451$$
$$N^{(4)}=N^{(3)}+\varepsilon_2=0.889+0.000=0.889$$
$$b^{(4)}=b^{(3)}+\varepsilon_3=8.905+0.001=8.906$$

这时$|\varepsilon_\alpha|<0.1$，已满足精度要求，不再往下算，因此取待定常数：$a=a^{(4)}=732.451$，$N=N^{(4)}=0.889$，$b=b^{(4)}=8.906$。

其回归方程为

$$i=\frac{732.451}{(t+8.906)^{0.889}}$$

例2、由某站平均下渗曲线上摘读资料见表－2，经分析判定下渗率V与时间t之间的关系可用$V=ae^{bt}+C$函数来拟合，求其待定常数a，b和c的值（精度要求$|\varepsilon_\alpha|<0.1$），並建立回归方程。

表一

时间 t（分）	200	300	400	500	600	700
下渗率V（毫米/小时）	8.5	4.3	3.1	2.7	2.5	2.4

解：对于带常数项的指数函数方程$V=ae^{bt}+c$。根据迭代法原理，由（6）和（7）式，可导出计算a_{ij}和$a_{i(1+\alpha)}$的公式。

$$
\left\{
\begin{aligned}
a_{11} &= \sum_{k=1}^{m}\left[e^{bt_k} \right]^2 \\
a_{12} &= \sum_{k=1}^{m}\left[a t_K e^{2bt_k} \right] = a_{21} \\
a_{13} &= \sum_{k=1}^{m}\left[e^{bt_k} \right] = a_{31} \\
a_{22} &= \sum_{k=1}^{m}\left[a t_K e^{bt_k} \right]^2 \\
a_{23} &= \sum_{k=1}^{m}\left[a t_K e^{bt_k} \right] = a_{32} \\
a_{33} &= \sum_{k=1}^{m}\left[1 \right] = m \\
a_{14} &= \sum_{k=1}^{m} e^{bt_k}\left[V_K - a e^{bt_k} - c \right] \\
a_{24} &= \sum_{k=1}^{m} a t_K e^{bt_k}\left[V_K - a e^{bt_k} - c \right] \\
a_{34} &= \sum_{k=1}^{m}\left[V_K - a e^{bt_k} - c \right]
\end{aligned}
\right. \tag{10}
$$

取初始值$a^{(0)}=45$，$b^{(0)}=-0.01$，$c^{(0)}=2.4$，这时连同已给的资料，分别代入（10）式，则有

$a_{11}=0.021$，　$a_{12}=205.556$，　$a_{13}=0.214$，　$a_{14}=-0.018$；
$a_{21}=a_{21}$，　$a_{22}=2072297.154$，　$a_{23}=2467.079$，　$a_{24}=-260.116$；
$a_{31}=a_{13}$，　$a_{32}=a_{23}$，　$a_{33}=6$，　$a_{34}=-0.510$。

把以上各值代入（8）式，建立正规方程组。

$$
\left\{
\begin{aligned}
&0.021\,\varepsilon_1 + 205.556\,\varepsilon_2 + 0.214\,\varepsilon_3 = -0.018 \\
&205.556\,\varepsilon_2 + 2072297.154\,\varepsilon_2 + 2467.079\,\varepsilon_3 = -260.116 \\
&0.214\,\varepsilon_1 + 2467.079\,\varepsilon_2 + 6\,\varepsilon_3 = -0.510
\end{aligned}
\right.
$$

联立求解方程组得：$\varepsilon_1=19.155$，$\varepsilon_2=-0.002$，$\varepsilon_3=0.127$并将其代入（2）式，对初始值进行修正。

$$a^{(1)}=a^{(0)}+\varepsilon_1=45+19.155=64.155$$

$$b^{(1)}=b^{(0)}+\varepsilon_2=-0.01-0.002=-0.003$$

$c^{(1)}=c^{(0)}+\varepsilon_3=2.4+0.127=2.527$

由于$|\varepsilon_i|>0.1$，不符合要求，这时再将$a^{(1)}$，$b^{(1)}$，$c^{(1)}$及已给资料的数据，分别代入（10）式，则得到a_{ij}及$a_{i(1+\alpha)}$的值，用此值代入（8）式，得正规方程组，並求解方程组得新的ε_α值，再用（2）式进行修正，重复上述步骤，直到迭代十五次得相应的修正值：$\varepsilon_1=0.088$，$\varepsilon_2=0.00$，$\varepsilon_3=0.001$，则用（2）式修正，于是有

$$a^{(15)}=a^{(14)}+\varepsilon_1=60.256+0.088=60.344$$
$$b^{(15)}=b^{(14)}+\varepsilon_2=-0.011+0.00=-0.011$$
$$c^{(15)}=c^{(14)}+\varepsilon_3=2.448+0.01=2.449$$

因为$|\varepsilon_\alpha|<0.1$，这时已满足精度要求，故可取待定常数$a=a^{(15)}=60.344$，$b=b^{(15)}=-0.011$，$c=c^{(15)}=2.449$。因此所求的回归方程为：

$$V=60.344e^{-0.011t}+2.449$$

用这种方法同样可解线性回归问题，详见下例。

例3、某水文站有年平均流量记录（以Y表示）及相应年份的年雨量记录（以X表示），其实测资料见表一3。经分析Y与X成线性关系，即$Y=ax+b$，求其回归方程（要求$|\varepsilon_\alpha|<0.1$）。

表一3

流量（Y）	25	81	36	33	70	54	20	44	1	41	75
雨量（X）	110	184	145	122	165	143	78	129	62	130	168

解：对于线性方程$Y=ax+b$，根据迭代法原理，由（6）和（7）式，可导出a_{ij}和$a_{j(1+\alpha)}$的计算公式，代入已给的资料可得

$$a_{11}=\sum_{k=1}^{11}x_k^2=201232;\quad a_{12}=\sum_{k=1}^{11}x_k=1436=a_{21};\quad a_{22}=\sum_{k=1}^{11}[1]=11$$

$$a_{13}=\sum_{k=1}^{11}x_k(Y_k-ax_k-b);\quad a_{23}=\sum_{k=1}^{11}Y_k-ax_k-b$$

若取初始值$a^{(0)}=1$，$b^{(0)}=1$；则$a_{13}=-131268$，$a_{23}=-967$。将以上数值代入（8）式得

$$\begin{cases}201232\varepsilon_1+1436\varepsilon_2=-131268\\1436\varepsilon_1+11\varepsilon_2=-967\end{cases}$$

解方程组得：$\varepsilon_1=-0.365$，$\varepsilon_2=-40.213$，于是

$$a^{(1)}=a^{(0)}+\varepsilon_1=1-0.365=0.635$$
$$b^{(1)}=b^{(0)}+\varepsilon_2=1-40.213=-39.213$$

这时$a_{13}=-72.452$，$a_{23}=-0.517$，再代入（8）式而得

$$\begin{cases}201232\varepsilon_1+1436\varepsilon_2=-72.452\\1436\varepsilon_1+11\varepsilon_2=-0.517\end{cases}$$

解方程组.则有$\varepsilon_1=0.00$，$\varepsilon_2=0.00$。因此待定常数$a=a^{(1)}=0.635$，$b=b^{(1)}=-39.213$。其回归方程为

$$Y=0.635x-39.213$$

三、小　结

由以上分析可知，迭代法克服了最小二乘法不能直接解非线性回归问题的缺点，是一种既可直接分析非线性回归问题，又可求解线性问题的方法；此法计算结果可根据要求，经反复迭代达到接近真值的精度。迭代法可在 Pc—1500 微机上进行数值分析计算，並能迅速、准确地得出计算结果，有关计算程序略。

在众多的统计方法中，线性回归是应用最广，收效甚多的一种方法。但对非线性回归问题，常采用图解法，或用近似线性法来处理，这样做效果往往是不够理想的。应用本文所述的迭代法，不仅可提高非线性回归“拟合”精度，而且可应用在工程实践中，为推求高精度暴雨强度公式，提供一种新方法。也为非线性回归这一专题的理论研究开辟了新的途径，丰富了教学内容，有助于把非线性回归理论分析向前推进一步。

迭代法的初始值，一般可用图解法取得；或在乘法误差假定下，用加权最小二乘法准则来获得更为精确的初始估计值。

参　考　文　献

〔1〕D.A.Ratkowsy·洪再吉等译.非线性回归模型.南京：南京大学出版社，1986

〔2〕马学尼，叶镇国·水文学·北京：中国建筑工业出版社，1979

〔3〕华中工学院数学教研室，软件教研室·算法语言·计算方法·北京：人民教育出版社，1978。

Solve problem of Non–linear Regression in Reiterative method in Hydrology

Tao　Yunshan

ABSTRACT

This paper disscuses the principle in reiterative method and gets the basic formula of regression. It illustrates a use of reiterative method to analyse regression by some examples in linear and non–linear problems.